



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAIBA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA

MARCELO DA SILVA PEDRO

**FILTRO DE KALMAM ESTENDIDO PARA ESTIMATIVA E CONTROLE EM UM
REATOR CSTR NÃO ISOTÉRMICO DE PRODUÇÃO DE PROPILENO GLICOL**

João Pessoa - PB

Junho de 2017

MARCELO DA SILVA PEDRO

**FILTRO DE KALMAN ESTENDIDO PARA ESTIMATIVA E CONTROLE EM UM
REATOR CSTR NÃO ISOTÉRMICO DE PRODUÇÃO DE PROPILENO GLICOL**

Trabalho final de curso submetido à Coordenação do
Curso de Engenharia Química da Universidade
Federal da Paraíba, como requisito parcial para
obtenção do título de bacharel em Engenharia
Química.

Orientador: Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior

João Pessoa - PB

Junho de 2017

MARCELO DA SILVA PEDRO

**FILTRO DE KALMAM ESTENDIDO PARA ESTIMATIVA E CONTROLE EM UM
REATOR CSTR NÃO ISOTÉRMICO DE PRODUÇÃO DE PROPILENO GLICOL**

Trabalho final de curso submetido à Coordenação do Curso de Engenharia Química da Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para obtenção do título de bacharel em Engenharia Química.

Aprovado em _____ de _____ de _____

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior

(Orientador - UFPB)

Prof. Dra. Karla Silvana Menezes Gadelha de Sousa

(Avaliador - UFPB)

Prof. Dr. Leopoldo Oswaldo Alcázar Rojas

(Avaliador - UFPB)

*Dedico este trabalho a Deus
e aos meus pais João Crimacio e Ana.*

“Que os vossos esforços desafiem as impossibilidades, lembrai-vos de que as grandes coisas do homem foram conquistadas do que parecia impossível.”

Charles Chaplin

AGRADECIMENTOS

Ao senhor Deus pelo dom da vida.

Aos meus pais, João Crimacio Pedro e Ana Trajano da Silva Pedro, pelos ensinamentos, carinho, incentivo e compreensão ao longo desses cinco anos que moro distante.

A minha namorada Sabrinna Sanily, pela paciência, amor e compreensão quando preciso me ausentar para focar nos estudos.

Aos meus irmãos, Márcia, Alexandra, Maricélia, Marciano e de modo muito especial a Macilene que tem sido uma verdadeira mãe para mim.

A professora Edna Elba, pelos ensinamentos e ajuda, principalmente quando cheguei em João Pessoa.

A Matheus de Caldas, com quem divido apartamento ao longo desses cinco anos, pelos momentos de descontração.

A todos os meus colegas de curso, pelos momentos felizes e tristes que passamos juntos, pelos ensinamentos compartilhados e por tudo o que vivemos durante esses cinco anos.

Ao Professor Dr. Edvan Cirino da Silva, pelos ensinamentos e orientação ao longo dos quatro anos de projeto de pesquisa.

Ao Professor Dr. Leopoldo Oswaldo Alcazar Rojas, pelos ensinamentos e disponibilidade sempre quando requisitado.

Ao meu orientador, Professor Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior, pela orientação e ensinamentos durante o curso.

A todos os membros do Laboratório de Simulação e Modelagem Computacional (LABMC).

A todas as pessoas que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho, os meus sinceros agradecimentos.

RESUMO

Os equipamentos mais relevantes das indústrias químicas e petroquímicas são os reatores químicos. Esses equipamentos apresentam elevado custo energético de operação e também requer grande investimento econômico. Dessa forma, se faz necessário o conhecimento de sua operação e um acompanhamento remoto das variáveis relevantes. Inúmeros sensores físicos existentes em uma planta, fornecem medições físicas com pequenos tempos de amostragens e com boas precisões, dentre os quais destacam-se os sensores de vazão, temperatura, nível, dentre outros. No entanto, quando se deseja medir variáveis químicas e bioquímicas (tais como, biomassa, diâmetro de partículas e concentração de produtos) diversas dificuldades devem ser enfrentadas, sendo a amostragem *off-line* (análise em laboratório) mais comum. Nesse sentido, o presente trabalho propõe a construção de um analisador virtual para inferência e controle da concentração no processo de produção de Propileno Glicol. A metodologia desenvolvida foi construída em etapas, onde inicialmente foi proposta a modelagem matemática do processo, logo em seguida o processo foi simulado em regime estacionário e transiente no *software* Matlab-Simulink®, por conseguinte foi efetuada a construção do analisador virtual com a modelagem semiempírica, Filtro de Kalman Estendido (FKE). Os resultados obtidos com a inferência foram avaliados com critérios de desempenho, erro médio quadrático (MSE) e a raiz do erro médio quadrático (RMSE). A última etapa do trabalho consistiu na implementação de um sistema de controle inferencial realimentação para a temperatura e concentração do reagente na corrente de saída do reator. Os resultados apresentados mostraram que as estimativas da concentração e da temperatura apresentaram comportamento transiente semelhante à real do processo. Por fim, verificou-se que a o controle realimentação inferencial de concentração e de temperatura, utilizando o analisador virtual através do FKE, minimizou os efeitos de distúrbios inerentes inseridos no processo.

Palavras-Chave: Reatores químicos, analisadores virtuais, controle inferencial, filtro de Kalman estendido.

ABSTRACT

The most relevant piece of equipment in the chemical industry is the chemical reactor. Those equipments usually demand high amounts of energy during its operation, and considerable costs to install and maintain. That makes necessary a decent knowledge about the operation at any time and the remote monitoring of different variables inside the reactor. Several physical sensors are present in a chemical plant, providing measurements with good precision and low sampling times, with the flow, temperature, level, and others standing out. However, when the measurement of chemical and biochemical variables is desired (e.g. biomass, average particle diameter, and product concentration) several difficulties are present, with the need for offline sampling usually being necessary. In this sense, the present work proposes the construction of a virtual analyzer for inference and concentration control in the production process of Propylene Glycol. The methodology was developed in steps, where it was initially proposed the mathematical modeling of the process, soon after that the process was simulated in steady state and transient in the software Matlab-Simulink®, therefore, the virtual analyzer was carried out with the semi-empirical modeling, Extended Kalman Filter (FKE). The results obtained with the inference were evaluated using performance criteria, mean square error (MSE) and root mean square error (RMSE). The last step of the work consisted in the implementation of an inferential feedback control system for the temperature and reagent concentration in the reactor output stream. The results showed that the concentration and temperature estimates showed similar behavior to the actual process. Finally, it was verified that the inference feedback control of concentration and temperature, using the virtual analyzer through FKE, minimized the effects of inherent disturbances inserted in the process.

Keywords: Chemical reactors, control structures, virtual analyzers, extended Kalman filter.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Reator CSTR.	16
Figura 2.2 - Fluxograma simplificado do filtro de Kalman.	26
Figura 3.1 - Fluxograma da metodologia empregada.	28
Figura 3.2 - Produção de propileno glicol.	29
Figura 3.3 - Fluxograma da resolução em regime estacionário.	32
Figura 3.4 - Fluxograma da resolução em regime transiente.	33
Figura 3.5 - Fluxograma do algoritmo do filtro de Kalman para o processo.	34
Figura 3.6 - Estratégia de controle realimentação convencional (feedback).	35
Figura 3.7 - Controle inferencial em malha de realimentação.	36
Figura 3.8 - Curvas de características de válvulas.	38
Figura 4.1 - Fluxograma em regime estacionário para o processo.	41
Figura 4.2 - Dinâmica do processo estudado.	41
Figura 4.3 - Conversão ao longo do tempo.	43
Figura 4.4 - Perturbações em CA0.	43
Figura 4.5 - Perturbações em FA0.	44
Figura 4.6 - Perturbações em Ta1.	45
Figura 4.7 - Perturbações em T0.	47
Figura 4.8 - Perturbações em v0.	48
Figura 4.9 - Estimativa da temperatura pelo FKE.	49
Figura 4.10 - Estimativa da concentração pelo FKE.	50
Figura 4.11 - Temperatura estimada controlada versus malha aberta.	51
Figura 4.12 - Concentração estimada controlada versus malha aberta.	53

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Parâmetros e condições de operação do reator CSTR.	31
Tabela 4.1 - Parâmetros do erro da estimativa.....	50
Tabela 4.2 - Parâmetros do erro da estimativa.....	51
Tabela 4.3 - Parâmetros do erro da estimativa.....	52
Tabela 4.4 - Critérios de integral do erro.....	53

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	13
1.1 Objetivos.....	15
1.1.1 <i>Objetivo geral</i>	15
1.1.2 <i>Objetivos específicos</i>	15
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	16
2.1 Reator CSTR.....	16
2.1.1. <i>Balanço de massa para um reator CSTR</i>	16
2.2 CSTR com efeitos térmicos.....	17
2.3 Solução numérica.....	20
2.3.1 <i>Método de Newton-Raphson para Sistema de Equações Algébricas Não Lineares</i>	20
2.3.2 <i>Método de Runge-Kutta de Butcher para sistemas de equações diferenciais ordinárias</i>	22
2.4 Filtro de Kalman.....	23
3 METODOLOGIA DESENVOLVIDA	28
3.1 Processo químico estudado	29
3.1.1. <i>Modelagem matemática do processo</i>	30
3.1.2 <i>Resolução numérica em regime estacionário.....</i>	32
3.1.3 <i>Resolução numérica em regime transiente.....</i>	32
3.1.4 <i>Algoritmo do observador de estado dinâmico (FKE)</i>	33
3.1.5 <i>Proposta de estratégia de controle inferencial usando FKE</i>	34
3.1.5.1 <i>Algoritmo do controlador-proporcional-integral-derivativo</i>	36
3.1.5.2 <i>Seleção, dimensionamento e modelagem de válvula de controle</i>	37
3.1.6 <i>Crítérios de erro para análise de desempenho</i>	38
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES	40
4.1 Resultados em regime estacionário	40
4.2 Análise da dinâmica do processo.....	41

4.3 Estimativa do filtro de Kalman	49
4.3.1 <i>Resultados da inferência de temperatura no reator utilizando o FKE</i>	49
4.3.2 <i>Resultados da inferência de concentração utilizando o FKE</i>	50
4.4 Resultado da estratégia de controle inferencial realimentação	51
4.4.1 <i>Resultados da proposta de controle inferencial para a temperatura estimada</i>	51
4.4.2 <i>Resultados da proposta de controle inferencial para a concentração estimada</i>	52
5 CONCLUSÕES.....	55
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	56
ANEXO A.....	58

1 INTRODUÇÃO

A crescente competitividade entre as industriais, mediada por um mercado cada vez mais exigente, exige das plantas industriais produtos com elevada qualidade e menores preços. Nesse sentido, os processos industriais necessitam ser controlados de maneira eficiente, bem como custos operacionais adequados. Quando se trata de processos químicos industriais, os reatores são os equipamentos centrais da produção. Assim, precisa-se conhecer bem esses equipamentos, bem como suas variáveis de processo e princípio de operação.

Diante da importância dos reatores para as plantas químicas, o conhecimento do comportamento dinâmico de variáveis críticas de operação nesse processo, tais como: temperatura, concentração ou composição de reagentes e produtos, conversão, etc., torna-se essencial. No entanto, quando se deseja implementar uma estrutura de controle efetiva, faz-se necessário a medição da variável de processo, por exemplo, concentração, em tempo real; o que de fato para variáveis químicas ou bioquímicas essa medição geralmente não está disponível. E quando essas medições em tempo real estão disponíveis, por exemplo, com uso de analisadores em linha de processos, seu custo de manutenção e de operação é bastante elevado, além de demandar uma mão de obra qualificada para operação (CAMPOS et al., 2013).

Para superar essas e outras dificuldades relacionadas à estimativa de variáveis não diretamente mensuráveis em tempo real, foi então que surgiram os analisadores virtuais (do Inglês, *soft sensors*). Os analisadores virtuais (AV) são modelos matemáticos implementados em *softwares* que utilizam medições de variáveis secundárias (entradas) para estimar variáveis de interesse, esta alternativa surge diante de uma dificuldade operacional ou do alto custo na obtenção direta da variável desejada (FORTUNA et al., 2005; MORAIS JR, 2015).

De acordo com Kadlec et al. (2009), a construção de AV é feita através de dois tipos de abordagens: a modelagem fenomenológica e a identificação (modelagem caixa preta). A primeira é uma proposição teórica (fenomenológica), a qual requer um entendimento das propriedades físicas e químicas do processo. A segunda metodologia é gerada através de modelos de entrada-saída do processo, onde são coletados dados na planta ou de modelos validados com dados reais. Quando são empregadas as duas abordagens anteriores na construção do modelo matemático, tem-se uma modelagem denominada caixa cinza.

O uso da modelagem caixa preta na construção de analisadores virtuais é mais comum, haja vista a possibilidade de recorrer-se aos dados disponíveis nas plantas por meio de sensores físicos. Quando são empregados modelos do tipo espaços de estados, em vez da utilização do termo analisador virtual, utiliza-se o termo observador ou estimador de estados. Este observador pode ser exato quando fornece o estado diretamente, ou assintótico quando seu limite tende ao estado exato para tempo infinito (LOTUFO E GARCIA, 2008).

Neste trabalho, é proposta uma metodologia para construção de observadores de estado e filtragem de ruídos de sinais de medições secundárias através de observadores de estado, empregando Filtro de Kalman Estendido (FKE). A metodologia foi implementada em um processo produtivo de propileno glicol, que ocorre em um reator tanque agitado contínuo (CSTR) operando exotermicamente, sendo que o modelo é tratado como múltiplas entradas e múltiplas saída, ou seja, são utilizadas variáveis de entradas ruidosas do processo e são estimadas variáveis críticas, tais como a concentração do reagente (óxido de propileno). Foi implementada uma estratégia de controle inferencial realimentação para as malhas temperatura e concentração de óxido de propileno estimada do processo.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo geral

Desenvolver a modelagem e simulação em regimes estacionário e transiente de um reator CSTR para produção de propilenoglicol. Propor uma metodologia para estimativa das concentrações, caracterizar o processo com distúrbios inerentes, inserir ruídos característicos de sinais de medição utilizando o filtro de Kalman estendido (FKE).

1.1.2 Objetivos específicos

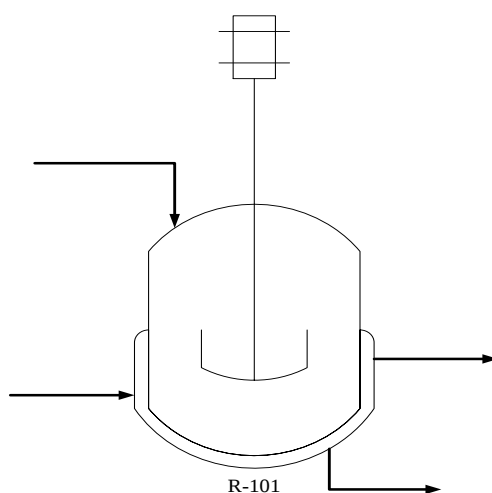
- Propor a modelagem e a simulação da reação de hidrólise do óxido de propileno em propileno glicol, sendo implementados rotinas numéricas no *software Matlab-Simulink®*;
- Avaliar o comportamento estacionário e transiente das variáveis críticas do processo, dentre as quais destacam-se: a temperatura de reação e as concentrações do reagente e do produto;
- Desenvolver um observador de estado virtual não-linear – Filtro de Kalman Estendido (FKE) - para inferir a concentração do óxido de propileno a partir de medições secundárias ruidosas do reator, utilizando critérios de desempenho na avaliação das estimativas;
- Propor uma estrutura de controle inferencial de concentração, sendo o elemento de medição a estimativa efetuada pelo FKE, implementando-a no processo e efetuando a sintonia do controlador;
- Efetuar a análise de desempenho do controlador utilizando critérios de integral do erro.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Reator CSTR

Os reatores são os equipamentos de maior influência no rendimento de processos químicos. Um tipo de reator amplamente empregado em processamento industrial é o reator do tipo contínuo de tanque agitado (CSTR). Este tipo de reator é usado principalmente em reações em fase líquida, onde é normalmente operado em estado estacionário e é feita a consideração de perfeitamente misturado, consequentemente, a temperatura, concentração e a velocidade de reação não dependem do tempo nem da posição dentro do reator (FOGLER, 2009). Na Figura 2.1, tem-se uma ilustração de um reator CSTR.

Figura 2.1 - Reator CSTR.



Fonte: O autor (2017).

Como nesses reatores a temperatura e concentração são as mesmas em qualquer ponto do mesmo, elas também são as mesmas na saída. Dessa forma, a concentração e temperatura são modeladas como sendo iguais aquelas no interior do reator.

