



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

RAISSA COSTA DE OLIVEIRA

**DESENVOLVIMENTO DE UMA ESTRUTURA ADAPTATIVA PARA
INTEGRAÇÃO DE MPC E RTO E SUA APLICAÇÃO EM UM
PROCESSO DE POLIMERIZAÇÃO DE ESTIRENO**

CAMPINAS

2019

RAISSA COSTA DE OLIVEIRA

**DESENVOLVIMENTO DE UMA ESTRUTURA ADAPTATIVA PARA INTEGRAÇÃO
DE MPC E RTO E SUA APLICAÇÃO EM UM PROCESSO DE POLIMERIZAÇÃO
DE ESTIRENO**

Dissertação de mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestra em Engenharia Química.

Orientador^a: Prof^a. Dr^a Luz Adriana Alvarez Toro

ESTE TRABALHO CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELA ALUNA RAISSA COSTA DE OLIVEIRA, E ORIENTADA PELA PROF^a. DR^a LUZ ADRIANA ALVAREZ TORO.

CAMPINAS

2019

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

OL4d Oliveira, Raissa Costa de, 1994-
Desenvolvimento de uma estrutura adaptativa para integração de MPC e RTO e sua aplicação em um processo de polimerização de estireno / Raissa Costa de Oliveira. – Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: Luz Adriana Alvarez Toro.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Controle preditivo. 2. Sistemas não-lineares. 3. Otimização. 4. Polimerização. I. Alvarez Toro, Luz Adriana, 1982-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Development of an adaptive structure for integration of MPC and RTO and its application in a styrene polymerization process

Palavras-chave em inglês:

Predictive control
Nonlinear systems
Optimization
Polymerization

Área de concentração: Engenharia Química

Titulação: Mestra em Engenharia Química

Banca examinadora:

Luz Adriana Alvarez Toro [Orientador]
Matheus Souza

Ana Maria Frattini Fileti

Data de defesa: 20-02-2019

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0001-5771-8310>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/8105534638079478>

Folha de Aprovação da Dissertação de Mestrado defendida por Raissa Costa de Oliveira e aprovada em 20 de fevereiro de 2019 pela banca examinadora constituída pelos seguintes doutores:

Prof^a. Dr^a Luz Adriana Alvarez Toro
FEQ/UNICMAP

Prof. Dr. Matheus Souza
FEEC/UNICAMP

Prof^a. Dr^a Ana Maria Frattini Fileti
FEQ/UNICAMP

*A ATA da Defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

DEDICATÓRIA

Este trabalho é dedicado, com muito amor, aos meus pais Graça e Murilo

AGRADECIMENTOS

Agradeço

a Deus, pela constante presença em minha vida e por ser meu orientador espiritual.

à minha orientadora Dr^a Luz Adriana Alvarez Toro, pela confiança, pelo apoio, paciência e ensinamentos imprescindíveis para a realização dessa conquista. Não tenho palavras para agradecer o acolhimento, a orientação e amizade! Tenho-a como exemplo de profissional a ser seguido. Obrigada por tudo!

aos constituintes da banca examinadora, pela contribuição dada através de sugestões e análise crítica.

ao professor Dr Roger Zemp, pela disponibilidade e por todas as orientações e comentários, os quais foram importantes para o meu desenvolvimento profissional.

aos meus pais, Graça e Murilo, que não mediram esforços para que eu alcançasse sucesso nessa jornada. Obrigada por todo amor e incentivo.

aos meus irmãos, Igor e Tulio, pela parceria, pelo carinho e por se alegrarem com minhas conquistas.

aos meus colegas e amigos de laboratório, em especial, Flávio Violaro, Romero Florentino, Fernando Marques e Yuli Salguero, pela convivência, pelos conselhos e sugestões, pela companhia diária e por tornarem a minha jornada mais leve.

aos amigos que Campinas me presenteou: Fernanda Rangel, Homero Sena, Rodolfo Cruz, Luciana Derami, Laís Medeiros, Daniella Sória, Matheus, Vanessa Araújo, família Conds, Dona Coni e meus companheiros da casa Shigeo 620,

pelas risadas, pelos momentos de diversão e descanso mental e, principalmente, por estarem ao meu lado nos momentos mais difíceis. Obrigada por, muitas vezes, me fazerem rir quando os olhos queriam chorar.

aos amigos e familiares de Montes Claros que, mesmo distantes, sempre estiveram ao meu lado, me apoiando e incentivando.

à minha psicanalista Veridiana Marucio, por todo o acompanhamento psicológico e por me fazer, cada vez mais, acreditar no meu potencial de evolução.

ao grupo "Bolsistas CAPES" do *Facebook*, por me incentivarem a terminar este trabalho. Agradeço por tê-los como companheiros e por poder compartilhar os dilemas de uma vida de pós-graduando.

a todos do DESQ e da Secretaria de Pós-Graduação da FEQ, em especial, Fernando Belluomini, Maria Teresa Baizi Botelho Casamassa e Aline Gomes Pinelli.

a toda comunidade FEQ e UNICAMP.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

A caminhada foi árdua e muitos foram os momentos de angústia e aflição, principalmente nessa reta final. Sou profundamente grata a todos que me incentivaram a erguer a cabeça e seguir em frente. Eu não teria conseguido se não fosse o acolhimento e ombro amigo de cada um de vocês!

Muita gratidão!

*“A menos que modifiquemos a nossa
maneira de pensar, não seremos capazes de
resolver os problemas causados pela forma
como nos acostumamos a ver o mundo”.*

Albert Einstein

RESUMO

Processos químicos, em geral, apresentam comportamentos não lineares e esse é um dos principais desafios encontrados pelos desenvolvedores de sistemas de controle. Uma das técnicas de controle avançado que despontou como uma alternativa no controle de processos químicos foi o controle preditivo baseado em modelo (MPC) que, em conjunto com uma otimização em tempo real (RTO), permitiu desenvolvimento de uma estrutura hierárquica de controle, na qual, além do controle regulatório do sistema, é possível realizar uma otimização econômica. Neste trabalho, propôs-se um controlador adaptativo de múltiplos modelos com a integração entre a RTO e o MPC, desenvolvido para sistemas não lineares. A ação final de controle foi calculada por um esquema de combinação linear entre as ações dos múltiplos controladores lineares, que possuem modelos de aproximação linear correspondentes a possíveis pontos de operação do sistema. O desempenho do controlador de estrutura adaptativa foi testado em um reator de polimerização contínuo através de simulações computacionais e comparado com a estrutura robusta proposta por Alvarez e Odloak (2010; 2012). Os resultados das simulações mostram que o controlador adaptativo, de fato, exerce a sua função de combinar e gerar uma ação de controle final a partir das ações de controle disponíveis. Além disso, as simulações mostram que a estrutura proposta apresenta uma performance melhor que o controlador robusto frente a perturbações aplicadas, com maior rapidez de resposta, menor custo computacional e vantagens econômicas.

Palavras-chave: Controle preditivo modelo; Múltiplos modelos; Controle adaptativo; Sistemas não lineares; Otimização em tempo real.

ABSTRACT

Chemical processes in general have non-linear behaviors and this is one of the main challenges faced by control system developers. One of the advanced control techniques that emerged as an alternative in the control of chemical processes was the model-based predictive control (MPC) which, together with a real-time optimization (RTO), allowed the development of a hierarchical control structure. This structured makes possible the regulatory control of the system, besides to perform an economic optimization. In this work, an adaptive controller of multiple models was proposed with the integration between RTO and MPC, developed for non-linear systems. The final control action was calculated by a linear combination scheme between the actions of the multiple linear controllers. Each linear controller has a linear approximation model corresponding to a possible operating point of the system. The performance of the adaptive structure controller was tested in a continuous polymerization reactor through computational simulations and compared with the robust structure proposed by Alvarez and Odloak (2010; 2012). Simulations results show that the adaptive controller, in fact, make its function of combining and generating a final control action from the available control actions. In addition, these simulations show that the proposed structure presents a better performance than the robust controller in the face of applied perturbations, with faster response, lower computational cost and economic advantages.

Keywords: Predictive control model; Multiple models; Adaptive control; Nonlinear systems; Real-time optimization.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Diagrama de bloco da estrutura básica do MPC. Adaptado de Camacho e Bordons (2007).....	28
Figura 2: Estratégia de controle do MPC (CAMACHO, BORDONS, 2007).....	28
Figura 3: Estrutura da integração de MPC com RTO: (a) clássica e (b) em três camadas.....	33
Figura 4: Estrutura hierárquica de três camadas da interação RTO/MPC (ALVAREZ, ODLOAK, 2012).	36
Figura 5: Integração adaptativa da RTO com MPC de múltiplos modelos.	43
Figura 6: Distância dos valores reais das variáveis do processo com relação ao estado estacionário dos modelos.	44
Figura 7: Reator de polimerização de estireno. Adaptado de Alvarez e Odloak (2012).....	49
Figura 8: Posição dos modelos na prática (estados estacionários de obtenção dos modelos do controlador).....	56
Figura 9: Comportamento das saídas durante a simulação.	62
Figura 10: Comportamento das entradas durante a simulação.....	63
Figura 11: Taxa de produção de polímero.	65
Figura 12: Pesos da combinação linear, calculados pela estrutura proposta.....	66
Figura 13: Evolução das ações de controle dos modelos lineares e a ação de controle final, resultante da combinação linear.	68
Figura 14: Tempo computacional a cada iteração.....	69
Figura 15: Funções de custo das estruturas de controle.....	70
Figura 16: Funções de custo das estruturas de controle.....	71
Figura 17: Comportamento da polidispersidade do polímero produzido ao longo da simulação.	72

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Parâmetros do processo de polimerização.	52
Tabela 2: Ponto operacional inicial do reator.	53
Tabela 3: Estados estacionários dos modelos do controlador.	56
Tabela 4: Valores de restrição das variáveis do sistema de controle.....	59
Tabela 5: Valores de restrição das variáveis do sistema de controle.....	60

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Abreviaturas

CD	Camada dinâmica do controlador proposto
CE	Camada estática do controlador proposto
CSTR	Reator contínuo de mistura perfeita (<i>Continuous Stirred-Tank Reactor</i>)
IHMPC	Controle preditivo baseado em modelo infinito (<i>Infinite Horizon Model Predictive</i>)
MMPC	Controle preditivo de múltiplos modelos (<i>Multiple Model Predictive Control</i>)
MPC	Controle preditivo baseado em modelo (<i>Model Predictive Control</i>)
NMPC	Controle preditivo baseado em modelo não linear (<i>Nonlinear Model Predictive Control</i>)
OPOM	Modelo de predição orientado à saída (<i>Output Predictive Oriented Model</i>)
PID	Controlador proporcional-integral-derivativos
QP	Problema quadrático (<i>Quadratic Problem</i>)
RTO	Otimização em tempo real (<i>Real-Time Optimization</i>)
TC	<i>Target Calculation</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Romanos

A	Matriz do estado do modelo de espaço estado em tempo discreto
$a_{i,j,l}$	Coefficientes do denominador da função de transferência $G_{i,j}(s)$
$b_{i,j,l}$	Coefficientes do numerador da função de transferência $G_{i,j}(s)$
B	Matriz da entrada do modelo de espaço estado em tempo discreto
C	Matriz da saída do modelo de espaço estado em tempo discreto
C_u	Peso do desvio dos <i>targets</i> da entrada na função objetivo da Camada Estática do MPC
C_y	Peso do desvio dos <i>targets</i> da saída na função objetivo da Camada Estática do MPC
C_ε	Peso das variáveis de folga na função objetivo da Camada Estática do MPC
$d_{i,j}^0$	Coefficiente estático do modelo de resposta ao degrau
$d_{i,j}^d$	Coefficiente dinâmico do modelo de resposta ao degrau
D^0	Matriz de ganho estático definida pelo modelo OPOM
\widetilde{D}^0	Matriz construída a partir de D^0 que aparece na restrição do estado terminal do MPC
D^d	Matriz definida pelo modelo OPOM
D_0	Ordem zero do polímero morto
D_1	Primeira ordem do polímero morto
D_2	Segunda ordem do polímero morto
F	Matriz definida pelo modelo OPOM
$G_{i,j}(s)$	Função de transferência que relaciona a entrada u_i com a saída y_j
$G(s)$	Matriz de função de transferência
hA	Coefficiente global de transferência de calor do reator de polimerização
I	Iniciador da reação de polimerização de estireno
\tilde{I}	Matriz construída a partir de I_{nu} e que aparece na restrição de entrada na Camada Estática do MPC
$[I]$	Concentração da espécie I no reator de polimerização
$[I_f]$	Concentração da espécie I na alimentação do reator de polimerização

I_{nu}	Matriz identidade de tamanho nu
I_{ny}	Matriz identidade de tamanho ny
k_i	Taxa constante para a reação de iniciação do processo de polimerização
k_d	Taxa constante para a reação de decomposição do processo de polimerização
k_p	Taxa constante para a reação de propagação do processo de polimerização
k_t	Taxa constante para a reação de terminação do processo de polimerização
m	Horizonte de controle do MPC
M	Monômero da reação de polimerização de estireno
$[M]$	Concentração da espécie M no reator de polimerização
$[M_f]$	Concentração da espécie M na alimentação do reator de polimerização
M_m	Massa molecular do monômero
\overline{M}_m	Massa molecular médio do polímero
\overline{M}_w	Massa molecular médio do polímero
na	Número de polos do sistema linear
nd	Número total de polos estáveis do sistema
nu	Número de entradas
ny	Número de saídas
N	Horizonte de predição do MPC
N	Quantidade de modelos utilizados para a estrutura adaptativa do MPC
P_n	Cadeia de polímero vivo com tamanho n no reator de polimerização
$[P]$	Concentração total de polímero vivo no reator de polimerização
PD	Polidispersidade do polímero
Q_c	Vazão do fluido refrigerante da camisa do reator de polimerização
Q_i	Vazão de Iniciador no reator de polimerização
\overline{Q}_i	Vazão nominal do Iniciador no reator de polimerização
Q_m	Vazão de Monômero no reator de polimerização
\overline{Q}_m	Vazão nominal de Monômero no reator de polimerização
Q_s	Vazão de Solvente no reator de polimerização
Q_t	Vazão total no reator de polimerização
Q_u	Peso dos <i>targets</i> da entrada na função objetiva da Camada Dinâmica do MPC

Q_y	Peso dos <i>targets</i> da saída na função objetiva da Camada Dinâmica do MPC
$r_{i,j}$	Polos estáveis do modelo de função de transferência
R	Radical produzido no processo de polimerização de estireno
R	Peso que penaliza as mudanças da entrada na função objetiva da Camada Dinâmica do MPC
S_u	Peso da folga da entrada na função objetiva da Camada Dinâmica do MPC
S_y	Peso da folga da saída na função objetiva da Camada Dinâmica do MPC
T	Temperatura do reator de polimerização
T_c	Temperatura do fluido refrigerante da camisa do reator de polimerização
T_{cf}	Temperatura de entrada do fluido refrigerante da camisa do reator
T_f	Temperatura da alimentação do reator de polimerização
T_n	Cadeia de polímero morto com tamanho n
u	Variável de entrada do processo
u_0	Valor inicial da entrada
u_{sst}	<i>Target</i> da entrada calculado pela Camada Estática do MPC
u_{min}	Limite mínimo da entrada do processo
u_{max}	Limite máximo da entrada do processo
u_{RTO}	<i>Target</i> da entrada calculado pela Camada RTO
V	Volume do reator de polimerização
V_C	Volume da camisa do reator de polimerização
w_i	Peso calculado pela análise combinatória dos modelos e que corresponde à influência do modelo i na ação final de controle
x	Variável de estado do processo
x^d	Componente estável da variável de estado do modelo OPOM
x^s	Componente integrador do modelo OPOM incremental
Y_{M_i}	Ponto correspondente aos valores de y do modelo i
y	Variável de saída do processo
y_0	Valor inicial da saída
y_{sst}	<i>Target</i> da saída calculado pela Camada Estática do MPC
y_{min}	Limite mínimo da saída do processo
y_{max}	Limite máximo da saída do processo
y_{RTO}	<i>Target</i> da saída calculado pela Camada RTO

Símbolos gregos

δ_u	Variável de folga da entrada
δ_y	Variável de folga da saída
ΔH_r	Calor de polimerização
Δu	Vetor da variação do valor de entrada
Δu_{max}	Varição máxima da entrada
ε	Variável de folga da Camada Estática do MPC
η	Viscosidade intrínseca do polímero
ρC_p	Capacidade calorífica média do fluido do reator de polimerização
$\rho_c C_{pc}$	Capacidade calorífica média do fluido refrigerante da camisa do reator de polimerização
ψ	Matriz definida pelo modelo OPOM
ϕ	Matriz definida pelo modelo OPOM

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	20
1.1. Objetivos Geral e Específicos	23
1.2. Estrutura da Dissertação	24
2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	26
2.1. Controle Preditivo Baseado em Modelo (MPC).....	26
2.1.1. Estrutura e Estratégia do MPC.....	27
2.1.2. Representação de um Sistema em um MPC	29
2.2. Integração RTO com MPC.....	32
2.3. Controle Preditivo de Múltiplo Modelos	35
3. ESTRATÉGIA DE INTEGRAÇÃO COM MÚLTIPLOS MODELOS .	39
3.1. Camada RTO	39
3.2. Controlador MPC de duas camadas	40
3.3. Estratégia Adaptativa de Múltiplos Modelos.....	42
4. ESTUDO DE CASO: REATOR DE POLIMERIZAÇÃO	46
4.1. Descrição do Processo	47
4.2. Estrutura de Controle.....	54
4.2.1. Camada RTO	55
4.2.2. Obtenção dos Múltiplos Modelos Lineares do Sistema.....	55
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	59
5.1. Parâmetros de Simulação.....	59
5.2. Resultados das Simulações	61

6. CONCLUSÕES73

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS76

1. INTRODUÇÃO

Um processo químico é um conjunto de operações capaz de transformar matérias-primas em produtos comercializáveis pela indústria. Por essa razão, é justificável o constante interesse da indústria em modernizar seus processos químicos, já que a alta competitividade de mercado exige, cada vez mais, produtos de alta qualidade, seguros e modernos aliados à sustentabilidade e à pouca geração rejeitos.

Os processos químicos apresentam diversas características que dificultam o projeto de um sistema de controle (BEQUETTE, 1991). Geralmente, possuem dinâmica não linear, com grande número de variáveis que se interagem entre si, grande número de entradas e saídas, presença de distúrbios e ruídos, além de restrições operacionais. Vários desses problemas são encontrados no controle e monitoramento de reatores de polimerização, por exemplo.

Processos de polimerização são extremamente complexos devido à sua dinâmica não linear, às reações exotérmicas com cinética de reação desconhecida e à alta viscosidade. Geralmente, eles têm múltiplos estados estacionários e podem ser extremamente sensíveis a pequenas mudanças nas condições operacionais (HOSEN et al., 2014; RICHARDS, CONGALIDIS, 2006; PRASAD et al., 2002; OGUNNAIKE, RAY, 1994).

Controladores convencionais muitas vezes não conseguem controlar reatores com comportamento não linear em uma ampla gama de condições de operação (GHASEM et al., 2007). De acordo com Halim e Sata (2013), os controladores Proporcional-Integral-Derivativos (PID) convencionais falham ao tentar alcançar a qualidade desejada do produto polimérico quando aplicados a um reator de polimerização e, por isso, os pesquisadores têm buscado uma solução viável para o controle e monitoramento da produção de polímeros. Entretanto, com o avanço tecnológico e com o desenvolvimento de computadores potentes nas últimas décadas, foi possível a implementação de controles industriais sofisticados e precisos, capazes de suportar as dificuldades inerentes ao sistema. Dentre as técnicas de controle aplicadas em processos industriais químicos, pode-se citar o controle preditivo baseado em modelo (MPC - *Model Predictive Control*).

Atualmente, o MPC tem sido amplamente implementado na indústria por se mostrar uma alternativa eficaz no controle de processos químicos. Ele fornece uma solução poderosa e viável para a otimização dinâmica e controle de reatores de polimerização, com vários tipos de controladores preditivos recentemente propostos e aplicados a este processo (BUSTOS et al., 2016; CANCELIER et al., 2016; HASHEMI et al., 2013; HOSEN, HUSSAIN, 2012; HOSEN et al., 2011).

O MPC é um termo genérico que representa uma família de algoritmos de controle que prevê a evolução futura do processo e mantém as saídas sob controle por meio de um modelo dinâmico do processo e pela inclusão de restrições operacionais para as variáveis manipuladas e controladas (CAMACHO; BORDONS, 2007). Critérios econômicos também costumam ser adicionados aos algoritmos para melhorar o desempenho da planta. No entanto, devido às constantes mudanças do processo (consequência das variações de preços, custos, demanda de produção, além de perturbações contínuas, etc.), o processo pode nunca chegar ao estado estacionário ou o ponto de operação ideal precisa ser frequentemente modificado (FERRAMOSCA et al., 2017; SANTANDER et al., 2016; ELLIS et al., 2011).

