

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

JOSÉ CARLOS DINIZ FILHO

CONTROLE PREDITIVO INFERENCIAL ADAPTATIVO NEURAL
APLICADO EM UM REATOR QUÍMICO NÃO ISOTÉRMICO

JOÃO PESSOA - PB

2023

JOSÉ CARLOS DINIZ FILHO

**CONTROLE PREDITIVO INFERENCIAL ADAPTATIVO NEURAL
APLICADO EM UM REATOR QUÍMICO NÃO ISOTÉRMICO**

Trabalho de Final de Curso apresentado ao Centro de Tecnologia, da Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Arioston Araújo de
Morais Júnior

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

F481c Filho, Jose Carlos Diniz.

CONTROLE PREDITIVO INFERENCIAL ADAPTATIVO NEURAL
APLICADO EM UM REATOR QUÍMICO NÃO ISOTÉRMICO / Jose
Carlos Diniz Filho. - João Pessoa, 2023.
68 f. : il.

Orientação: Arioston Araujo de Moraes Junior.
TCC (Graduação) - UFPB/CT.

1. MPC, soft sensors, redes neurais. I. de Moraes
Junior, Arioston Araujo. II. Título.

UFPB/CT/BSCT

CDU 66.01(043.2)

JOSÉ CARLOS DINIZ FILHO

**CONTROLE PREDITIVO INFERENCIAL ADAPTATIVO NEURAL
APLICADO EM UM REATOR QUÍMICO NÃO ISOTÉRMICO**

Trabalho de Final de Curso apresentado
ao Centro de Tecnologia, da
Universidade Federal da Paraíba, como
requisito parcial para a obtenção do título
de Bacharel em Engenharia Química.

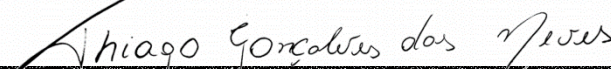
Aprovado em 27 de outubro de 2023.

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior

(Orientador - UFPB)



Prof. Dr. Thiago Gonçalves das Neves

(Avaliador Externo/ IFRN)



Prof. Dr. Leopoldo Oswaldo Alcazar Rojas

(Avaliador - UFPB)



Eng. Químico Wanderson Felipe Araújo dos Passos

(Avaliador – UFPB)

AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar minha sincera gratidão a todas as pessoas que desempenharam um papel fundamental na conclusão deste trabalho de conclusão de curso. Este é um momento especial e repleto de emoção, e estou profundamente agradecido por todo o apoio que recebi ao longo desta jornada. Primeiramente, gostaria de agradecer à minha família. Seu amor incondicional, encorajamento constante e apoio foram pilares fundamentais para que eu chegasse até aqui, minha mãe, Maria do Socorro Gomes da Silva, meu irmão, Jefferson Diniz Santos, minha tia, Oziele Gomes e minha namorada, Clara Lucia da Silva Rodrigues. Sem vocês, essa conquista não teria sido possível. Aos meus amigos, obrigado por compreenderem as minhas ausências, ouvirem as minhas preocupações e me incentivarem quando mais precisei. Sua amizade e apoio são tesouros que valorizo profundamente, obrigado por toda ajuda, todo companheirismo e amizade, em especial: Jhonatas, Danilo, Beatriz, Paloma, Paulo, Bione, Joice, Eduarda, Isis, Layane e Humberto, que foram os mais próximos durante essa caminhada. Aos meus professores e orientadores, minha gratidão é imensa. Seu conhecimento, orientação e feedback crítico moldaram este trabalho e meu crescimento acadêmico, em especial ao Prof. Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior. Por fim, quero expressar meu agradecimento a todos que de alguma forma contribuíram, mesmo que de maneira indireta, para o esse TCC. Este é um marco em minha jornada acadêmica e pessoal, e cada um de vocês teve um papel importante nessa realização. Este TCC representa não apenas o meu esforço, mas a colaboração e apoio de uma comunidade incrível. Obrigado por fazerem parte desta conquista. Estou muito grato por tudo.

“Não espere o futuro mudar tua vida, porque o futuro é a consequência do presente.”

Racionais Mc's

RESUMO

Os processos químicos industriais são essenciais na produção de diversos produtos e têm um impacto direto em nossa vida diária. A eficiência e segurança desses processos são fundamentais para a economia global, a saúde humana e o meio ambiente. Estratégias de controle desempenham um papel central ao otimizar o uso de recursos, minimizar resíduos e maximizar a qualidade do produto. No entanto, a complexidade aumenta devido à dificuldade de medir algumas variáveis críticas com precisão em tempo real. Nesse cenário, os sensores virtuais podem ser úteis como modelos de referência, controle inferencial e estimativa de variáveis de difícil medição, usando modelos matemáticos e dados disponíveis para calcular essas informações cruciais. Neste trabalho, foram desenvolvidas duas estratégias de controle para um reator CSTR não isotérmico que produz propilenoglicol. O controle de modelo preditivo (MPC) foi aplicado em sistemas complexos e não lineares, substituindo estratégias de controle convencionais. Uma Rede Neural Artificial (RNA) do tipo MLP foi usada como sensor virtual para estimar a concentração de propilenoglicol. O sensor virtual neural foi treinado, validado e testado, com resultados notáveis, mesmo sob condições de distúrbios e mudanças do ponto de operação (*setpoint*). A análise de regressão mostrou um ajuste sólido do modelo, com alta precisão. Além disso, uma abordagem heurística foi usada para sintonizar os parâmetros dos controladores preditivos. O Controlador Adaptativo por matriz dinâmica com programação quadrática (AQDMC), apresentou melhor desempenho, com menor overshoot e tempo de estabilização, destacando sua superioridade. Isso demonstra a eficácia do sensor virtual na estimativa de concentração e a vantagem do controlador AQDMC, especialmente diante de perturbações no processo. O estudo contribui para a aplicação de RNAs na otimização de processos químicos, enfatizando a importância do sensor virtual e do controle eficaz para alcançar eficiência e precisão na indústria.

Palavras-chave: MPC, soft sensors, redes neurais.

ABSTRACT

Industrial chemical processes are essential for the production of various products and have a direct impact on our daily lives. The efficiency and safety of these processes are crucial for the global economy, human health, and the environment. Control strategies play a central role in optimizing resource utilization, minimizing waste, and maximizing product quality. However, complexity increases due to the challenge of accurately measuring some critical variables in real-time. In this scenario, virtual sensors can be valuable as reference models, inferential control, and estimators of hard-to-measure variables, utilizing mathematical models and available data to compute these vital pieces of information. In this study, two control strategies were developed for a non-isothermal CSTR (Continuous Stirred-Tank Reactor) that produces propylene glycol. Model Predictive Control (MPC) was applied to complex and nonlinear systems, replacing conventional control strategies. A Multilayer Perceptron Artificial Neural Network (MLP-ANN) served as a virtual sensor to estimate the concentration of propylene glycol. The neural virtual sensor was trained, validated, and tested, producing remarkable results even under disturbance and setpoint changes. Regression analysis demonstrated a robust model fit with high accuracy. Additionally, a heuristic approach was employed to fine-tune the parameters of the predictive controllers. The Adaptive Quadratic Dynamic Matrix Control (AQDMC) controller exhibited superior performance, with reduced overshoot and stabilization time, underscoring its superiority. This showcases the effectiveness of the virtual sensor in concentration estimation and the advantage of the AQDMC controller, particularly in the presence of process disturbances. The study contributes to the application of Artificial Neural Networks (ANNs) in chemical process optimization, emphasizing the importance of virtual sensors and effective control in achieving efficiency and precision in the industry.