2.1.1. Balanço de massa para um reator CSTR

Para desenvolver um balanço molar em qualquer sistema, as fronteiras do sistema têm de ser primeiramente especificadas. O volume envolvido por essas fronteiras é denominado *volume do sistema* ou *volume de controle*. Considerando o reator da Figura 2.1, fazendo um balanço molar da espécie j para qualquer instante, t , resulta na Equação (2.1).

$$F_{j0} - F_j + G_j = \frac{dN_j}{dt} \quad (2.1)$$

Onde: F_{j0} é a taxa de j que entra no sistema em (mols/tempo), F_j é a taxa de j que sai no sistema em (mols/tempo), G_j é a taxa de geração de j por reação química em (mols/tempo) e $\frac{dN_j}{dt}$ é a taxa de acúmulo de j dentro do sistema. Se as variáveis (temperatura, concentração, atividade catalítica) forem uniformes (não há variações espaciais) dentro do reator, a taxa de geração de j , G_j , será dada pela Equação 2.2.

$$G_j = r_j * V \quad (2.2)$$

Sendo: r_j a velocidade de formação de j e V é o volume do reator.

Considerando o reator da Figura 2.1, operando em regime estacionário, tem-se:

$$\frac{dN_j}{dt} = 0 \quad (2.3)$$

Substituindo as Equações 2.2 e 2.3 na Equação (2.1) e reorganizando, chega-se na Equação (2.4), a qual é denominada como equação de projeto para um reator CSTR.

$$V = \frac{F_{j0} - F_j}{-r_j} \quad (2.4)$$

2.2 CSTR com efeitos térmicos

Aplicando um balanço de energia no reator CSTR da Figura 2.1 obtém-se a Equação 2.5:

$$\frac{d\bar{E}_{sit}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{j=1}^n F_{j0} * H_{j0} - \sum_{j=1}^n F_j * H_j \quad (2.5)$$

onde $\frac{d\bar{E}_{sit}}{dt}$ é a taxa de acúmulo de energia dentro do reator, $\dot{Q}$ é a taxa de energia transferida para o reator ou deste para as vizinhanças (depende do tipo de reação), F_{j0} é vazão molar do componente j na entrada do reator, H_{j0} entalpia do componente j na entrada do reator; F_j é vazão molar do componente j na saída do reator, H_j entalpia do componente j na saída do reator e $\dot{W}$ é o trabalho de eixo (desprezível).

Considerando que no reator ocorre uma reação genérica, representada pela Equação 2.6.



Assim, o somatório das entalpias da Equação 2.5 serão representados pelas Equações 2.7 e 2.8:

$$\sum F_{i0} * H_{i0} = F_{A0} * H_{A0} + F_{B0} * H_{B0} + F_{C0} * H_{C0} + F_{D0} * H_{D0} \quad (2.7)$$

$$\sum F_i * H_i = F_A * H_A + F_B * H_B + F_C * H_C + F_D * \quad (2.8)$$

Sabe-se que a vazão molar em termos de conversão é: $F_j = (\Theta_j + v_j * X)$ onde $\Theta_j = \frac{F_{j0}}{F_{A0}}$

Onde: Θ_j é razão entre o número que entra da espécie j pelo de moles de A que entra;

v_j é a razão entre os coeficientes da equação química; e X é a conversão do reagente-chave.

Assim:

$$F_A = F_{A0}(1 - X); F_B = F_{A0} \left(\Theta_B - \frac{b}{a} X \right); F_C = F_{A0} \left(\Theta_C + \frac{c}{a} X \right); F_D = F_{A0} \left(\Theta_D + \frac{d}{a} X \right)$$

Subtraindo a Equação 2.7 da Equação 2.8 e substituindo os termos acima, obtemos a Equação (2.9):

$$\sum F_{j0} * H_{j0} - \sum F_j * H_j = F_{A0} [(H_{A0} - H_A) + (H_{B0} - H_B) * \Theta_B + (H_{C0} - H_C) * \Theta_C + (H_{D0} - H_D) * \Theta_D] - \left(-H_A - \frac{b}{a} * H_B + \frac{c}{a} * H_C + \frac{d}{a} * H_D \right) * F_{A0} * X \quad (2.9)$$

O calor de reação é dado pela Equação (2.10):

$$\Delta H_{RX}(T) = -H_A - \frac{b}{a} * H_B + \frac{c}{a} * H_C + \frac{d}{a} * H_D \quad (2.10)$$

Substituindo a Equação 2.10 na Equação 2.9 e colocando em somatória de espécie, temos a Equação (2.11):

$$\sum F_{j0} * H_{j0} - \sum F_j * H_j = F_{A0} * \sum_{j=1}^n \Theta_j (H_{j0} - H_j) - \Delta H_{RX} * F_{A0} * X \quad (2.11)$$

O balanço molar do CSTR é dado pela Equação 2.12:

$$F_{A0} * X = -r_A * V \quad (2.12)$$

Substituindo a Equação 2.12 na Equação 2.11, chega-se na Equação 2.13:

$$\sum F_{j0} * H_{j0} - \sum F_j * H_j = F_{A0} * \sum_{j=1}^n \Theta_j (H_{j0} - H_j) - \Delta H_{RX} * -r_A * V \quad (2.13)$$

A variação na entalpia ($H_{j0} - H_j$) é dada conforme a Equação 2.14:

$$H_{j0} - H_j = \sum_{T_{j0}}^T C_{Pj} * dT = C_{Pj}(T - T_{j0}) \quad (2.14)$$

Substituindo a Equação 2.14 na Equação 2.13 e considerando $T_{j0} = T_0$, obtemos a Equação 2.15:

$$\sum F_{j0} * H_{j0} - \sum F_j * H_j = F_{A0} * \sum_{j=1}^n \Theta_j (C_{Pj}(T - T_0)) - \Delta H_{RX} * -r_A * V \quad (2.15)$$

Substituindo a Equação 2.15 na Equação 2.5, temos a Equação 2.16:

$$\frac{d\bar{E}_{sit}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + F_{A0} * \sum_{j=1}^n \Theta_j (C_{Pj}(T - T_0)) - \Delta H_{RX} * -r_A * V \quad (2.16)$$

A taxa de acúmulo de energia no reator é expressa pela Equação 2.17.

$$\frac{d\bar{E}_{sit}}{dt} = \sum_{j=1}^n N_j * C_{Pj} * \frac{dT}{dt} \quad (2.17)$$

Substituindo a Equação 2.17 na Equação 2.16, tem-se o balanço de energia para um reator CSTR em regime transiente, Equação 2.18.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W} + F_{A0} * \sum_{j=1}^n \Theta_j (C_{Pj}(T - T_0)) - \Delta H_{RX} * -r_A * V}{\sum_{j=1}^n N_j * C_{Pj}} \quad (2.18)$$

Onde: T é temperatura do reator; T_0 é temperatura da alimentação; C_{Pj} é o calor específico do componente j ; N_j é o número de mols da espécie j ; e ΔH_{RX} é a entalpia da reação.

Para um reator CSTR operando em regime estacionário e considerando trabalho de eixo nulo ($\dot{W} = 0$), obtemos a Equação 2.19:

$$0 = \frac{\dot{Q} + F_{A0} * \sum_{j=1}^n \Theta_j (C_{Pj}(T - T_0)) + \Delta H_{RX} * r_A * V}{\sum_{j=1}^n N_j * C_{Pj}} \quad (2.19)$$

2.3 Solução numérica

2.3.1 Método de Newton-Raphson para Sistema de Equações Algébricas Não Lineares

Para solução numérica de sistemas de equações algébricas não lineares (SEANL), destacam-se alguns métodos, tais como: Newton-Raphson, Iteração e do Gradiente Descendente.

Dentre os métodos acima citados, destaca-se o de Newton-Raphson pela sua consolidação e aproximações sucessivas, fornecendo uma boa ordem de convergência. Neste método utiliza-se o conhecimento da derivada de uma função f para se chegar mais rapidamente à solução (zeros de funções) (CHAPRA, 2008; MORAIS JR, 2017).

Um sistema de equações não lineares é um sistema constituído por combinação de funções algébricas e funções transcendentais, tais como a função exponencial, a função logaritmo, as funções trigonométricas, etc. Devido à não linearidade dos sistemas de equações não lineares eles não podem ser reduzidos à forma matricial $Ax = b$, de modo que nem o cálculo direto pelo método de eliminação gaussiana nem por inversão de matrizes pode ser aplicado. Outra dificuldade vem da diversidade de funções transcendentais que impede a elaboração de um algoritmo que possa ser aplicado a um SEANL genéricas.

Considere um sistema não linear de n equações com n incógnitas:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned} \quad F(\vec{x}) = 0 \quad (2.20)$$

Verifica-se que em um caso particular podemos ter um sistema linear de equações algébricas apresentado na forma da Equação 2.21.

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n - b_1 = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n - b_2 = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n - b_n = 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

Sob a forma matricial a Equação 2.21 assume a forma da Equação 2.22.

$$Ax - b = 0 \quad (2.22)$$

Esse sistema pode ser resolvido para k aproximações sucessivas. Seja a aproximação k com $\mathbf{x}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$, sendo uma das raízes de $\mathbf{x}$ com erro $\Delta\mathbf{x}^{(k)} = (\Delta x_1^{(k)}, \Delta x_2^{(k)}, \Delta x_3^{(k)}, \dots, \Delta x_n^{(k)})$.

Onde: $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}^{(k)}$.

$$\begin{aligned}\mathbf{x} &= \mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}^{(k)} \\ f(\mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}^{(k)}) &= 0\end{aligned}$$

Suponha que $f(\mathbf{x})$ seja contínua e diferenciável em um domínio convexo, que contenha $\mathbf{x}$ e $\mathbf{x}^{(k)}$, pode-se expandir essa função em série de Taylor em torno do ponto $\mathbf{x}^{(k)}$ e despreza-se as potenciais maiores que um (termos lineares). Linearizando o sistema de equação:

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^{(k)} + \Delta\mathbf{x}^{(k)}) \approx f(\mathbf{x}^{(k)}) + f'(\mathbf{x}^{(k)})\Delta\mathbf{x}^{(k)} = 0$$

$$f_1(\mathbf{x}) = f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) + \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_1^{(k)} + \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_2^{(k)} + \dots + \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_n^{(k)} = 0$$

$$f_2(\mathbf{x}) = f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) + \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_1^{(k)} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_2^{(k)} + \dots + \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_n^{(k)} = 0$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$f_n(\mathbf{x}) = f_n(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}) + \frac{\partial f_n}{\partial x_1} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_1^{(k)} + \frac{\partial f_n}{\partial x_2} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_2^{(k)} + \dots + \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \Big|_{\mathbf{x}^{(k)}} \Delta x_n^{(k)} = 0$$

Sendo $f'(\mathbf{x}^{(k)})$ a matriz Jacobiana, definida como:

$$f'(\mathbf{x}^{(k)}) = J(\underline{\mathbf{x}}^{(k)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

A Equação 2.23 é um sistema linear na seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} f_1(\underline{\mathbf{x}}^{(k)}) \\ f_2(\underline{\mathbf{x}}^{(k)}) \\ \vdots \\ f_n(\underline{\mathbf{x}}^{(k)}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n(\underline{\mathbf{x}}^{(k)})}{\partial x_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1^{(k)} \\ \Delta x_2^{(k)} \\ \vdots \\ \Delta x_n^{(k)} \end{bmatrix} = 0 \quad (2.24)$$

Na sua forma matricial:

$$F(\underline{x}) = F(\underline{x}^{(k)}) + J(\underline{x}^{(k)})\Delta\underline{x}^{(k)} = 0 \quad (2.25)$$

Se a matriz Jacobiana é não singular, então possui inversa, que segue:

$$J(\underline{x}^{(k)})^{-1} [F(\underline{x}^{(k)}) + J(\underline{x}^{(k)})\Delta\underline{x}^{(k)}] = 0 \quad (2.26)$$

Por sua vez:

$$\Delta\underline{x}^{(k)} = -J(\underline{x}^{(k)})^{-1} F(\underline{x}^{(k)}) = 0 \quad (2.27)$$

Assim, encontra-se o Método de Newton para sistemas de equações não lineares (sendo que para $k=0$, $\underline{x}^{(0)}$ deve ser fornecido):

$$\underline{x}^{(k+1)} - \underline{x}^{(k)} = -J(\underline{x}^{(k)})^{-1} F(\underline{x}^{(k)}), \text{ com } k = 0, 1, 2, \dots, n \text{ iterações} \quad (2.28)$$

Tendo como critério de parada:

$$x^{(k+1)} - x^k \leq \text{Toleância} \quad (2.29)$$

Sendo que a tolerância, geralmente empregada, é 10^{-5} .

2.3.2 Método de Runge-Kutta de Butcher para sistemas de equações diferenciais ordinárias

Os métodos de Runge-Kutta (RK) formam uma família de métodos numéricos de integração de EDO's, largamente utilizados em várias áreas da Engenharia Química. Estes algoritmos são explícitos e envolvem a determinação da função f em pontos entre t_n e t_{n+1} (MORAIS Jr., 2017).

O método de Runge-Kutta é provavelmente um dos métodos mais consolidados. O método de Runge-Kutta de quarta ordem também é um dos mais preciosos para obter soluções aproximadas de valor inicial. Cada método de Runge-Kutta consiste em comparar um polinômio de Taylor apropriado para eliminar o cálculo das derivadas. Fazendo-se várias avaliações da função a cada passo. Estes métodos podem ser construídos para qualquer ordem (VALLE, 2012).

A necessidade de resultados mais precisos (acurados) pode-se recorrer a métodos mais precisos, como é o caso de RK-5 desenvolvido por Butcher (1963):

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{90} (7k_1 + 32k_3 + 12k_4 + 32k_5 + 7K_6) \text{ passo}$$

$$k_1 = f(t_n, y_n)$$

$$k_2 = f(t_n + \frac{1}{4} \text{passo}, y_n + \frac{1}{4} k_1 \cdot \text{passo})$$

$$k_3 = f(t_n + \frac{1}{4} \text{passo}, y_n + \frac{1}{8} k_1 \cdot \text{passo} + \frac{1}{8} k_2 \cdot \text{passo})$$

$$k_4 = f(t_n + \frac{1}{2} \text{passo}, y_n - \frac{1}{2} k_2 \cdot \text{passo} + k_3 \cdot \text{passo})$$

$$k_5 = f(t_n + \frac{3}{4} \text{passo}, y_n + \frac{3}{16} k_1 \cdot \text{passo} + \frac{9}{16} k_4 \cdot \text{passo})$$

$$k_6 = f(t_n + \text{passo}, y_n - \frac{3}{7} k_1 \cdot \text{passo} + \frac{2}{7} k_2 \cdot \text{passo} + \frac{12}{7} k_3 \cdot \text{passo} - \frac{12}{7} k_4 \cdot \text{passo} + \frac{8}{7} k_5 \cdot \text{passo})$$

Para resolução do sistema de equações diferenciais oriundas da modelagem do processo, empregamos o método de Runge-Kutta de 5º ordem.

2.4 Filtro de Kalman

O filtro de Kalman (FK) é resultado da contribuição de vários pesquisadores. Começando por Wiener no final da década de 1940 com o filtro de Wiener (contínuo). Em 1960 Kalman publicou um artigo intitulado “A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems” (Uma nova abordagem para filtragem linear e problemas de previsão), que deu origem ao filtro de Kalman linear e não-linear (estendido). Desde então, o filtro de Kalman tem apresentado grande aplicação em várias áreas, como por exemplo, navegação, em usinas nucleares, astronomia, entre outros.

O FK é um algoritmo matemático que realiza o cálculo da estimativa de estados instantâneos de um sistema dinâmico perturbado por ruído usando medidas relacionadas aos estados e minimiza a média do erro quadrático entre o estado medido e estimado. Na prática, o

FK é um conjunto de equações de estados, que contêm informações necessárias sobre o perfil do sistema e permite uma solução computacional (SILVA, 2012).

2.4.1 Filtro de Kalman linear

Para que o Filtro de Kalman linear (FKL) seja um estimador de estado ótimo é necessário que o sistema seja linear e o ruído do processo e das medidas seja branco e gaussiano (PETER, 1979). O algoritmo do FKL, desenvolvido por Rudolf Kalman (1960), utiliza a inferência *bayesiana* e estima a distribuição de probabilidade conjunta para estimar os valores de variáveis desconhecida.

A base para o FKL é constituída de duas etapas, predição e correção. Na primeira etapa, é feita a predição do estado através do modelo dinâmico no tempo k , quando dispõe-se dos estados no tempo $k-1$. Na segunda etapa é realizada a correção com o modelo de observação (que relaciona os estados com as saídas), de modo que a covariância do erro entre os estados medido e predito seja minimizada, ou seja, os estados são corrigidos baseando-se em medições disponíveis do sistema e em dados estocásticos do processo (JESUS, 2012).

2.4.2 Algoritmo do FK

A dedução matemática do filtro de Kalman é apresentada no AXENO A desse trabalho. O princípio de atuação do FK consiste em duas etapas: predição (ou propagação) e correção. A seguir tem-se as equações matemáticas de cada etapa.