Para que o controlador opere de forma eficiente e leve em conta as alterações de ponto de operação e as não linearidades do processo, é preciso que o modelo utilizado represente corretamente a dinâmica do processo em questão, seja ele desenvolvido por modelagem fenomenológica ou por modelagem empírica. Portanto, a escolha da estrutura do modelo dinâmico é extremamente importante e as principais medidas que determinam sua viabilidade de uso são: precisão de aproximação com relação ao modelo dinâmico exato, adequação à estrutura de controle e facilidade de desenvolvimento (PEARSON, 2003).

O controlador preditivo baseado em modelo não linear (NMPC - *Nonlinear Model Predictive Control*) é uma estratégia eficaz para controlar processos químicos não lineares com restrições e atrasos de tempo (SISTU et al., 1991). Entretanto, este tipo de controlador consiste em um problema não linear que precisa ser resolvido online a cada instante de amostragem. Isso geralmente requer um grande esforço para calcular as ações de controle dentro do tempo de amostragem fixo, além de problemas numéricos que podem ser gerados devido à complexidade do modelo dinâmico, como rigidez ou mau condicionamento (GOUTA et al., 2017; ŁAWRYŃCZUK, TATJEWSKI, 2010; SEKI et al., 2001).

É exatamente por causa das grandes limitações computacionais dos controladores MPC baseados em modelos não lineares que os processos químicos têm sido tradicionalmente operados com MPC de modelos lineares. Mesmo com toda a defasagem que este tipo de controlador apresenta ao lidar com processos de dinâmicas complexas, os algoritmos MPC baseados em modelos lineares são caracterizados por um esforço computacional mais baixo se comparados com aqueles que utilizam modelos não lineares (ŁAWRYŃCZUK, 2011; SISTU et al., 1991).

A fim de manter o desempenho do controlador sem perder agilidade de resposta, o controle preditivo de múltiplos modelos (MMPC - *Multiple Model Predictive Control*) tem despontado como uma estratégia viável e uma excelente ferramenta no controle de processos químicos, normalmente apresentando melhor desempenho de controle que um único MPC linear (SHI et al., 2018; XU et al., 2017; CHI, LIANG, 2015; DOUGHERTY, COOPER, 2003; PORFIRIO et al., 2003).

A ideia principal do MMPC é o particionamento do processo não linear em pontos operacionais locais. Cada ponto é representado por um modelo linear que descreve efetivamente sua região local. A diferença entre os tipos de MMPC está na forma como eles lidam com os múltiplos modelos para calcular a ação de controle, que pode ser uma soma de ponderação do sinal de controle dos controladores locais (SLAVOV, 2012) ou um esquema de comutação, onde o melhor controlador é selecionado em cada amostragem instantânea de acordo com os valores atuais das variáveis medidas do processo (BELLO et al., 2014; CHI, LIANG, 2015; XIE et al., 2008), dentre outros.

Com o aumento da competitividade do mercado, tornou-se necessário não só o fornecimento de produtos especificados e com qualidade como também a maximização do lucro da unidade produtiva. Neste sentido, com o avanço no estudo de sistemas de controle, novas estruturas foram desenvolvidas, podendo-se citar a estrutura baseada na abordagem hierárquica. Segundo Tatjewski (2008), esse tipo de estrutura é formado por um conjunto de subtarefas, no qual as camadas inferiores são responsáveis pelo controle regulatório enquanto as superiores são responsáveis pela otimização do processo a partir de critérios econômicos, por exemplo.

A técnica de estrutura hierárquica que vem se destacando na operação de processos contínuos frente ao desafio de maximizar os lucros, enquanto reduz os custos operacionais e garante produtos de qualidade, é chamada Otimização em

Tempo Real (RTO – *Real Time Optimization*) (SOUZA et al., 2010). Essa técnica se baseia na análise de regiões de operação, com o intuito de determinar qual o melhor ponto de operação em que a planta deve operar para atingir o objetivo da otimização. Assim, o otimizador em tempo real atua na correção do ponto de operação ao invés de utilizar *setpoints* fixos, já que ótimos nominais podem não representar necessariamente pontos ótimos de produção da planta (DURAISKI, 2009).

1.1. Objetivos Geral e Específicos

Diante do exposto, o presente trabalho propõe desenvolver uma estratégia de controle adaptativa de múltiplos modelos e com critério econômicos, capaz de lidar com não linearidades de processos químicos e melhorar o desempenho econômico, dinâmico e computacional na presença de perturbações. A estrutura de controle é aplicada em um reator de polimerização contínuo através de simulações computacionais e seu desempenho é comparado a uma estrutura de controle já existente na Literatura, proposta por Alvarez e Odloak (2010; 2012). Para isso, os seguintes objetivos específicos devem ser alcançados:

- Simular o modelo fenomenológico do processo de polimerização de estireno;
- Definir quantos e quais pontos de operação necessários para obtenção dos múltiplos modelos e realizar suas respectivas identificações;
- Construir um controlador individual preditivo de duas camadas para cada modelo identificado;
- Definir uma função objetivo para a otimização econômica do processo;
- Desenvolvimento teórico da estrutura adaptativa, capaz de analisar a melhor combinação entre as ações de controle disponíveis sem perder estabilidade e convergência;
- Arquitetar uma estrutura de controle que contenha uma camada de otimização econômica, controlares individuais e a estratégia adaptativa que relacione as saídas destes controladores;

- Aplicar a estrutura de controle no processo de polimerização, analisando seu desempenho frente a perturbações no sistema; e
- Comparar a performance do controlador proposto com a estrutura robusta de Alvarez e Odloak (2010; 2012), a fim de verificar a viabilidade de aplicação da estrutura de estudo.

1.2. Estrutura da Dissertação

A dissertação está estruturada em seis capítulos, incluindo esta introdução. No Capítulo 2, foi feita uma breve fundamentação teórica acerca dos conceitos sobre controle preditivo baseado em modelo. Em seguida, foi apresentada a integração entre a camada de otimização econômica e o controle preditivo e, no final, apresentou-se uma análise da Literatura sobre os controladores preditivos de múltiplos modelos, onde são aplicados e alguns tipos de estratégias adaptativas.

No Capítulo 3, é apresentada toda a estrutura adaptativa de múltiplos modelos proposta por este trabalho. O capítulo inicia-se com uma breve introdução sobre a camada de otimização econômica, a RTO e, em seguida, o controlador preditivo de duas camadas é apresentado. Cada uma das camadas é descrita detalhadamente, incluindo a apresentação de suas funções econômicas e restrições. O esquema de adaptação e combinação entre os modelos é definido, apresentando-se as equações de cálculo dos pesos da combinação linear. Por fim, é apresentado um esquema detalhado de todo o sistema de controle, a relação entre as várias camadas da estrutura e a relação entre todos os múltiplos controladores.

O Capítulo 4 descreve detalhadamente o estudo de caso deste trabalho: um reator contínuo de polimerização de estireno, o qual tem sido um exemplo clássico e importante para a busca de melhorias das estratégias de controle. O mecanismo reacional é detalhado juntamente com todas as considerações e os balanços de massa e energia que compõem o modelo fenomenológico adotado. Também são apresentados todos os parâmetros e constantes do sistema, bem como o ponto operacional escolhido como ponto de partida das simulações computacionais. Além disso, a estrutura de controle para o sistema é definida a partir da escolha da função do problema de otimização econômico e da metodologia adotada para identificação de modelos. Ao final deste capítulo, os modelos obtidos e seus respectivos pontos

operacionais são apresentados para o desenvolvimento da estratégia adaptativa de controle.

A apresentação e discussão dos resultados estão dispostos no Capítulo 5. Nesse, o desempenho do controlador proposto foi comparado com o do controlador robusto proposto por Alvarez e Odloak (2010; 2012). Todos os detalhes da simulação são apresentados: tempo total de simulação, restrições das variáveis de controle, perturbações e seus tempos de aplicação, além dos parâmetros de sintonia dos controladores. Como resultados, foram obtidos: o comportamento das variáveis controladas em função dos ajustes das variáveis manipuladas, a taxa de produção do polímero, os pesos e a variação das combinações lineares das ações de controle, o tempo computacional gasto, a polidispersidade e as funções custo dos controladores. A cada resultado, uma breve discussão foi realizada.

O Capítulo 6 destina-se à apresentação das conclusões a respeito dos resultados alcançados e dos objetivos almejados no início do trabalho. Melhorias e sugestões para futuros trabalhos também são apresentadas a fim de incentivar a continuidade de pesquisas sobre o tema.

Ao final deste trabalho, estão dispostas todas as referências bibliográficas utilizadas para a construção, justificativa e sustento da pesquisa.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo tem como objetivo apresentar uma fundamentação teórica sobre controle preditivo, sua definição, estrutura básica de funcionamento e a representação de um sistema em um controlador preditivo a partir da representação de estados. Além disso, a estrutura de integração de uma otimização econômica com o controlador preditivo também é apresentada, detalhando-se sua esquematização e funcionalidade. Por fim, são apresentados os controladores preditivos de múltiplos modelos, justificando-se a importância dos mesmos a partir de uma breve revisão bibliográfica.

2.1. Controle Preditivo Baseado em Modelo (MPC)

O MPC teve origem no final dos anos 70 e, desde então, vem se desenvolvendo consideravelmente tanto na indústria quanto nas pesquisas em universidades e laboratórios (SEBORG, 2010).

Algoritmos clássicos de MPC são frequentemente usados na prática (QIN, BADGWELL, 2003) e, desde a década de 1980, o MPC se tornou um método de controle bastante utilizado em problemas de controle de processos multivariáveis de dinâmicas complexas, com grandes interações entre entradas e saídas, atrasos significativos ou resposta inversa. Aplicado principalmente no setor petroquímico, onde os sistemas são de grande escala e altamente integrados, os algoritmos MPC levam em conta restrições impostas às entradas (variáveis manipuladas) e saídas (variáveis controladas) de processo e que geralmente dispõem sobre a qualidade, eficiência e segurança (LEE, LEE, 2014; ŁAWRYŃCZUK, TATJEWSKI, 2010; SEBORG, 2010; BRAVO, NORMEY-RICO, 2009). A técnica MPC permite incluir realimentações, adicionar restrições operacionais de entradas e saídas na lei de controle, compensar intrinsecamente os tempos mortos existentes e ser capaz de operar durante longos períodos de tempo com quase nenhuma intervenção (BRAVO, NORMEY-RICO, 2009; CAMACHO, BORDONS, 2007).

2.1.1. Estrutura e Estratégia do MPC

O MPC é um método de controle que envolve a resolução de um problema de otimização com uma função objetivo sujeita a restrições incorporadas pelo usuário, cuja ação de controle é dada a partir da previsão do comportamento do sistema ao longo de um horizonte de previsão. Segundo Camacho e Bordons (2007), o MPC não se trata de um único tipo de controlador, mas sim de uma classe de controladores que utiliza um método de predição e a resolução de um problema de otimização para o cálculo da saída do controlador. Sendo assim, os algoritmos de MPC se diferem, basicamente, no modelo do processo em estudo, nos ruídos e na função objetivo a ser otimizada (UCHIYAMA, 2013).

A Figura 1 apresenta a estrutura básica de um controlador MPC, cuja metodologia utilizada é dada pela seguinte estratégia de controle (Figura 2) (CAMACHO, BORDONS, 2007):

- 1) Utilizando-se o modelo do processo, em cada instante t , faz-se a predição das saídas futuras para um horizonte N , denominado por horizonte de predição. As saídas preditas $\hat{y}(t+k|t)$ (A notação indica o valor da variável predito no instante $(t+k|t)$ para $k = \{1 \dots N\}$) dependem dos valores conhecidos das entradas e saídas até o instante t e dos sinais de controle $u(t+k|t)$ para $k = \{0 \dots N-1\}$, os quais são calculados e enviados para o sistema.
- 2) Os sinais de controle futuros são calculados a partir da otimização de um critério, mantendo o processo o mais próximo possível da trajetória de referência. Normalmente, este critério está na forma de uma função quadrática dos erros da saída predita e da trajetória de referência. Em casos onde o critério é quadrático, o modelo é linear e não há restrições, é possível obter uma solução analítica; caso contrário, é necessária a utilização de um método numérico de otimização.
- 3) O sinal de controle $u(t)$ é enviado ao processo enquanto despreza-se demais sinais de controle calculados, já que, no instante seguinte, já é

conhecido o valor de $y(t + 1)$. Assim, repete-se o passo 1 com este novo valor de saída, calculando-se $u(t + 1|t)$ com o uso do conceito de horizonte deslizante.

Figura 1: Diagrama de bloco da estrutura básica do MPC. Adaptado de Camacho e Bordons (2007).

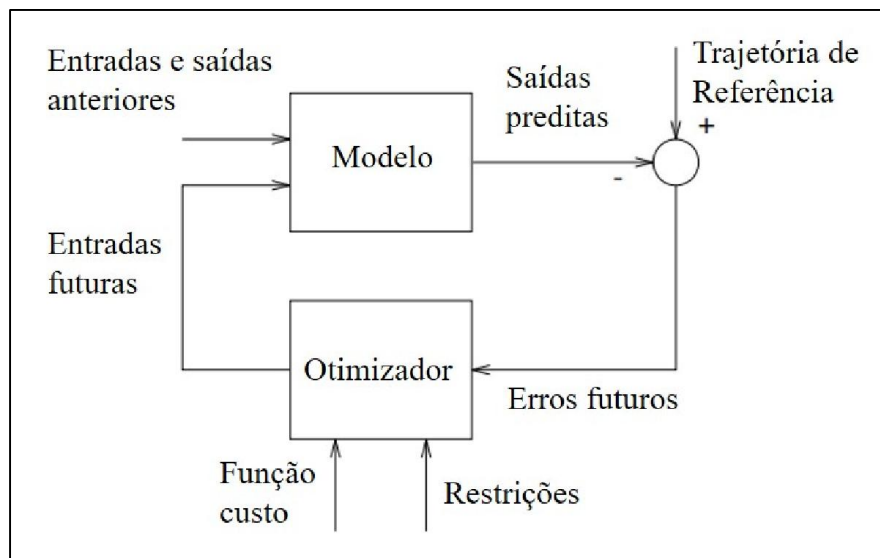
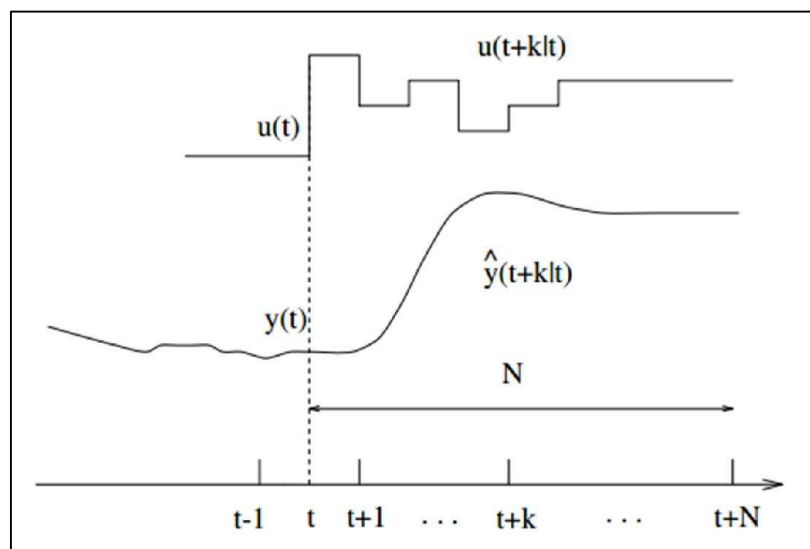


Figura 2: Estratégia de controle do MPC (CAMACHO, BORDONS, 2007).



2.1.2. Representação de um Sistema em um MPC

Em um MPC, os sistemas são representados por modelos matemáticos da planta para prever o comportamento dinâmico do processo. De acordo com Camacho e Bordons (2007), o modelo utilizado em projetos de sistema de controle preditivo vem de uma formulação de espaço de estados que pode ser usada tanto para processos monovariáveis quanto para multivariáveis, além de ser facilmente estendida a processos não lineares. A partir do modelo de espaço de estados, as informações necessárias para a predição são representadas pela variável de estado no momento atual (WANG, 2009). As seguintes equações são usadas para capturar a dinâmica do processo:

$$x(k + 1) = Ax(k) + Bu(k) \quad (01)$$

$$y(k) = Cx(k) \quad (02)$$

nas quais x é o estado, A é a matriz dinâmica, B e C são as matrizes da entrada e da saída, respectivamente e k é o instante do tempo discreto.

O modelo de espaço de estado representado pelas equações (01) e (02) é definido como um modelo na forma posicional e é a forma mais tradicional de representar um sistema. Entretanto, o uso de modelos posicionais em uma lei de controle pode resultar em um *offset* nas variáveis controladas, além de exigir o conhecimento dos valores estacionários das variáveis manipuladas (PEREZ, 2012).

A fim de garantir rastreamento livre de *offset*, é conveniente introduzir a chamada formulação incremental de MPC ou modelo de velocidade: modelo de espaço de estado cuja entrada do modelo é o incremento de controle $\Delta u(k)$ em vez do sinal de controle $u(k)$, de modo que $\Delta u(k) = u(k) - u(k - 1)$.

Apesar do modelo de velocidade garantir ausência de *offset*, Odloak (2004) afirma que o uso desse tipo de modelo em um MPC convencional pode resultar em modelos instáveis quando aplicado em um projeto de um controlador robusto. Neste sentido, para a implementação de um MPC sem *offset* e com garantia de estabilidade, Odloak (2004) desenvolveu um modelo de espaço estado incremental baseado em

resposta ao degrau de um processo estável e sem tempo morto, denominado modelo de predição orientado à saída (OPOM - *Output Predictive Oriented Model*).

Para o modelo OPOM, considera-se um sistema com nu entradas e ny saídas, cujos polos relacionados à entrada u_j e à saída y_i não são repetidos. A função de transferência em Laplace para esse sistema, que relaciona a entrada u_j com a saída y_i , é dada pela equação (03) e a resposta ao degrau correspondente, no instante k e para um período de amostragem T , pode ser calculada pela equação (04).

$$G_{i,j}(s) = \frac{b_{i,j,0} + b_{i,j,1}s + \dots + b_{i,j,n_b}s^{n_b}}{1 + a_{i,j,1}s + \dots + a_{i,j,n_a}s^{n_a}} \quad (03)$$

$$S_{i,j}(k) = d_{i,j}^0 + \sum_{l=1}^{n_a} [d_{i,j,l}^d] e^{r_{i,j,l}kT} \quad (04)$$

em que $\{n_a, n_b \in \mathbb{N} \mid n_b < n_a\}$, os coeficientes $d_{i,j}^0, d_{i,j,1}^d, \dots, d_{i,j,n_a}^d$ são obtidos por frações parciais de expansão e $r_{i,j}, r_{i,j,1}, \dots, r_{i,j,n_a}$ são os polos assumidos como distintos.

A representação desse sistema em modelo de espaço de estado incremental é dada por:

$$\begin{bmatrix} x^s(k+1) \\ x^d(k+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{ny} & 0 \\ 0 & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^s(k) \\ x^d(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D^0 \\ D^d \end{bmatrix} \Delta u(k) \quad (05)$$

$$y(k) = [I_{ny} \quad \psi] \begin{bmatrix} x^s(k) \\ x^d(k) \end{bmatrix} \quad (06)$$

sendo

$$x^s = [x_1 \dots x_{ny}]^T, x^s \in \mathbb{R}^{ny}$$

$$x^d = [x_{ny+1} \dots x_{ny+nd}]^T, x^d \in \mathbb{C}^{nd},$$

$$nd = nun_a ny$$

$$D^0 \triangleq \begin{bmatrix} d_{1,1}^0 & \cdots & d_{1,nu}^0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{ny,1}^0 & \cdots & d_{ny,nu}^0 \end{bmatrix}, D^0 \in \mathbb{R}^{ny \times nu}$$

$$D^d \triangleq \text{diag}(d_{1,1}^d \cdots d_{1,1,n_a}^d \cdots d_{1,nu,1}^d \cdots d_{1,nu,n_a}^d \cdots \\ d_{ny,1,1}^d \cdots d_{ny,1,n_a}^d \cdots d_{ny,nu,1}^d \cdots d_{ny,nu,n_a}^d)$$

$$D^d \in \mathbb{C}^{nd \times nd}$$

$$F \triangleq \text{diag}(e^{r_{1,1,1}kT} \cdots e^{r_{1,1,n_a}kT} \cdots e^{r_{1,nu,1}kT} \cdots e^{r_{1,nu,n_a}kT} \cdots \\ e^{r_{ny,1,1}kT} \cdots e^{r_{ny,1,n_a}kT} \cdots e^{r_{ny,nu,1}kT} \cdots e^{r_{ny,nu,n_a}kT})$$

$$F \in \mathbb{C}^{nd \times nd}$$

$$\Delta u(k) = u(k) - u(k-1)$$

$$\psi = \begin{bmatrix} \phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \phi \end{bmatrix}, \psi \in \mathbb{R}^{ny \times nd}$$

$$\phi = [1 \quad \cdots \quad 1], \phi \in \mathbb{R}^{nu \times n_a}$$

De acordo com as equações (05) e (06), nota-se que Odloak (2004) divide o vetor de estado em duas partes: x^s que representa a parte estática do vetor de estado e corresponde à saída predita do estado estacionário, $y(\infty | k)$, e x^d que representa a parte dinâmica do vetor de estado e que tende a zero quando o sistema se aproxima do estado estacionário. D^0 é o ganho estático do sistema. O sistema possui nd polos estáveis, os quais formam a matriz diagonal F . Por fim, é possível observar que a entrada do modelo, definida por $\Delta u(k)$, prova que a saída integra a entrada.