Keywords: MPC, soft sensors, neural networks.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
2. OBJETIVOS	3
2.2 OBJETIVO GERAL	3
2.3 OBJETIVOS ESPECIFICOS	3
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	4
3.1 SENSOR VIRTUAL	4
3.1.1 REDES NEURAIS	4
3.2. CONTROLE PREDITIVO BASEADO NO MODELO	11
3.2.1. Controle por matriz dinâmica.....	13
3.2.1.1. DMC SISO e MIMO	13
3.2.1.2. QDMC	25
4. METODOLOGIA	26
4.1. ESTUDO DE CASO – REATOR PRODUTIVO DE PROPILENOGLICO.....	27
4.1.1. Modelagem do processo descrito por (Brandão, 2019)	27
4.1.1.1 Cinética de reação	28
4.1.1.2 Balanços matérias.....	28
4.1.1.3 Balanços energéticos	29
4.1.1.4 Modelo de espaço de estados	33
4.2 ESTRATEGIAS DE CONTROLE	36
4.2.1 IMPLEMENTAÇÃO DE ESTRATÉGIAS DE CONTROLE INFERENCIAL	37
4.2.2 Controle QDMC com modelo linear estático	37
4.2.3 Controle AQDMC inferencial com modelo de predição linear por Linearização Sucessiva	39
4.2.3.1 Função custo de otimização	41
4.2.3.2. Sintonia dos Controladores	41
4.3 DESENVOLVIMENTO DOS SENSORES VIRTUAIS.....	42
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES	44
5.1. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	44
5.2. SENSOR VIRTUAL PARA O CONTROLE INFERENCIAL	45
5.2.1. Avaliação de Desempenho e Modelos Finais para Inferência	45
5.2.2. Análise Gráfica do Sensor Virtual da CC	46
5.3. ESTRATÉGIA DE CONTROLE PREDITIVO.....	49
5.3.1. Sintonia.....	49
5.3.2. Comparação entre as estratégias de controle propostas.....	49
6. CONCLUSÕES	53

7. REFERÊNCIAS	54
-----------------------------	-----------

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 : Nós na rede neural.....	5
Figura 2 : Esquema geral MLP.....	9
Figura 3 : Função de ativação.....	10
Figura 4 : Figura 4: Princípio de funcionamento de um preditivo baseado em modelo com horizontes N_1 , N_2 , N_u	11
Figura 5 : Fluxograma da metodologia abordada.....	26
Figura 6 : Esquematização do CSTR para síntese de propilenoglicol.....	27
Figura 7 : Esquematização da aplicação de um controlador LMPC inferencial.....	37
Figura 8 : Esquematização da aplicação de um controlador LMPC inferencial por Linearização Sucessiva.....	38
Figura 9 : Fluxograma do processo de Linearização sucessiva.....	39
Figura 10 : Estrutura da rede MLP (MATLAB R2020a®).....	42
Figura 11 : Análise sensibilidade.....	43
Figura 12 : 9 melhores RNA (MQE), Etapa Treinamento, validação e Teste das RNA para a saída CC.....	45
Figura 13 : Dados de Treinamento, validação e reais do modelo: Sensor virtual neural do CC fornecida pelo simulador.....	46
Figura 14 : Dispersões dos dados estimados pelos SVN: regressão dos dados para CC.....	47
Figura 15 : Erro Médio Quadrático do sensor virtual de CC.....	47
Figura 16 : Resposta dos controles a perturbações em T_0	49
Figura 17 : Resposta dos controles a perturbações em T_{a1}	50
Figura 18 : Resposta dos controles a perturbações em F_{B0}	50
Figura 19 : Resposta dos controles a perturbações no setpoint.....	51

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros e dados de projeto utilizados durante as simulações.....	35
Tabela 2 – Análise topológica dos sensores virtuais.....	42
Tabela 3 – Melhores RNA do tipo MLP (Levenberg-Marquardt) para inferência da Concentração de CC.....	44
Tabela 4 - Parâmetros de sintonia dos controladores utilizados.....	48
Tabela 5 – Critérios de erro integrado para os controladores.....	51

1. INTRODUÇÃO

Os processos químicos industriais desempenham um papel crucial na fabricação de uma ampla gama de produtos que têm um impacto direto e significativo em nossa vida cotidiana, abrangendo desde alimentos e produtos farmacêuticos até combustíveis e materiais de construção. A eficiência e a segurança desses processos são de importância vital, não apenas para a economia global, mas também para a proteção da saúde humana e a preservação do meio ambiente. Nesse contexto, as estratégias de controle desempenham um papel central, visando assegurar a operação eficiente, segura e econômica dos processos, otimizando a utilização de recursos, minimizando resíduos e maximizando a produção de produtos de alta qualidade (Brandão, 2019).

Atualmente, os sistemas de controle preditivo desempenham um papel fundamental na indústria química. Originalmente, o controle preditivo surgiu como resposta às demandas específicas dessa indústria, que enfrentava desafios significativos no controle eficaz de processos complexos com várias entradas e saídas, além de restrições operacionais. O impulso inicial para a adoção dessa abordagem veio durante a crise do petróleo na década de 1970, quando os preços do petróleo dispararam, levando as indústrias petroquímicas a buscar maneiras de otimizar a produção de combustíveis e produtos derivados (Richalet; O'donovan, 2009). Esse cenário abriu espaço para o desenvolvimento de novos tipos de controladores avançados, desafiando a predominância dos Controladores PID (Proporcional Integral Derivativo) no ambiente industrial. Os Controladores PID frequentemente enfrentavam dificuldades ao lidar com sistemas multivariáveis complexos (Rosich; Ocampo-Martinez, 2015). Baseados na capacidade de prever o comportamento futuro dos processos, esses sistemas de controle permitem a tomada de decisões proativas. O Modelo Preditivo de Controle (MPC) destaca-se por sua habilidade em antecipar o comportamento futuro do processo por meio de modelos dinâmicos e das medições disponíveis (Kwong, 2005). A principal característica do MPC é a utilização de modelos dinâmicos, garantindo que o processo permaneça dentro de limites aceitáveis. Isso é particularmente valioso em ambientes industriais com processos complexos e em constante evolução.

A complexidade inerente ao controle de processos químicos industriais é amplificada pela dificuldade de medição de algumas variáveis críticas. Em muitos casos, a medição direta de parâmetros essenciais, como a concentração de substâncias em reatores ou a temperatura interna de equipamentos, torna-se desafiadora devido a sua precisão e tempo

real. Nesse cenário, a estimativa de variáveis assume um papel de destaque, recorrendo a modelos matemáticos e dados disponíveis para calcular ou estimar essas variáveis cruciais (Morais Jr, 2015).