Predição

Predição do estado (estimativa) (ver Equação A.1): $\hat{x}_{k|k-1} = A\hat{x}_{k-1|k-1} + Bu_{k-1}$

Predição da covariância (ver Equação A.30): $P_{k|k-1} = AP_{k-1|k-1}A^T + Q_k$

Correção

Ganho de Kalman (ver Equação A.26): $K_k = P_{k|k-1}C^T(CP_{k|k-1}C^T + R)^{-1}$

Correção do estado (ver Equação A.12): $\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K_k[y_k - (C\hat{x}_{k|k-1} + Du_k)]$

Correção da covariância (ver Equação A.27): $P_{k|k} = (I - K_kC)P_{k|k-1}$

2.4.3 Filtro de Kalman estendido (FKE)

O filtro de Kalman mostrado anteriormente considerava a estimação de um vetor de estados para um modelo linear de um sistema dinâmico. Se, no entanto, o modelo for não linear, é possível aplicar a técnica de linearização ao longo da trajetória dinâmica e aplicar a estimação de estado linear para produzir as correções, a cada novo estado predito. Este filtro é denominado filtro de Kalman estendido (FKE). Essa versão do FK considera que o modelo do processo é não linear:

$$\begin{cases} x_k = f(x_{k-1}, u_{k-1}) + e_{k|k-1} \\ y_k = h(x_k) + e_{yk} \end{cases}$$

A diferença entre o FK e o FKE, é que no último as matrizes de derivadas parciais (Jacobianas) são calculadas a cada interação:

Predição

Predição do estado (estimativa): $\hat{x}_{k|k-1} = f(\hat{x}_{k-1|k-1}, u_{k-1})$

Predição da covariância: $P_{k|k-1} = A_{k-1}P_{k-1|k-1}A_{k-1}^T + Q_k$

Correção

Ganho de Kalman: $K_k = P_{k|k-1}C_k^T(CP_{k|k-1}C_k^T + R)^{-1}$

Correção do estado (estimativa): $\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + k_k[y_k - h(\hat{x}_{k|k-1})]$

Correção da covariância: $P_{k|k} = (I - k_k C_k)P_{k|k-1}$

Jacobianas

Jacobiana dos estados (ver Equação A.26): $A_{k-1} = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\hat{x}_{k-1|k-1}}$

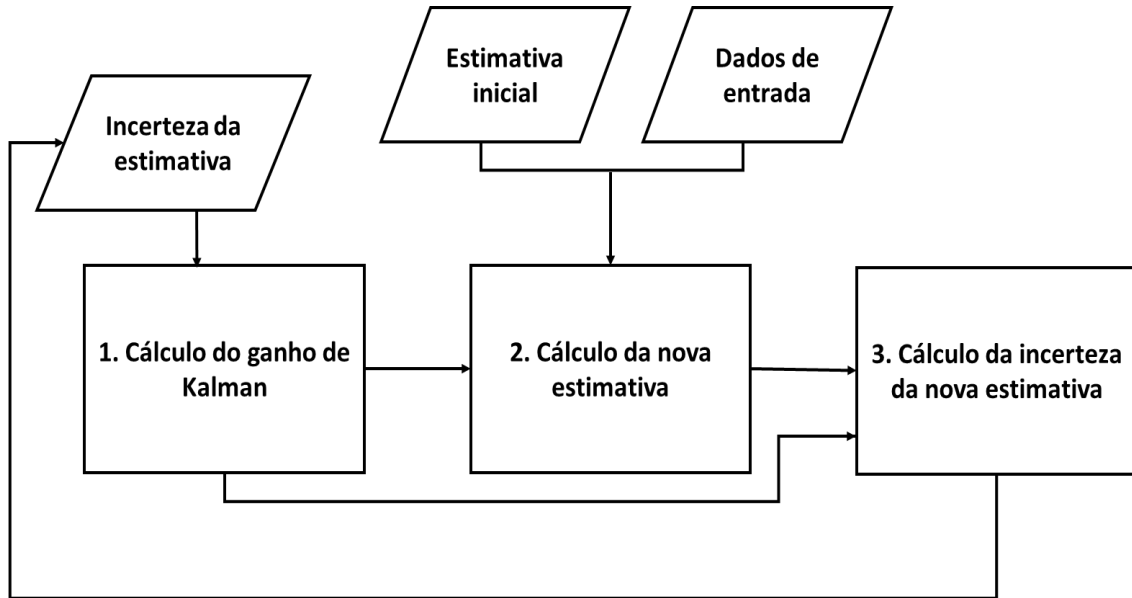
Jacobiana das saídas: $C_k = \left. \frac{\partial h}{\partial x} \right|_{\hat{x}_{k|k-1}}$

2.4.4 Algoritmo genérico do filtro de Kalman

Para um melhor entendimento do princípio de funcionamento do FK será mostrado um algoritmo genérico. De maneira geral, ele é composto por três cálculos principais que busca mostrar o valor mais próximo possível do real através de iterações e atualizações. Os cálculos

são: ganho de Kalman, nova estimativa e cálculo da incerteza da nova estimativa. Na Figura 2.2 tem-se um fluxograma do funcionamento genérico do FK.

Figura 2.2 - Fluxograma simplificado do filtro de Kalman.



Fonte: Adaptada de BRANDÃO (2016).

Descrevendo as equações principais do filtro de Kalman de forma genérica. Para o ganho de Kalman (K) tem-se:

$$K = \frac{e_{est}}{e_{est} + e_{med}}$$

Onde:

e_{est} = Erro (incerteza) da estimativa;

e_{med} = Erro (incerteza) da medição;

Calcula-se a nova estimativa com o valor do ganho de Kalman (K) como mostra a equação abaixo:

$$EST_t = EST_{t-1} + K[med - EST_{t-1}]$$

Onde:

EST_t = Nova estimativa;

med = Valor medido;

EST_{t-1} = Estimativa anterior.

Quando se tem um ganho de Kalman (K) tendendo a 0, isto é, $e_{med} \gg e_{est}$ o ganho quase não influencia no cálculo da nova estimativa, ou seja, $EST_t \cong EST_{t-1}$. Para a situação onde o ganho de Kalman (K) tende a 1, isto é, $e_{med} \ll e_{est}$, o segundo termo do cálculo da nova estimativa terá maior influência e assim, o valor estimado está distante do valor real.

O cálculo da incerteza (erro) da nova estimativa é dado por:

$$E_{EST,t} = [1 - K](E_{EST,t-1})$$

Onde:

$E_{EST,t}$ = Incerteza da nova estimativa;

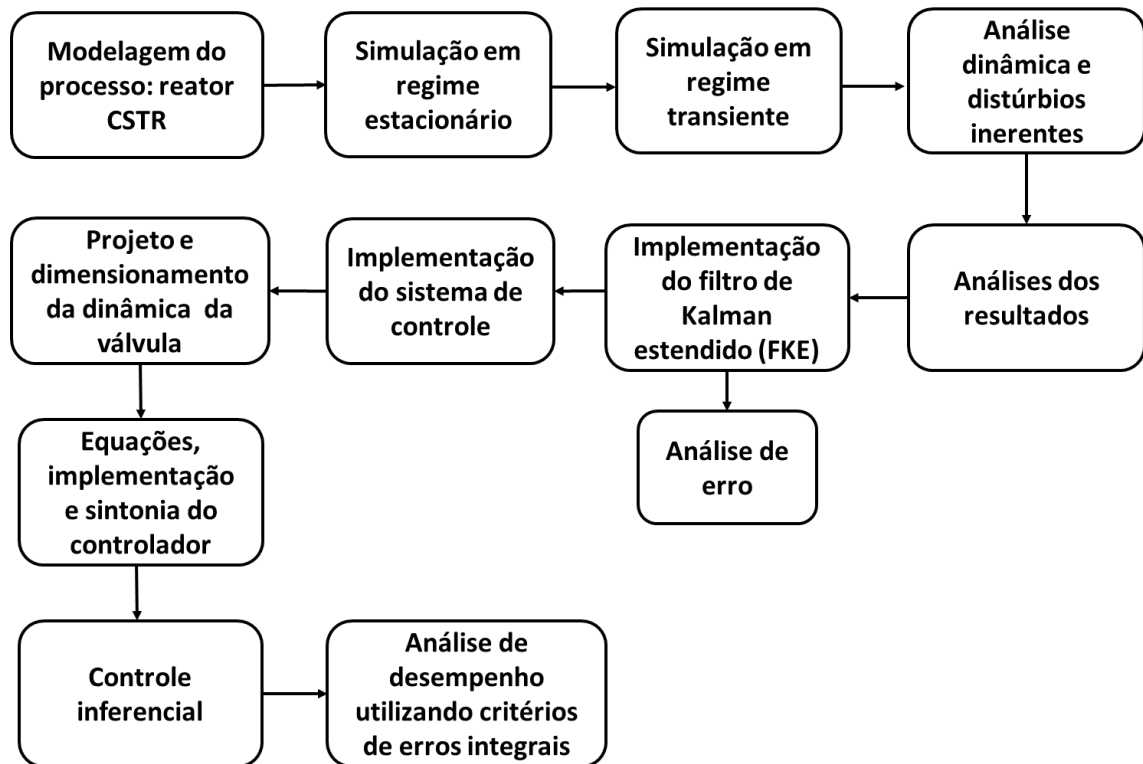
$E_{EST,t-1}$ = Incerteza da estimativa anterior;

Quando o valor do ganho de Kalman (K) tender a 1, o erro da nova estimativa será menor do que o da estimativa anterior, ou seja, o valor da estimativa se aproximará do valor real.

3 METODOLOGIA DESENVOLVIDA

Nessa seção será descrita a metodologia desenvolvida e aplicada no trabalho, conforme o fluxograma da Figura 3.1.

Figura 3.1 - Fluxograma da metodologia empregada.



Fonte: O autor (2017).

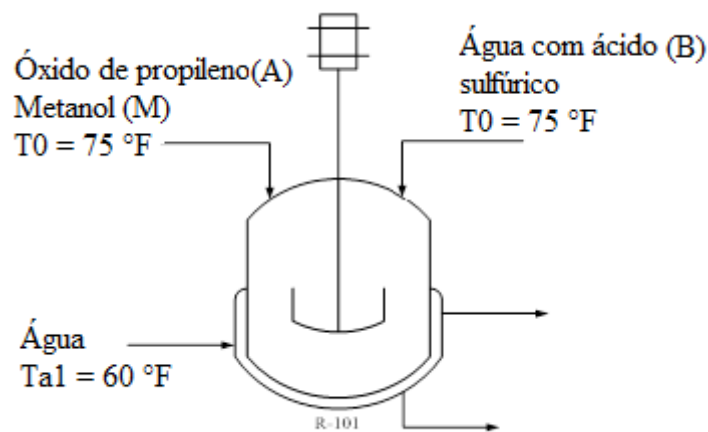
Inicialmente foi desenvolvida a modelagem matemática do reator de produção propileno glicol. Logo em seguida, o processo foi simulado em regime estacionário e transiente, utilizando o *software* Matlab-Simulink®, sendo inserido alguns distúrbios para análise do comportamento transiente do processo. Na etapa seguinte, foi implementado o algoritmo do FKE com o objetivo de estimar variáveis críticas do processo. Sendo empregado critérios de erro para avaliar a estimativa. Para implementação de um sistema de controle inferencial, foi projetada e dimensionada uma válvula de controle com abertura linear. Por fim, o algoritmo de um controlador proporcional-integrativo-derivativo foi inserido.

3.1 Processo químico estudado

O propileno glicol é um excelente solvente para muitos produtos orgânicos insolúveis em água, sendo produzido industrialmente através da hidrólise do óxido de propileno. Suas propriedades físico-químicas incluem: líquido claro e oleoso, incolor, sem sabor, ligeiramente viscoso e completamente miscível em água. Essa gama de distintas propriedades torna esse composto uma excelente escolha para as indústrias de cosméticos, alimentos e produtos farmacêuticos (GARDEN, 2014).

No processo em estudo, o propileno glicol é produzido em um reator CSTR, conforme a Figura 3.2. Na reação o óxido de propileno é hidrolisado, sendo o metanol utilizado como inerte e o ácido sulfúrico como catalisador.

Figura 3.2 - Produção de propileno glicol.



Fonte: Adaptação de Folgler (2009).

A Equação 3.1 representa a reação química envolvida do processo de produção de propileno glicol.



Para facilitar a escrita das equações de balanço de massa e energia os compostos envolvidos na reação acima são denominados: A é composto óxido de propileno (reagente), B é a água (reagente), C é o composto propileno glicol (produto) e M é metanol (inerte). A lei de velocidade da reação é dada pela Equação 3.2.

$$-r_A = k * C_A \quad (3.2)$$

Sendo C_A a concentração do óxido de propileno e k constante de velocidade.

Sabe-se pela estequiometria da reação que a relação da Equação 3.3 é verdadeira.

$$-r_A = -r_B = r_C \quad (3.3)$$

3.1.1. Modelagem matemática do processo

A finalidade da modelagem é determinar um conjunto de equações matemáticas (diferenciais, algébricas e integrais) que permitam descrever o comportamento do processo quando são modificados parâmetros e/ou variáveis deste.

Foram desenvolvidos os balanços molares em termos de concentração para cada componente no reator:

Para A:

$$\frac{dC_A}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{A0} - C_A}{V} \right) * V_0 \quad (3.4)$$

Para B:

$$\frac{dC_B}{dt} = r_B + \left(\frac{C_{B0} - C_B}{V} \right) * V_0 \quad (3.5)$$

Para C:

$$\frac{dC_C}{dt} = r_C + \left(\frac{0 - C_C}{V} \right) * V_0 \quad (3.6)$$

Para M:

$$\frac{dC_M}{dt} = \left(\frac{C_{M0} - C_M}{V} \right) * V_0 \quad (3.7)$$

Onde: C_{A0} e C_A são, respectivamente, as concentrações do óxido de propileno nas correntes de alimentação e de saída do reator; C_{B0} e C_B correspondem, respectivamente, as concentrações da água nas correntes de alimentação e de saída do reator; C_{M0} e C_M correspondem, respectivamente, as concentrações do metanol nas correntes de alimentação e de saída do reator; C_C é a concentração do produto propileno glicol na saída do reator; r_A , r_B e r_C são, respectivamente, as taxas de reação do composto A, B e C; e V e v_0 são, respectivamente, o volume e a vazão de alimentação do reator.

O balanço de energia no reator fornece a Equação 3.8.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W} + F_{A0} * \theta_{Cp} * (T - T_0) - \Delta H * -r_A * V}{NCp} \quad (3.8)$$

Onde: Q é o calor removido; W é o trabalho de eixo (desprezível); Θ_{Cp} é o somatório do produto da razão molar pelo calor específico de cada componente; T e T_0 são, respectivamente, a temperatura das correntes de saída e de alimentação do reator; ΔH é a variação de entalpia na reação; e NC_p é o somatório do produto entre o número de moles e a entalpia de cada componente. Os parâmetros e as condições iniciais estão apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Parâmetros e condições de operação do reator CSTR.

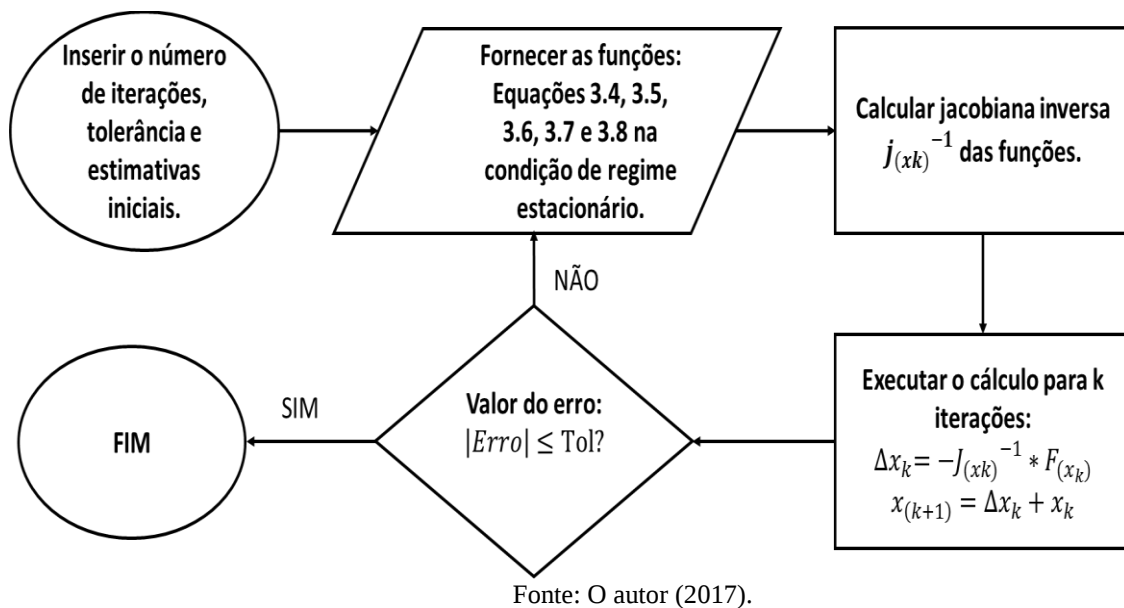
Parâmetros e condições de operação	Valores e unidades
V	66,8092 [ft ³]
UA	16000 [Btu/h.°F]
Ta1	60 [° F]
T0	75 [° F]
FA0	80 [lbmol/h]
magua	1000 [lbmol/h]
ΔH	-36000 [Btu/lbmol]
Θ_{Cp}	284,375 [Btu/lbmol.°F]
R	1,987 [Btu/lbmol.°R]
v0	441,4640 [ft ³ /h]
Tau	0,1514 [h ⁻¹]
CA0	0,1812 [lbmol/ft ³]
CB0	2,2652 [lbmol/ft ³]
CM0	0,2265 [lbmol/ft ³]
cpA	35 [Btu/lbmol.°F]
cpB	18 [Btu/lbmol.°F]
cpC	46 [Btu/lbmol.°F]
cpM	19,5 [Btu/lbmol.°F]
CAi	0 [lbmol/ft ³]
CBi	3,45 [lbmol/ft ³]
CCi	0 [lbmol/ft ³]
CMi	0 [lbmol/ft ³]
Ti	75 [° F]

Fonte: Furusawa e Miyauchi (1969) e Fogler (2009).