2.2. Integração RTO com MPC

Atualmente, o uso das estratégias avançadas de controle no meio industrial é devido ao grande interesse das indústrias de que suas usinas operem o mais próximo possível do ponto de operação economicamente ideal, a fim de garantirem um bom lucro (FERRASMOSCA et al., 2017). Para isso, as indústrias normalmente utilizam uma tradicional integração entre a otimização econômica e o controle de processos químicos feita a partir de uma arquitetura hierárquica de multicamadas e focada na decomposição da tarefa de controle original em uma sequência de subtarefas mais simples (Figura 3a).

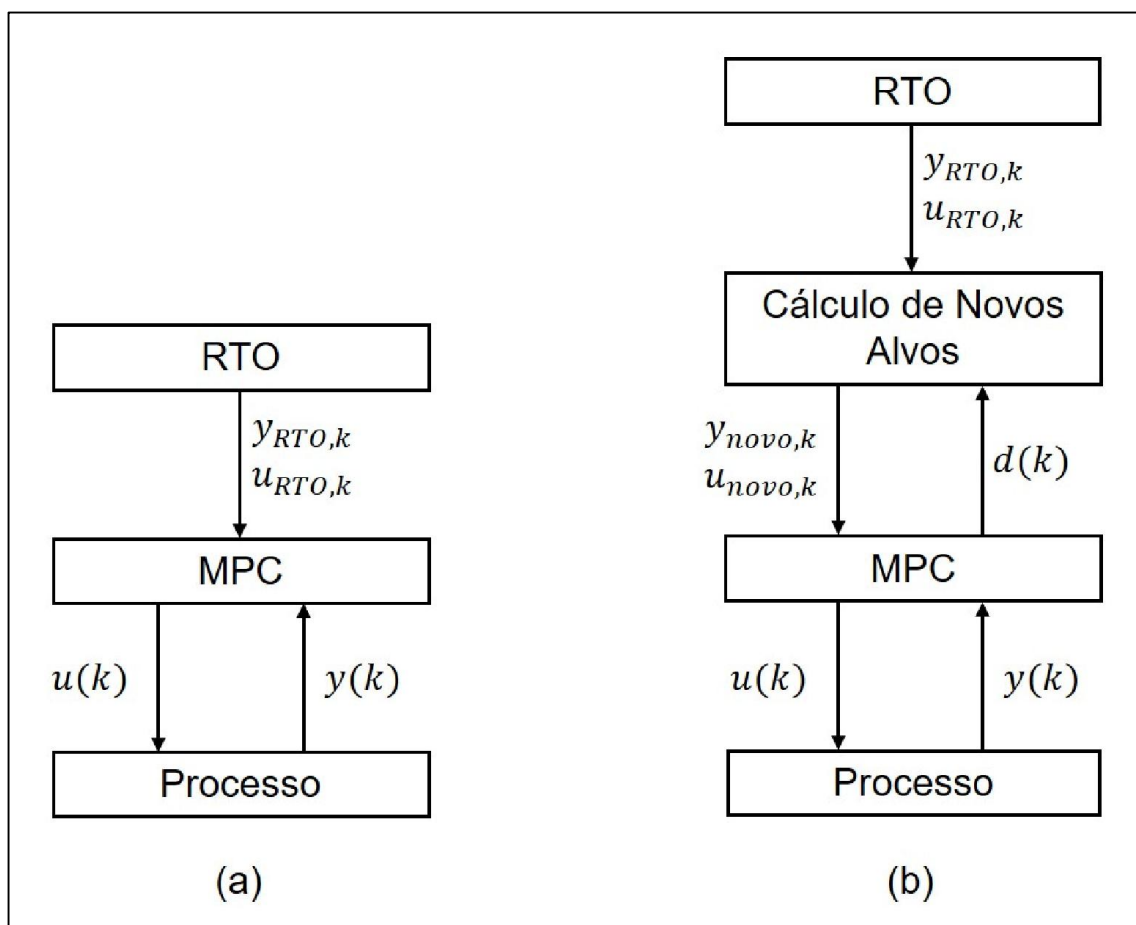
Nessa estrutura de controle hierárquica, a camada superior, a RTO, implementa uma decisão econômica em tempo real e calcula os *targets*, também chamados de alvos, ($y_{RTO,k}$ e $u_{RTO,k}$), valores das variáveis que indicam o ponto de operação ideal do processo. O problema de otimização dessa camada é não linear e se baseia em um modelo não linear em estado estacionário. Os *targets* calculados pela RTO são então enviados para o MPC.

Para colocar o processo o mais próximo possível do ponto calculado pela camada RTO, o MPC calcula a ação de controle, $u(k)$, que altera as variáveis manipuladas, levando em consideração um modelo dinâmico linear da planta, restrições e requisitos de estabilidade (HINOJOSA et al., 2017; FERRAMOSCA et al., 2014).

No entanto, os problemas de otimização da camada RTO e da camada MPC são executados em diferentes níveis e frequências. A frequência de execução da camada RTO é geralmente menor e isso pode levar o processo a condições abaixo do ideal, com um fraco desempenho econômico (HINOJOSA et al., 2017; ALVAREZ, 2012). Enquanto a camada RTO precisa resolver um problema de otimização não linear que lida com questões de longo prazo, como as metas de taxa de produção e alocação de matéria-prima, o controlador MPC resolve um problema quadrático (QP) com foco na vazão, pressão e temperatura do processo (MARCHETTI et al., 2014). Assim, dependendo do grau da perturbação externa sofrida pelo processo, o ponto economicamente ideal pode mudar enquanto o MPC continua a calcular ações de controle baseados no ponto anterior até que as atualizações sejam feitas pela RTO.

Uma maneira útil de evitar esse problema é adicionar uma nova camada entre a RTO e o MPC (Figura 3b). Esta camada intermediária calcula novos *targets* com base em um modelo estacionário linear do processo, operando na mesma frequência e com as mesmas restrições operacionais que o controlador do MPC. Seu objetivo é garantir que os *targets* enviados para o cálculo das ações de controle sejam alcançáveis e atuais.

Figura 3: Estrutura da integração de MPC com RTO: (a) clássica e (b) em três camadas.



A estrutura de três camadas é o projeto mais tradicional do sistema de controle com RTO e MPC (SCATTOLINI, 2009) e tem sido aplicada em vários processos industriais, como na planta de Williams-Otto (MARCHETTI et al., 2014), em *splitter* de propileno/propano (HINOJOSA et al., 2017) e em processos de polimerização (WURTH et al., 2011). O reator de polimerização, segundo Richards e

Congalidis (2006), é usualmente o coração do processo de fabricação e é o equipamento mais crítico da planta, de modo que, para melhorar a qualidade e a produtividade, bem como reduzir os custos operacionais é necessário otimizar e controlar o processo de polimerização.

Alvarez e Odloak (2012) propuseram o estudo da otimização e do controle de um reator de polimerização de estireno, utilizando a abordagem de três camadas com RTO e MPC com múltiplos modelos. A Figura 4 apresenta um esquema da estrutura proposta. Segundo os autores, a RTO calcula o ótimo econômico e envia seu ponto operacional ($y_{RTO,k}$ e $u_{RTO,k}$) para a camada intermediária, denominada por *Target Calculation* (TC). A camada TC recebe os dados da RTO, recalcula e atualiza o ponto operacional ($y_{novo,k}$ e $u_{novo,k}$), tornando-o factível para o MPC. O MPC, por sua vez, recebe os dados da camada TC e define a melhor ação de controle, $u(k)$, a ser enviada para a planta e, se os alvos da RTO forem alcançáveis, as variáveis do processo convergem para os alvos desejados. O controlador MPC resultante possui garantia de estabilidade e utiliza de um sistema OPOM em um MPC com horizonte infinito (IHMPC – *Infinite Horizon Model Predictive*). Além disso, ele é baseado no controlador desenvolvido por Gonzalez e Odloak (2009), que é capaz de lidar com os dados fornecidos pela RTO e de controlar as saídas através de zonas de controle.

Manter a variável controlador em seu valor exato de *setpoint* nem sempre é importante, desde que essa permaneça dentro de uma região operacional especificada (MACIEJOWSKI, 2002). Essa abordagem é denominada de controle por zonas. Uma das formas de implementação do controle por zonas, proposta por Gonzalez e Odloak (2009) e utilizada no trabalho de Alvarez e Odloak (2012), foi considerar o *setpoint* como uma variável adicional do problema de otimização, de modo que essa satisfaça os limites mínimo e máximo das variáveis controladas. A principal desvantagem dessa estratégia está na resolução problemas de otimização não lineares, com restrições de custo-contracção, o que exige uma carga computacional considerável.

As condições do mercado, as especificações do produto, a qualidade da matéria-prima, dentre outros, são fatores que podem oscilar e, conseqüentemente, a camada RTO pode gerar resultados que não correspondem com o ótimo econômico. Sem um ponto de operacional correto, o controlador MPC perde qualidade de desempenho e pode ainda provocar instabilidade no sistema. Uma maneira de

contornar esse problema é considerar a incerteza do modelo nos problemas de otimização do controlador MPC (ALVAREZ, ODLOAK, 2010).

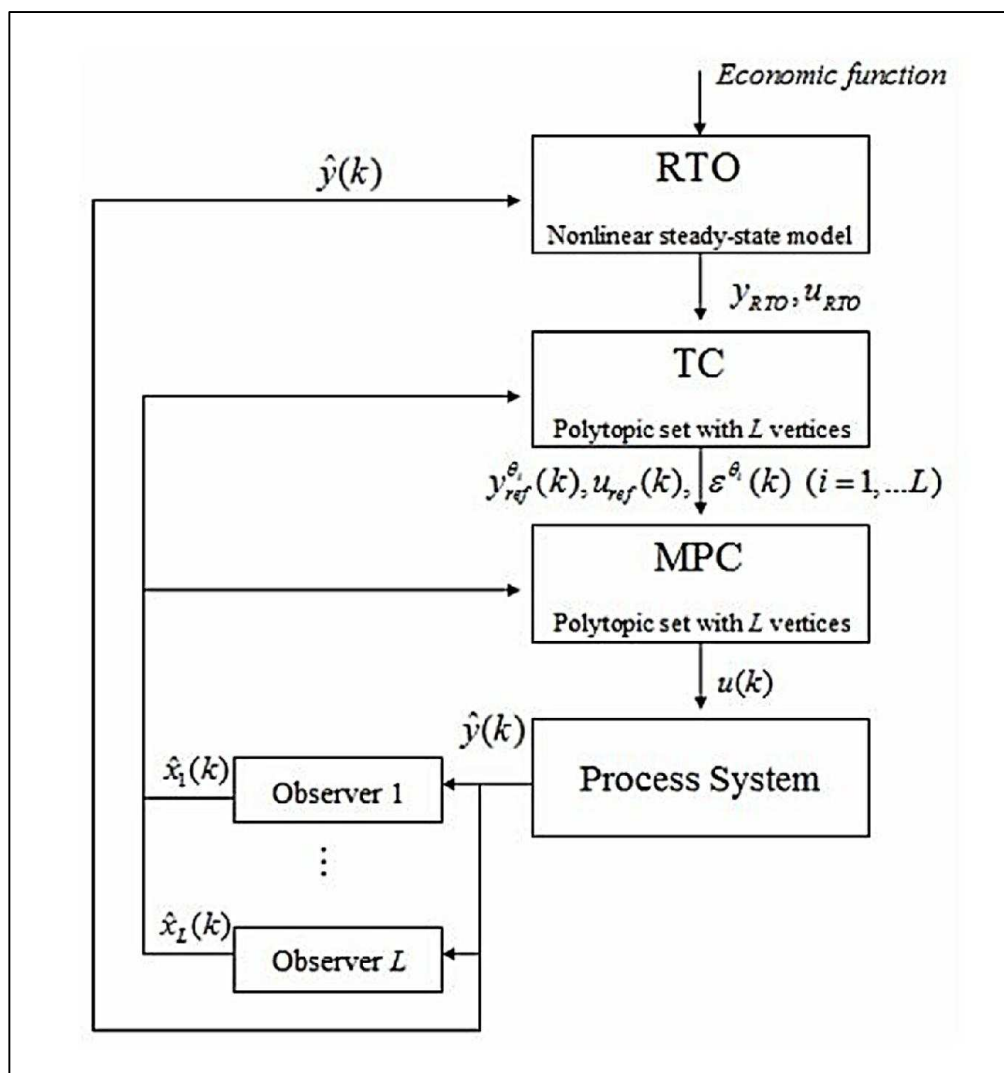
O modelo real do sistema simulado é desconhecido. Assim, considerando um conjunto de pontos operacionais possíveis da planta, supõe-se supor que o modelo real possa ser representado por meio dos pontos operacionais considerados que definem os vértices de um polítopo convexo (KOTHARE et al., 1996). Desse modo, os problemas de otimização da estrutura de controle são estruturados com base no modelo nominal ou no modelo mais provável do sistema enquanto os demais modelos (pontos operacionais) são inseridos no problema na forma de restrição, a qual garante que a verdadeira função objetivo da planta está decrescendo em etapas sucessivas. Esse tipo de restrição é denominado de restrição de custo-contracção e é aquela que garante a estabilidade robusta do controlador. Porém, é válido ressaltar que, por ser representada na forma de uma desigualdade quadrática para cada um dos modelos, as funções objetivo se tornam não lineares, exigindo maior esforço computacional para a resolução de seus problemas de otimização a cada tempo de amostragem.

2.3. Controle Preditivo de Múltiplo Modelos

Como dito anteriormente, os controladores preditivos utilizam modelos matemáticos para a previsão do comportamento do sistema, sejam eles desenvolvidos tanto por modelagem fenomenológica quanto por modelagem empírica.

Uma vez que o controlador MPC linear utiliza um modelo explícito linear para a predição, sua aplicação em processos químicos é restrita a pequenas regiões de operação. Segundo Gopinath et al. (1995), a precisão do modelo tem um efeito significativo no desempenho do sistema. Assim, devido à alta não linearidade dos processos químicos, os modelos lineares obtidos não são capazes de representar de forma satisfatória toda a faixa de operação da planta, mas somente aquela na qual foi obtido. À medida que o processo se afasta dessa condição, o modelo matemático perde capacidade de prever com exatidão o comportamento químico do processo, enfraquecendo o desempenho do controlador e até podendo resultar em um comportamento instável da planta (CHI, LIANG, 2015; HUNG et. al, 2014;).

Figura 4: Estrutura hierárquica de três camadas da interação RTO/MPC (ALVAREZ, ODLOAK, 2012).



Os principais motivos pelo quais os controles lineares têm sido continuamente aplicados em sistemas de controle de processos químicos é a capacidade de lidar com grandes sistemas multivariáveis com restrições operacionais e a baixa carga computacional necessária na simulação do processo quando comparada à simulação de um modelo não linear (QIN, BADGWELL, 2003; BEQUETTE, 1991). Além disso, poucas técnicas de controle baseadas em modelos não lineares foram implementadas na indústria de processos e um dos motivos é a

dificuldade em se obter modelos não lineares para caracterizar adequadamente o processo (SCHOTT, BEQUETTE, 1995).

Dentre as maneiras encontradas para minimizar as incertezas do modelo linear com relação ao real comportamento do sistema, a simulação dos processos químicos com múltiplos modelos lineares foi uma delas, na qual os modelos, em conjunto, representam toda a faixa de operação da planta industrial. Neste sentido, a cada intervalo de tempo, realiza-se a predição do sistema a partir de todos os seus modelos lineares, sendo a saída final do controlador uma combinação de todas as saídas dos modelos. Neste sentido, um controlador adaptativo de múltiplos modelos (MMPC) permite ao projetista abordar um sistema não linear complexo por meio de um conjunto de modelos lineares simples (TOHIDI; HAJIEGHRARY, 2016; DU; JOHANSEN, 2014; BASHIVAN; FATEHI, 2012).

A partir do que foi dito, pode-se entender que um MMPC é a combinação de uma série de MPC, cujos modelos lineares foram obtidos em diferentes pontos de operação da planta. Quanto maior a quantidade e mais abrangentes forem os modelos lineares em relação à faixa de operação do processo, maior será a exatidão do controlador ao calcular um sinal de saída (ação de controle). Normalmente, a quantidade de modelos lineares é determinada de acordo com a capacidade computacional, exigência de precisão e facilidade de obtenção dos modelos (DOUGHERTY, COOPER, 2003).

Uma das principais propriedades dos controladores de múltiplos modelos é a habilidade de selecionar o melhor sinal de controle a partir de todos os sinais disponíveis. Atualmente, existem várias abordagens e tipos de estratégia para a escolha do melhor sinal de controle, tais como:

- Troca rígida entre os modelos;
- Cálculo da ação de controle final como a soma ponderada das ações dos submodelos;
- Controlador de múltiplos modelos como restrições (robusto).

Vários são os estudos relacionados à aplicação de um controle preditivo em processos químicos, incluindo plantas de neutralização de pH (HERMANSSON, 2010; PEYMANI et al., 2008; XIE et al., 2008; DOUGHERTY, COOPER, 2003),

trocadores de calor (DOUGHERTY, COOPER, 2003; SCHMITZ ET AL., 2003), processos de destilação (MAHINDRAKAR, HAHN, 2016; PORFIRIO et al., 2003), tratamento de água (BELLO et al., 2014), comportamento de gases dentro de vasos e tubulações (HUNG et al., 2014), sistemas autônomos de nível de líquido (GOUTA et al., 2017), dentre outros. Em todos os estudos citados, o MMPC se mostra como uma alternativa interessante no controle de sistemas químicos. Muitos destes estudos ainda fizeram comparações entre o desempenho do MMPC e um MPC convencional, sendo observada vantagens do primeiro sob o segundo, com melhoras na estabilidade, menores tempos de subida, menores sobressinais e redução nas oscilações (BELLO et al., 2014; HUNG et al., 2014; PORFIRIO et al., 2003).

3. ESTRATÉGIA DE INTEGRAÇÃO COM MÚLTIPLOS MODELOS

Esse capítulo tem como objetivo descrever toda a estratégia de controle utilizada neste trabalho. Uma vez que a estrutura de controle adotada se arquiteta em três grandes camadas, subdividiu-se esse capítulo da seguinte maneira: na primeira parte, é apresentada a camada RTO, responsável pela otimização econômica. A segunda parte dispõe sobre a estrutura do MPC de duas camadas e seus respectivos problemas de otimização. Por último, na terceira parte, é detalhada a estratégia adaptativa de múltiplos modelos, suas equações e um esquema genérico e representativo de toda a estrutura de controle.

3.1. Camada RTO

A primeira camada da estrutura de controle é a otimização em tempo real (RTO) e sua função é calcular a condição operacional ótima do processo de modo que esta esteja mais próximo possível do ótimo econômico. Para isso, a RTO resolve a otimização de uma função econômica baseada em um modelo estático rigoroso e não linear do processo, atendendo às restrições impostas pelos equipamentos, às especificações do produto e pelas regulamentações de segurança e ambientais. O problema de otimização dessa camada pode ser representado pela equação (06) e suas respectivas restrições, dadas pelas equações (07)-(09).

$$\max_{y_{RTO}, u_{RTO}, x} f_{eco} \quad (06)$$

sujeito a:

$$h(y_{RTO}, u_{RTO}, x) = 0 \quad (07)$$

$$y_{min} \leq y_{RTO} \leq y_{max} \quad (08)$$

$$u_{min} \leq u_{RTO} \leq u_{max} \quad (09)$$

onde f_{eco} é a função econômica, y_{RTO} e u_{RTO} são os *targets* a serem determinados pela otimização, $h(y_{RTO}, u_{RTO}, x)$ representa o modelo de estado estacionário não linear e x é o vetor de estado do modelo fenomenológico.

A RTO emprega um modelo do processo em estado estacionário e, por isso, a otimização só deve ser executada quando o processo estiver próximo de um estado estacionário. Para isso, segundo Engell (2007), o tempo entre as otimizações sucessivas da RTO deve ser grande o suficiente para que o processo atinja um novo estado estacionário após o último movimento.

3.2. Controlador MPC de duas camadas

O objetivo principal das estratégias de controle avançado é aproximar as saídas do processo ao ponto de operação ideal ao mesmo tempo que garante estabilidade, o que, nos processos industriais, pode ser feito através de uma estrutura de controle hierárquica (FERRAMOSCA et al., 2017).