Para medir variáveis de difícil acesso, existem várias técnicas na literatura aplicadas a Sensores Virtuais (Soft Sensors). Uma abordagem simples é a identificação linear paramétrica, usando modelos compostos por funções ponderadas por parâmetros obtidos com técnicas de regressão, como mínimos quadrados. Em sistemas lineares, modelos de espaço de estados, chamados observadores ou estimadores de estados, são usados para estimar o estado. Esses observadores podem ser exatos ou assintóticos. Aumentar a precisão envolve o uso de técnicas de filtragem, como o Filtro de Kalman, ideal para sistemas lineares quando se conhece o modelo do sistema e as propriedades estocásticas das medições. O Filtro de Kalman Estendido é uma extensão para equações diferenciais lineares (Lotufo e Garcia, 2008). Mais recentemente, as Redes Neurais Artificiais têm se destacado, permitindo a identificação eficaz de sistemas não lineares, adaptando-se e aprendendo, inspiradas no funcionamento do cérebro humano, com neurônios interconectados e conexões ponderadas por parâmetros, onde uma rede neural artificial (RNA) é uma rede de neurônios artificiais conectados por sinapses, inserida na área de sistemas inteligentes. A RNA é altamente adaptável devido à sua arquitetura paralela e algoritmos de aprendizado inspirados na biologia cerebral. Ela encontra aplicação bem-sucedida na construção de sensores virtuais para variáveis químicas e bioquímicas, como demonstrado no trabalho de Duwaish et al. (2002) para a inferência da concentração de oxigênio. As RNA são valorizadas por suas propriedades, incluindo não linearidade, mapeamento de entrada e saída, adaptabilidade e generalização (Silva et al., 2010; Duwaish et al., 2002; Jang et al., 1997). Para ilustrar o caso em estudo, optou-se por analisar um sistema reacional composto por um reator contínuo (CSTR) de caráter não linear, concebido para a produção de propilenoglicol mediante a hidrólise de óxido de propileno. Nesse contexto, uma estratégia de controle inferencial é proposta com o intuito de manter a concentração do produto próxima ao valor desejado (setpoint).

2. OBJETIVOS

2.2 OBJETIVO GERAL

Desenvolver controladores preditivos e aplicá-los em um processo de altas não linearidades e restrições.

2.3 OBJETIVOS ESPECIFICOS

- Simular dinamicamente o sistema, avaliando a influência dos distúrbios do processo quanto às condições de estabilidade operacional;
- Construir e implementar redes neurais como sensores virtuais e avaliando seu desempenho;
- Aplicar e comparar estratégias de controle MPC linear convencional (QDMC) com um MPC adaptativo (AQDMC), caracterizando o controle inferencial;
- Avaliar os desempenhos dos controladores propostos frente a perturbações no ponto ótimo e nas variáveis de distúrbios;

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 SENSOR VIRTUAL

Em sistemas de monitoramento e controle, a presença dos sensores é crucial para a observação do estado atual do sistema e para tomar medidas adequadas. No entanto, em certas aplicações industriais, a medição em tempo real de variáveis críticas pode ser impraticável, devido a fatores como altos custos de implementação ou baixa frequência de amostragem. Um exemplo disso é a medição de concentrações em colunas de destilação, que requerem analisadores caros e pessoal treinado. Para lidar com esse desafio, surgiram os instrumentos inteligentes, que processam dados de sensores físicos para fornecer informações precisas (Morais Jr, 2015). Entre esses instrumentos, estão os sensores virtuais, que permitem medir variáveis de difícil obtenção usando variáveis de fácil medição. Conforme destacado por Fortuna et al. (2007), os sensores virtuais oferecem uma série de vantagens quando comparados ao uso exclusivo de sensores físicos, incluindo: custo mais acessível como uma alternativa viável; capacidade de operar em paralelo com sensores físicos existentes; potencial para fornecer informações valiosas relacionadas à detecção de falhas, aumentando, assim, a confiabilidade do processo e facilidade no ajuste dos parâmetros, simplificando sua configuração. A modelagem adequada é essencial para a construção desses sensores virtuais, podendo ser feita por modelagem "caixa branca", que usa princípios físicos, ou por modelagem "caixa preta", que se baseia em dados empíricos (Lotufo *et al*, 2008). A última abordagem é especialmente útil quando o conhecimento fenomenológico é limitado, embora os modelos resultantes possam ser restritos a faixas operacionais específicas. Entre as técnicas de modelagem, a identificação linear paramétrica e as Redes Neurais Artificiais (RNA) se destacam, sendo as RNA capazes de aprender e representar relações complexas entre variáveis, tornando-se particularmente valiosas com o avanço da inteligência artificial e do aprendizado de máquina (Silva *et al*, 2010).

3.1.1 REDES NEURAIS

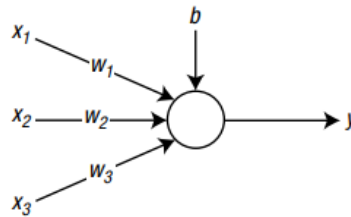
No mundo altamente integrado, quando as soluções para problemas são de natureza interdisciplinar, a computação promete tornar-se um meio poderoso para obter soluções aos problemas de forma rápida, mas precisa e aceitável. As redes neurais estão preocupadas com aprendizagem adaptativa, aproximações de funções não linear e

generalização universal. Em geral é uma rede altamente interconectada de um grande número de elementos de processamento chamados de neurônios em uma arquitetura inspirada no cérebro.

As redes neurais artificiais (RNA) são caracterizadas pelo processamento de modelagem do comportamento do cérebro na execução de tarefas ou funções particulares, assim armazenando conhecimento e tornando disponível para uso. Sendo utilizado em componentes eletrônicos ou simulados em software. Para um bom funcionamento, as redes neurais empregam uma interconexão de células chamadas de "neurônios" ou "unidades de processamento". (Haykin, 2009)

Os neurônios do cérebro, são chamados de nós na rede neural. Esses nós são associados aos pesos e um viés, sendo um fator de armazenamento, que vem do sinal transmitido (Kim, 2017). Podemos ver na Figura 2, para ficar mais claro: (Os w_1, w_2, w_3 são os pesos e o b é o viés, os sinais são dados pelos x_1, x_2, x_3 e y a saída.)

Figura.1. Nós na rede neural.



Fonte: Adaptada de Kim (2017, p. 20)

As entradas e os pesos são multiplicados antes de atingir o nó e assim esses sinais são dados como uma soma ponderada, posteriormente o nó insere as somas ponderadas em uma função de ativação e produz a saída mostra nas eqs. (1 e 2) (Kim, 2017):

$$v = wx + b \quad (1)$$

$$y = \varphi(v) \quad (2)$$

Onde: v é a soma ponderada e $\varphi(v)$ é a função de ativação, com $w = [w_1, w_2, w_3]$, $x = [x_1, x_2, x_3]^T$

Os tipos básicos de funções de ativação são do tipo: (Haykin, 2009)

a) Função Limiar pela eq. (3):

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & \text{se } v \geq 0 \\ 0, & \text{se } v < 0 \end{cases} \quad (3)$$

- b) Função Sigmóide: é a mais comum função de ativação, definida como uma função estritamente crescente que exhibe um equilíbrio entre o comportamento linear e não-linear, desse modo pode ser do tipo logística pela eq. (4):

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-a \cdot v)} \quad (4)$$

onde a é o parâmetro de inclinação da função sigmóide. Essa função assume uma faixa contínua de valores de 0 a 1. Observe também que a função sigmóide é diferenciável. Outro tipo é a função signum que varia de uma faixa de -1 a 1. Para a forma correspondente de uma função sigmóide usamos a função tangente hiperbólica pela eq. (5).