3.1.2 Resolução numérica em regime estacionário

O processo foi simulado em regime estacionário empregando o método de Newton-Raphson para sistema de equações não lineares, descrito na seção 2.2.1, empregando o *software Matlab®*. Na Figura 3.3 tem-se o fluxograma do método de solução numérica.

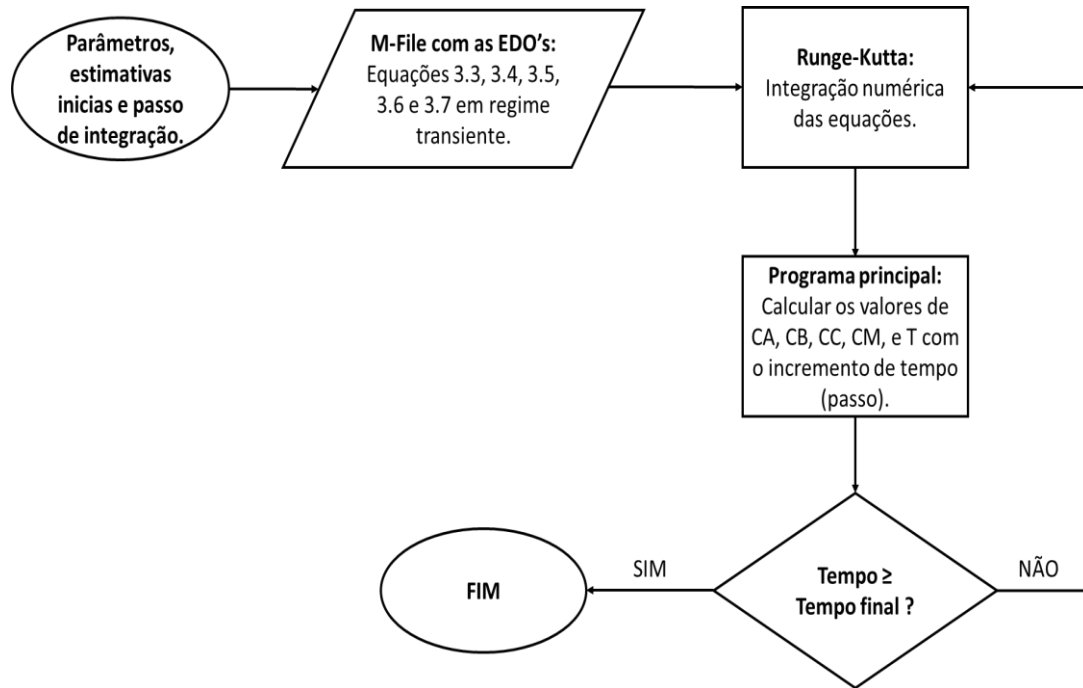
Figura 3.3 - Fluxograma da resolução em regime estacionário.



3.1.3 Resolução numérica em regime transiente

O processo também foi simulado em regime transiente empregando o método de Runge-Kutta de Butcher para sistemas de equações diferenciais ordinárias, empregando o *software Matlab®*. Na Figura 3.4 tem-se o fluxograma do método de solução numérica.

Figura 3.4 - Fluxograma da resolução em regime transiente.



Fonte: O autor (2017).

3.1.4 Algoritmo do observador de estado dinâmico (FKE)

Nesta seção é apresentado o algoritmo desenvolvido para o filtro de Kalman não linear, com obtivo de estimar a concentração do óxido de propileno e a temperatura do reator. Na Figura 3.5 é apresentado o fluxograma do algoritmo do FKE.

Para o process em estudo operando em regime transiente, tem-se um conjunto de cinco equações diferenciais ordinárias não lineares. Desse modo, foram calculadas as matrizes Jacobianas (dos estados (F) e das saídas (H)), de modo a implementar o algoritmo do FKE. Sendo F uma matriz 5x5 e H uma matriz 5x1, uma vez que se tem apenas uma saída medida (temperatura do reator, T_{med}).

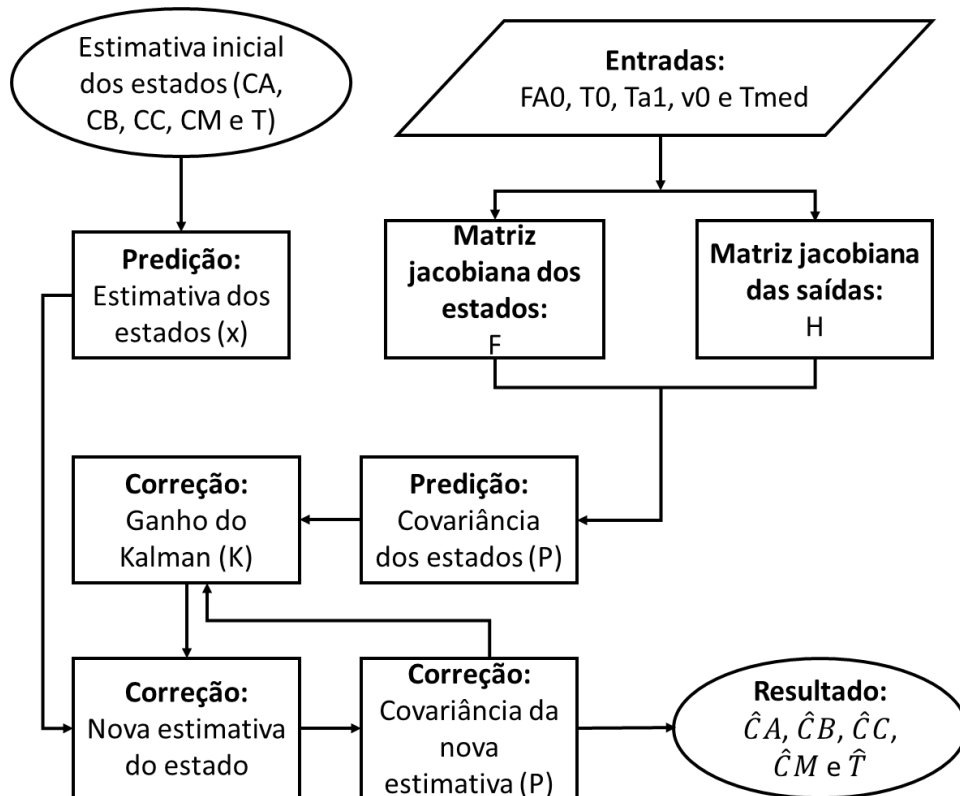
Para o modelo e implementação do FKE foram consideradas:

Entradas: $FA0$, $T0$, $Ta1$ e $v0$;

Variáveis de estado: CA , CB , CC , CM e T ;

Saídas (variável medida): T_{med} .

Figura 3.5 - Fluxograma do algoritmo do filtro de Kalman para o processo.

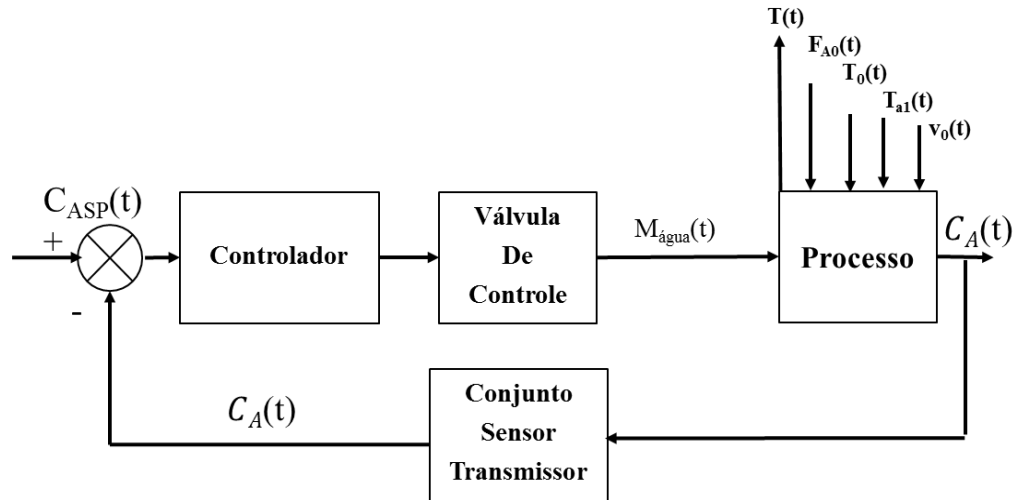


Fonte: O autor (2017).

3.1.5 Proposta de estratégia de controle inferencial usando FKE

O controle realimentação (*feedback*) é uma estratégia de controle convencional. Na Figura 3.6, tem-se uma representação desse tipo dessa estratégia de controle.

Figura 3.6 - Estratégia de controle realimentação convencional (feedback).



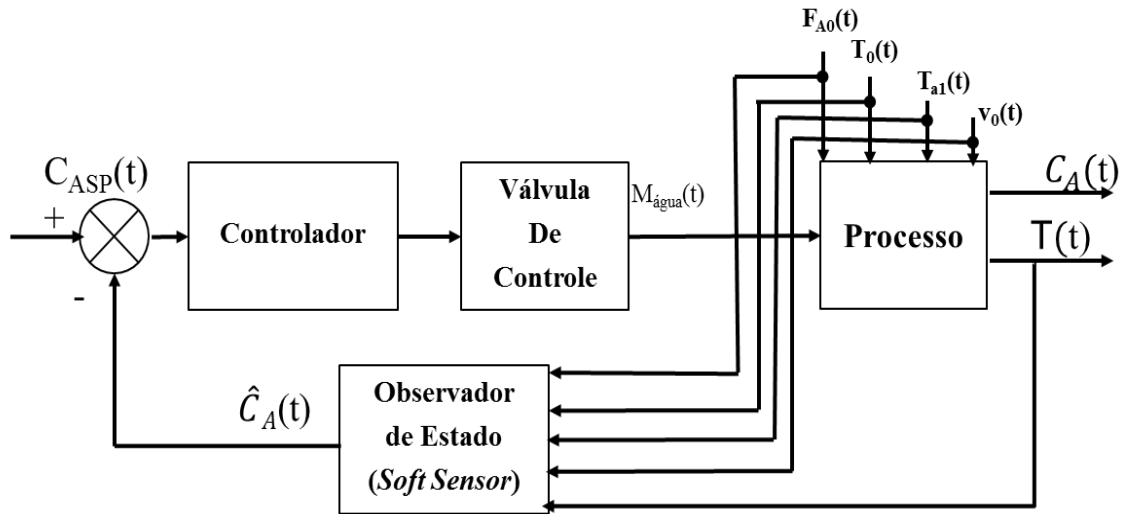
Fonte: O autor (2017).

Uma possível configuração do controle realimentação para o processo em estudo, ver Figura 3.6, tem como variável de processo (PV) a concentração do reagente A na corrente de saída ($C_A(t)$) e como variável manipulada (MV) a vazão do fluido refrigerante da camisa do reator. Sendo o valor da PV medido e transmitido ao controlador, que por sua vez compara a medição com o valor desejado (*set point*) ($C_{ASP}(t)$) e promove uma ação na MV, com objetivo de manter a PV em seu *set point*.

No entanto, o tipo de estratégia de controle apresentada na Figura 3.5, somente é possível quando ocorre a medição da variável de processo em tempo real. Logo, se a medição não for possível, o controle realimentação torna-se impraticável (SEBORG, 2010). No caso da variável concentração, trata-se de uma grandeza química não diretamente mensurável, que necessita de análises em laboratório (*off-line*).

Para suprir essas e outras necessidades, a estimativa através de um analisador virtual pode fornecer o valor da variável em tempo real. E assim, o controle inferencial realimentação pode ser aplicado. A Figura 3.7 representa uma estratégia de controle inferencial utilizando o FKE como analisador virtual (*soft sensor*).

Figura 3.7 - Controle inferencial em malha de realimentação.



Fonte: O autor (2017).

Como citado anteriormente, o termo observador de estado é dado ao tipo de modelo aplicado na construção de analisador virtual (FKE). O intuito é que o analisador virtual substitua o elemento de medição da malha de controle realimentação convencional. Logo, o controle inferencial faz uso de medições secundárias à estimativa e fornece o valor da PV à entrada do controlador.

3.1.5.1 Algoritmo do controlador-proporcional-integral-derivativo

De acordo com estudos de Astrom e Hagglund (2006), envolvendo 11.000 controladores nas indústrias de refino, química e de papel/celulose, mostram que 97% das malhas de controles regulatórios apresentavam a estrutura PID, em maioria PI. Sendo assim, os controladores PID são os mais utilizados nos processos industriais.

O controlador PID é uma estratégia consolidada devido a sua fácil implementação e arquitetura simples, podendo ter seus parâmetros ajustados através métodos de sua sintonia de controladores. A sua Equação 3.9, representa a forma geral do controlador PID ideal.

$$c(t) = c(0) + K_c e(t) + \frac{K_c}{\tau_I} \int_0^t e(t) dt + K_c \tau_D \frac{de(t)}{dt} \quad (3.9)$$

Onde: $c(t)$ é o sinal do controlador; K_c é o ganho do controlador; $c(0)$ é sinal do controlador quando o erro for zero; $e(t)$ é sinal de erro do controlador; τ_I e τ_D são, respectivamente, as constantes de tempo integrativa e derivativa.

Para o caso do controle inferencial proposto, Equação 3.10, o algoritmo do controlador PID é sintetizado.

$$c(t) = c(0) + K_c [CA_{SP}(t) - \hat{CA}(t)] - + \frac{K_c}{\tau_I} \int_0^t [CA_{SP}(t) - \hat{CA}(t)] dt + K_c \tau_D \frac{d[CA_{SP}(t) - \hat{CA}(t)]}{dt} \quad (3.10)$$

É importante notar que, $CA_{SP}(t)$ é o valor do *set point* da concentração do reagente e $\hat{CA}(t)$ é o valor da concentração estimado pelo filtro de Kalman (analisador virtual).

3.1.5.2 Seleção, dimensionamento e modelagem de válvula de controle

Os elementos finais de controle mais empregados no controle processo são as válvulas de controle. Elas atuam na restrição de uma variável em uma tubulação do processo. O sinal que sai do controlador determina a atuação da válvula. Dessa forma, a saída do controlador é a entrada para a válvula, e o fluxo é a saída da válvula (SMITH e CORRÍPIO, 2008).

A válvula de controle foi projetada e dimensionada para a vazão de fluido refrigerante, que no caso o fluido é água, com densidade igual a 1 g/cm³ e vazão volumétrica nominal de 35,948 gal/min e uma queda de pressão constante e igual a 1 psi. Foi empregada uma válvula do fabricante Masoneilan, Tabela do fabricante obtido em Smith e Corríprio (2008), com característica de abertura linear. A válvula foi projetada para 100% acima da sua capacidade requerida.

A capacidade de fluxo de uma válvula está relacionada com um fator chamado coeficiente de vazão, C_v . A Equação 3.11, fornece o fluxo de líquido através de uma válvula.

$$f_L(t) = C_v * \sqrt{\frac{\Delta P}{G_f}} \quad (3.11)$$

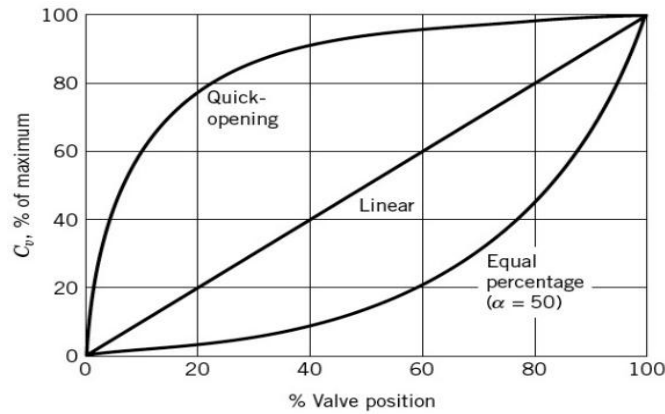
Onde: f é o fluxo de líquido (gal/min); ΔP é queda de pressão da válvula, em psi; G_f é a densidade relativa do líquido nas condições do fluxo.

As duas características de válvula mais comuns que se utiliza são a linear e a de igual porcentagem. A Figura 3.8 mostra a curva característica dos principais tipos de válvulas. Para

a estratégia de controle proposta, a válvula escolhida foi a do tipo linear, representada pela Equação 3.12.

$$C_v(x) = C_{v,máx} * x \quad (3.12)$$

Figura 3.8 - Curvas de características de válvulas



Fonte: SMITH e CORRÍPIO (2008).