Aqui, a estrutura de controle possui três camadas: a camada RTO e um MPC de duas camadas. A camada RTO calcula os *targets*, y_{RTO} e u_{RTO} , considerando também as medidas do processo e os parâmetros econômicos. Os valores econômicos são enviados para o MPC, que é formado por duas camadas: a camada estática (CE) e a camada dinâmica (CD). A camada estática recebe as informações fornecidas pela RTO e recalcula os destinos de estado estacionário, enviando um ponto de operação alcançável para a camada dinâmica. A camada dinâmica calcula a sequência ideal de ações de controle, cuja primeira ação de controle calculada é a saída da estrutura.

A camada estática da estrutura de controle, em cada tempo de amostragem, resolve o seguinte problema de otimização:

$$\min_{y_{sst}(k), u_{sst}(k), \varepsilon(k)} J_s(k) = \|y_{sst}(k) - y_{RTO}\|_{C_y}^2 + \|u_{sst}(k) - u_{RTO}\|_{C_u}^2 + \|\varepsilon(k)\|_{C_\varepsilon}^2 \quad (10)$$

sujeito a:

$$y_{sst}(k) - y(\infty | k) = D^0(u_{sst}(k) - u(k-1)) \quad (11)$$

$$\begin{bmatrix} y_{min} + \varepsilon(k) \\ -m\Delta u_{max} \\ u_{min} \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} y_{sst}(k) \\ u_{sst}(k) - u(k-1) \\ u_{sst}(k) \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} y_{max} + \varepsilon(k) \\ m\Delta u_{max} \\ u_{max} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$(13)$$

$$(14)$$

em que $y_{sst}(k)$ e $u_{sst}(k)$ são os *targets* recalculados e C_y , C_u e C_ε são matrizes de ponderação definidas positivas. D^0 é uma matriz que representa o ganho estático do sistema, $y(\infty | k)$ é o valor final de saída, $u(k-1)$ é a última ação de controle aplicada ao sistema real, $\varepsilon(k)$ são as variáveis de folga para as restrições relacionadas a cada $y_{sst}(k)$ e m é o horizonte de controle do MPC. A solução deste problema produz valores ótimos do $y_{sst}(k)$, $u_{sst}(k)$ e $\varepsilon(k)$, que são enviados para a camada dinâmica do controlador do MPC. Na camada dinâmica, o MPC resolve o seguinte problema de otimização:

$$\begin{aligned} \min_{\Delta u(k), y_{sp}(k), \delta_y(k)} J_D(k) &= \sum_{j=0}^{\infty} \|y(k+j | k) - y_{sp}(k) - \delta_y(k)\|_{Q_y}^2 + \\ & \sum_{j=0}^{\infty} \|u(k+j | k) - u_{sst}(k)\|_{Q_u}^2 + \sum_{j=0}^{\infty} \|\Delta u(k+j | k)\|_R^2 + \|\delta_y(k)\|_{S_y}^2 \end{aligned} \quad (15)$$

sujeito a:

$$\begin{bmatrix} -\Delta u_{max} \\ u_{min} \\ y_{min} \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} \Delta u(k+j | k) \\ u(k+j | k) \\ y_{sp}(k) \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} \Delta u_{max} \\ u_{max} \\ y_{max} \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} j = 0, \dots, m-1 \\ j = 0, \dots, m-1 \end{array} \quad (16)$$

$$(17)$$

$$(18)$$

$$y(\infty | k) + \widetilde{D}^0 \Delta u(k) - y_{sp}(k) - \delta_y(k) = 0 \quad (19)$$

$$y_{sp}(k) = y_{sst}(k) - \delta_y(k) \quad (20)$$

$$\delta_y(k) = \varepsilon(k) \quad (21)$$

$$u(k-1) + \widetilde{I} \Delta u(k) - u_{sst}(k) = 0 \quad (22)$$

no qual Q_y , Q_u e R são matrizes com dimensões apropriadas, $\delta_y(k)$ é a variável de folga que garante que a restrição terminal (19) seja sempre viável e a função de custo J_D seja limitada.

A estrutura de controle proposta requer modelos lineares do sistema. Assim, com a determinação das variáveis de interesse do sistema e de seus respectivos valores limites, serão determinadas diferentes condições operacionais para a obtenção de modelos descritivos do processo. De acordo com Dougherty e Cooper (2003), cada um dos modelos deverá descrever o processo em torno de um ponto, sendo eles: (1) limite inferior de operação, (2) condição intermediária e (3) limite superior de operação. Uma vez que isso é feito, os modelos são capazes de descrever razoavelmente toda a extensão de operação da planta. Com os modelos dinâmicos obtidos, o MPC de duas camadas é implementado para cada um deles. Vale ressaltar que a condição intermediária pode conter um ou mais pontos de interesse, sendo a quantidade determinada de acordo com o processo, seu grau de não linearidade e a precisão de resposta.

Neste controlador, a predição da trajetória de saída do sistema no horizonte de predição é feita a partir de um modelo linear no espaço de estados. Este modelo pode ser obtido empiricamente, na forma de função de transferência, por meio de teste de resposta ao degrau.

Após o desenvolvimento do algoritmo do controlador, é feito o ajuste dos parâmetros de cada controlador individual (sintonia dos controladores) e inicia-se a construção da estratégia adaptativa.

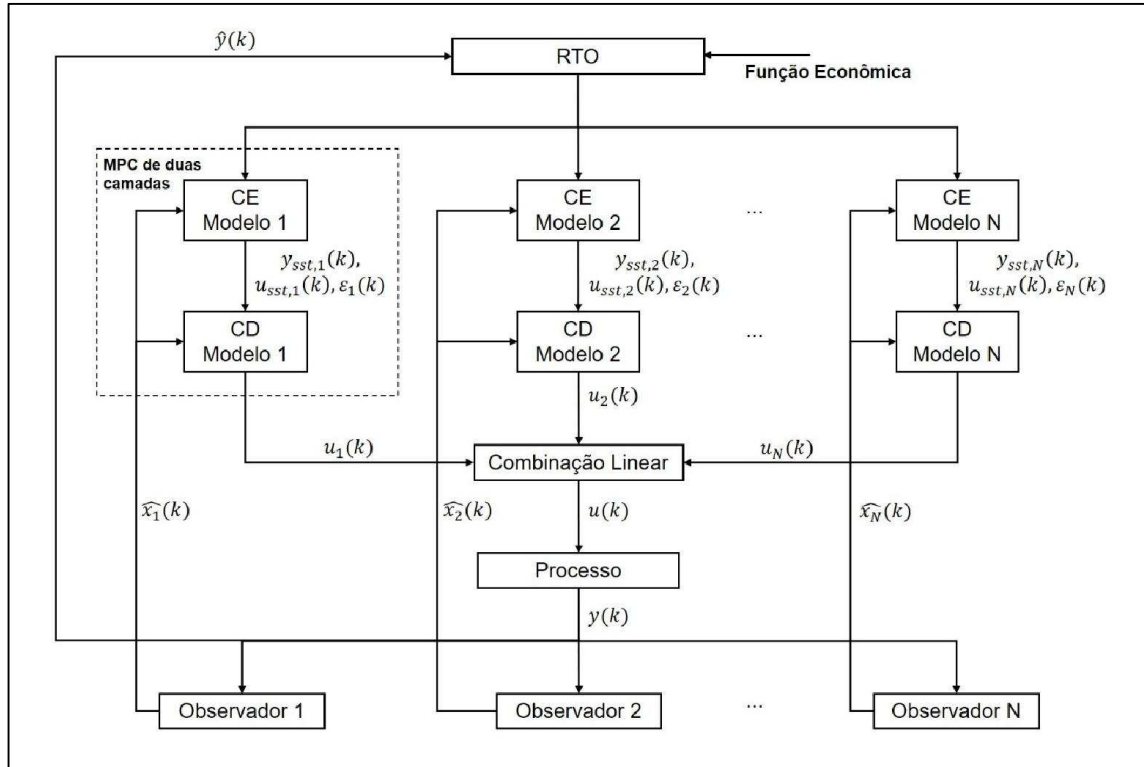
3.3. Estratégia Adaptativa de Múltiplos Modelos

A estratégia adaptativa consiste na combinação das ações de controle dos controladores MPC.

Supondo que N modelos lineares são suficientes para representar o comportamento do processo em uma região de operação e que cada modelo i ($i = \{1 \dots N\}$) é obtido em um estado estacionário diferente dentro da região de operação, a estratégia adaptativa consiste em executar as camadas CE e CD e produzir uma ação de controle para cada modelo i . Em seguida, a ação de controle final aplicada

ao processo é uma combinação linear das diferentes ações de controle calculadas. Essa estrutura está ilustrada na Figura 5.

Figura 5: Integração adaptativa da RTO com MPC de múltiplos modelos.



A camada RTO resolve a otimização econômica e a solução dessa camada, y_{RTO} e u_{RTO} , é enviada para a camada estática do controlador MPC de cada modelo i . A cada passo de tempo k , as camadas estáticas são executadas e enviam alvos para suas respectivas camadas dinâmicas. A estrutura tem garantia de estabilidade nominal para cada modelo i e a ação de controle final $u(k)$ é calculada a partir da combinação das ações de controle a partir da equação (23).

$$u(k) = \sum_{i=1}^N w_i(k) u_i(k) \quad (23)$$

$$\sum_{i=1}^N w_i(k) = 1 \quad (24)$$

em que w_i é o fator de ponderação que indica o peso da ação de controle u_i na ação de controle final.

O fator de ponderação atribuído para cada ação de controle é calculado levando em consideração a distância (norma euclidiana) entre o valor do estado estacionário do modelo i , $y_{i,j}$, e o valor atual da variável controlada y_j de acordo com as equações (25) a (27). Uma representação do cálculo das distâncias entre os valores pode ser vista na Figura 6, considerando $N = 3$ e duas variáveis controladas.

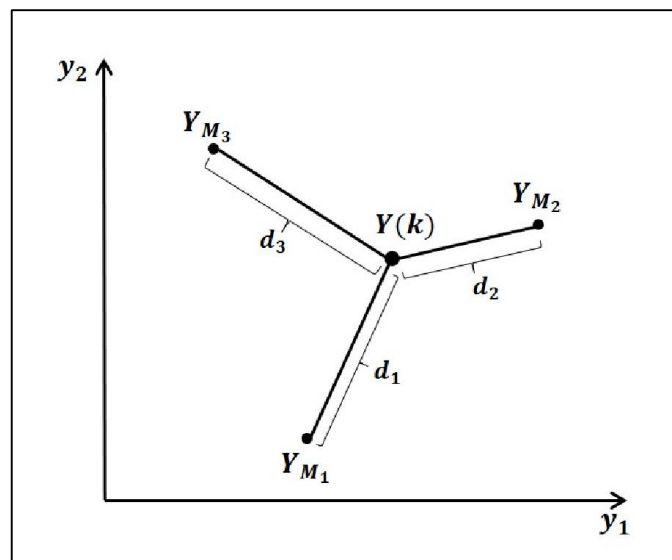
$$d_i(k) = \|y_i - y(k)\|_2, i = \{1, 2, \dots, N\} \quad (25)$$

$$p_i(k) = 1 - \frac{d_i(k)}{\sum_{i=1}^N d_i(k)} \quad (26)$$

$$w_i(k) = 1 - \frac{p_i(k)}{\sum_{i=1}^N p_i(k)} \quad (27)$$

sendo n_y a quantidade de variáveis controladas do processo.

Figura 6: Distância dos valores reais das variáveis do processo com relação ao estado estacionário dos modelos.



Com o desenvolvimento da estratégia, a última etapa do trabalho consistirá na análise de desempenho do controlador com relação ao controlador robusto

proposto por Alvarez e Odloak (2010; 2012) através de testes regulatórios. Um teste regulatório é responsável por verificar a atuação do controlador frente a perturbações externas, inerentes ao comportamento dinâmico do processo. Para isso, uma perturbação é provocada em alguma variável de processo que interfira no valor final da variável controlada, provocando sua modificação.

4. ESTUDO DE CASO: REATOR DE POLIMERIZAÇÃO

Ao longo dos anos, a polimerização de estireno vem sendo utilizada em diversos estudos de controle já que apresenta uma série de características que abrange grande parte dos processos químicos industriais, a citar: não linearidades, presença de múltiplas variáveis, reações altamente exotérmicas, além das várias configurações de reatores que podem ser utilizados no processo.

Muitos foram os estudos que utilizaram técnicas avançadas de controle para controlar o reator de polimerização de estireno em batelada: Ghasem et al. (2007) investigou as técnicas de Lógica *Fuzzy* e Controlador por Modelo Genérico. Ao final, os controladores avançados foram comparados com o PID convencional e, como esperado, foi constatada uma performance melhor pelos controladores avançados em relação ao convencional. Cancelier et al. (2016) aplicou um controlador preditivo que utiliza uma rede neural *feedforward* com adaptação *online* dos parâmetros. O controlador apresentou bons resultados, principalmente em se tratando de presenças de *offset*, quando comparado a um controlador de parâmetros fixos. Çetinkaya et al. (2006) utilizou um Controle por Matriz Dinâmica *fuzzy*-relacional e, ao final, os autores concluíram que o controlador é uma estratégia promissora para o controle de temperatura de reatores de polimerização em batelada em aplicações industriais.

Entretanto, mesmo com os extensos estudos do controle de reator de polimerização de estireno em batelada, das facilidades operacionais e da flexibilidade de produção que este processo apresenta, este tipo de reator possui uma capacidade produtiva limitada quando comparados aos processos contínuos, uma variabilidade na qualidade do polímero produzido em cada batelada e um elevado tempo ocioso da planta produtiva (NOGUEIRA, 2007). Além disso, é importante ressaltar que, apesar do controle da temperatura do reator ser primordial para a garantia de um processo seguro e um polímero de qualidade, a plantas de polimerização requerem que outras variáveis também sejam controladas, como é o caso da massa molecular do polímero.

Hidalgo e Brosilow (1990) implementaram um algoritmo de controle preditivo de modelo não linear de baixa ordem para o controle da temperatura de polimerização de estireno em um reator contínuo de mistura perfeita a partir de duas variáveis manipuladas (vazão da camisa de resfriamento e vazão de monômero).

Prasad et al. (2002) aplicou uma estratégia de controle preditivo multivariável de modelo não linear a um reator contínuo de polimerização de estireno e foi realizado o controle das propriedades do polímero como a massa molecular média e a polidispersidade. Para isso, presumiu-se que o sistema tivesse dois conjuntos de medidas: medições *online* instantâneas e medições laboratoriais lentas com atraso na análise. Porém, os autores não realizaram um estudo da carga computacional dos controladores e sabe-se que controladores não lineares geralmente apresentam maiores complexidades e custos computacionais que controladores lineares, sendo necessária uma análise da viabilidade computacional desses sistemas de controle.

Ferramosca et al. (2014) comparou diferentes estratégias de controladores preditivos com objetivos econômicos em um reator de polimerização de estireno. Cada um dos controladores apresentou um comportamento diferente, mas os resultados mostraram viabilidade, convergência e estabilidade de todos. Todavia, os autores utilizaram apenas um modelo linear para as previsões dos controladores.

Diante do exposto, não há dúvidas de que a polimerização de estireno é considerada um problema clássico para testes e melhorias de estratégias de monitoramento, otimização e controle e sua recorrente aplicação reforça ainda mais sua confiabilidade e aplicabilidade, justificando seu uso no estudo do presente trabalho.

Neste capítulo, são apresentados os mecanismos reacionais do processo de polimerização. Em seguida, é apresentada a descrição detalhada do processo, as equações diferenciais do modelo fenomenológico e as considerações envolvidas. Em seguida, é definido o estado estacionário inicial do processo e os valores dos parâmetros e das constantes do sistema. Finalmente, são apresentadas a estrutura de controle de processo, com a definição do objetivo econômico e a apresentação dos múltiplos modelos adotados.

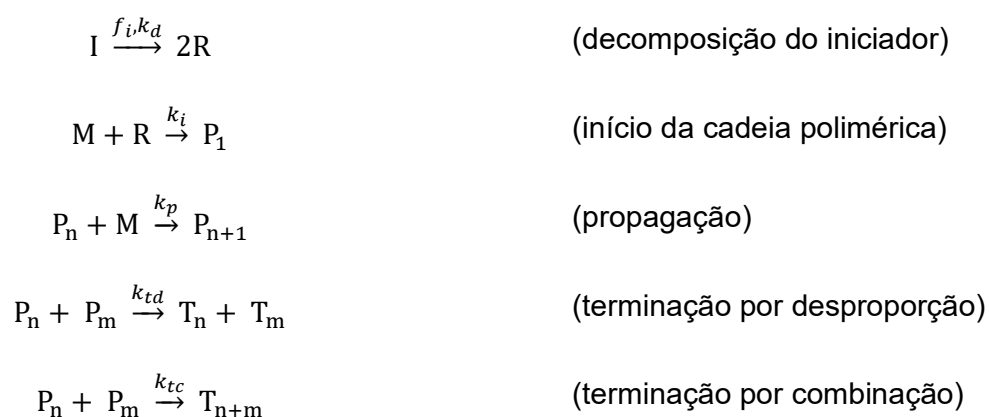
4.1. Descrição do Processo

O processo aqui estudado é um reator contínuo de mistura perfeita (CSTR - *Continuous Stirred-Tank Reactor*) de polimerização de estireno. A polimerização é um processo químico que gera um composto polimérico a partir da combinação de vários

monômeros, guiada por um conjunto de reações que determinam o mecanismo de polimerização.

As reações de polimerização por radicais livres são descritas em geral por duas etapas: (1) reconhecer o mecanismo cinético e (2) escrever as equações diferenciais com base nos balanços de massa e de energia.

Segundo Odian (2004), o mecanismo de polimerização que utiliza monômeros com ligações do tipo vinílica, como o estireno, geralmente apresenta três etapas (iniciação, propagação e terminação) e pode ser representado pelas seguintes reações (JAISINGHANI, RAY, 1977):



A etapa de iniciação é composta pelas duas primeiras reações. Nela, o iniciador I decompõe-se, gerando radicais livres R. O radical livre, por sua vez, reage com as moléculas de monômero M, dando início à cadeia polimérica (P_1). Durante a propagação, as cadeias crescem com adições sucessivas de monômeros a partir dos seus centros ativos. As cadeias crescerão enquanto seus centros ativos existirem. Na etapa de terminação, os centros ativos são desativados e as cadeias poliméricas finalizadas. Isso pode acontecer de duas maneiras: a partir da transferência de elétrons de um centro ativo para outro (terminação por desproporção), gerando duas cadeias poliméricas inativas (ou mortas) de tamanhos diferentes (T_n e T_m) ou através da junção das cadeias poliméricas ativas (terminação por combinação), resultando em uma cadeia de polímero inativa (T_{n+m}).

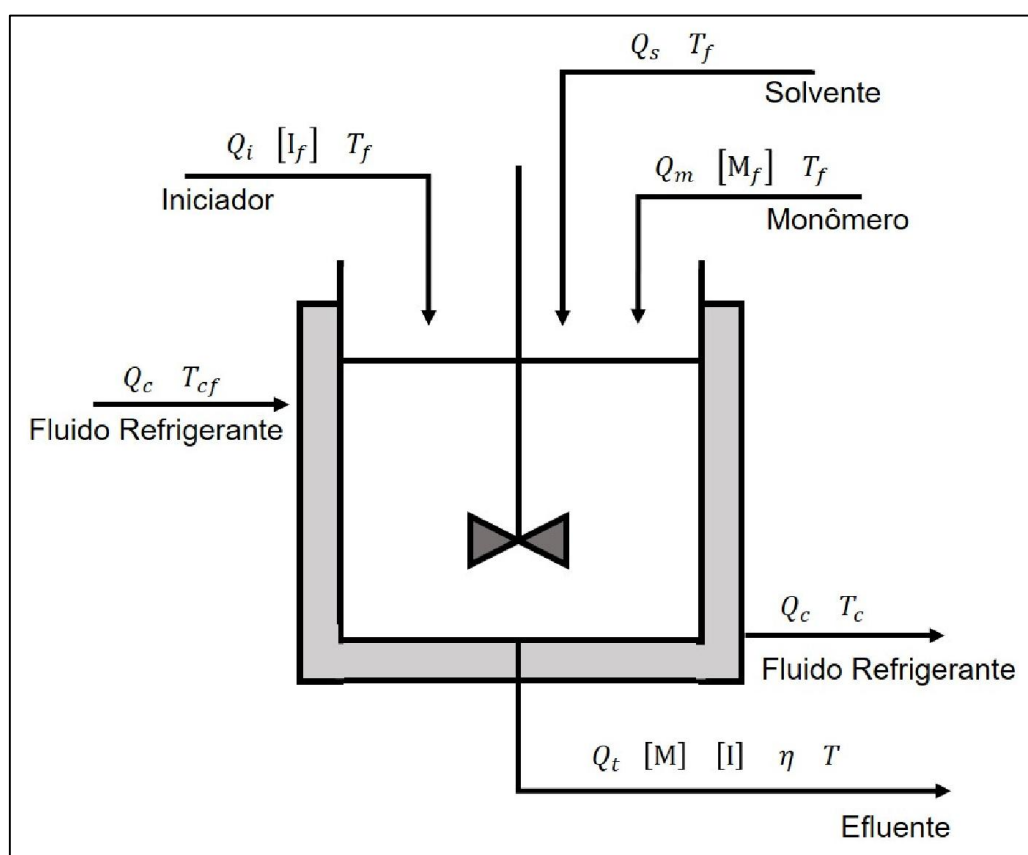
Segundo Machado (1996), existem diversas maneiras de dar início a um processo de polimerização. Na polimerização do estireno, a técnica mais utilizada é o emprego de compostos com ligações covalentes de baixa energia, como peróxidos ou

azocompostos como iniciadores e que, sob condições energéticas brandas, liberam radicais livres altamente reativos. Essa técnica foi utilizada neste trabalho e o iniciador da polimerização foi definido como o 2,2'-azoisobutironitrila (AIBN) em benzeno.