$$\varphi(v) = \tanh(v) \quad (5)$$

Prosseguindo, uma rede neural é constituída por suas camadas. Sendo elas: (a) a camada de entrada, cuja função é receber informação, sinais, recursos ou medições, essas entradas são normalizadas para os valores limites resultando em melhor precisão numérica, (b) camada oculta ou invisível, sendo responsável por extrair padrões do processo analisado. (c) camada de saída, responsável por produzir e apresentar resultados da rede. (Silva et al., 2017)

A maneira como os neurônios de uma rede está estruturada está intimamente ligada com o algoritmo de aprendizagem usado para treinar a rede. Com isso, concentrando atenção na arquitetura da rede neural, podemos identificar três tipos diferentes de classes (Haykin, 2009):

1. Feedforward de camada única: Em uma rede neural, os neurônios são organizados em camadas. Na forma de camada única, temos que uma camada de entrada de nós de origem projeta diretamente uma saída, porém não vice-versa.
2. Feedforward de múltiplas camadas: Esse tipo é distinguido quando se há uma ou mais camadas ocultas (refere à parte na qual a rede não é vista diretamente da entrada ou saída). Os neurônios associados a cada camada têm como entradas os sinais que saem da camada anterior.
3. Rede recorrente: diferente da feedforward há pelo menos um loop de feedback. Podemos dizer que consiste em uma única camada com os neurônios ligados aos seus sinais de saída de volta para a entrada de outros neurônios. Por isso, tem um impacto na capacidade de aprendizagem e desempenho. Somado a isso, temos que os loops envolvem ramificações que compõem elementos de retardo de tempo, resultando em uma dinâmica não linear.

Em seguida, o treinamento da rede é seguido pelo algoritmo de treinamento. Nesse contexto são ajustados os pesos da conexão, já que bons valores iniciais dos pesos tendem a diminuir o tempo necessário de treinamento da rede, essa fase é chamada de iniciação da rede (Zanata, 2005)

O treinamento da rede neural pode se tornar mais eficiente se certas etapas de pré-processamento nas entradas da rede e nos destinos são executadas. A normalização dos valores de entrada e destino significa mapeá-los em certo intervalo. Isso simplifica o problema dos outliers para a rede. As entradas e destinos normalizados que são retornados cairão todos no intervalo dado. Uma das vantagens é a diminuição dos erros de aproximações e estimativas de classes de hipóteses ou podem produzir um algoritmo mais rápido, melhorando também o tempo de treinamento. A eq. (6) é definida como sendo: (Khamis; Abdullah, 2014; Shalev-Shwartz; Ben-David, 2014)

$$x_{i-1} = \frac{x_i - \left(\frac{x_{max} + x_{min}}{2}\right)}{\left(\frac{x_{max} - x_{min}}{2}\right)} \quad (6)$$

Para avaliar o desempenho de cada topologia ao usar um conjunto de dados diferentes daquele usado no processo de treinamento, é usado o método de validação cruzada (cross-validation). Assim o primeiro método é a subamostragem aleatória, que consiste em todo o conjunto de amostra é dividido aleatoriamente em dois subconjuntos: treinamento (treina as topologias candidatas) e o teste (seleciona a topologia que fornece melhores resultados), somado a isso o conjunto total de dados tem certa de 60 – 90% de seus elementos destinados ao treinamento. O segundo método é o *k – fold* que consiste em dividir o conjunto total em *k* partições e assim o desempenho é obtido pela avaliação da média dos desempenhos (Silva et al., 2017).

Um ponto de destaque na rede é o aumento no número de neurônios ou a diminuição, denominados overfitting e underfitting, respectivamente. O overfitting além de aumentar o número de camadas intermediárias, não garante uma boa generalização da rede em relação as amostras do subconjunto de teste, somado a isso, há um estímulo à memorização da rede, assim o erro quadrático de treinamento tende a ser baixo, porém o de teste tende a ser alto. O underfitting apresenta o contrário, uma vez que a memória não é excessiva há a eliminação de ruídos, porém o número de neurônios reduzidos gera insuficiência para extrair e armazenar recursos do processo, resultado debilidades e o erro quadrático serão significativos (Silva et al., 2017). Em relação ao número de camadas ocultas, uma rede feedforward com uma única camada é suficiente para representar

qualquer função, segundo o teorema da aproximação universal, porém as camadas podem ser inviavelmente grandes e podem falhar em aprender e generalizar corretamente. Nesses casos, o uso de modelos mais profundos pode reduzir o número de unidades necessárias para representar a função desejada e pode reduzir a quantidade de erros de generalização (GOODFELLOW; BENGIO; COURVILLE, 2016). Segundo Shafi et al. (2006), verificou-se que para problemas não lineares complexos não há a necessidade de ampliar a arquitetura da rede em duas ou mais camadas ocultas, em certos casos podendo até gerar resultados debilitados.

Um dos passos mais difíceis do conjunto de treinamento é a escolha do método de otimização, um método fraco pode atrasar a convergência e não chegar a valores de erros baixos suficientes. Para isso, métodos como Levenberg-Marquardt geram bons resultados para uma gama de problemas.

3.3.1. MULTILAYER PERCEPTRON (MLP)

O MLP é um dos tipos de rede neural mais conhecidos e usados. Geralmente, os sinais são transmitidos dentro da rede em uma direção: entrada até a saída. Sem a presença de loop, a saída de cada neurônio não afeta o próprio neurônio. Essa arquitetura é chamada de feedforward. (POPESCU et al., 2009). A introdução de várias camadas foi determinada pela necessidade de aumentar a complexidade de regiões de decisão, porém isso não implica em um aumento computacional, se as funções de ativação forem lineares. Entretanto o real poder do multilayer perceptron é derivado das funções de ativação não lineares. Nesse contexto, a presença da não linearidade e a alta conectividade da rede tornam a análise teórica de um perceptron multicamadas difíceis de ser realizada. Outro ponto são os neurônios que estão ocultos, tornando o processo de aprendizagem mais difícil de visualizar (Popescu et al., 2009; HAYKIN, 2009).

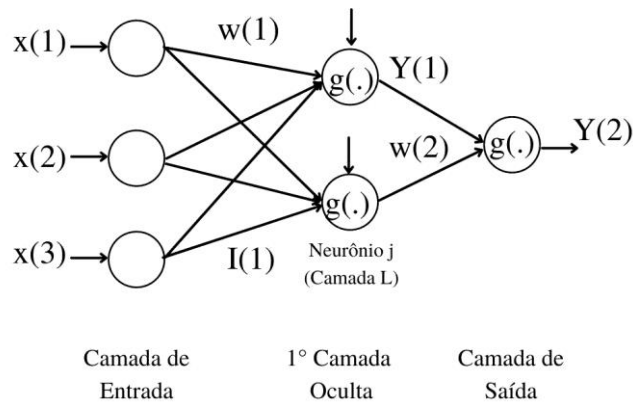
No algoritmo de aprendizagem deve prestar atenção a noção de atribuição de crédito. O problema deriva em atribuir culpa aos resultados gerais a cada uma das decisões internas tomadas pelas unidades computacionais, reconhecendo que essas decisões são responsáveis pelos resultados gerais. Para resolver esse problema é usado o algoritmo de backpropagation (Haykin, 2009).