3.1.6 Critérios de erro para análise de desempenho

Para se avaliar o desempenho do modelo existem diversos índices, a maioria deles utiliza o SSE (soma quadrática do erro – *Soma Square Error*). Dividindo a SSE pelo número de amostras (n) menos número de variáveis (p) determina-se o MSE (erro médio quadrático – *Medium Square Error*). Tirando a raiz do MSE tem a RMSE (raiz do erro quadrático médio – *Root Medium Square Error*).

Na avaliação de desempenho do controlador são empregados normalmente os seguintes critérios de erros: IAE, ISE e ITAE.

O critério de Integral do Erro Absoluto (IAE), Integral do Erro Quadrático (ISE) e Integral do Tempo Multiplicado pelo Erro Absoluto (ITAE) são dados pelas Equações 3.13, 3.14 e 3.15, respectivamente.

$$IAE = \int_0^{\infty} |e(t)| dt \quad (3.13)$$

$$ISE = \int_0^{\infty} (e(t))^2 dt \quad (3.14)$$

$$ITAE = \int_0^{\infty} |e(t)|t dt \quad (3.15)$$

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Resultados em regime estacionário

Com os valores dos parâmetros e condições operacionais do processo, foi empregado o algoritmo de Newton-Raphson da Figura 3.3 (ver seção 3) com objetivo resolver o sistema de cinco equações algébricas não lineares (SENL). Esse algoritmo foi implementado em código em *software* Matlab®. Assim, foram obtidos os valores das concentrações (CA, CB, CC e CM), da conversão (X) e da temperatura (T), em regime estacionário, na corrente de saída do reator.

As Equações 4.1 a 4.7 são as equações algébricas não lineares resultantes do balanço de massa e energia no reator em regime estacionário. O método de Newton-Raphson foi empregado na resolução desse sistema de equações não lineares.

$$f1(CA, T) = r_A + \left(\frac{C_{A0} - C_A}{V} \right) * v_0 \quad (4.1)$$

$$f2(CA, CB, T) = r_B + \left(\frac{C_{B0} - C_B}{V} \right) * v_0 \quad (4.2)$$

$$f3(CA, CC, T) = r_C + \left(\frac{0 - C_C}{V} \right) * v_0 \quad (4.3)$$

$$f4(CA, CM, T) = \left(\frac{C_{M0} - C_M}{V} \right) * v_0 \quad (4.4)$$

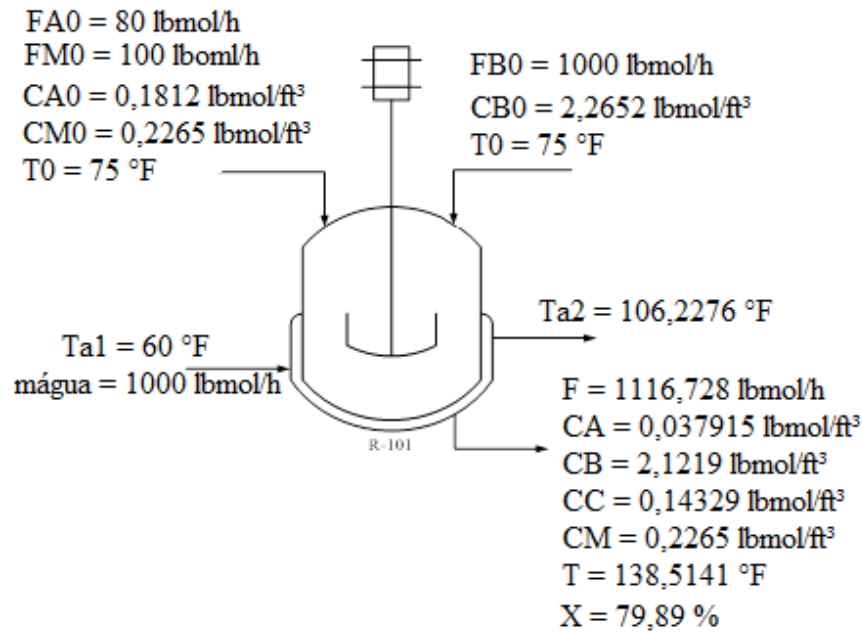
$$f5(CA, CB, CC, CM, T) = \frac{\dot{Q} - \dot{W} + F_{A0} * \Theta_{Cp} * (T - T_o) - \Delta H * -r_A * V}{NCp} \quad (4.5)$$

Foi calculada a matriz jacobiana das funções f1, f2, f3, f4 e f5. Essa matriz foi utilizada no método numérico para determinação das variáveis na condição de regime estacionário. A Equação 4.6 representa a jacobiana do processo.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f1}{\partial CA} & \frac{\partial f1}{\partial CB} & \frac{\partial f1}{\partial CC} & \frac{\partial f1}{\partial CM} & \frac{\partial f1}{\partial T} \\ \frac{\partial f2}{\partial CA} & \frac{\partial f2}{\partial CB} & \frac{\partial f2}{\partial CC} & \frac{\partial f2}{\partial CM} & \frac{\partial f2}{\partial T} \\ \frac{\partial f3}{\partial CA} & \frac{\partial f3}{\partial CB} & \frac{\partial f3}{\partial CC} & \frac{\partial f3}{\partial CM} & \frac{\partial f3}{\partial T} \\ \frac{\partial f4}{\partial CA} & \frac{\partial f4}{\partial CB} & \frac{\partial f4}{\partial CC} & \frac{\partial f4}{\partial CM} & \frac{\partial f4}{\partial T} \\ \frac{\partial f5}{\partial CA} & \frac{\partial f5}{\partial CB} & \frac{\partial f5}{\partial CC} & \frac{\partial f5}{\partial CM} & \frac{\partial f5}{\partial T} \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

O fluxograma da Figura 4.1 apresenta os resultados em regime estacionário para o reator CSTR de propileno glicol. É importante notar que esses resultados estão de acordo com os obtidos em Fogler (2009).

Figura 4.1 - Fluxograma em regime estacionário para o processo.



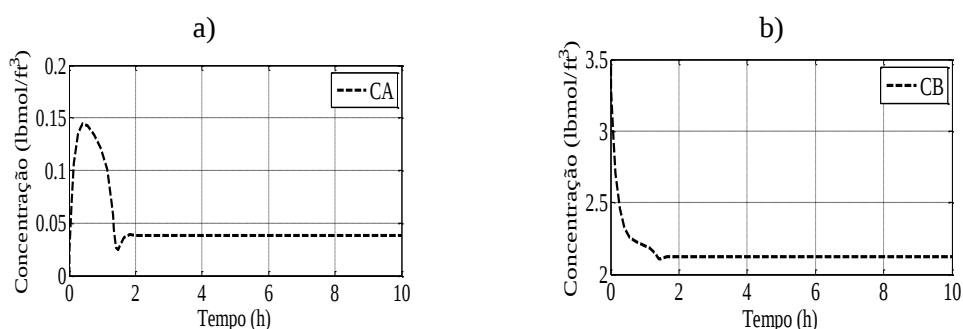
Fonte: O autor (2017).

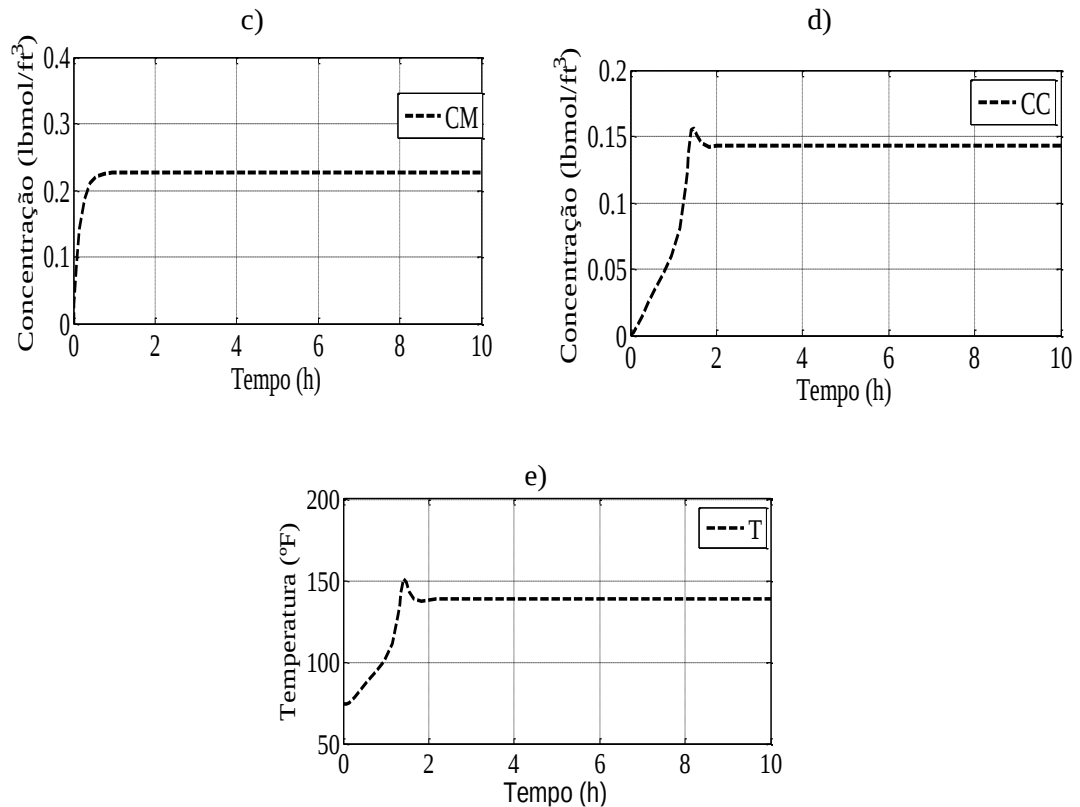
4.2 Análise da dinâmica do processo

Com o objetivo de avaliar o comportamento transiente do processo, foram resolvidas o conjunto de 5 (cinco) equações diferenciais ordinárias acopladas, apresentadas na seção 3.1.1, implementando o algoritmo da seção 3 (ver Figura 3.4) nos *softwares* Matlab-Simulink®.

Os gráficos das Figuras 4.2 a), b), c), d) e e), apresentam, respectivamente, o comportamento transiente das concentrações de CA, CB, CC e CM e T durante um tempo de simulação de 10 horas.

Figura 4.2 - Dinâmica do processo estudado.





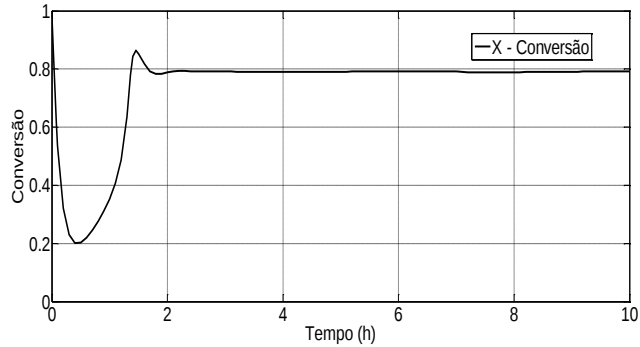
Fonte: O autor (2017).

De acordo com a Figura 4.2 a), percebe-se que há um aumento na concentração do reagente limitante (A) até o tempo de 0,25 h, logo em seguida ocorre sua diminuição, provocada pelo seu consumo durante o início da reação. Assim, percebe-se um aumento da concentração do produto até o tempo de 1,8 horas, conforme o gráfico da Figura 4.2 d).

Com a finalidade de avaliar a sensibilidade do processo, foram inseridas perturbações nas seguintes variáveis: CA_0 , FA_0 , T_0 , Ta_1 e v_0 . Todas as perturbações tiveram magnitude de + 10 % (no instante de tempo de 4 horas) e – 10% (no instante de tempo de 6 horas), a segunda perturbação teve por objetivo retornar o processo para as condições iniciais de operação, verificando também a possível ocorrência de multiplicidade de regimes estacionários.

Foi avaliada também a conversão do processo ao longo do tempo de acordo com a Figura 4.3.

Figura 4.3 - Conversão ao longo do tempo.

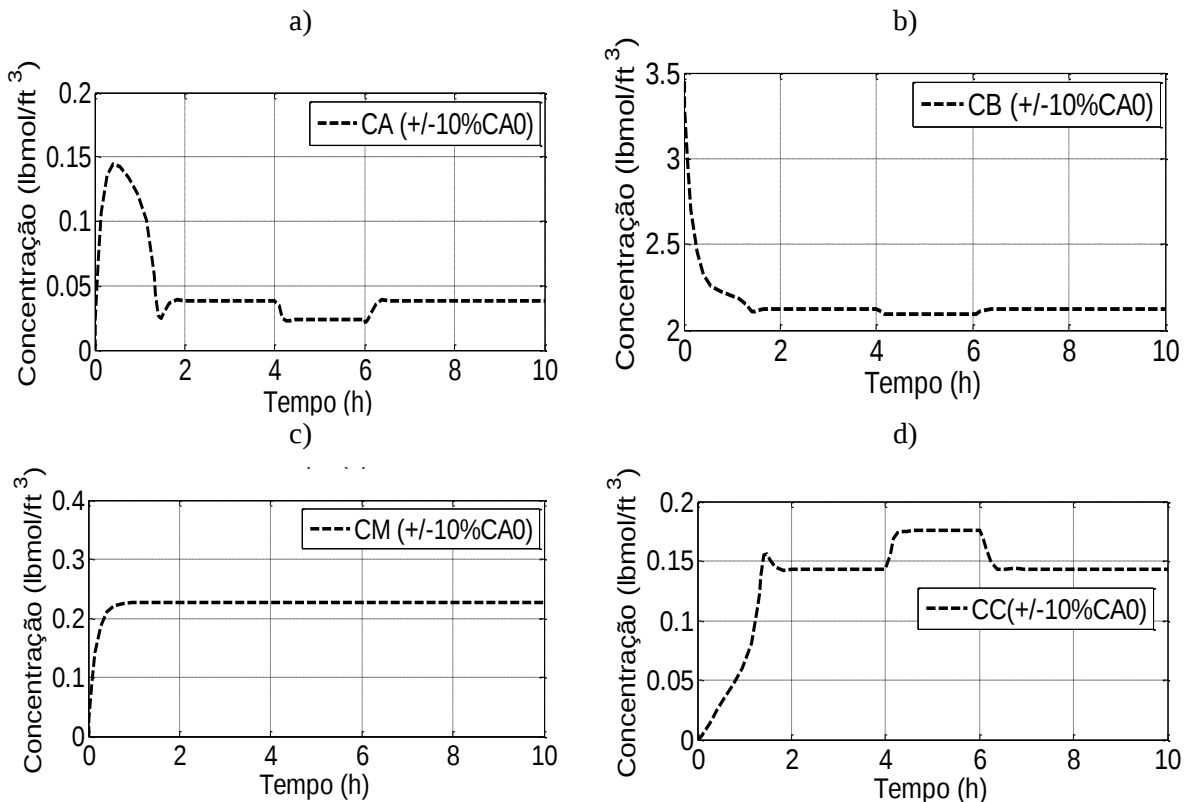


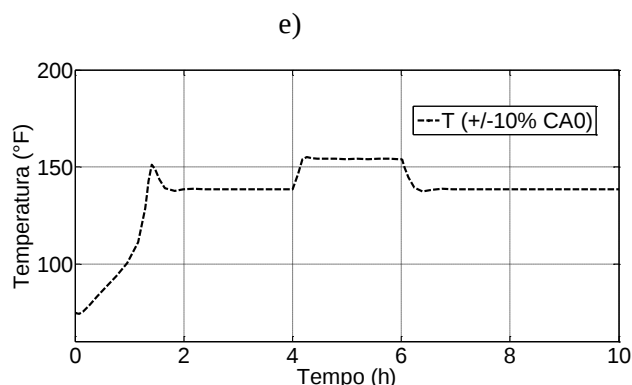
Fonte: O autor (2017).

Com base no gráfico da Figura 4.3, a conversão inicialmente diminui devido ao aumento da concentração de óxido de propileno no reator. Entretanto, quando a reação de fato começa a acontecer ocorre um aumento significativo na conversão devido o maior consumo de reagente. Como o processo atinge o regime estacionário por volta de 1,8 horas, a partir desse momento, a conversão se mantém constante.

Os gráficos das Figuras 4.4 a), b), c), d) e e), apresentam, respectivamente, o comportamento transiente das concentrações de CA, CB, CC e CM e T, quando inseridas perturbações em CA0, durante um tempo de simulação de 10 horas.

Figura 4.4 - Perturbações em CA0.