É importante citar também que as reações de polimerização são conhecidas por serem altamente exotérmicas, por isso, há a necessidade de um sistema de refrigeração capaz de promover a troca de calor entre o reator e o fluido de refrigeração e, conseqüentemente, amenizar os efeitos térmicos sob a qualidade do polímero produzido.

Um diagrama esquemático do sistema é apresentado na Figura 7. O CSTR tem três correntes de alimentação: Q_i , Q_s , Q_m , que representam as taxas de fluxo do monômero de estireno, do solvente benzeno e do iniciador 2,2'-azoisobutironitrila (AIBN) em benzeno, respectivamente. A temperatura do reator é mantida pela vazão Q_c do fluido de resfriamento que circula na camisa. O efluente do reator é representado por Q_t e contém polímero, monômero não reagido, iniciador e solvente.

Figura 7: Reator de polimerização de estireno. Adaptado de Alvarez e Odloak (2012).



O modelo fenomenológico do processo é definido de acordo com Alvarez e Odloak (2012) e Hidalgo e Brosilow (1990) e leva em conta as seguintes suposições:

- A vida útil dos radicais poliméricos é extremamente curta se comparada a outras constantes de tempo do sistema, de modo que a variação nas concentrações de R e P_n são quase nulas;
- O consumo de monômero é principalmente devido à propagação, o que sugere à hipótese de polímeros finais de cadeia longa;
- Foram desconsideradas as reações de transferência de cadeia para o monômero e para o solvente;
- A iniciação térmica do monômero foi desconsiderada, já que esta é significativa apenas em temperaturas superiores a 373 K.
- A temperatura do reator considerada neste trabalho está abaixo do limite de 373 K;
- A constante de taxa de terminação da cadeia global, k_t , é definida como a soma das constantes de terminação por combinação, k_{tc} e de terminação por desproporção, k_{td} , ou seja $k_t = k_{tc} + k_{td}$;
- A terminação por desproporção não é considerada, de modo que a terminação da cadeia ocorre apenas por combinação, ou seja, $k_t = k_{tc}$;
- A taxa de propagação é muito mais rápida que a taxa de terminação;
- O calor de reação da iniciação e o calor de reação da terminação podem ser considerados desprezíveis se comparados ao calor de reação da etapa de propagação.

A partir do mecanismo reacional e das considerações adotadas, os balanços de massa e energia são reduzidos às seguintes equações diferenciais:

$$\frac{d[I]}{dt} = \frac{(Q_i[I_f] - Q_t[I])}{V} - k_d[I] \quad (28)$$

$$\frac{d[M]}{dt} = \frac{(Q_m[M_f] - Q_t[M])}{V} - k_p[M][P] \quad (29)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_t(T_f - T)}{V} + \frac{(-\Delta H_r)}{\rho C_p} k_p [M][P] - \frac{hA}{\rho C_p V} (T - T_c) \quad (30)$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{Q_c(T_{cf} - T_c)}{V_c} + \frac{hA}{\rho_c C_{cp} V_c} (T - T_c) \quad (31)$$

sendo

$$[P] = \left[\frac{2f_i k_d [I]}{k_t} \right]^{0.5} \quad (32)$$

$$k_j = A_j \exp\left(\frac{-E_j}{T}\right), \quad j = d, p, t \quad (33)$$

$$Q_t = Q_i + Q_s + Q_m \quad (34)$$

em que $[I_f]$ e $[I]$ são as concentrações do Iniciador na corrente de entrada e saída, respectivamente, assim como $[M_f]$ e $[M]$ são as concentrações de monômero na corrente de entrada e saída do reator. T_f é a temperatura do fluxo de alimentação e T é a temperatura do reator e da corrente de saída. T_{cf} é a temperatura da corrente de alimentação do fluido de resfriamento e T_c é a temperatura dentro da camisa. V é o volume do reator e V_c é o volume do fluido refrigerante da camisa. Os outros termos das equações são parâmetros relacionados à cinética, termodinâmica e propriedades de transporte associadas ao reator de polimerização e suas definições e valores estão dispostos na Tabela 1. A Tabela 2 apresenta os valores do estado estacionário inicial do processo.

A variação dos momentos do polímero morto é descrita pelas equações (35)-(37), sendo D_0 , D_1 e D_2 os momentos de ordem zero, primeira e segunda ordem, respectivamente.

$$\frac{dD_0}{dt} = 0.5k_t [P]^2 - \frac{Q_t D_0}{V} \quad (35)$$

$$\frac{dD_1}{dt} = M_m k_t [M][P] - \frac{Q_t D_1}{V} \quad (36)$$

$$\frac{dD_2}{dt} = 5M_m k_t [M][P] + 3M_m \frac{k_p^2}{k_t} [M]^2 - \frac{Q_t D_2}{V} \quad (37)$$

Tabela 1: Parâmetros do processo de polimerização.

Variável	Definição	Valor
A_d	Fator de frequência para a decomposição do iniciador	2.142e17 h ⁻¹
E_d	Energia de ativação para a decomposição do iniciador	14897 K
A_p	Fator de frequência para a reação de propagação	3.816e10 L/(mol.h)
E_p	Energia de ativação para a reação de propagação	3557 K
A_t	Fator de frequência para a reação de terminação	4.50e12 L/(mol.h)
E_t	Energia de ativação para a reação de terminação	843 K
f_i	Eficiência do iniciador	0.6
$-\Delta H_r$	Calor de polimerização	6.99e4 J/mol
hA	Coeficiente de transferência de calor global	1.05e6 J/(K.h)
ρC_p	Capacidade calorífica média do fluido do reator	1506 J/(K.L)
$\rho_c C_{cp}$	Capacidade calorífica do fluido refrigerante da camisa	4043 J/(K.L)
M_m	Massa molecular do monômero	104.14 g/mol

Fonte: Alvarez, Odloak (2012).

Uma das variáveis de interesse para o controle de um processo de polimerização é a massa molecular do polímero devido à sua influência sob as propriedades do produto. Entretanto, segundo Machado (1996), as curvas de distribuição de massa molecular são obtidas por análises cromatográficas que demandam um tempo considerável, tornando-se inviável para um controle *online* da planta. Neste sentido, outras variáveis ganham espaço para monitoramento e controle indireto das propriedades poliméricas do produto como, por exemplo, a viscosidade. De acordo com Richards e Congalidis (2006), a viscosidade, η , é uma variável de grande interesse na tecnologia de polímeros, capaz de indicar o curso de uma reação de polimerização e a qualidade de um produto polimérico. Assim, a

viscosidade, η , é medida e infere-se a massa molecular média do polímero, \overline{M}_w , a partir de uma Lei de Potência, $\eta = a\overline{M}_w^b$, onde a e b são determinados por regressão de dados experimentais. Neste trabalho, os parâmetros utilizados foram retirados de Gazi et al. (1996) de modo que:

$$\eta = 0.0012(\overline{M}_w)^{0.7} \quad (38)$$

sendo \overline{M}_w a massa molecular média do polímero, calculada por:

$$\overline{M}_w = M_m \frac{D_2}{D_1} \quad (39)$$

Tabela 2: Ponto operacional inicial do reator.

Variável	Valor
$[I_f]$	0.5888 mol/L
$[M_f]$	8.6981 mol/L
$[I]$	6.6832e-2 mol/L
$[M]$	3.3245 mol/L
T_f	330 K
T_{cf}	295 K
T	323.56 K
T_c	305.17 K
Q_i	108 L/h
Q_c	471.6 L/h
Q_s	459 L/h
Q_m	378 L/h
V	3000 L
V_c	3312.4 L
D_0	2.7547e-4 mol/L
D_1	16.110 g/L

Fonte: Alvarez, Odloak (2012).

De acordo com Rogosic et al. (1996), a adição de monômeros nas cadeias poliméricas durante a reação de polimerização segue alguns princípios estatísticos, de modo que o produto final não apresenta homogeneidade em se tratando das propriedades moleculares. Ainda segundo os autores, quase todo polímero é polidispersivo em relação à massa molecular e a propriedade que define a distribuição da massa molecular do polímero morto é índice de polidispersidade (PD), definido como:

$$PD = M_m \frac{D_2 D_0}{D_1^2} \quad (40)$$

4.2. Estrutura de Controle

Neste trabalho, o sistema de controle projetado e aplicado ao reator de polimerização tem como objetivo controlar a viscosidade do polímero η (y_1) e a temperatura do reator T (y_2).

Russo e Bequetti (1996) afirmam que a taxa de fluxo da camisa de resfriamento é a principal variável manipulada usada para controlar a temperatura do reator. Porém, de acordo com Hidalgo e Brosilow (1990), o reator não pode ser operado de forma segura manipulando apenas a vazão do refrigerante. Sendo assim, definiu-se como variáveis manipuladas a vazão do iniciador Q_i (u_1) e a vazão do líquido da camisa de resfriamento Q_c (u_2).

As demais vazões do reator (Q_s e Q_m) estão relacionadas com a vazão Q_i e foram definidas de modo que a fração de volume do solvente seja mantida em 60% para evitar um aumento significativo do efeito gel e assegurar a qualidade do produto polimérico (ALVAREZ, ODLOAK, 2012; CHOI, 1986):

$$Q_m = \frac{\overline{Q_m}}{\overline{Q_i}} Q_i \quad (41)$$

$$Q_s = 1.5Q_m - Q_i \quad (42)$$

nas quais $\overline{Q_m}$ e $\overline{Q_i}$ são valores nominais de Q_m e Q_i , respectivamente.

4.2.1. Camada RTO

Para o processo de polimerização, o objetivo econômico da RTO será a maximização da taxa de produção do polímero, definida como o produto entre a vazão total do efluente, Q_t (L/h) e o momento de primeira ordem D_1 (g/L) e que pode ser interpretada como a concentração média do polímero morto (ALVAREZ, ODLOAK, 2012). As equações (43)-(46) representam o problema de otimização a ser resolvido pela RTO.

$$\max_{y_{RTO}, u_{RTO}, x} Q_t D_1 \quad (43)$$

sujeito a:

$$h(y_{RTO}, u_{RTO}, x) = 0 \quad (44)$$

$$y_{min} \leq y_{RTO} \leq y_{max} \quad (45)$$

$$u_{min} \leq u_{RTO} \leq u_{max} \quad (46)$$

4.2.2. Obtenção dos Múltiplos Modelos Lineares do Sistema

Como dito anteriormente, as camadas CE e CD do controlador proposto exigem modelos lineares. Para este sistema, três modelos diferentes foram identificados ($N = 3$), respeitando as condições de obtenção definidos por Dougherty e Cooper (2003). A Figura 6 apresenta os pontos de estado estacionário onde os modelos foram obtidos.

A condição operacional em estado estacionário detalhada em Alvarez e Odloak (2012), e disposta na Tabela 2, foi escolhida como ponto de operação inicial e seu modelo de função de transferência, obtido pelos autores, foi definido como o Modelo 1 (M_1). Para a determinação dos outros dois modelos, os valores das entradas u_1 e u_2 foram modificados, a partir de seus valores de operação inicial. Com a modificação, novos estados estacionários foram atingidos e seus respectivos os modelos lineares obtidos. Neste sentido, os estados estacionários que representam os pontos de obtenção dos três modelos do controlador estão dispostos na Tabela 3.

Figura 8: Posição dos modelos na prática (estados estacionários de obtenção dos modelos do controlador).

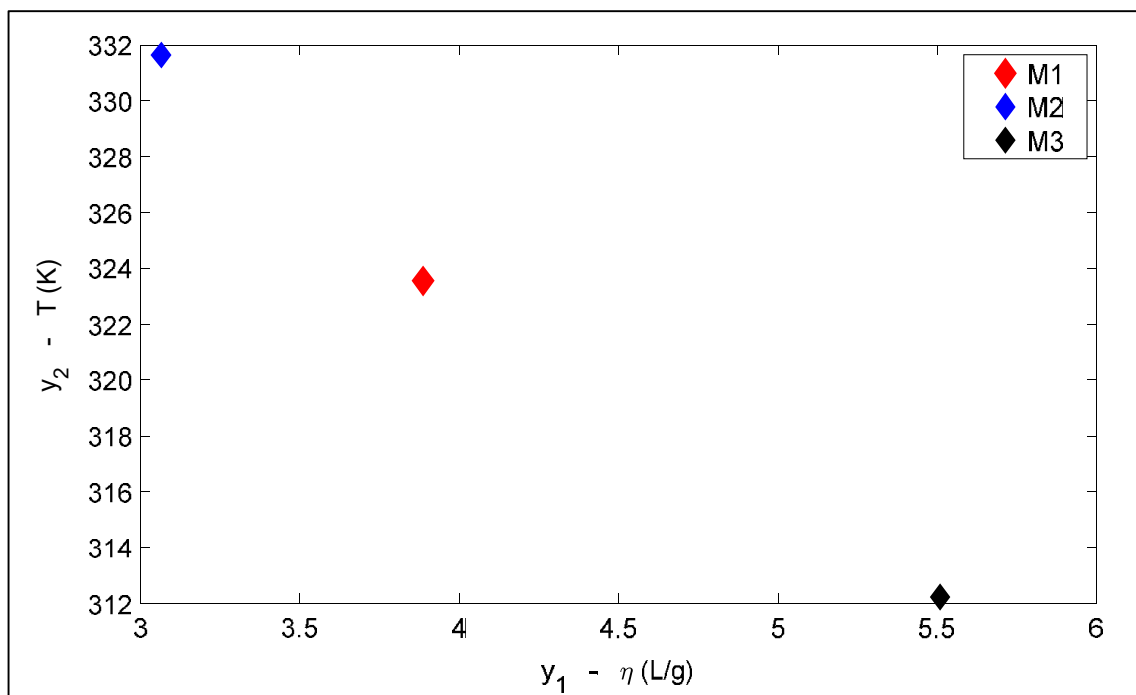


Tabela 3: Estados estacionários dos modelos do controlador.

	u_1 (L/h)	u_2 (L/h)	y_1 (L/g)	y_2 (K)
Modelo 1 (M_1)	0,03	0,131	3,8863	323,5558
Modelo 2 (M_2)	1,7*0,03	0,5*0,131	3,0645	331,6396
Modelo 3 (M_3)	0,4*0,03	1,5*0,131	5,5083	312,2310

Para os estados estacionários definidos na Tabela 3, os modelos obtidos apresentam as seguintes formulações no domínio de Laplace:

Modelo 1 (M_1):

$$G(s) = \begin{bmatrix} \frac{-66.69}{13.5150s^2 + 7.8748s + 1} & \frac{5,9425}{64.0145s^3 + 52.7290s^2 + 13.4498s + 1} \\ \frac{144.7925}{10.6786s^2 + 8.3396s + 1} & \frac{-47.5589}{18.2571s^2 + 10.0141s + 1} \end{bmatrix}$$

Modelo 2 (M_2):

$$G(s) = \begin{bmatrix} \frac{6.7655}{1.0821s^2 + 6.3316s + 1} & \frac{14.2628}{47.1032s^2 + 15.6430s + 1} \\ \frac{-49.9157}{6.0241s^3 + 23.3193s^2 + 14.0542s + 1} & \frac{-149.0235}{28.7191s^2 + 14.3308s + 1} \end{bmatrix}$$

Modelo 3 (M_3):

$$G(s) = \begin{bmatrix} \frac{-142.5637}{41.0846s^2 + 13.4675s + 1} & \frac{3.2093}{127.4535s^3 + 88.6057s^2 + 17.0533s + 1} \\ \frac{827.0916}{0.0797s^2 + 5.3841s + 1} & \frac{-17.1810}{14.8368s^2 + 8.5297s + 1} \end{bmatrix}$$

A partir da análise dos modelos obtidos, é possível perceber mudanças tanto no ganho quanto na constante de tempo das funções, o que reforça a diferença entre os pontos operacionais obtidos, a presença de não linearidades no processo e a importância de garantir que o controlador seja capaz controlar adequadamente o sistema, mesmo apresentando comportamentos distintos.

Analisando-se de forma mais criteriosa a mudança dos ganhos, observa-se que as variações nas entradas possuem interferências diferentes sob o processo. Quando comparados entre os três modelos, os ganhos K_{11} e K_{21} são aqueles que apresentam as maiores variações, com presença de inversão de sinal e de módulos que destoam entre si. Os ganhos K_{11} e K_{21} indicam a maneira como as saídas y_1 e y_2 se modificam a partir de variações no valor da entrada u_1 e a maneira como estes se modificam apontam uma alta sensibilidade do processo à mudanças em u_1 . Apesar das mudanças de valores de K_{12} e K_{22} , o que reafirma a diferença entre os modelos obtidos, seus valores são próximos e possuem sinais iguais nas três matrizes de função de transferência, de modo que variações em u_2 têm menor influência sob o processo se comparado com u_1 .

Ainda analisando as estruturas das matrizes de funções de transferência, observa-se que a matriz do Modelo 2 é a mais distinta dentre as três. A grande divergência dessa matriz pode ser devido à alta não linearidade do processo e à presença de regiões de operação instáveis. Segundo Hidalgo e Brosilow (1990), as

reações exotérmicas podem apresentar vários estados estacionários de acordo com as condições em que o reator se encontra. Assim, ao modificar as condições de operação do reator, este pode passar de um estado estacionário em que há geração de calor para um em que a remoção de calor domina a geração e essa variação pode ser a causa da grande divergência dos ganhos do Modelo 2 se comparados com os ganhos dos Modelos 1 e 3.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo tem como objetivo apresentar os parâmetros e detalhes das simulações, bem como os resultados obtidos. As simulações analisam a convergência e a viabilidade da estratégia proposta quando comparada com a estrutura proposta por Alvarez e Odloak (2010; 2012). Isso é feito a partir de perturbações no sistema. Também é apresentado as análises do esforço computacional.

5.1. Parâmetros de Simulação

O reator de polimerização foi simulado durante 1000 horas, onde o processo foi submetido as perturbações a fim de verificar o desempenho da estrutura de controle proposta.

De acordo com Hidalgo e Brosilow (1990), o processo de polimerização de estireno possui um estado estacionário instável. Sendo assim, com o intuito de evitar que o processo atinja uma região de instabilidade e de difícil operabilidade, foi necessária a adição de valores de restrições para as entradas. Além disso, a estrutura proposta considera um controle por zonas, sendo necessários limites para as variáveis de saída. Adicionalmente, uma restrição na variação de entrada também foi considerada a fim de se evitar variações bruscas nas entradas e, conseqüentemente, aumentar a vida útil dos instrumentos de controle instalados na planta. Todas essas restrições estão dispostas na tabela a seguir (Tabela 4).

Tabela 4: Valores de restrição das variáveis do sistema de controle.

	min	max
Δu [L/h; L/h]	-	[0,01; 0,01]
u [L/h; L/h]	[0,015; 0,03]	[0,07; 0,25]
y [L/g; K]	[3,5; 321]	[4,15; 326]

Apesar da estrutura de controle possuir três modelos distintos para três controladores individuais e independentes, estes foram sintonizados com os mesmos parâmetros de ajuste, apresentados na Tabela 5.

De acordo com a Tabela 5, C_y possui valor nulo para a primeira saída enquanto C_u possui valor nulo para a segunda entrada, o que indica que os alvos das RTO não estão ativados para y_1 e u_2 e a otimização econômica da RTO gera *targets* unicamente para y_2 e u_1 .

A fim de analisar as vantagens e desvantagens da estrutura proposta, o processo de polimerização também foi simulado utilizando-se a estrutura robusta proposta por Alvarez e Odloak (2010; 2012). Essa estrutura, apresentada no item 2 deste trabalho, também utiliza múltiplos modelos. Entretanto, um único modelo é usado para predição enquanto os demais estão inseridos como forma de restrição, de modo que a estrutura possui desigualdade quadrática e um grande conjunto de restrições que aumentam a complexidade dos problemas de otimização nas camadas dinâmica e estática. Assim, para fins de comparação de desempenho entre as estruturas, foram aplicados os mesmos cenários de estudo, de modo que ambas as estruturas possuem as mesmas configurações (valores de restrição das variáveis e os parâmetros de ajuste). Aqui, as variáveis da estrutura robusta estão denotadas com subscrito “rob”.

Tabela 5: Valores de restrição das variáveis do sistema de controle.