O processo popular de treinamento do MLP usa o algoritmo backpropagation, cujo treinamento segue em dois estágios. O primeiro estágio é chamado de propagação forward: os pesos sinápticos da rede são fixos e os sinais de entrada são propagados pela rede, camada por camada, até atingir a saída. O segundo estágio é o backward: um sinal

de erro é produzido comparando a saída da rede com uma resposta desejada, e esse sinal é propagado através da rede, camada por camada, na direção para trás (Haykin, 2009).

A rede MLP é totalmente conectada à camada anterior, os neurônios de saída constituem a camada de saída da rede, o restante dos neurônios constitui as camadas ocultas, de modo que não faz parte da saída ou entrada da rede. A primeira camada oculta é alimentada pela camada de entrada e a saída resultantes da primeira camada oculta e assim aplicados na próxima camada oculta e assim por diante (Haykin, 2009). Como podemos descrever na figura 1, abaixo:

Figura 2: Esquema geral MLP



Fonte: Adaptado de (Silva et al., 2017; Haykin, 2009)

Para descrever o algoritmo backpropagation, necessitamos definir, a priori, as variáveis e parâmetros auxiliares, baseando-se na figura.1, que mostra a representação do conjunto de variáveis do algoritmo. Desse modo, cada neurônio j pertence a uma das camadas L , onde $g(\cdot)$ é a função de ativação, contínua e diferenciável; W é a matriz de peso sináptico; e i o sinal de entrada. Os vetores que representam as entradas ponderadas, é definido na eq. (7), como (SILVA et al., 2017):

$$I_j^{(L)} = \sum_{i=0}^n W_{ji}^{(L)} \cdot Y_i^{(L-1)} \quad (7)$$

E $Y_j^{(L)}$ são os vetores cujos elementos representam as saídas, que são definidos na eq. (8), como:

$$Y_j^{(L)} = g(I_j^{(L)}) \quad (8)$$

Em seguida, necessitamos definir uma função que representa o erro de aproximação, com o objetivo de medir o desvio das respostas produzidas pelos neurônios

de saída da rede em relação aos valores desejados correspondentes. Definimos a função de erro quadrático pela eq. (9):

$$E(k) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (d_j(k) - Y_j^{(L)}(k))^2 \quad (9)$$

Onde $d_j(k)$ é o valor desejado correspondente. Dessa maneira, assumindo um conjunto de p amostras, a medição do desempenho do algoritmo de backpropagation pode ser dada pelo erro quadrático médio, definido pela eq. (10):

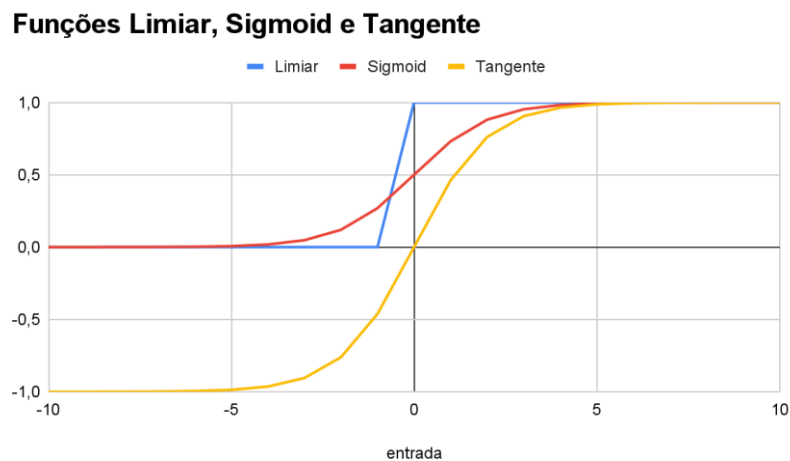
$$E_M = \frac{1}{p} \sum_{k=1}^p E(k) \quad (10)$$

Nesse momento, precisamos minimizar a matriz de pesos sinápticos W , para fornecer uma melhor compreensão do algoritmo. De modo geral o ajuste para a camada de saída, das camadas intermediárias e ocultas, pode ser resumido na eq. (11):

$$W = \operatorname{argmin}_W [E(Y, \operatorname{RNA}(W, I))] \quad (11)$$

A escolha da função de ativação é imposta pelo teorema da aproximação universal, sendo, portanto, uma função crescente nao-constante, limitada, monótona e não-linear. A figura 1 demonstra três funções de ativações, sendo elas: Sigmóide $g(I) = 1/(1 + e^{-I})$ e tangente $g(I) = (1 - e^{-I})/(1 + e^{-I})$, funções como Limiar não são recomendadas para redes de multicamadas, pela não conformidade pelo teorema da aproximação universal. (HAYKIN, 2009)

Figura 3: função de ativação



Fonte: Autor

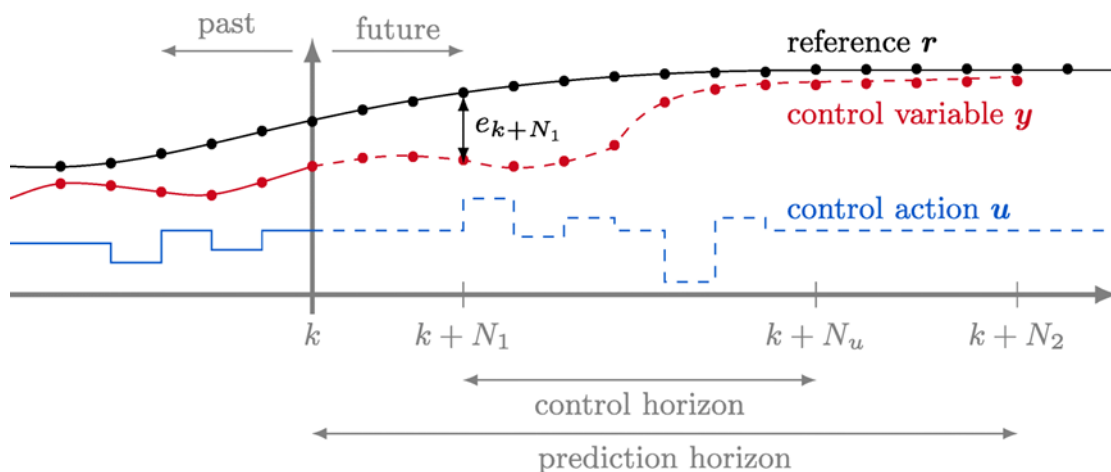
Para seleccionar o número ótimo de neurônios em cada camada, iremos determinar o número de camadas e o número de neurônios que minimizem o máximo o erro. Além disso, o critério de parada é realizado quando o valor de teste é aumentado para cada

interação de época, ou seja, quando há perda de generalização ou overfitting (Cross-Validation).