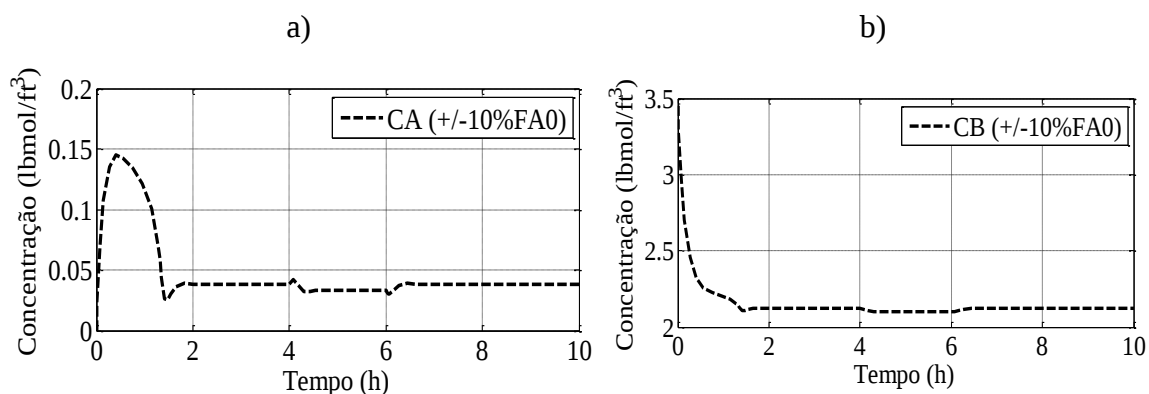
Fonte: O autor (2017).

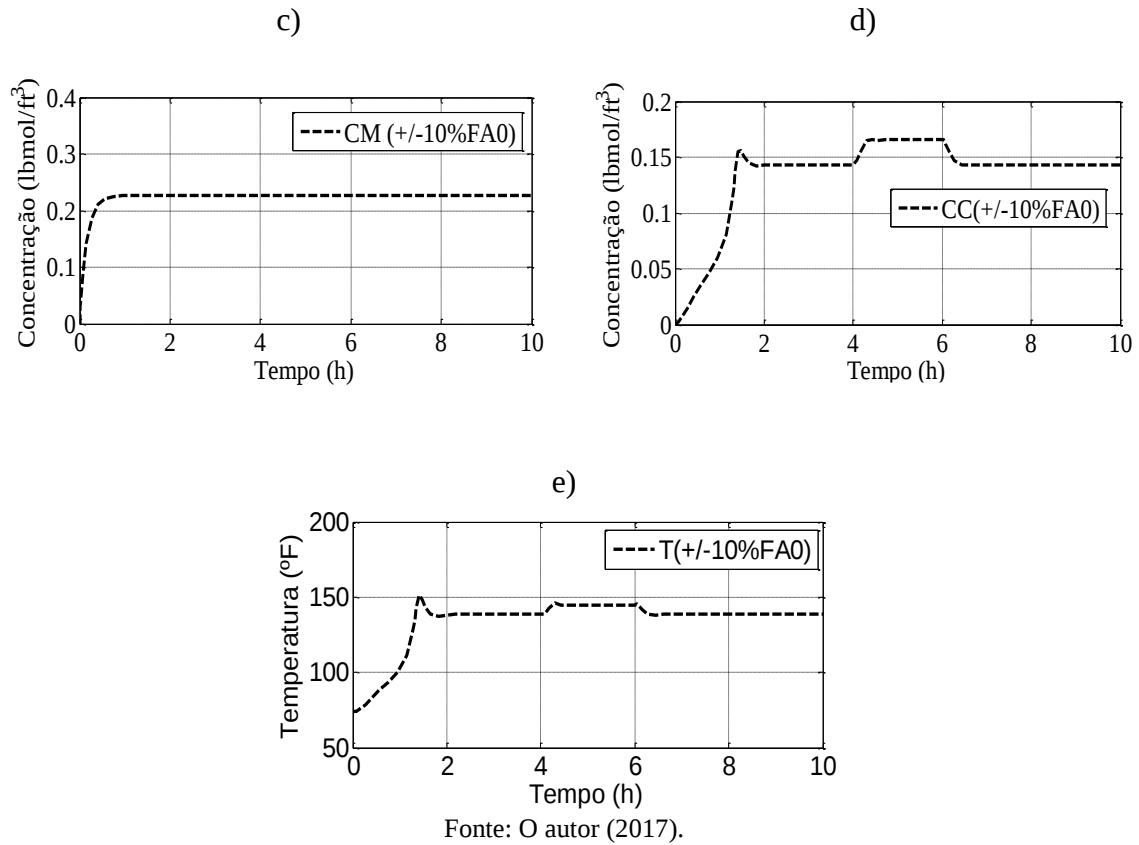
Analisando os gráficos percebe-se que as variáveis CA, CC e T foram as mais afetadas. Esse resultado era esperado uma vez que o óxido de propileno (A) é o reagente limitante, tendo, portanto, uma relação direta com a formação do produto propileno glicol (C). Considerando o fato que a reação é altamente exotérmica, influencia a temperatura do reator.

Também efetuou-se perturbações na concentração de água (CB0) na entrada do reator, sendo que essas alterações não afetaram as variáveis de estados, exceto a concentração da própria água. Como a água é o reagente em excesso, era previsto que seu aumento na entrada do processo não afetasse as demais variáveis.

Quando foram efetuadas perturbações na vazão molar do óxido de propileno (FA0), conforme as Figura 4.5 a), b), c), d) e e), percebe-se que CC apresentou maior variação (Figura 4.5 d)), seguida pela concentração CA e temperatura do reator T.

Figura 4.5 - Perturbações em FA0.

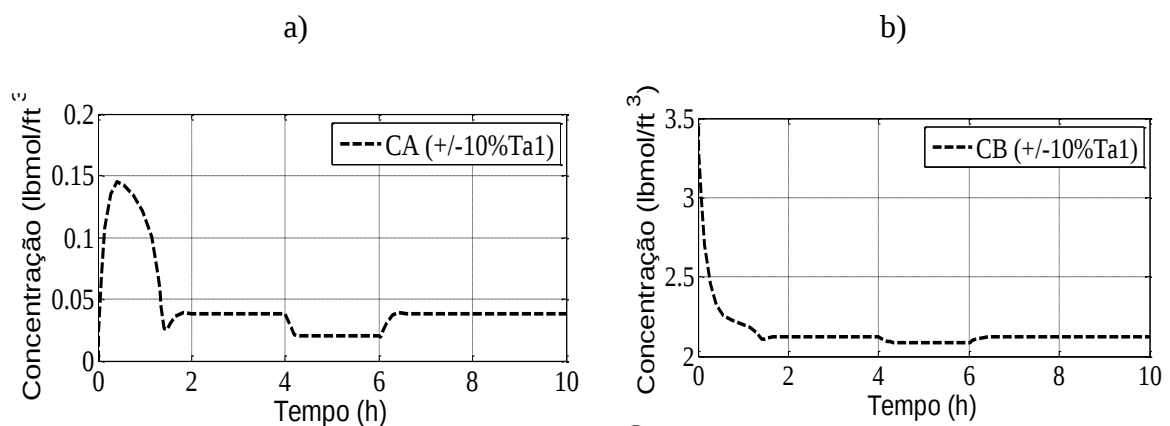


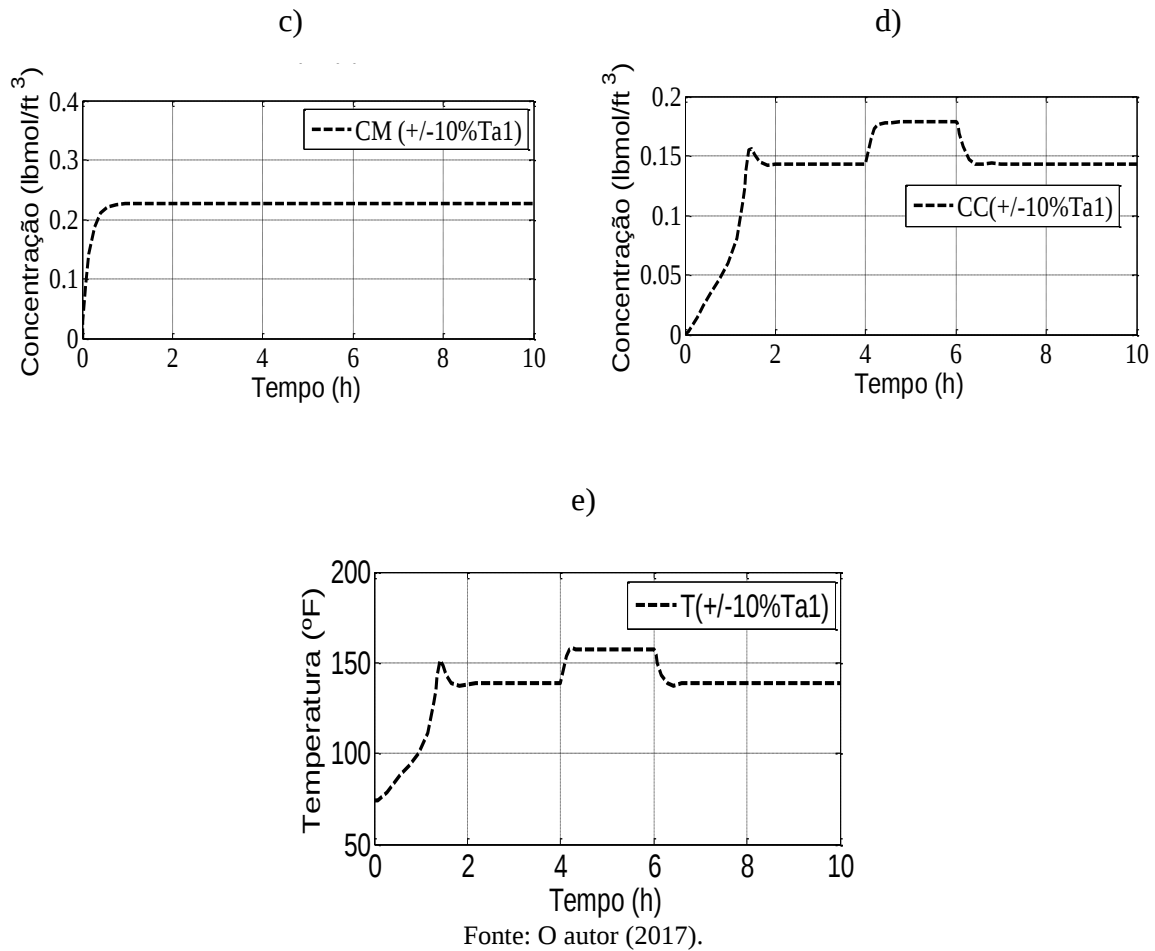


De acordo com a Figura 4.5 d) verifica-se que, em comparação às perturbações efetuadas em CA0 (Figura 4.4 d), variações em FA0 proporcionaram alterações ligeiramente menores em CC. Haja vista, o fato que a resposta transiente de CC (Figura 4.4 d)) apresentou maior sobrelevação percentual.

Alterações na temperatura de entrada do fluido refrigerante da camisa (Ta1), conforme Figura 4.6 a), b), c), d) e e), proporcionaram maiores modificações na temperatura de saída do reator (Figura 4.6 e)).

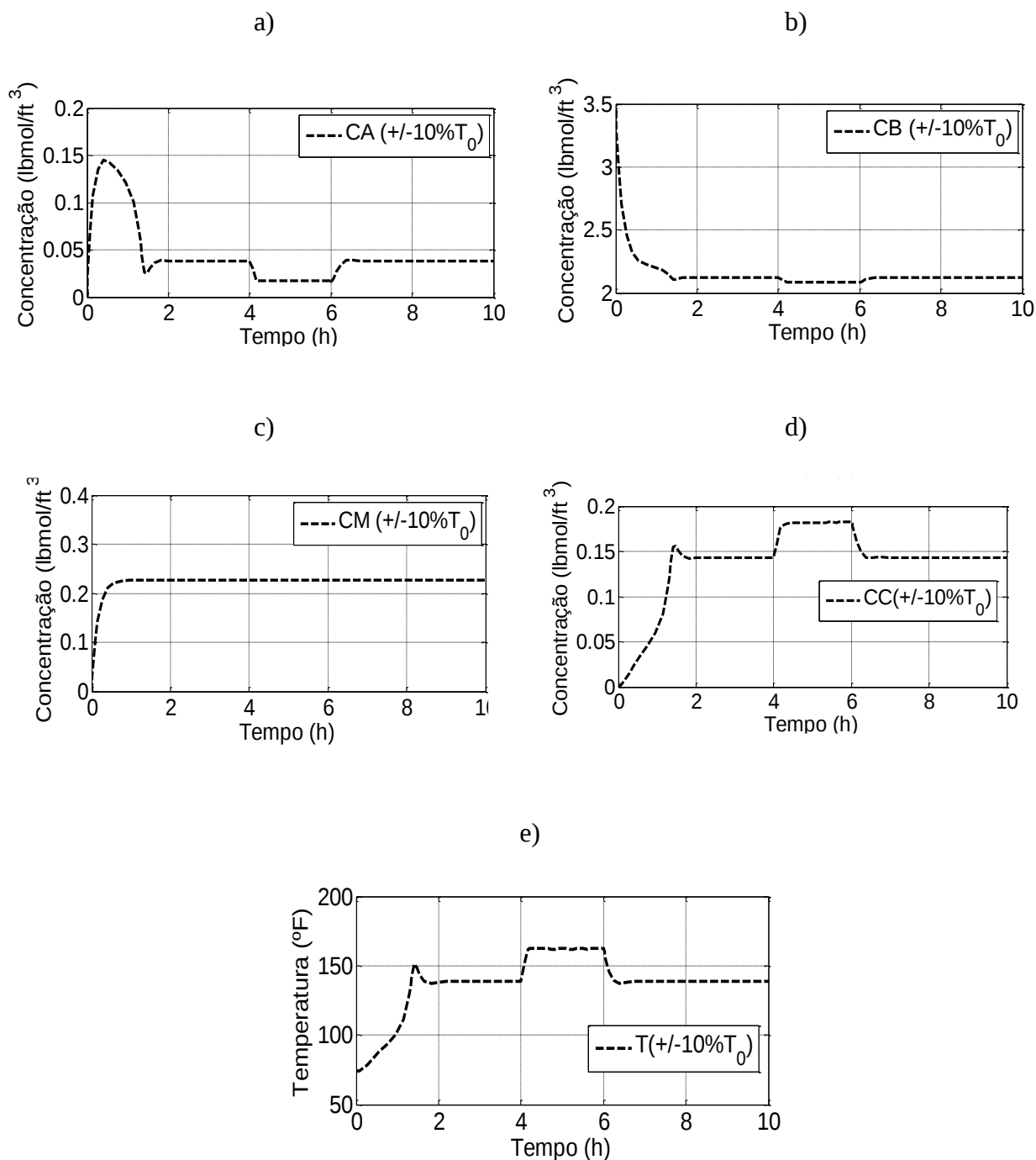
Figura 4.6 - Perturbações em Ta1.





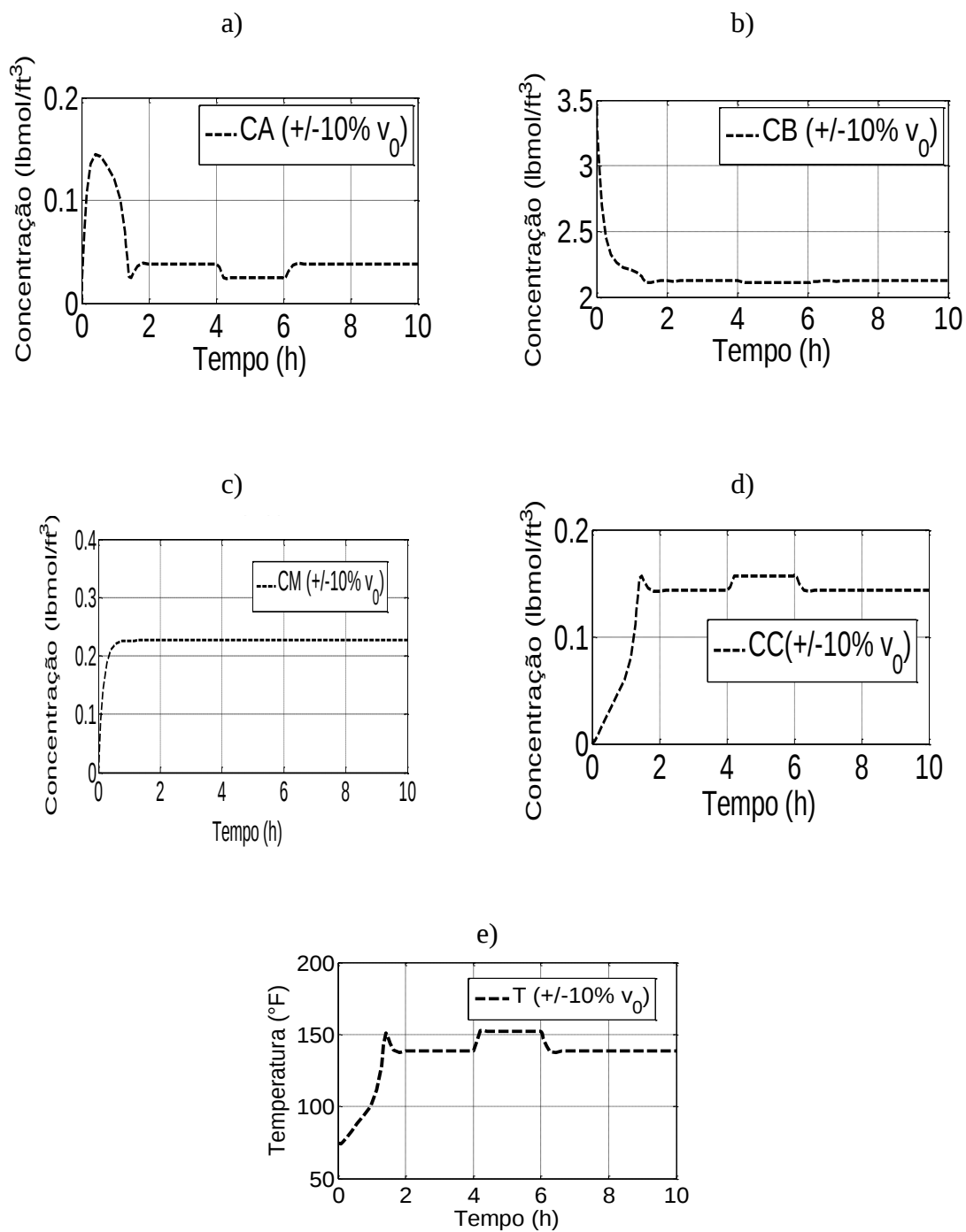
Percebe-se que o aumento na temperatura do fluido refrigerante teve como principal consequência o aumento na concentração do propileno glicol (ver Figura 4.6 d)). No entanto, esse aumento (tempo de 4h) ou redução (tempo de 6h) é não desejado na operação do processo, haja vista o fato de deslocar a reação para fora da região de equilíbrio.