Camada	Parâmetros de ajuste
CE	$C_y = [0 \ 1];$
	$C_u = [5 \ 0];$
	$C_e = [1e5 \ 1e5];$
	$m = 3;$
CD	$Q_y = [1 \ 1];$
	$Q_u = [200 \ 0];$
	$R = [10 \ 10];$
	$S_y = [1e5 \ 1e5];$

Como dito acima, as estruturas foram submetidas às mesmas condições de simulação, de modo que perturbações foram aplicadas em duas variáveis de processo diferentes: a temperatura nas correntes de alimentação T_f e a concentração do iniciador em sua corrente de alimentação $[I_f]$. Os valores iniciais das variáveis escolhidas como perturbações correspondem aos valores do ponto operacional M_1 , com $T_f = 330$ °K e $[I_f] = 0,5888$ mol/L (Tabela 2). Durante o tempo total de simulação, três perturbações de magnitude e sinal diferentes foram aplicadas e os resultados obtidos são apresentados a seguir.

5.2. Resultados das Simulações

O comportamento das variáveis de saída do processo diante das perturbações aplicadas é apresentado na Figura 9. A Figura 10 representa o comportamento assumido pelas entradas.

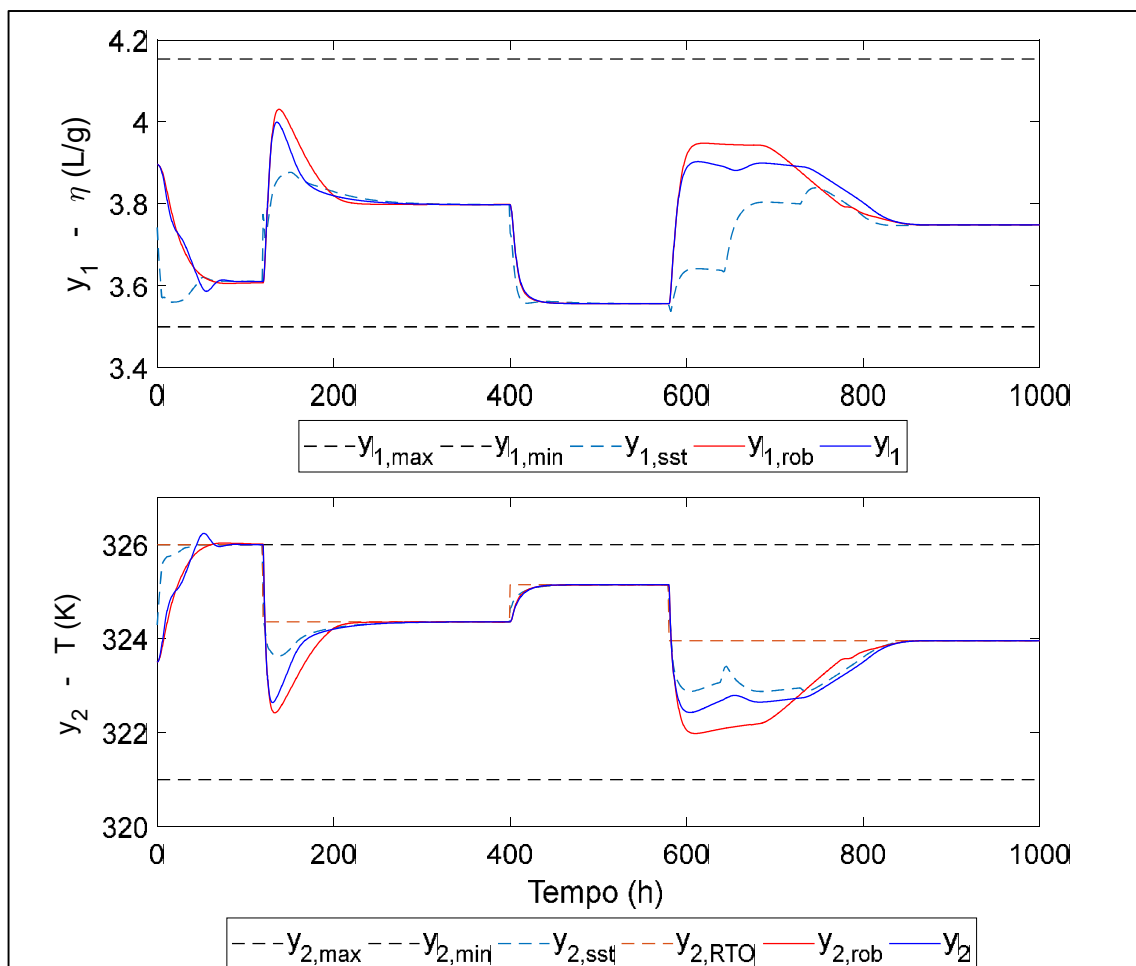
De acordo com as figuras, percebe-se que a simulação não se inicia em um ponto operacional ótimo, já exige que o controlador força o sistema a seguir os *targets* calculados pela RTO.

A primeira perturbação ocorre no tempo $t = 120$ h, com uma diminuição de 3 K em T_f , assumindo o valor de 327 K. Na Figura 9, percebe-se que essa perturbação provoca um elevado *overshoot* nas variáveis de saída. Entretanto, a estrutura de controle proposta foi capaz de levar o sistema ao estado estacionário com menor *overshoot* e com uma resposta mais rápida às variações do ótimo econômico calculado pela camada RTO. Ambos os controladores foram capazes de levar o sistema ao novo estado estacionário, no entanto, a estrutura adaptativa apresenta um desempenho dinâmico melhor que o robusto.

A Figura 9 ainda fornece uma valiosa informação: o quão dependentes e o quão influentes as variáveis são entre elas. Com a diminuição em T_f , a viscosidade se elevou e a temperatura do reator diminuiu. Porém, percebe-se que diminuir a temperatura da alimentação gerou uma variação mais significativa na viscosidade, com um aumento de aproximadamente 5% no seu valor, se comparada à temperatura do reator, que elevou aproximadamente 0,6% apenas. Ainda analisando a relação entre as variáveis do processo, a Figura 10 mostra que a perturbação provocada foi

controlada majoritariamente com a diminuição de u_2 , o que faz sentido já que a entrada u_2 corresponde à vazão do fluido de resfriamento na camisa, responsável pelo controle da temperatura do sistema.

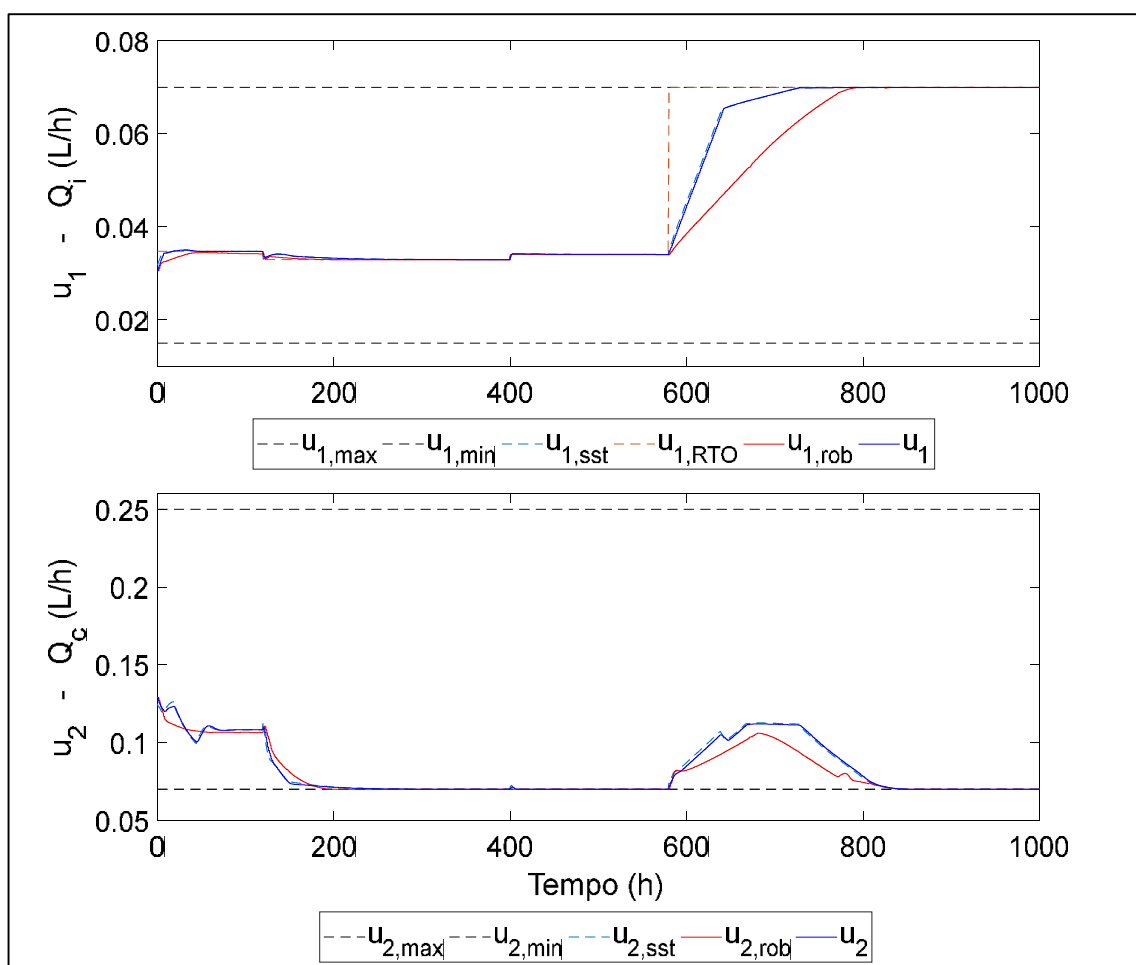
Figura 9: Comportamento das saídas durante a simulação.



A segunda perturbação ocorre no tempo $t = 400$ h, após o sistema atingir completamente o novo estado estacionário gerado pela primeira perturbação. Nesta, gerou-se um aumento de $0,07$ mol/L na concentração de alimentação do iniciador, passando ao novo valor de $0,6588$ mol/L. Novamente, a segunda perturbação provoca uma mudança nos *targets* calculados pela RTO e o controlador precisa levar o sistema ao novo estado de ótimo econômico. Mais uma vez, é possível analisar a relação de dependência e influencia entre as variáveis. Apesar desta segunda perturbação ser de uma magnitude significativamente maior que a primeira (o aumento em T_f foi de

apenas 0,9% enquanto que a diminuição em $[I_f]$ foi aproximadamente de 12% em seu valor), tanto as variáveis de saída como as de entrada apresentaram variações menores. Entretanto, dessa vez, o aumento da concentração provocou uma variação maior na viscosidade do que na temperatura do reator. Isso pode ser explicado analisando-se a dependência das variáveis através do processo de polimerização e do seu modelo matemático correspondente. Um aumento na concentração do iniciador aumenta a produção de radicais, responsáveis pelo início das cadeias de polímeros. Assim, maior é a quantidade de cadeias de polímeros produzidas e, conseqüentemente, maior é a taxa de produção de polímeros mortos, os quais estão diretamente relacionados com a massa molecular média do polímero, equação (39). Neste sentido, com o aumento dos polímeros mortos, a massa molecular média também aumenta, aumentando a viscosidade, como pode ser observado em (38).

Figura 10: Comportamento das entradas durante a simulação.



De acordo com a Figura 9, ambas as estruturas de controle foram capazes de levar o sistema ao novo estado estacionário e, em nenhuma das situações, as saídas apresentaram *overshoot*. Porém, mais uma vez, é possível observar que, mesmo com um problema de otimização mais simples, a estrutura de controle proposta foi capaz de controlar o sistema e levá-lo de forma mais rápida que a estrutura robusta, provando sua eficiência e seu desempenho.

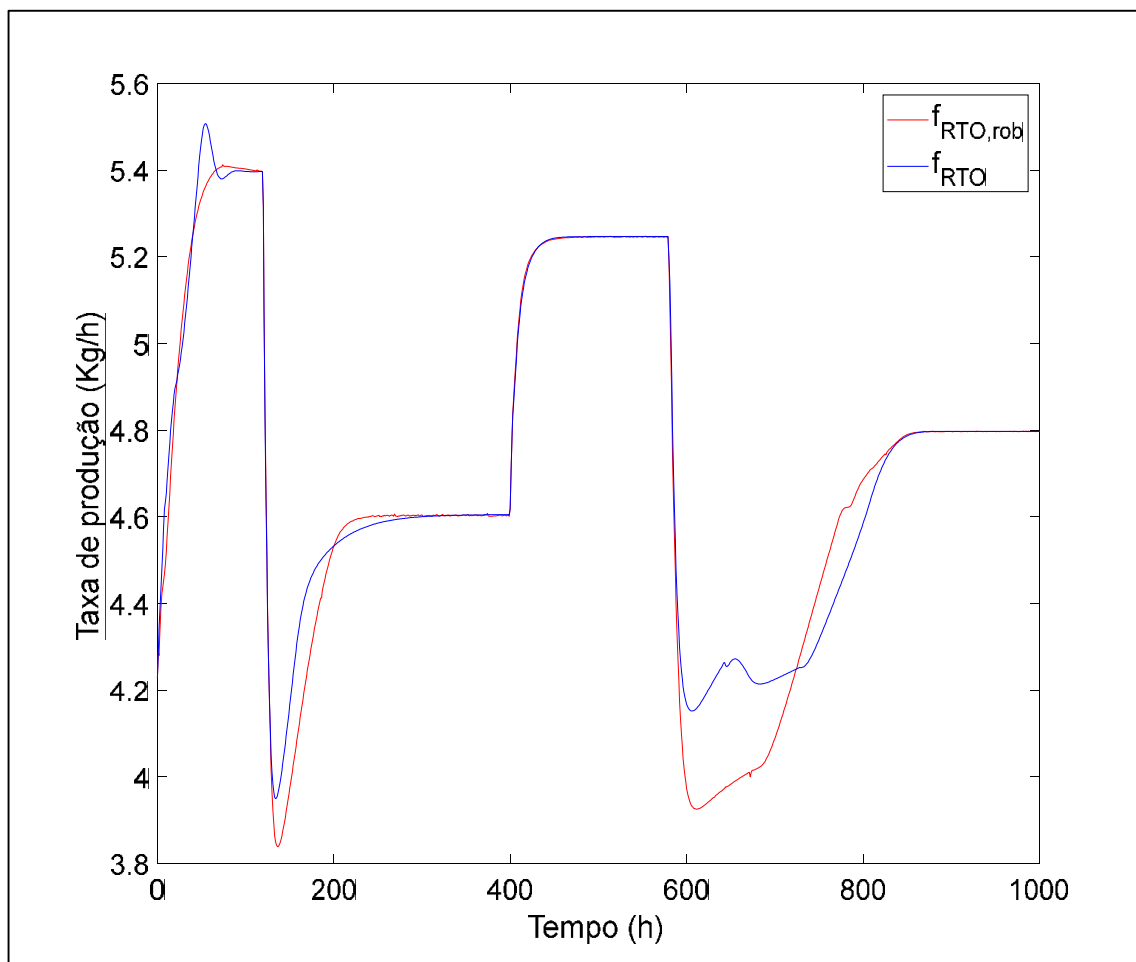
A última perturbação aplicada ao sistema foi novamente uma diminuição na temperatura do reator. Assim, após o sistema atingir o novo estado estacionário provocado pela segunda perturbação, no tempo $t = 580$ h, a temperatura de alimentação do reator, T_f , diminui em 2 K, assumindo o valor de 325 K. Pela Figura 9, é possível observar que o sistema controlado pela estrutura proposta apresentou melhor dinâmica, com menor variação das saídas, apesar do sistema atingir o novo estado estacionário praticamente no mesmo tempo em ambas as situações de controle. Nesta última perturbação, o sistema demorou um tempo significativo para atingir o novo estado estacionário se comparado com as duas perturbações anteriores. Isso pode estar relacionado com a necessidade do controlador de gerar mudanças significativas nas entradas para que o sistema atinja o novo ótimo econômico calculado pela RTO. Na Figura 10, observa-se que em ambas as situações de controle, as entradas assumem os mesmos valores após o sistema atingir o novo estado estacionário. Entretanto, mais uma vez, a estrutura adaptativa consegue apresentar melhor desempenho dinâmico, já que suas entradas se modificam de forma mais rápida e de maior magnitude, justificando assim o melhor desempenho das saídas na Figura 9.

É importante ressaltar que, em todas as situações, os controladores foram capazes de levar o sistema ao ótimo econômico calculado pela RTO. Todavia, durante os estados transientes, a estrutura proposta apresentou melhor desempenho, influenciando diretamente na função objetiva da camada RTO. A Figura 11 apresenta o comportamento da taxa de produção de polímero, objetivo econômico da camada RTO, ao longo de toda a simulação.

Para este estudo, escolheu-se como objetivo econômico a maximização da taxa de produção de poliestireno em kg/h. Observa-se que ambas as estruturas foram capazes de maximizar a taxa e de levarem o processo para os mesmos valores econômicos ideais no estado estacionário. No entanto, novamente, a estrutura

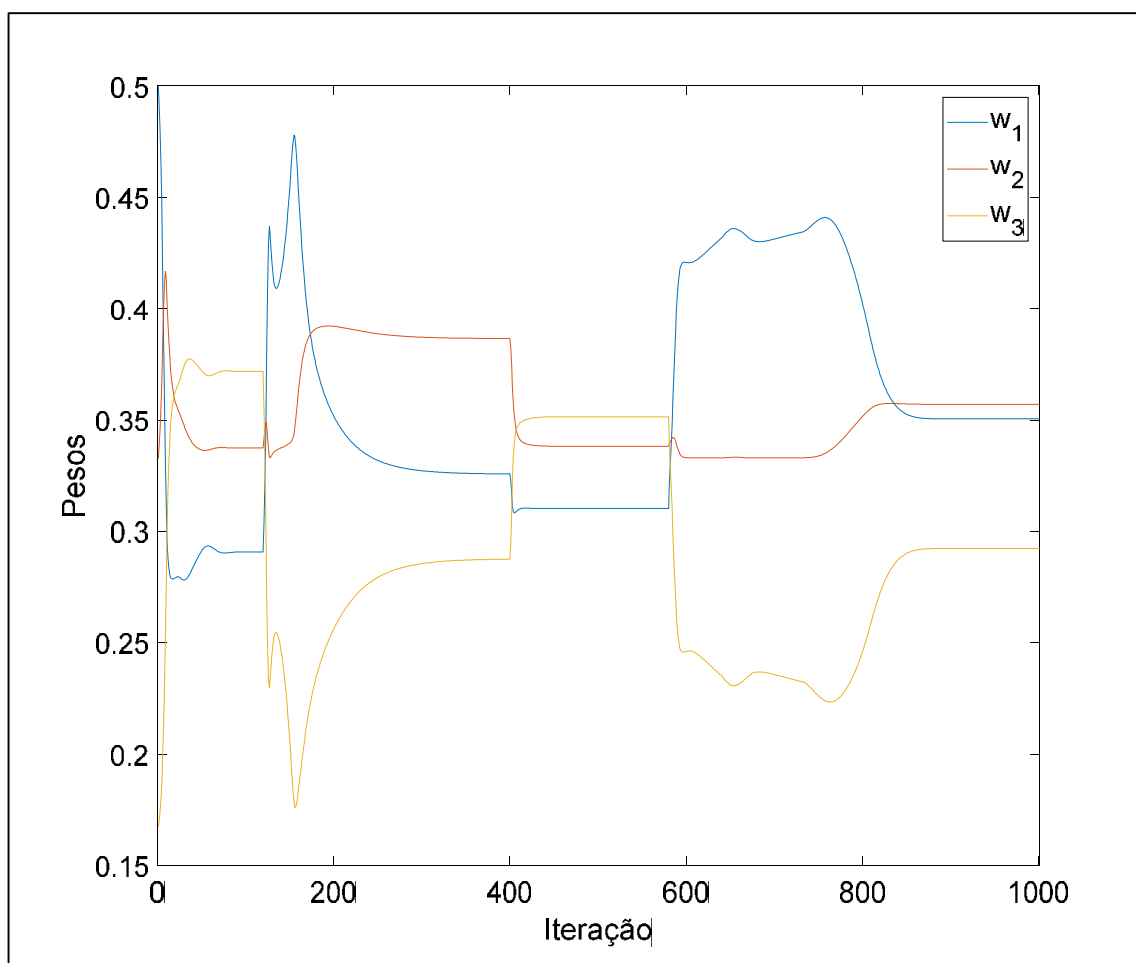
proposta apresentou melhor desempenho, respondendo de forma mais rápida e exibindo vantagens econômicas, principalmente durante os estados transientes, após as perturbações serem aplicadas.

Figura 11: Taxa de produção de polímero.