3.2.CONTROLE PREDITIVO BASEADO NO MODELO

MPC é uma categoria de estratégias de controle que emprega um modelo explícito do processo para antecipar a resposta futura da planta em diversas sequências de entrada. A otimização de uma função objetivo dinâmica é então aplicada para determinar a melhor sequência de entrada a ser seguida (Qin et al., 2003). É um dos poucos métodos de controle que leva em consideração diretamente as restrições. Geralmente, a função de custo é formulada de maneira a fazer com que a saída do sistema, representada por "y", siga uma referência específica o valor ótimo e por um horizonte de tempo N_2 , como mostrado na Figura 3. Somente o primeiro valor da trajetória otimizada é aplicado ao sistema. Esse processo de previsão e otimização é repetido a cada intervalo de tempo, o que é a razão pela qual o MPC também é conhecido como controle de "horizonte recuado". Em resumo, a ideia subjacente é que a otimização de curto prazo alcança a otimização de longo prazo (Schwenzer, Max et al, 2021).

Figura 4: Princípio de funcionamento de um preditivo baseado em modelo com horizontes N_1 , N_2 , N_u



Fonte: de acordo com Richalet et al. 1978

Entretanto, a eficácia de um MPC (ou de qualquer outra abordagem fundamentada em modelos) está intrinsecamente ligada à precisão do modelo do processo e à sintonia dos parâmetros do controlador. Previsões imprecisas podem, na verdade, deteriorar o desempenho global da planta em vez de aprimorá-lo (Seborg et al., 2011). Portanto, quando se trata de processos químicos, é frequente depararmos com sistemas não lineares, que demandam modelos representativos das não linearidades inerentes ao processo. No

entanto, a implementação de controladores não lineares implica uma carga computacional significativa e a utilização de ferramentas de otimização mais complexas. Uma alternativa é a adoção do MPC adaptativo com linearização sucessiva, que pode mitigar as imprecisões associadas à linearização de modelos matemáticos altamente não lineares e dinâmicos (Schwedersky, 2020). Por exemplo, Cutler e Ramaker (1980) empregaram um modelo linear segmentado para controlar um forno em uma unidade de craqueamento catalítico da SHELL OIL. Com um horizonte de previsão de $N_2 = 30$ e um horizonte de controle de $N_u = 10$, eles exploraram o potencial preditivo do sistema. Já Piche et al. (2000) introduziram uma rede neural (NN) no MPC para controlar alterações no ponto de ajuste em um reator de polietileno (PE). Eles desenvolveram modelos dinâmicos lineares com base em testes de plantas convencionais (em malha aberta) para controlar a planta em diferentes pontos de ajuste. Esse esforço resultou em transições 30% mais rápidas e uma redução geral na variabilidade das variáveis controladas. A pesquisa nessa área está em constante evolução. Li et al. (2019) também exploraram a linearização sucessiva de uma rede neural (NN) no contexto do MPC, mas com o objetivo de controlar a temperatura em um reator agitado, uma aplicação comum na indústria de processos, como biorreatores. Por sua vez, Prasad et al. (2020) seguiram uma abordagem distinta, preferindo empregar múltiplos modelos lineares em vez de um único modelo não linear. Eles controlaram o nível de enchimento de um tanque cônico, adaptando três modelos lineares diferentes em alturas distintas. Cada modelo foi usado para projetar um controlador específico, e suas saídas foram combinadas para obter uma resposta global para a variável de manipulação, ou seja, a vazão de entrada. Pramuditha et al. (2019) exploraram o uso do controle preditivo adaptativo (MPC) com linearização sucessiva para regular a pureza do produto em uma coluna de destilação em batelada. Esse método demonstrou ser mais preciso e computacionalmente eficiente do que o MPC não linear. O estudo realizou comparações entre essas abordagens em termos de precisão e carga computacional.

3.2.1. Controle por matriz dinâmica

3.2.1.1. DMC SISO e MIMO

Cutler e Radamaker (1979), engenheiros da Shell, desenvolveram o seu MPC, baseado em uma matriz dinâmica. Na qual está matriz, contendo a dinâmica de um processo, é o resultado da identificação da planta obtida com a aplicação de um degrau, ao qual deram o nome de Dynamic Matrix Control (DMC). Onde o desenvolvimento do

modelo a seguir segundo Odloak (2021) mostra como e a formulação do problema de controle DMC:

A partir do modelo de resposta ao degrau e possível escrever a seguinte eq. (12) para a predição da variável $\hat{y}$:

$$\hat{y}_{k+1} = \sum_{i=1}^N h_i u(k+1-i) \quad (12)$$

A eq. (13) acima pode ser descrita para o instante k:

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^N h_i u(k-i) \quad (13)$$

Fazendo a subtração das duas equações temos a eq. (14):

$$\hat{y}_{k+1} = \hat{y}_k + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u(k+1-i) \quad (14)$$

Desse modo passando de um controlador expresso com lei de controle em função da posição um MPC posicional para o modelo incremental e $\Delta u(k+1-i)$, é mais conveniente, pois o controlador passa a ser integral, desse modo eliminando *offset*.

Generalizando a eq. (15) temos:

$$\hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1} + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u(k+j-i) \quad (15)$$

Desse modo a eq. (15) fornece uma estimativa da saída do sistema no instante futuro k+1, a parti das variações do sistema até o instante k, assim a predição do instante imediatamente anterior é utilizada no próximo intervalo de tempo. Além disso para se obter uma estimativa mais precisa e assim diminuir a sensibilidade do controlador a erros de modelo ou ações de perturbações não esperadas, a predição $\hat{y}_{k+1}$ deve ser corrigida com erro atual da predição de y para o intervalo k, predição feita no instante k-1 anterior, no qual esse erro e calculado, pois a informação da planta já está disponível mostrado na eq. (16).

$$\hat{y}_{k+1}^c = \hat{y}_{k+1} + (y_k - \hat{y}_k) \quad (16)$$

Substituindo a eq. (16) eq. (15)

Onde

$\hat{y}_{k+1}^c$ é previsão corrigida no instante k+1

$\hat{y}_{k+j}$ e o valor predito no instante k+1 que vai ser corrigido

y_k valor lido da planta no instante k

$\hat{y}_k$ e o valor predito no instante k-1

Para a correção da predição em um instante genérico j, o DMC assume que o erro atual, erro existe entre a predição deste instante atual, feita no instante anterior, e a leitura da planta, já disponível, será constante para todo o horizonte de predição.

$$\hat{y}_{k+j}^c - \hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1}$$

Sendo

$\hat{y}_{k+j}^c - \hat{y}_{k+j}$ erro de predição do instante k+j

$\hat{y}_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1}$ erro de predição do instante k+j-1

Reescrevendo a equação temos:

$$\hat{y}_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j-1}^c + \hat{y}_{k+j} - \hat{y}_{k+j-1}$$

Pela eq. (17):

$$\hat{y}_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j-1}^c + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u(k+j-i) \quad (17)$$

Para j=1 temos

$$\hat{y}_{k+1}^c = \hat{y}_k^c + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u(k+1-i)$$

No qual:

$\hat{y}_k^c = y_k$, pois no instante k está informação já está disponível

Desenvolvendo a eq. 17 temos:

$$\hat{y}_{k+1}^c = y_k + h_1 \Delta u(k) + h_2 \Delta u(k-1) + h_3 \Delta u(k-2) + \dots h_N \Delta u(k+1-N)$$

Onde:

$\Delta u(k)$ em procedimento de cálculo pelo controlador

$\Delta u(k-1), \Delta u(k-2) \dots$ valores de ações passadas

Separando as ações de controle, isto é, do passado, da ação de controle atual:

$$\hat{y}_{k+1}^c = y_k + h_1 \Delta u(k) + \sum_{i=2}^N h_i \Delta u(k+1-i)$$

Assumindo S_1 como:

$$S_1 = \sum_{i=2}^N h_i \Delta u(k+1-i)$$

Assim temos eq. (18):

$$\hat{y}_{k+1}^c = y_k + h_1 \Delta u(k) + S_1 \quad (18)$$

No qual o valor de S_1 é conhecido, pois depende das ações de controle passadas.