Efetuada-se perturbações na temperatura de alimentação do reator (T_0), conforme Figuras 4.7 a), b), c), d) e e), os efeitos são similares aos observados quanto ao aumento de Ta_1 .

Figura 4.7 - Perturbações em T_0 .

Fonte: O autor (2017).

Quando efetuadas perturbações na vazão de alimentação (v_0), as variáveis mais afetadas são: concentração de óxido de propileno, concentração de propileno glicol e temperatura. Com o aumento de v_0 tem-se uma maior quantidade de reagente sendo adicionada no reator, assim a temperatura do reator e concentração de produto são os mais afetados, conforme a Figura 4.8 a), b), c), d) e e).

Figura 4.8 - Perturbações em v_0 .

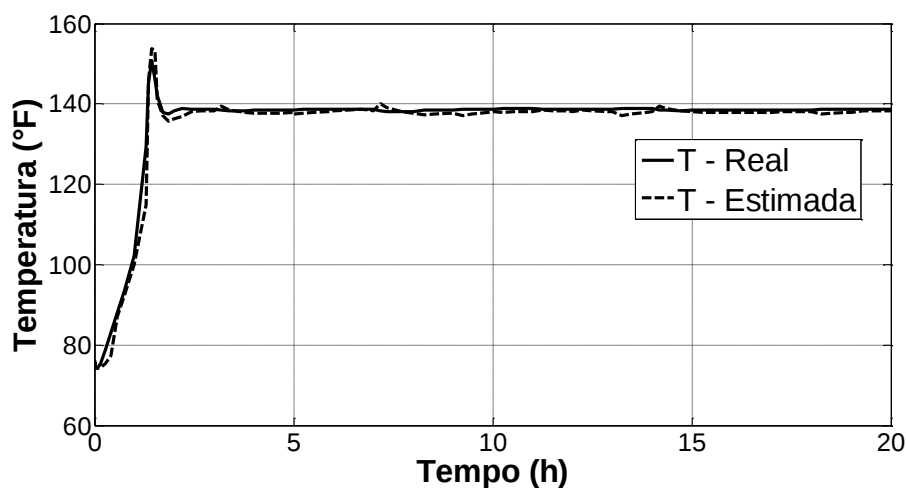
Fonte: O autor (2017).

4.3 Estimativa do filtro de Kalman

4.3.1 Resultados da inferência de temperatura no reator utilizando o FKE

A simulação do processo foi feita em ambiente *Matlab-Simulink*®. Os ruídos do processo e da medição foram considerados como ruídos gaussianos de média zero e variância 0,01 e 0,02, respectivamente. A Figura 4.9 apresenta os resultados da estimativa e filtragem do sensor virtual (FKE) para a temperatura (T_{estimada}), em comparação com o resultado da simulação em regime transiente do reator do processo do Propileno Glicol.

Figura 4.9 - Estimativa da temperatura pelo FKE.



Fonte: O autor (2017).

Verifica-se no gráfico da Figura 4.8, que o valor estimado apresenta comportamento transiente semelhante ao da temperatura real. Percebe-se que o sensor virtual acompanha a linha preta contínua que representa a temperatura real do sistema.

A quantificação do erro na estimativa da temperatura na saída do reator CSTR foi avaliada através dos critérios MSE e RMSE. Na Tabela 4.1, são apresentados os resultados referentes aos métodos de critério de erro empregados. O método RMSE apresentou melhor resultado em relação ao MSE.

Tabela 4.1 - Parâmetros do erro da estimativa.

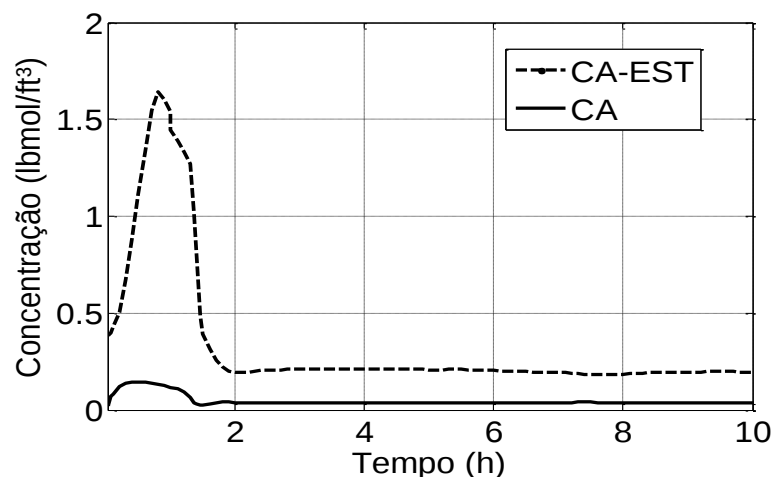
Parâmetros	Valores
MSE	6,45
RMSE	2,54

Fonte: O autor (2017).

4.3.2 Resultados da inferência de concentração utilizando o FKE

O gráfico da Figura 4.10 mostra a concentração real do óxido de propileno (reagente limitante) em comparação com a inferência do sensor virtual utilizando FKE. Como pode-se observar o valor de concentração estimado pelo FKE, embora apresentando o mesmo perfil no gráfico, apresentou certa discrepância em comparação ao valor do processo.

Figura 4.10 - Estimativa da concentração pelo FKE.



Fonte: O autor (2017).

A quantificação do erro na estimativa da concentração do óxido de propileno, assim como no caso da temperatura, foi realizada através dos critérios MSE e RMSE. Diferente da temperatura, o critério de erro que se mostrou mais satisfatório foi o RMSE. Na Tabela 4.2 são apresentados os resultados.

A discrepância entre os valores estimados e real pode estar relacionado com os parâmetros de sintonia do filtro de Kalman. Não existe, até então, um método para sintonizar

esses parâmetros, sendo normalmente aplicado o método de tentativa e erro, o qual é susceptível a erros.

Tabela 4.2 - Parâmetros do erro da estimativa.

Parâmetros	Valores
MSE	0,4608
RMSE	0,6788

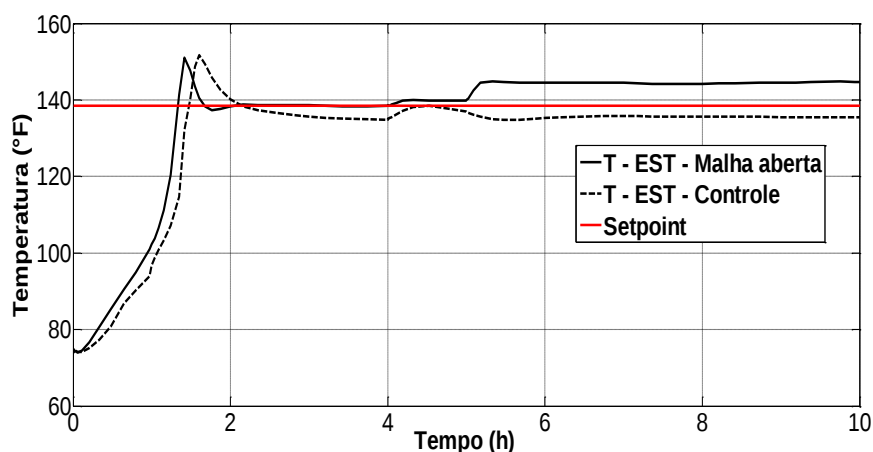
Fonte: O autor (2017).

4.4 Resultado da estratégia de controle inferencial realimentação

4.4.1 Resultados da proposta de controle inferencial para a temperatura estimada

A estratégia de controle inferencial realimentação, proposta na seção 3.1.6, sendo utilizado e sintonizado um controlador PID à malha de temperatura estimada pelo analisador virtual (FKE). No gráfico da Figura 4.11 tem-se o comportamento do processo diante de uma perturbação na temperatura de alimentação.

Figura 4.11 - Temperatura estimada controlada versus malha aberta.



Fonte: O autor (2017).

Observa-se no gráfico da Figura 4.11 que a variável controlada não estabilizou em seu *set point* quando o sistema sofreu uma mudança em T_0 , como desejado. Esse fato é justificado pela dificuldade de sintonia dos parâmetros do controlador (k_c , τ_i e τ_D), quando o mesmo está atuando em conjunto com o FKE. No entanto, quando foi inserida uma perturbação de +5% em

T_0 (no instante de tempo de 5 h) o analisador apresentou menor erro de estado estacionário (*offset*) em comparação com a condição de malha aberta.

No sentido de verificar o desempenho do controlador e a qualidade do controle inferencial empregado, foram empregados os critérios do Erro Integral Quadrático (ISE), Erro Integral Absoluto (IAE) e Erro Integral Absoluto vezes o Tempo (ITAE), cujos os resultados são apresentados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 - Critérios de integral do erro.

Parâmetros	Malha fechada	Malha aberta
IAE	0,2364	28,3
ITAE	0,436	288
ISE	0,0442	39,63

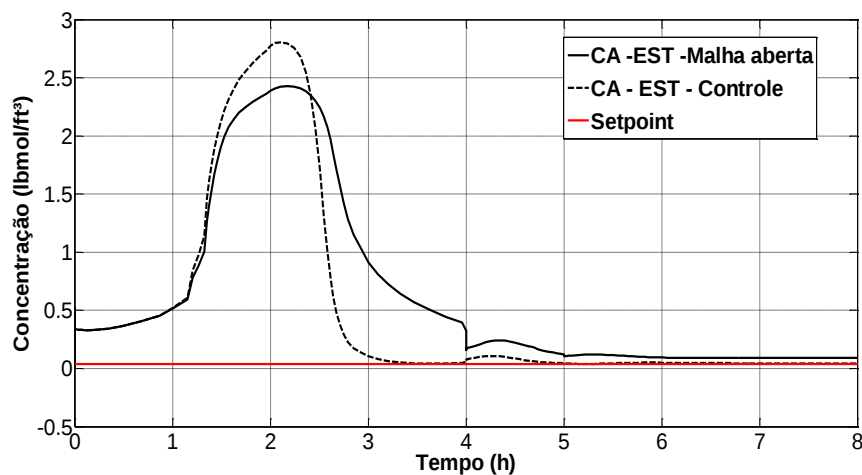
Fonte: O autor (2017).

De acordo com a Tabela 4.3, os resultados dos critérios quantitativos IAE, ISE e ITAE, foram significativamente menores para condição da atuação do controle.

4.4.2 Resultados da proposta de controle inferencial para a concentração estimada

Para a proposta de controle inferencial de concentração, também foi implementado e sintonizado um controlador PID para malha de realimentação da concentração do óxido de propileno na saída do reator. O gráfico da Figura 4.12 apresenta o comportamento transiente dessa resposta, quando inserida uma perturbação de +5% na temperatura de alimentação do reator T_0 .

Figura 4.12 - Concentração estimada controlada versus malha aberta.



Fonte: O autor (2017).

De acordo com o gráfico da Figura 4.12, a ação do controlador PID foi efetiva para minimizar a perturbação inserida no processo e não deslocando a resposta dinâmica de concentração de seu *setpoint*. Mostrando assim, que o controle inferencial utilizando sensor virtual (FKE) como elemento de medição da malha de controle foi efetivo na estimativa da variável de processo.

O desempenho do controlador e a qualidade do controle inferencial para a concentração foi empregado os mesmos critérios de erro. Os resultados são apresentados na Tabela 4.4.

Tabela 4.4 - Critérios de integral do erro.

Parâmetros	Malha fechada	Malha aberta
IAE	1,163	5,4
ITAE	2,407	10,99
ISE	0,6334	8,99

Fonte: O autor (2017).

Portanto, verifica-se que a estratégia de controle inferencial de concentração utilizando como analisador virtual o filtro de Kalman estendido (FKE) mostrou-se eficiente e satisfatória,

tanto na avaliação do erro de regime estacionário (*offset*) como também nas avaliações dos erros integrais.

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi desenvolvida uma metodologia construída em etapas, onde inicialmente foi proposta a modelagem matemática do processo, logo em seguida o processo foi simulado em regime estacionário e transiente no *software* Matlab-Simulink®, por conseguinte foi efetuada a construção do analisador virtual com a modelagem semi-empírica, Filtro de Kalman Estendido (FKE).

A solução numérica em regime estacionário e transiente apresentou resultados semelhantes aos obtidos na literatura. Os valores obtidos tanto para as equações algébricas, quanto para as equações diferenciais foram satisfatórios, evidenciando o sucesso na implementação dos métodos numéricos.

No estudo da dinâmica do processo, foi verificado a influência das entradas do processo nas concentrações da corrente de saída do reator. Assim, comprovou-se que a variável que apresentou maior influência no processo, quando variada, foi a concentração do óxido de propileno na entrada do processo (CA0).

O analisador virtual (empregando FKE) para estimativa de concentração no reator CSTR de produção de propileno glicol foi construído, tomando como variáveis de entrada: FA0, T0, Ta1, v0 e Tmed. Para essas variáveis, em uma situação prática do processo a medição física com sensores contém amplitude de ruídos, sendo assim foram inseridos ruídos brancos gaussianos para testar a qualidade na estimativa.

As principais dificuldades enfrentadas foram relacionadas a sintonia dos parâmetros do filtro de Kalman, bem como na atuação de controle em conjunto com o FKE (ajuste dos parâmetros do controlador). A estratégia de controle inferencial de temperatura e concentração foi bem sucedida, conseguindo sanar os efeitos transientes dos distúrbios.

Por fim, a metodologia desenvolvida mostrou-se capaz de utilizar analisadores virtuais como observadores de estado (FKE) na dinâmica e controle de processos químicos não lineares. Sendo a inferência avaliada através dos critérios de desempenho, erro médio quadrático (MSE) e a raiz do erro médio quadrático (RMSE), apresentando valores coerentes. O sistema de controle quando comparado com a condição malha aberta apresentou melhores resultados quando avaliado com os critérios de erros integrais (IAE, ISE e ITAE).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ASTROM, K. J. & HAGGLUND, T. (2006), **Advanced PID Control**, Instrument Society of America, Durham, NC, EUA.

BRANDÃO, W. Y. A. **Uso de sensores virtuais como observadores de estado aplicados na dinâmica e controle de processos químicos lineares e não lineares**. Trabalho final de curso (Graduação em engenharia química). Universidade Federal da Paraíba. 2016.

BUTCHER, J. C. **Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes**. Journal of the Australian Mathematical Society, v. 3, n. 02, p. 185-201, 1963.

CAMPOS, M. GOMES, M. E PEREZ, J. **Controle Avançado e Otimização na Indústria de Petróleo**. Ed. Interciência, 2013.

CHAPRA, Steven C.; CANALE, Raymond P. **Métodos numéricos para engenharia**. McGraw-Hill, 2008.

FOGLER, H. S. **Elementos de engenharia das reações químicas**. 4ª ed. Rio de Janeiro, LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A, 2009.

FORTUNA L., GRAZIANI S., XIBILIA M. G. **Soft sensors for product quality monitoring in debutanizer distillation columns**. CONTROL ENGINEERING PRACTICE, V.13(4), 499-508, 2005.

FURUSAWA, T. NISHIMURA, H. and MIYAUCHI, T. **Experimental study of a bistable continuous stirred tank reactor**. Journal of Chemical Engineering of Japan, Vol. 2, Nº 1, 1969.

GARDEN QUÍMICA. **Boletim técnico: propileno glicol**. São Paulo, 2014.

JESUS, L. F. F. S. **O filtro de Kalman como analisador virtual para o controle de qualidade em processos de polimerização**. 164 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Industrial). Universidade Federal da Bahia, Salvador. 2012.

KADLEC, P. GABRYS, B. STRANDT, S. **Data-driven Soft Sensors in the process industry**. Computers and Chemical Engineering, pages 795-814, 2009.