Em geral, durante todas as três perturbações, a estrutura proposta apresentou comportamento igual ou superior à estrutura robusta, com melhor performance, com respostas mais rápidas tanto das entradas como das saídas, alcançando resultados econômicos e dinâmicos melhores que a estrutura robusta. Isso pode estar relacionado à capacidade do controlador adaptativo escolher a melhor combinação linear dos três modelos e a sua formulação matemática mais simples, tornando-o mais ágil na resolução dos problemas de otimização de sua estrutura. As Figuras 12, 13 e 14 apresentam esses resultados.

Figura 12: Pesos da combinação linear, calculados pela estrutura proposta.



O cálculo dos pesos correspondentes aos modelos para a determinação da ação final do controlador está disposto na Figura 12. Nela, observa-se que, de acordo com a distância entre a condição operacional do sistema e os estados estacionários dos modelos, a estrutura proposta foi capaz de determinar qual ação de controle deve receber maior peso ou menor peso. É possível observar ainda que a magnitude das perturbações e suas influências sobre as variáveis de processo também interferiu na magnitude e na dinâmica do cálculo dos pesos. Na primeira e na terceira perturbações, os pesos variaram consideravelmente no estado dinâmico a fim de gerar a melhor ação de controle, enquanto a segunda perturbação apresentou um comportamento mais suave, comprovando a capacidade da estrutura de lidar com diferentes dinâmicas sem afetar a estabilidade da malha fechada. É possível observar

também que os pesos assumiram valores somente entre aproximadamente 0,5 e 0,2, mesmo tendo podendo variar entre 0 e 1, respeitando a condição da equação (24). Ou seja, mesmo o sistema estando consideravelmente próximo de um modelo em questão, é possível que a estrutura não esteja sendo capaz de atribuir valores maiores ou menores a ponto de praticamente zerar a influência do modelo mais distante ou de atribuir praticamente toda a ação de controle final a apenas um único ou ao conjunto de dois modelos. Analisar novos cenários e forçar com que o sistema, de fato, se aproxime ao máximo de um único modelo torna-se necessário a fim de aprimorar cada vez mais a estrutura que já se apresenta como um recurso atraente no controle de processos não lineares.

Apesar das melhorias necessárias na estratégia adaptativa e na determinação dos pesos, a ação de controle final foi, de fato, uma combinação entre as ações de controle individuais, como mostra a Figura 13. Nela, é possível observar que a ação de controle final (linha azul) tanto para u_1 como para u_2 muda à medida que o processo se aproxima ou se afasta dos modelos dos controladores.

Ainda na Figura 13, é possível observar que as principais divergências entre as ações de controle individuais são logo após as perturbações. Durante a primeira e a terceira perturbação, as ações de controle assumiram valores consideravelmente diferentes. Observando-se o comportamento de u_2 , é possível perceber detalhadamente a influência dos modelos na ação final de controle: na primeira perturbação, a ação de controle final se aproximou da ação de controle correspondente ao modelo 2 (M_2), já que influência das ações dos modelos 1 (M_1) e 3 (M_3) praticamente se cancelam entre si. Na segunda perturbação, todos os modelos parecem convergir para uma mesma magnitude. Entretanto, na terceira perturbação, é possível observar que a ação de controle do modelo 3 diverge das demais ações de controle.

A Figura 14 apresenta o tempo de execução das estruturas em cada tempo de amostragem durante toda a simulação. A estrutura proposta resolve simultaneamente os três conjuntos de dois problemas de otimização quadráticos (J_S e J_D), um para cada modelo, enquanto a estrutura robusta resolve dos problemas de otimização não lineares. Pela figura, é possível observar que há uma redução considerável no tempo de execução da estrutura proposta e este resultado se reforça ainda mais ao considerar que o sistema aqui estudado é apenas um reator de

polimerização. A diferença no tempo de execução das duas estruturas de controle tende a se tornar cada vez mais significativa com o aumento do processo em estudo e da sua complexidade. Com isso, a estrutura adaptativa torna-se um recurso atraente no desenvolvimento de sistemas de controle para sistemas de larga escala, sistemas de controle integrados ou sistemas com pequenos períodos de amostragem. Para a análise computacional, ressalta-se que as simulações foram executadas em um computador com processador Intel (R) Core (TM) i5-7400 3GHz e 8GB de RAM, cujo ambiente de programação utilizado foi o MATLAB.

Figura 13: Evolução das ações de controle dos modelos lineares e a ação de controle final, resultante da combinação linear.

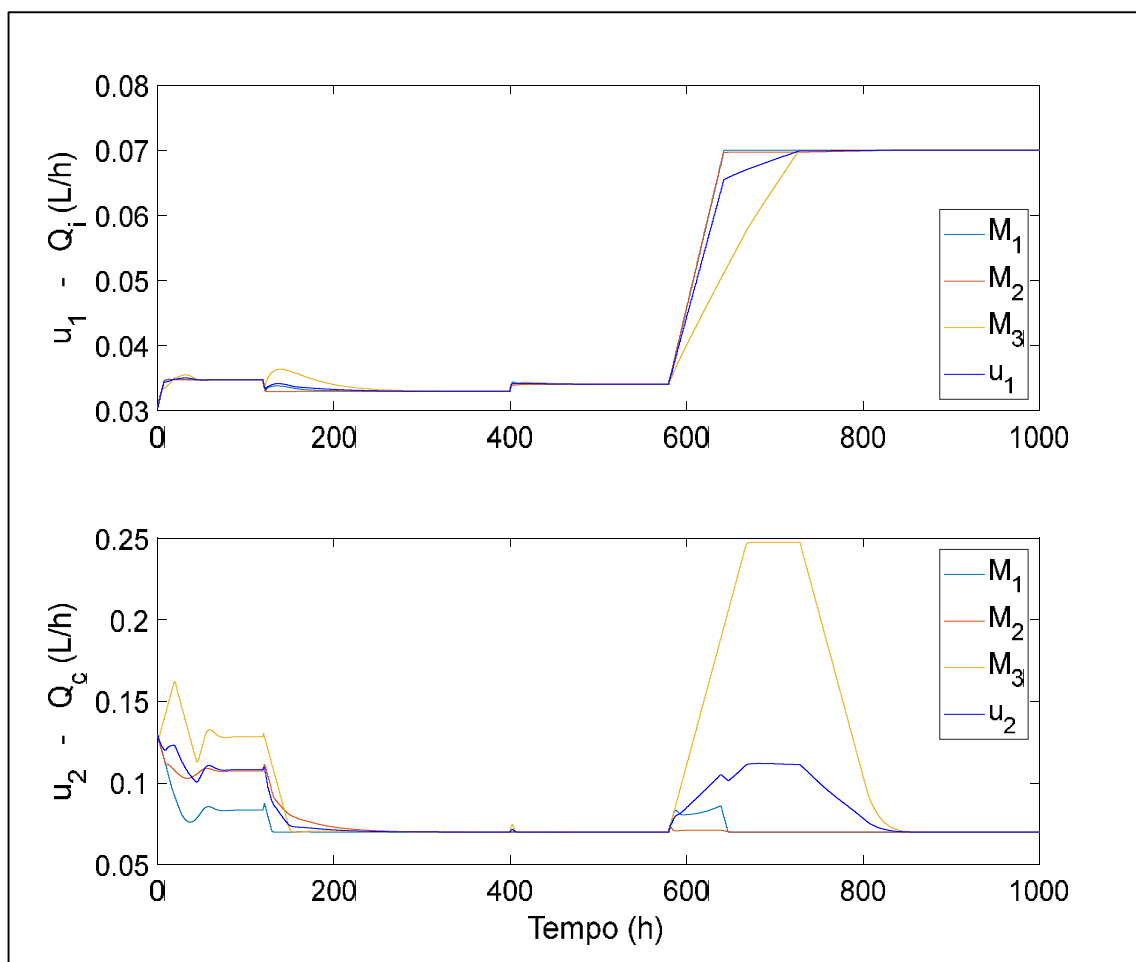
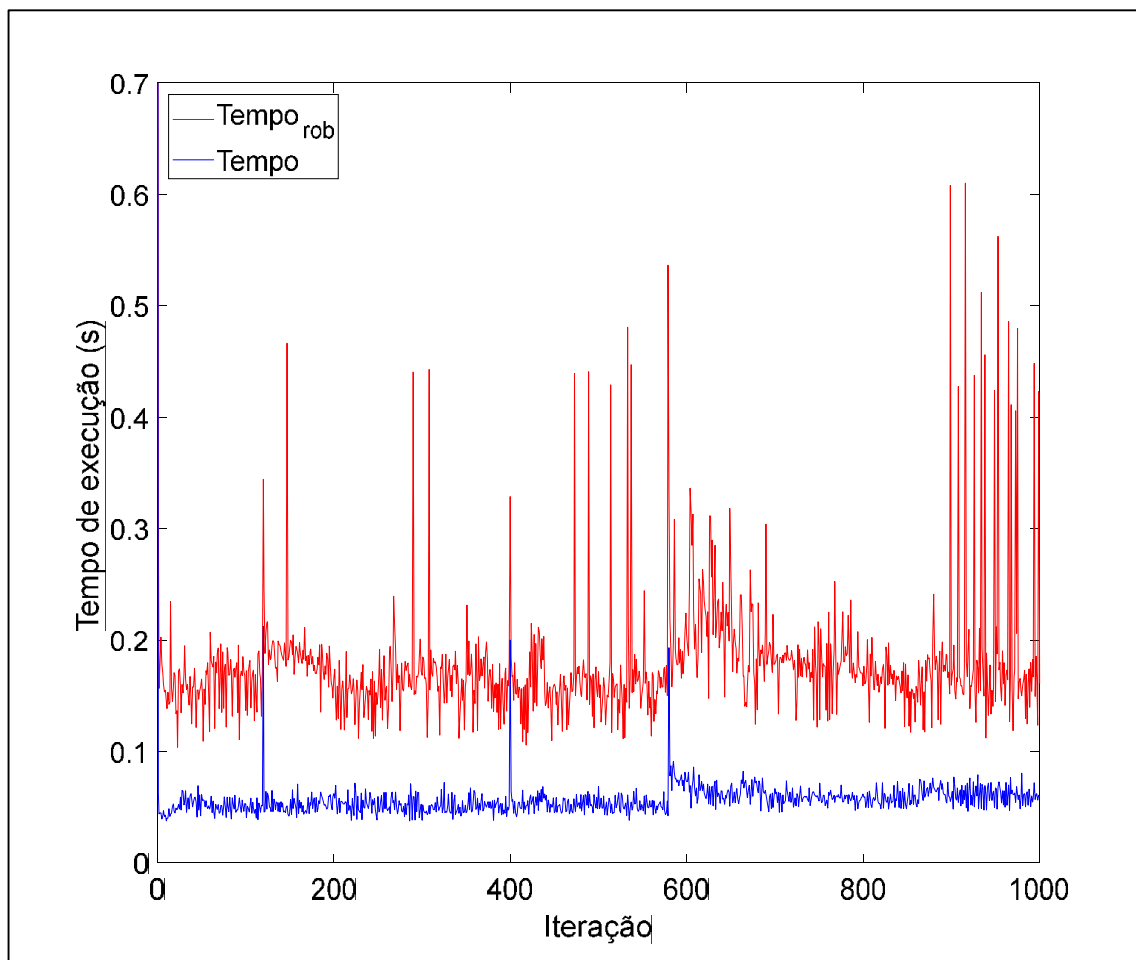
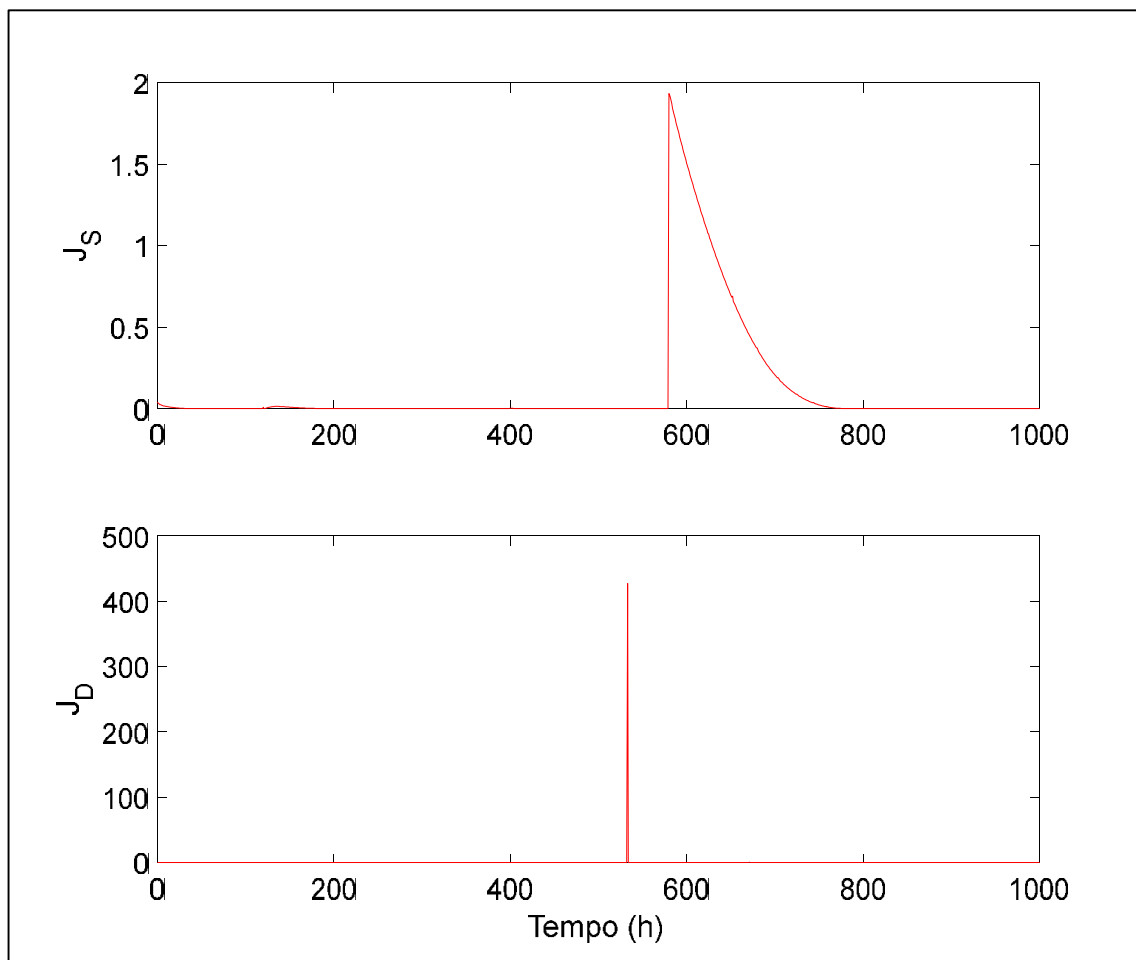


Figura 14: Tempo computacional a cada iteração.



As funções custo das camadas estática e dinâmica são mostradas nas Figuras 15 e 16. A estrutura de controle tem como objetivo otimizar as funções custo de modo que as variáveis do processo sigam ao máximo a trajetória definida pela camada RTO. Alvarez e Odloak (2010) provaram que, se o sistema é perturbado e a camada RTO calcula um novo estado estacionário ótimo alcançável, então haverá a convergência das saídas e das entradas do sistema para os valores ótimos, enquanto as funções custo J_S e J_D convergem para zero. Sendo assim, é possível verificar que, apesar de afetadas, principalmente pela terceira perturbação, as funções custo convergiram para zero, confirmando que, de fato, as entradas e saídas alcançaram os valores econômicos ótimos calculados pela RTO.

Figura 15: Funções de custo das estruturas de controle.

Como dito anteriormente, a polidispersidade é uma característica que indica a distribuição do tamanho da cadeia polimérica, indicando a homogeneidade da distribuição dos tamanhos das cadeias que formam o polímero produzido e, conseqüentemente, sua qualidade. Na polimerização radicalar livre, esse índice costuma variar entre 1,5 e 2 (FLORENZANO, 2008). Neste sentido, a Figura 17 apresenta o comportamento da polidispersidade durante a simulação. Percebe-se que a polidispersidade se mantém próxima do valor 1,5 ao longo de quase toda a simulação, com exceção dos pontos em que as perturbações foram aplicadas. Mesmo a polidispersidade variando com as perturbações, a estrutura de controle proposta foi capaz de controlar o sistema o suficiente para que as variações não se mantivessem, mantendo a polidispersidade sempre próxima do valor desejado de 1,5.

Figura 16: Funções de custo das estruturas de controle.

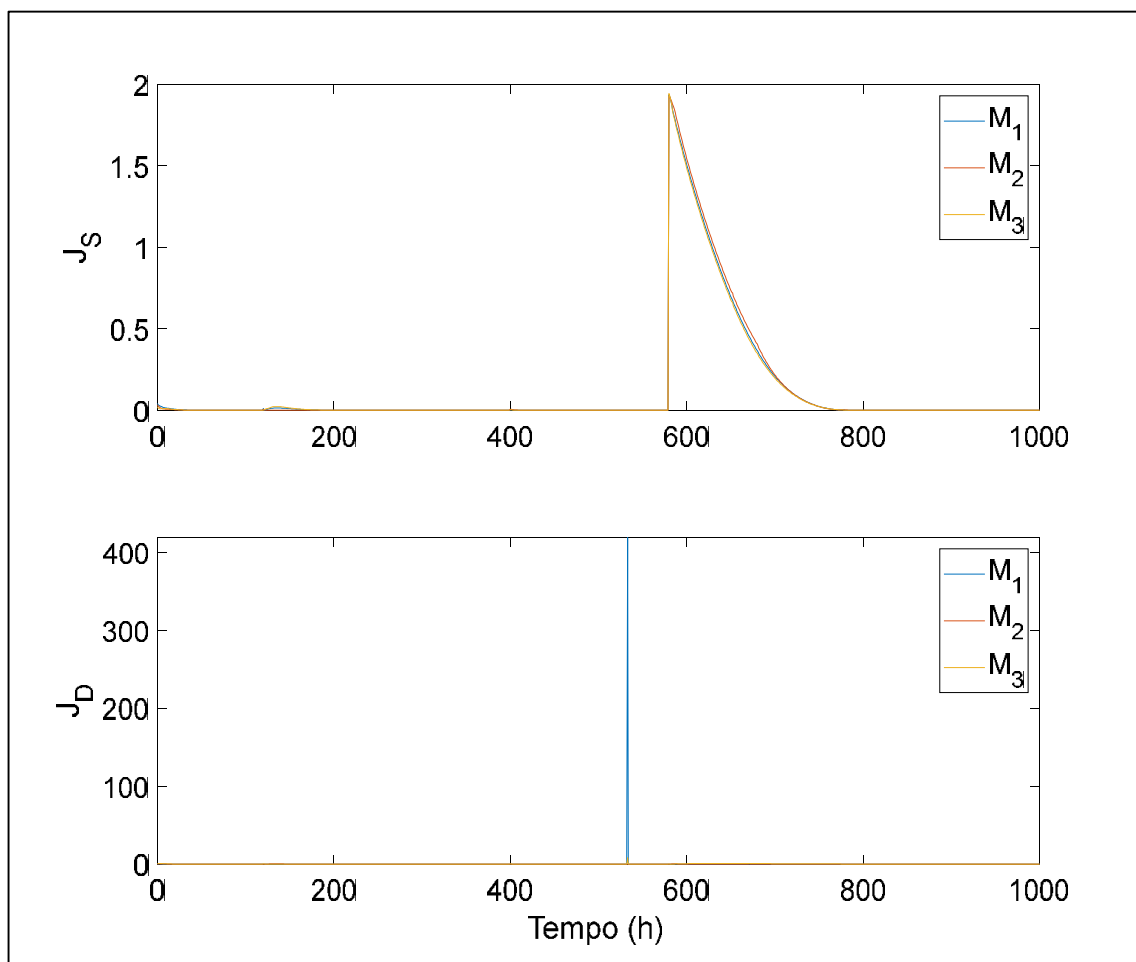
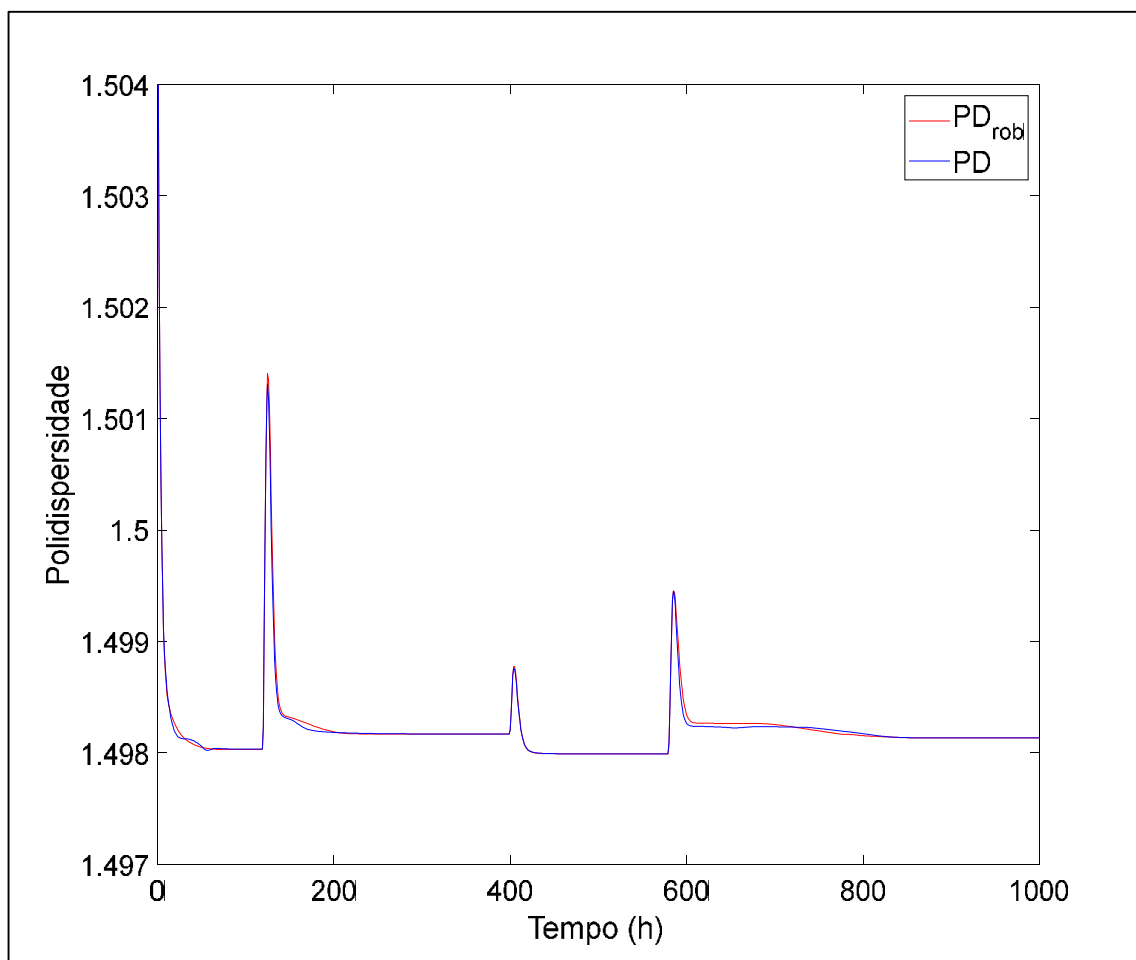


Figura 17: Comportamento da polidispersidade do polímero produzido ao longo da simulação.