Já para $j=2$ temos:

$$\hat{y}_{k+2}^c = \hat{y}_{k+1}^c + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u(k+2-i)$$

$$\hat{y}_{k+2}^c = \hat{y}_{k+1}^c + h_1 \Delta u(k+1) + h_2 \Delta u(k) + h_3 \Delta u(k-1) + \dots h_N \Delta u(k+2-N)$$

Assumindo S_2 como:

$$S_2 = \sum_{i=3}^N h_i \Delta u(k+2-i)$$

Assim temos:

$$\hat{y}_{k+2}^c = \hat{y}_{k+1}^c + h_1 \Delta u(k+1) + h_2 \Delta u(k) + S_2$$

Utilizando a eq. (18) nessa temos:

$$\hat{y}_{k+2}^c = y_k + h_1 \Delta u(k) + S_1 + h_1 \Delta u(k+1) + h_2 \Delta u(k) + S_2$$

Organizando temos a eq. (19):

$$\hat{y}_{k+2}^c = y_k + (h_1 + h_2) \Delta u(k) + S_1 + h_1 \Delta u(k+1) + S_2 \quad (19)$$

Já para $j=3$ temos:

$$\hat{y}_{k+3}^c = \hat{y}_{k+2}^c + \sum_{i=1}^N h_i \Delta u(k+3-i)$$

$$\hat{y}_{k+3}^c = \hat{y}_{k+2}^c + h_1 \Delta u(k+2) + h_2 \Delta u(k+1) + h_3 \Delta u(k) + \dots h_N \Delta u(k+3-N)$$

Assumindo S_3 como:

$$S_3 = \sum_{i=4}^N h_i \Delta u(k+3-i)$$

Assim temos:

$$\hat{y}_{k+3}^c = \hat{y}_{k+2}^c + h_1 \Delta u(k+2) + h_2 \Delta u(k+1) + h_3 \Delta u(k) + S_3$$

Utilizando a eq. (19) nessa temos:

$$\begin{aligned} \hat{y}_{k+3}^c &= y_k + (h_1 + h_2) \Delta u(k) + S_1 + h_1 \Delta u(k+1) + S_2 + h_1 \Delta u(k+2) \\ &\quad + h_2 \Delta u(k+1) + h_3 \Delta u(k) + S_3 \end{aligned}$$

Organizando temos a eq. (20):

$$\begin{aligned} \hat{y}_{k+3}^c &= y_k + (h_1 + h_2 + h_3) \Delta u(k) + S_1 + (h_1 + h_2) \Delta u(k+1) + S_2 \\ &\quad + h_1 \Delta u(k+2) + S_3 \end{aligned} \tag{20}$$

Podemos definir:

$$a_i = \sum_{j=1}^N h_j$$

$$S_m = \sum_{i=m+1}^N h_i \Delta u(k+m-i)$$

$$P_j = \sum_{m=1}^j S_m$$

Dessa forma as eq. 18,19 e 20 podem ser escritas da seguinte maneira:

$$\hat{y}_{k+1}^c = y_k + a_1 \Delta u(k) + P_1 \tag{21}$$

$$\hat{y}_{k+2}^c = y_k + a_2 \Delta u(k) + a_1 \Delta u(k+1) + P_2 \tag{22}$$

$$\hat{y}_{k+3}^c = y_k + a_3 \Delta u(k) + a_2 \Delta u(k+1) + a_1 \Delta u(k+2) + P_3 \quad (23)$$

Assim generalizando para qualquer valor de j temos a eq. (24):

$$\hat{y}_{k+j}^c = y_k + a_j \Delta u(k) + a_{j-1} \Delta u(k+1) + \dots + a_1 \Delta u(k+j-1) + P_j \quad (24)$$

Escrevendo em forma matricial para todos os instantes dentro do horizonte de predição R temo a seguinte forma eq. (25).

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_{k+1}^c \\ \hat{y}_{k+2}^c \\ \vdots \\ \hat{y}_{k+R-1}^c \\ \hat{y}_{k+R}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_2 & a_1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{R-1} & a_{R-2} & \dots & a_1 & 0 \\ a_R & a_{R-1} & \dots & a_1 & a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \Delta u(k+1) \\ \vdots \\ \Delta u(k+R-2) \\ \Delta u(k+R-1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_{R-1} \\ y_k + P_R \end{bmatrix} \quad (25)$$

Ou eq. (26),

$$y^c = A \Delta u + y_k + P \quad (26)$$

Onde:

y^c : Vetor dos valores preditos e corrigidos de y no instante k até o horizonte de controle de predição R

A : Matriz dinâmica

Δu : Vetor das ações futuras de controle

y_k : leitura da planta

P : vetor de predições decorrentes das ações de controle passadas.

Obtendo o vetor erro a partir da diferença entre o vetor y^{sp} e vetor y^c eq. (27):

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} y_k^{sp} - \hat{y}_{k+1}^c \\ y_k^{sp} - \hat{y}_{k+2}^c \\ \vdots \\ y_k^{sp} - \hat{y}_{k+R-1}^c \\ y_k^{sp} - \hat{y}_{k+R}^c \end{bmatrix} &= - \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_2 & a_1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{R-1} & a_{R-2} & \dots & a_1 & 0 \\ a_R & a_{R-1} & \dots & a_1 & a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \Delta u(k+1) \\ \vdots \\ \Delta u(k+R-2) \\ \Delta u(k+R-1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k^{sp} - y_k \\ y_k^{sp} - y_k \\ \vdots \\ y_k^{sp} - y_k \\ y_k^{sp} - y_k \end{bmatrix} \\
&\quad - \begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_{R-1} \\ P_R \end{bmatrix} \quad (27)
\end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} e_{k+1} \\ e_{k+2} \\ \vdots \\ e_{k+R-1} \\ e_{k+R} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_2 & a_1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{R-1} & a_{R-2} & \dots & a_1 & 0 \\ a_R & a_{R-1} & \dots & a_1 & a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \Delta u(k+1) \\ \vdots \\ \Delta u(k+R-2) \\ \Delta u(k+R-1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_k - P_1 \\ e_k - P_2 \\ \vdots \\ e_k - P_{R-1} \\ e_k - P_R \end{bmatrix}$$

O MPC não calcula R ações de controle, como indicado na equação (27), mas apenas L ações de controle, após o horizonte de controle L, os valores de incremento na entrada serão nulos. Portanto

$$\begin{bmatrix} e_{k+1} \\ e_{k+2} \\ \vdots \\ e_{k+L} \\ e_{k+L+1} \\ \vdots \\ e_{k+R} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_2 & a_1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_L & a_{L-1} & \dots & a_1 & 0 \\ a_{L+1} & a_1 & \dots & a_2 & a_1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_R & a_{R-1} & \dots & a_{R-L} & a_{R-L-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \Delta u(k+1) \\ \vdots \\ \Delta u(k+L-1) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_k - P_1 \\ e_k - P_2 \\ \vdots \\ e_k - P_L \\ e_k - P_{L+1} \\ \vdots \\ e_k - P_R \end{bmatrix}$$

Na notação vetorial temos eq. (28):

$$e = -A\Delta u + e' \quad (28)$$

Onde:

$$e_k = y_k^{sp} - y_k$$

$$e' = e_k - P$$

e : Vetor de erro entre os valores previsto e o valor desejado

A : Matriz dinâmica

Δu : Vetor das ações futuras de controle

P : vetor de predições decorrentes das ações de controle passadas.