- KALMAN, R. E. (1960). **A new approach to linear filtering and prediction problems**. Transactions of the ASME – Journal of Basic Engineering, 82, 35–45.
- LOTUFO, F. A.; GARCIA, C. **Sensores virtuais ou soft sensors: uma introdução**. 7th Brazilian Conference on Dynamics, Control and Applications, FCT – UNESP, São Paulo. 2008.
- MORAIS JR., A. A. **Método de Newton**. Modelagem e simulação de processos químicos. Curso de engenharia química. Centro de tecnologia. Universidade Federal da Paraíba. 2017.
- MORAIS JR., A. A. **Uso de sensores virtuais (Soft Sensors) para estimativa de impurezas em colunas de destilação de alta pureza**. 148 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande. 2015.
- PETER, S. M. **Stochastic Models, Estimation, and Control**, volume 2. Academic press, 1979.
- SEBORG, D. E. et al. **Process dynamics and control**. John Wiley & Sons, 2010.
- SILVA, L. F. S. **O Filtro de Kalman como analisador virtual para o controle de qualidade em processos de polimerização**. 164 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Industrial). Universidade Federal da Bahia, Salvador. 2012.
- SMITH, C. A. E CORRIPIO, A. **Princípios e prática de controle automático de processo**. 3ª Edição, Editora Gen e LTC, 2008.
- VALLE, K. N. F. **Métodos Numéricos de Euler e Runge-Kutta**. Monografia (Especialização em educação matemática). Universidade Federal de Minas Gerais. Pós-graduação em matemática. Belo Horizonte. 2012.
- WIENER, N. **Extrapolation, interpolation, and smoothing of stationary time series**. Cambridge, MA: MIT press, 1949.

ANEXO A

Dedução Matemática do Filtro de Kalman

O filtro de Kalman, o sistema dinâmico deve ser representado em espaço de estados, de acordo com a Equação 2.29:

$$\begin{cases} \hat{x}_k = A\hat{x}_{k-1} + Bu_{k-1} \\ \hat{y}_k = C\hat{x}_k + Du_k \end{cases} \quad (A.1)$$

Onde $\hat{x}_k$ e $\hat{y}_k$ são grandezas estimadas, A é matriz de estados do sistema, B é matriz de entradas, C é matriz de saídas e D é a matriz de transmissão direta.

O erro das estimativas é dado conforme a Equação A.2.

$$\begin{cases} e_{xk} = x_k - \hat{x}_k \\ e_{yk} = y_k - \hat{y}_k \end{cases} \quad (A.2)$$

Substituindo a Equação A.2 na Equação A.1, obtém-se o modelo linear estocástico do processo:

$$\begin{cases} x_k = A\hat{x}_{k-1} + Bu_{k-1} + e_{xk} \\ y_k = C\hat{x}_k + Bu_k + e_{yk} \end{cases} \quad (A.3)$$

Como as variáveis de saída podem ser medidas, a incerteza de medição e_{yk} pode ser determinada. A incerteza de medição inicial e_{y0} das variáveis de saída é dada por uma função de probabilidade normal e média zero:

$$P(e_{y0}) \sim N(0, R)$$

Associado ao ruído de medição é definida a matriz R_k referente as incertezas de medidas das variáveis de saída, conforme a Equação A.4.

$$\begin{aligned} R_k &= E \left[(e_{yk} - \hat{e}_{yk})(e_{yk} - \hat{e}_{yk})^T \right] \\ R_k &= E \left[(e_{yk} - 0)(e_{yk} - 0)^T \right] = E \left[(e_{yk})(e_{yk})^T \right] = cov(e_{yk}) \\ R_k &= E \left[(e_{yk})(e_{yk})^T \right] = E[(y_k - \hat{y}_k)(y_k - \hat{y}_k)^T] \end{aligned} \quad (A.4)$$

No caso das variáveis de estado, não se conhece o valor da incerteza do estado e_{xk} , uma vez que essas variáveis não são medidas. A incerteza inicial dos estados e_{x0} , é dada por uma função de probabilidade normal e média zero:

$$P(e_{yo}) \sim N(0, Q)$$

A matriz de covariância dos estados, ou seja, da incerteza das estimativas dos estados não medidos é dada pela Equação A.5.

$$P_k = E[(e_{xk} - \hat{e}_{xk})(e_{xk} - \hat{e}_{xk})^T]$$

$$P_k = E[(e_{xk} - 0)(e_{xk} - 0)^T] = E[(e_{xk})(e_{xk})^T] = cov(e_{xk})$$

$$P_k = cov(e_{xk}) = Q_k = E[(x_k - \hat{x}_k)(x_k - \hat{x}_k)^T] \quad (A.5)$$

Não se conhece a incerteza do estado (e_{xk}), porém pode-se relaciona-se ela com a incerteza da saída (e_{yk}), de acordo com a Equação A.6.

$$e_{xk} = K_k e_{yk} \quad (A.6)$$

Onde K_k é o ganho de Kalman.

Substituindo a Equação A.1 na Equação (A.6), obtém-se as Equações A.7 e A.8.

$$x_k - \hat{x}_k = K_k(y_k - \hat{y}_k) \quad (A.7)$$

$$x_k = \hat{x}_k + K_k(y_k - \hat{y}_k) \quad (A.8)$$

Substituindo a Equação A.1 na Equação A.7, tem-se a Equação A.9.

$$x_k = \hat{x}_k + K_k[y_k - (C\hat{x}_k + Du_k)] \quad (A.9)$$

Sabe-se que x_k não é medido e, portanto, só é possível inferir seu valor a partir de informações do instante k . Assim tem-se que:

$$x_k \Rightarrow \hat{x}_{k|k} \quad (A.10)$$

Já o valor de $\hat{x}_k$ é calculado a partir de informações do instante $k-1$. Logo:

$$\hat{x}_k \Rightarrow \hat{x}_{k|k-1} \quad (A.11)$$

Substituindo as Equações A.10 e A.11 na Equação A.9, obtém-se a Equação A.12.

$$\hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + K_k[y_k - (C\hat{x}_{k|k-1} + Du_k)] \quad (A.12)$$

A incógnita da Equação A.12 é K_k , isto é, o ganho de Kalman. O ganho de Kalman tem a função de minimizar as incertezas encontrados entre o valor das variáveis de saída medidas no sistema e o valor das variáveis de saída previstas pelo modelo representada pela matriz P_k , ou seja, o Kalman busca minimizar a incerteza da estimativa, conforme a Equação A.13.

$$\min tr_{k|k} (cov(e_{xk})) = \min tr_{k|k} (P_{k|k}) \quad (A.13)$$

Define-se que:

$$P_{k|k} = cov(x_k - \hat{x}_{k|k}) \quad (A.14)$$

Substituindo a Equação A.13 na Equação A.14, tem-se a Equação A.15.

$$P_{k|k} = cov\left(x_k - \left[\hat{x}_{k|k-1} + K_k[y_k - (C\hat{x}_{k|k-1} + Du_k)]\right]\right) \quad (A.15)$$

Substituindo a Equação A.3 na Equação A.15, tem-se a Equação A.16.

$$P_{k|k} = cov\left(x_k - \left[\hat{x}_{k|k-1} + K_k[Cx_k + Du_k + e_{yk} - (C\hat{x}_{k|k-1} + Du_k)]\right]\right) \quad (A.16)$$

Fazendo uma simplificação na Equação A.16 obtemos:

$$\begin{aligned} P_{k|k} &= cov\left(x_k - \left[\hat{x}_{k|k-1} + K_k[Cx_k + e_{yk} - C\hat{x}_{k|k-1}]\right]\right) \\ P_{k|k} &= cov(x_k - \hat{x}_{k|k-1} - K_kCx_k - K_ke_{yk} + K_kC\hat{x}_{k|k-1}) \\ P_{k|k} &= cov(x_k - \hat{x}_{k|k-1} - K_kC(x_k - \hat{x}_{k|k-1}) - K_ke_{yk}) \\ P_{k|k} &= cov((I - K_kC)(x_k - \hat{x}_{k|k-1}) - K_ke_{yk}) \\ P_{k|k} &= cov((I - K_kC)(x_k - \hat{x}_{k|k-1}) - K_ke_{yk}) \end{aligned} \quad (A.17)$$

Rearranjando a Equação A.17, obtém-se a Equação A.18.

$$P_{k|k} = cov((I - K_kC)(x_k - \hat{x}_{k|k-1})) + cov(-K_ke_{yk}) \quad (A.18)$$

Com base na definição de covariância e a partir da Equação A.18:

$$P_{k|k} = E[\{(I - K_kC)(x_k - \hat{x}_{k|k-1})\}\{(I - K_kC)(x_k - \hat{x}_{k|k-1})^T\}] + E[\{-K_ke_{yk}\}\{-K_ke_{yk}^T\}]$$

Trabalhando com a seguinte propriedade de matrizes: $(AB)^T = B^T A^T$

$$P_{k|k} = E[(I - K_k C)\{(x_k - \hat{x}_{k|k-1})(x_k - \hat{x}_{k|k-1})^T\}(I - K_k C)^T] \\ + E[-IK_k(e_{yk})(e_{yk})^T K_k^T (-I^T)]$$

Sabendo que $E[\text{const.}X] = \text{const.}E[X]$ e que $E[X.\text{const}] = E[X].\text{const}$, tem-se a Equação A.19.

$$P_{k|k} = (I - K_k C)E[(x_k - \hat{x}_{k|k-1})(x_k - \hat{x}_{k|k-1})^T](I - K_k C)^T \\ + K_k E[(e_{yk})(e_{yk})^T] K_k^T \quad (A.19)$$

Definindo a Equação A.20 como sendo,

$$P_{k|k} = E[(x_k - \hat{x}_{k|k-1})(x_k - \hat{x}_{k|k-1})^T] \quad (A.20)$$

Substituindo a Equação A.20 na Equação A.19, sendo $R = E[(e_{yk})(e_{yk})^T]$ chega-se na Equação A.21.

$$P_{k|k} = (I - K_k C)P_{k|k-1}(I - K_k C)^T + K_k R K_k^T \quad (A.21)$$

A Equação A.21 representa atualização da covariância e é conhecida como a fórmula de Joseph. Para o valor ótimo de K_k , essa equação pode ser simplificada. Substituindo a Equação A.21 na Equação A.13, temos:

$$\min \text{tr} K_k (P_{k|k}) = \min \text{tr} K_k \{(I - K_k C)P_{k|k-1}(I - K_k C)^T\} \quad (A.22)$$

Quando covariância dos estados estimados não varia com o ganho de Kalman (K_k), então o processo encontra-se otimizado, isto é:

$$\frac{\partial \text{tr}\{P_{k|k}\}}{\partial K_k} = 0 \quad (A.23)$$

Essa derivada pode ser dada por:

$$\frac{\partial tr\{P_{k|k}\}}{\partial K_k} = \begin{bmatrix} \frac{\partial tr\{P_{k|k}\}}{\partial K_k^{C1}} \\ \frac{\partial tr\{P_{k|k}\}}{\partial K_k^{C2}} \\ \vdots \\ \frac{\partial tr\{P_{k|k}\}}{\partial K_k^{Cn}} \end{bmatrix}^T \quad (A.24)$$

Sendo ∂K_k^{Cn} a n-ésima coluna da matriz K_k . Substituindo a Equação A.21 na Equação A.23:

$$\frac{\partial tr\{P_{k|k}\}}{\partial K_k} = \frac{\partial tr\{(I - K_k C)P_{k|k-1}(I - K_k C)^T + K_k R K_k^T\}}{\partial K_k}$$

Temos que:

$$\begin{aligned} (I - K_k C)P_{k|k-1}(I - K_k C)^T &= (P_{k|k-1} - K_k C P_{k|k-1})(I - K_k C)^T = \\ &= P_{k|k-1} - P_{k|k-1}(K_k C)^T - K_k C P_{k|k-1} + (K_k C P_{k|k-1})(K_k C)^T = \\ &= P_{k|k-1} - P_{k|k-1} C^T K_k^T - K_k C P_{k|k-1} + K_k C P_{k|k-1} C^T K_k^T \end{aligned}$$

Assim:

$$\frac{\partial tr\{P_{k|k}\}}{\partial K_k} = \frac{\partial tr\{P_{k|k-1} - P_{k|k-1} C^T K_k^T - K_k C P_{k|k-1} + K_k C P_{k|k-1} C^T K_k^T + K_k R K_k^T\}}{\partial K_k} =$$

0

Reorganizando, obtém-se a Equação A.25.

$$\begin{aligned} \frac{\partial tr\{P_{k|k}\}}{\partial K_k} &= \frac{\partial tr\{P_{k|k-1}\}}{\partial K_k} - \frac{\partial tr\{P_{k|k-1} C^T K_k^T\}}{\partial K_k} - \frac{\partial tr\{K_k C P_{k|k-1}\}}{\partial K_k} \\ &\quad + \frac{\partial tr\{K_k C P_{k|k-1} C^T K_k^T\}}{\partial K_k} + \frac{\partial tr\{K_k R K_k^T\}}{\partial K_k} \end{aligned}$$

Sendo que $\frac{\partial tr\{P_{k|k-1}\}}{\partial K_k} = 0$.

Resolvendo cada termo:

$$\frac{\partial \text{tr}\{P_{k|k-1} C^T K_k^T\}}{\partial K_k} = \frac{\partial \text{tr}\{K_k [(P_{k|k-1} C^T)^T]^T\}}{\partial K_k} = \frac{\partial \text{tr}\{[K_k C P_{k|k-1}]^T\}}{\partial K_k} = \frac{\partial \text{tr}\{K_k C P_{k|k-1}\}}{\partial K_k}$$

$$\frac{\partial \text{tr}\{K_k C P_{k|k-1}\}}{\partial K_k} = (C P_{k|k-1})^T = P_{k|k-1}^T C^T = P_{k|k-1} C^T$$

$$\frac{\partial \text{tr}\{K_k C_k P_{k|k-1} C^T K_k^T\}}{\partial K_k} = K_k C P_{k|k-1} C^T + K_k (C_k P_{k|k-1} C^T) = 2K_k C P_{k|k-1} C^T$$

$$\frac{\partial \text{tr}\{K_k R K_k^T\}}{\partial K_k} = K_k R + (R K_k^T) = K_k R + K_k R^T = K_k (R_k + R_k^T) = 2K_k R$$

Substituindo cada termo na Equação A.23, obtém-se a Equação A.26.

$$\frac{\partial \text{tr}\{P_{k|k}\}}{\partial K_k} = 0 - P_{k|k-1} C^T - P_{k|k-1} C^T + 2K_k C P_{k|k-1} C^T + 2K_k R = 0$$

$$2K_k C P_{k|k-1} C^T + 2K_k R - 2P_{k|k-1} C^T = 0$$

$$K_k C P_{k|k-1} C^T + K_k R - P_{k|k-1} C^T$$

$$K_k (C P_{k|k-1} C^T + R) = P_{k|k-1} C^T$$

$$K_k = P_{k|k-1} C^T (C P_{k|k-1} C^T + R)^{-1} \quad (\text{A. 26})$$

A Equação A.26 representa o *ganho ótimo de Kalman*. No sentido de simplificar a equação de atualização da covariância, a Equação 2.48, define-se $S_k = C P_{k|k-1} C^T + R$ e tem-se:

$$K_k = P_{k|k-1} C^T S_k^{-1}$$

Fazendo a multiplicação dos dois lados da equação acima por $S_k K_k^T$:

$$K_k S_k K_k^T = P_{k|k-1} C^T K_k^T$$

Efetando a expansão da Equação A.21 e substituindo o valor de S_k , encontra-se a Equação A.27.

$$P_{k|k} = P_{k|k-1} - K_k C P_{k|k-1} - P_{k|k-1} C^T K_k^T + K_k S_k K_k^T$$

$$P_{k|k} = P_{k|k-1} - K_k C P_{k|k-1} - P_{k|k-1} C^T K_k^T + P_{k|k-1} C^T K_k^T$$

$$P_{k|k} = P_{k|k-1} - K_k C P_{k|k-1}$$

$$P_{k|k} = (I - K_k C) P_{k|k-1} \quad (\text{A. 27})$$

Definindo o valor de $P_{k|k-1}$, que será utilizado na etapa de predição. Encontra-se a Equação A.28.

$$P_{k|k-1} = E[(x_{k|k-1} - \hat{x}_{k|k-1})(x_{k|k-1} - \hat{x}_{k|k-1})^T]$$

$$P_{k|k-1} = E[(Ax_{k-1} + Bu_{k-1} + e_{xk} - (A\hat{x}_{k-1} + Bu_{k-1}))(A\hat{x}_{k-1} + Bu_{k-1} + e_{xk} - (A\hat{x}_{k-1} + Bu_{k-1}))^T]$$

$$P_{k|k-1} = E[(Ax_{k-1} - \hat{x}_{k-1}) + e_{xk})(A(x_{k-1} - \hat{x}_{k-1}) + e_{xk})^T] \quad (\text{A. 28})$$

Desenvolvendo a Equação A.29, obtém-se a Equação A.30:

$$P_{k|k-1} = AP_{k-1|k-1}A^T + Q_k \quad (30)$$