6. CONCLUSÕES

Neste estudo, uma estratégia de controle adaptativa para a integração de RTO e MPC baseada em múltiplos modelos lineares foi proposta. Em seguida, a estrutura proposta foi aplicada em um reator de polimerização contínua através de simulações computacionais com o intuito de analisar seu desempenho frente a uma estrutura de controle robusta já existente na Literatura.

A estrutura proposta utiliza múltiplos modelos para aproximar a predição do comportamento do sistema com o que, de fato, está acontecendo no mesmo. Isso permite que as ações de controle calculadas pelo controlador sejam mais precisas. Além disso, a estrutura é uma extensão da estratégia de três camadas com estabilidade nominal proposta por Alvarez e Odloak (2010), de modo que cada modelo linear obtido tenha seu próprio controlador. Neste caso, o controlador é estruturado em duas camadas, uma camada dinâmica e uma camada estática, as quais resolvem problemas de otimização quadráticos a fim de levar o sistema ao ponto econômico ótimo, definido pela camada superior, a RTO, com o intuito de maximizar a taxa de produção do polímero.

Para analisar seu desempenho em um processo não linear, a abordagem foi simulada em um reator de polimerização na presença de três perturbações. A abordagem proposta também foi comparada à estrutura robusta apresentada por Alvarez e Odloak (2010; 2012).

Os resultados da simulação mostraram que a estrutura proposta é capaz de lidar com as não linearidades do processo, maximizando o lucro econômico, preservando a qualidade do polímero e com maior velocidade de resposta. Após todas as perturbações, a estrutura proposta foi capaz de apresentar comportamentos dinâmicos das saídas com menos *overshoot*, atingindo os estados estacionários mais rapidamente. Em relação às entradas do sistema, mais uma vez, a estrutura se mostrou mais ágil em modificá-las, justificando o melhor desempenho das variáveis de saída.

Uma análise computacional também foi realizada. Ao analisar o tempo de execução gasto a cada instante de amostragem, a estrutura proposta se mostrou vantajosamente superior à estrutura robusta. Cabe ainda ressaltar que os cenários e parâmetros de ajustes foram os mesmos para as duas estruturas. Uma vez que a

estrutura proposta já se mostra eficiente em um único reator, a vantagem computacional da mesma se torna relevante em sistemas de grande porte devido ao aumento de não linearidades, limites, instabilidade e integração dos processos simulados e controlados.

O mecanismo adaptativo da estrutura consiste em obter a ação final de controle através de uma combinação linear das ações de controle calculadas por cada controlador individual. Desse modo, pesos são distribuídos e adicionados às ações de controle de maneira que a ação de controle calculada pelo controlador, cujo modelo mais se aproxima do estado real da planta, receba um peso maior que as demais e vice-versa. De acordo com os resultados obtidos, pode-se concluir que a estrutura proposta foi capaz de calcular os pesos conforme as mudanças de cenários. Entretanto, os valores dos pesos não variaram ao longo de toda a faixa permitida (os pesos poderiam assumir valores entre 0 e 1). Neste caso, surge a necessidade de maiores estudos a fim de verificar se foram os cenários que não permitiram essa mobilidade dos pesos ou se foi uma limitação do próprio mecanismo adaptativo.

Em relação à estabilidade, pode-se afirmar que cada controlador individual é comprovadamente estável. Como a estratégia consiste em uma combinação linear dessas sequências de cálculo, espera-se que a estrutura adaptativa também seja. Entretanto, ainda é necessário maiores estudos sobre o tema e sobre a estabilidade da estrutura frente processos mais complexos.

Por fim, conclui-se que os resultados obtidos foram promissores e instigam o desenvolvimento de novas pesquisas relacionadas ao tema e à estrutura proposta, a saber:

- Analisar novos cenários de estudo através de novas perturbações, novas entradas e saídas, presença de incertezas e mudanças na função econômica e nos limites e restrições dos problemas de otimização dos controladores;
- Ampliar a região na qual se opera o sistema, inclusive aproximando-se de pontos instáveis;
- Aprimorar o cálculo dos pesos a fim de garantir maiores possibilidades de combinações lineares entre os múltiplos modelos;

- Estudar a importância e a influência da quantidade de modelos lineares utilizados na precisão da ação de controle final;
- Estudar a viabilidade, a convergência e a estabilidade da estrutura proposta, com o intuito de torná-la genérica e aplicável a diferentes tipos de processos;
- Analisar novos tipos de estrutura adaptativa e novos meios para o cálculo da ação final de controle; e
- Simular a estrutura proposta como parte do sistema de controle de sistemas de grande porte, com integração energética, pequenos períodos de amostragem e altas não linearidades.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALVAREZ, L.A. Strategies with guarantee of stability for the integration of model predictive control and real time optimization. Thesis (PhD in Chemical Engineering), **University of São Paulo**, São Paulo, 2012.

ALVAREZ, L.A., ODLOAK, D. Optimization and control of continuous polymerization reactor. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 29, n. 4, pp. 807-820, 2012.

ALVAREZ, L.A., ODLOAK, D. Robust integration of real time optimization with linear model predictive control. **Computers and Chemical Engineering**, v. 34, p. 1937-1944, 2010.

BASHIVAN, P., FATEHI, A. Improved switching for multiple model adaptive controller in noisy environment. **Journal of Process Control**, v. 22, p. 390-396, 2012.

BELLO, O., HAMAM, Y., DJOUANI, K. Coagulation process control in water treatment plants using multiple model predictive control. **Alexandria Engineering Journal**, v. 53, p. 939-948, 2014.

BEQUETTE, B. W. Nonlinear Control of Chemical Processes: A review. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 30, n. 7, p. 1391-1413, 1991.

BRAVO, C. O.; NORMEY-RICO, J. E. Controle de Plantas Não Lineares Utilizando Controle Preditivo Linear Baseado em Modelos Locais. **Revista Controle & Automação**, v. 20, n. 4, p. 465-481, 2009.

BUSTOS, G.A., FERRAMOSCA, A., GODOY, J.L., GONZÁLEZ, A.H. Application of Model Predictive Control suitable for closed-loop re-identification to a polymerization reactor. **Journal of Process Control**, v. 44, p. 1-13, 2016.

CAMACHO, E. F.; BORDONS, C. **Model Predictive Control**. 2 ed. London, England: Springer-Verlag London, 2007.

CANCELIER, A., CLAIMANN, C.A., BOLZAN, A., MACHADO, R.A.F. Predictive control of a batch polymerization system using a feedforward neural network with online adaptation by genetic algorithm. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 33, n. 1, p. 177-190, 2016.

ÇETINKAYA S., ZEYBEK Z., HAPOGLU H., ALPBAZ M. Optimal temperature control in a batch polymerization reactor using fuzzy-relational models-dynamics matrix control. **Computers and Chemical Engineering**, v. 30, p. 1315–1323, 2006.

CHI, Q., LIANG, J. A multiple model predictive control strategy in the PLS framework. **Journal of Process Control**, v. 25, p. 129–141, 2015.

CHOI, K. Y. Analysis of Steady State of Free Radical Solution Polymerization in a Continuous Stirred Tank Reactor. **Polymer Engineering and Science**, v. 26, n. 14, p. 975-981, 1986.

DOUGHERTY, D., COOPER, D. A practical multiple model adaptive strategy for single-loop MPC. **Control Engineering Practice**, v. 11, p. 141-159, 2003.

DU, J., JOHANSEN, T. A. Integrated multimodel control of nonlinear systems based on gap metric and stability margin. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 53, p. 10206-10215, 2014.

DURAIKI, R. G. Otimização Dinâmica em Tempo Real Utilizando Modelos Não lineares Simplificados. Tese de Doutorado, **Universidade Federal do Rio Grande do Sul**, Porto Alegre, 2009.

ELLIS, M., DURAND, H., CRISTOFIDES, P.D. A tutorial review of economic model predictive control methods. **Journal of Process Control**, v. 24, p. 1156–1178, 2014.

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

FERRAMOSCA, A., GONZÁLEZ, A.H., LIMON, D. Offset-free multi-model economic model predictive control for changing economic criterion. **Journal of Process Control**, v. 54, p. 1–13, 2017.

FERRAMOSCA, A., GONZÁLEZ, A. H., LIMON, D., BUSTOS, G. A., GODOY, J. L., MARCHETTI, J. L. On Economic Optimality of Model Predictive Control. **IEEE Latin America Transactions**, v. 12, n. 7, p. 1234-1241, 2014.

FLORENZANO, F.H. Perspectivas atuais para a obtenção controlada de polímeros e sua caracterização. **Polímeros: Ciência e Tecnologia**, v. 18, n. 2, p. 100-105, 2008.

GAZI, E., SEIDER, W. D., UNGAR, L. H. Verification of controllers in the presence of uncertainty: application to styrene polymerization. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 35, p. 2277-2287, 1996.

GHASEM, N.M., SATA, S.A., HUSSAIN, M.A., Temperature Control of a Bench-Scale Batch Polymerization Reactor for Polystyrene Production. **Chemical Engineering & Technology**, v. 30, n. 3, p. 1193–1202, 2007.

GOPINATH, R. S., BEQUETTE B.W., ROY, R.J., KAUFMAN, H. Issues in the Design of a Multirate Model-Based Controller for a Nonlinear Drug Infusion System. **Biotechnology Progress**, v. 11, n. 3, p. 318-332, 1995.

GOUTA, H., SAÏD, S. H., BARHOUMI, N., M'SAHLI, F. Generalized predictive control for a coupled four tank MIMO system using a continuous-discrete time observer. **ISA Transactions**, v. 67, p. 280–292, 2017.

HALIM, A., SATA, A. Review on Advanced Control Technique in Batch Polymerization React of Styrene. **1st National Colloquium on Process Control**, p. 1-8, 2013.

HASHEMI, R., KOHLMANN D., ENGELL, S. Optimizing Control of a Continuous Polymerization Reactor. **10th International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)**, p. 726–731, 2013.

HERMANSSON, A. W.; SYAFIIE, S.; MOHD NOOR, S. B. Multiple Model Predictive Control of Nonlinear pH Neutralization System. **Industrial Engineering and Engineering Management (IEEM)**, p. 301-304, 2010.

HIDALGO, P.M., BROSILOW, C.B. Nonlinear model predictive control of styrene polymerization at unstable operating points. **Computers and Chemical Engineering**, v. 14, n. 4/5, p. 481-494, 1990.

HINOJOSA, A.I., FERRAMOSCA, A., GONZÁLEZ, A.H., ODLOAK, D. One-layer gradient-based MPC + RTO of a propylene/propane splitter. **Computers and Chemical Engineering**, v. 106, p. 160–170, 2017.

HOSEN, M. A., KHOSRAVI, A.K., CREIGHTON, D. Prediction interval-based neural network modelling of polystyrene polymerization reactor – A new perspective of data-based modelling. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 92, p. 2041–2051, 2014.

HOSEN, M.A. AND HUSSAIN, M.A. Optimization and control of polystyrene batch reactor using hybrid based model. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 31, p. 760-764, 2012.

HOSEN, M.A., HUSSAIN, M.A., MJALLI, F.S. Control of polystyrene batch reactors using neural network based model predictive control (NNMPC): An experimental investigation. **Control Engineering Practice**, v. 19, p. 454–467, 2011.

HUNG, N. T., ISMAI, I., SAAD, N. B., FAISAL, A., IRFAN, M. A Practical Approach of Control of Real Time Nonlinear Process Plant Using Multiple Model Predictive Control. **Interational Conference on Modelling, Identifcation and Control**, p. 59-64, 2014.

JAISINGHANI, R., RAY, W., On the Dynamic Behavior of a Class of Homogeneous Continuous Stirred Tank Polymerization Reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 32, p. 811-825, 1977.

KOTHARE, M., BALAKRISHNAN, V., MORARI, M. Robust constrained model predictive control using linear matrix inequalities. **Automatica**, v. 32, n. 80, p. 1361-1379, 1996.

ŁAWRYŃCZUK, M. Accuracy and computational efficiency of suboptimal nonlinear predictive control based on neural models. **Applied Soft Computing**, v. 11, p. 2202–2215, 2011.

ŁAWRYŃCZUK, M., TATJEWSKI, P. Nonlinear predictive control based on neural multi-models. **International Journal of Applied Mathematics and Computer Science**, v. 20, n. 1, p. 7–21, 2010.

LEE, J. H; LEE, J. M. Progress and Challenges in Control of Chemical Processes. **Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering**, v. 5, p. 383-404, 2014.

MACHADO, R. A. F. Otimização e Controle de Reatores de Polimerização em Batelada. Dissertação de Mestrado. **Universidade Federal de Santa Catarina**, Florianópolis, 1996.

MACIEJOWSKI, J. M. **Predictive Control with Constraints**. London: Prentice Hall, 2002, 352 p.

MAHINDRAKAR, V. HAHN, J. Model predictive control of reactive distillation for benzene hydrogenation. **Control Engineering Practice**, v. 52, p. 103–113, 2016.

MARCHETTI, A.G., FERRAMOSCA, A., GONZÁLEZ, A.H. Steady-state target optimization designs for integrating real-time optimization and model predictive control. **Journal of Process Control**, v. 24, p. 129–145, 2014.

NOGUEIRA, A. L. Desenvolvimento de Reator Tubular para a Produção de Polímeros em Suspensão. Tese de Doutorado, **Universidade Federal de Santa Catarina**, Florianópolis, 2007.

ODIAN, G. **Principles of Polymerization**. 4. ed. New York: J. Wiley & Sons, Inc., 2004.

ODLOAK, D. Extended robust model predictive control. **AIChE Journal**, v. 50, p. 1824-1836, 2004.

OGUNNAIKE, B.A., RAY, W.H. **Process Dynamics, Modeling, and Control**. New York: Oxford University Press, 1994.

PEARSON, R. K. Selecting nonlinear model structures for computer control, **Journal of Process Control**, v. 13, p. 1–26, 2003.

PEREZ, J. Controle Preditivo Multivariável com Modelo de Realinhamento e Robusto Quanto à Estabilidade. Tese (Doutorado em Engenharia Química), **Universidade Federal do Rio de Janeiro**, Rio de Janeiro, 2012.

PEYMANI, E., FATEHI, A., SEDIGH, A.K. Automatic learning in multiple model adaptive control, **International Conference on Control**, UKACC, Manchester, UK, 2008.

PORFÍRIO, C.R., ALMEIDA NETO, E., ODLOAK, D. Multi-model predictive control of an industrial C3/C4 splitter. **Control Engineering Practice**, v. 11, p. 765–779, 2003.

PRASAD, V., SCHLEY, M., RUSSO, L.P., BEQUETTE, B.W. Product property and production rate control of styrene polymerization. **Journal of Process Control**, v. 12, p. 353–372, 2002.

QIN, S. J.; BADGWELL, T. A survey of industrial model predictive control technology, **Control Engineering Practice**, v. 11, n. 7, p. 733-764, 2003.

RICHARDS, J.R., CONGALIDIS, J.P. Measurement and control of polymerization reactors. **Computers and Chemical Engineering**, v. 30, p. 1447–1463, 2006.

ROGOSIC, M., MENCER, H. J. AND GOMZI, Z., Polydispersity Index and molecular weight distributions of polymers. **European Polymer Journal**, v. 32, p. 1337-1344, 1996.

ROSSITER, J.A. Efficient assessment of MATLAB for control. 10th IFAC Symposium Advances in Control Education, p. 291-296, 2013.

SANTANDER, O.; ELKAMEL, A.; BUDMAN, H. Economic model predictive control of chemical processes with parameter uncertainty. **Computers and Chemical Engineering**. v. 95, p. 10-20, 2016.

RUSSO, L. P., BEQUETTE, B. W., Operability of Chemical Reactors: Multiplicity Behavior of a Jacketed Styrene Polymerization Reactor. **Chemical Engineering Science**, v. 53, n. 1, p. 27-45, 1997.

SCATTOLINI, R. Architectures for distributed and hierarchical model predictive control – a review. **Journal of Process Control**, 19, p. 723-731, 2009.

SCHIMTZ, U., HABER, R., BARS, R. Nonlinear process identification and predictive control by the weighted sum of multi-model outputs. **IFAC Control Systems Design**, p. 129-134, 2003.

SCHOTT, K., BEQUETTE, W. Control of chemical reactors using multiple-model adaptive control (MMAC). **IFAC Dynamics and Control of Chemical**, p. 345-350, 1995.

SEBORG, D. E., MELLICHAMP, D. A., EDGAR, T. F., DOYLE, F. J. **Process Dynamics and Control**. 3. ed. New York: J. Wiley, 2010.

SEKI, H., OGAWA, M., OYAMA, S., AKAMATSU, K., OHSHIMA, M., YANG, W. Industrial application of a nonlinear model predictive control to polymerization reactors. **Control Engineering Practice**, v. 9, p. 819–828, 2001.

SHI, K., YUAN, X., LIU, L. Model predictive controller-based multi-model control system for longitudinal stability of distributed drive electric vehicle. **ISA Transactions**, v. 72, p. 44-55, 2018.

SISTU, P. B., BEQUETTE, W. Nonlinear Predictive Control of Uncertain Processes: Application to a CSTR. *AICHE Journal*, v. 37, n. 11, p. 1711-1723, 1991.

SLAVOV, T. Algorithm for Multiple Model Adaptive Control Based on Input-Output Plant Model. **Cybernetics and Information Technologies**, v. 12, n. 1, p. 13-33, 2012.

SOUZA, G., ODLOAK, D., ZANIN, A. C. Real Time Optimization (RTO) With Model Predictive Control (MPC). **Computers and Chemical Engineering**. v. 34, p. 1999-2006, 2010.

TATJEWSKI, P. Advanced Control and On-line Process Optimization in Multilayer Structures. **Annual Reviews in Control**, v. 32, p. 71-85, 2008.

TOHIDI, A., HAJIEGHRARY, H. Self-Tuning adaptive multiple model predictive control with application to pH control process. **IEEE International Conference on Automation Science and Engineering (CASE)**, p. 21-24, 2016.

UCHIYAMA, M. T. Controle Preditivo Aplicado ao Processamento Primário de Petróleo. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). **Universidade de São Paulo**, São Paulo, 2013.

WURTH, L., HANNEMANN, R., MARQUARDT, W. A two-layer architecture for economically optimal process control and operation. **Journal of Process Control**, v. 21, p. 311-321, 2011.

XIE, S., ZHOU, L., MA, A., ZHOU, L. A new switching scheme for multi-model predictive control using clustering modeling. **5th International Conference on Fuzzy Systems and Knowledge Discovery**, p. 484–488, 2008.

XU, W., ZHANG, J., ZHANG, R. Application of multi-model switching predictive functional control on the temperature system of an electric heating furnace. **ISA Transactions**, v. 68, p. 287-292, 2017.