Dimensões:

$$e = R \times 1$$

$$A = R \times L$$

$$\Delta u = L \times 1$$

$$e' = e_k = P = R \times 1$$

Desse modo, o controlador calcula as ações de controle em L instantes futuros, ou seja, do instante atual k até o instante $k+L-1$

O MPC tem como objetivo minimizar $j = e^T e$, desse modo que as L ações de controle futuras serão calculadas. Substituindo a eq. (28) do erro na função objetivo temos:

$$j = (-A\Delta u + e')^T (-A\Delta u + e')$$

Desenvolvendo a expressão temos:

$$j = (-A^T \Delta u^T + e'^T) (-A\Delta u + e')$$

$$j = A^T \Delta u^T A \Delta u - A^T \Delta u^T e' - e'^T A \Delta u + e'^T e'$$

Agora encontrando o mínimo da função j com relação as ações de controle chegamos na eq. (29)

$$\frac{\delta j}{\delta \Delta u} = 0 \Rightarrow A^T A \Delta u - A^T e' = 0$$

$$\Delta u = (A^T A)^{-1} A^T e' \quad (28)$$

Obs: $(A^T A)$ tem que ser invertível, det. diferente de zero

Dimensões:

$$e = R \times 1$$

$$A = R \times L$$

$$\Delta u = L \times 1$$

$$e' = R \times 1$$

Das L ações de controle calculadas na eq. (28), apenas a primeira é implementada. No instante $k+1$ seguinte, todo processo é recalculado com a nova informação da planta disponível.

Para suavizar a ação de controle que pode ser violenta com formulação anterior, acrescentasse um peso na variação da ação de controle conforme a seguinte eq. (29):

$$j = e^T e + \Delta u^T R \Delta u \quad (29)$$

Onde $R = L \times L$. A matriz R define um peso sobre os movimentos da variável manipulada para cada instante do horizonte de controle.

$$R = \begin{bmatrix} R_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & R_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & R_3 \end{bmatrix}$$

Expandido e desenvolvendo a eq. (29) temos:

$$j = (-A\Delta u + e')^T (-A\Delta u + e') + \Delta u^T R \Delta u$$

Desenvolvendo a expressão temos:

$$j = A^T \Delta u^T A \Delta u - A^T \Delta u^T e' - e'^T A \Delta u + e'^T e' + \Delta u^T R \Delta u$$

Agora encontrando o mínimo da função j com relação as ações de controle chegamos na eq. (30):

$$\frac{\delta j}{\delta \Delta u} = 0 \Rightarrow A^T A \Delta u - A^T e' + R \Delta u = 0$$

$$\Delta u = (A^T A + R)^{-1} A^T e' \quad (30)$$

Já para o caso MIMO do DMC é similar ao caso SISO. Apenas mudam as dimensões das matrizes e vetores envolvidos, tendo em vista que o controlador manipular sistemas de controle de múltiplas entradas e saídas.

Na qual a eq. (12) pode ser escrita da seguinte forma eq. (31):

$$\hat{y}_{j,k} = \sum_{i=i}^N \sum_{l=1}^{n_u} h_{jl,i} u_l(k-i) \quad (31)$$

Onde:

N = horizonte de convolução

n_u = número de variáveis manipuladas

$u_l(k - i)$ = entrada manipula l aplicada no k-i

$h_{j,l,i}$ = resposta da saída j ao impulso aplicado na entrada l no instante i

$\hat{y}_{j,k}$ = predição da saída j, para o instante k

Escrevendo a eq. (31) na sua forma vetorial, obtemos eq. (32):

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^N H_i u(k - i) \quad (32)$$

Sendo:

$$\hat{y}_k = [\hat{y}_{1,k} \ \hat{y}_{2,k} \ \cdots \ \hat{y}_{n_y,k}]^T$$
$$u(k - i) = [u_1(k - i) \ u_2(k - i) \ \cdots \ u_{n_u}(k - i)]^T$$

$$H_i = \begin{bmatrix} h_{11,i} & h_{12,i} & \cdots & h_{1n_u,i} \\ h_{21,i} & h_{22,i} & \cdots & h_{2n_u,i} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n_y1,i} & h_{n_y2,i} & \cdots & h_{n_y n_u,i} \end{bmatrix}$$

Dessa forma de modo análogo ao SISO para o instante k+1 temos eq. (33):

$$\hat{y}_{k+1} = \hat{y}_k + \sum_{i=1}^N H_i \Delta u(k + 1 - i) \quad (33)$$

Generalizando a equação anterior para qualquer instante futuro temos eq. (34):

$$\hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1} + \sum_{i=1}^N H_i \Delta u(k + j - i) \quad (34)$$

Para a correção da predição em um instante genérico j , o DMC assume que o erro atual, erro existe entre a predição deste instante atual, feita no instante anterior, e a leitura da planta, já disponível, será constante para todo o horizonte de predição.

$$\hat{y}_{k+j}^c - \hat{y}_{k+j} = \hat{y}_{k+j-1}^c - \hat{y}_{k+j-1}$$

Considerando as equações anteriores podemos obter a eq. (35):

$$\hat{y}_{k+j}^c = \hat{y}_{k+j-1}^c + \sum_{i=1}^N H_i \Delta u(k+j-i) \quad (35)$$

Na qual a equação pode ser escrita para qualquer instante no futuro, gerando os valores das predições corrigidas das n_y variáveis controladas considerando um horizonte de controle L . Na forma vetorial, temos eq. (36):

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_{k+1}^c \\ \hat{y}_{k+2}^c \\ \vdots \\ \hat{y}_{k+L}^c \\ \hat{y}_{k+L+1}^c \\ \vdots \\ \hat{y}_{k+R}^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ A_2 & A_1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_L & A_{L-1} & \dots & A_1 & 0 & \dots & 0 \\ A_{L+1} & A_L & \dots & A_2 & A_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_R & A_{R-1} & \dots & A_{R-L} & A_{R-L-1} & \dots & A_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \Delta u(k+1) \\ \vdots \\ \Delta u(k+L-1) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_k + P_1 \\ y_k + P_2 \\ \vdots \\ y_k + P_L \\ y_k + P_{L+1} \\ \vdots \\ y_k + P_R \end{bmatrix} \quad (36)$$

Sendo:

$$A_i = \sum_{j=1}^N H_j$$

$$S_m = \sum_{i=m+1}^N H_i \Delta u(k+m-i)$$

$$P_j = \sum_{m=1}^j S_m$$

A eq. (35) pode ser escrita da seguinte forma eq. (37):

$$y_{n_y R \times 1}^c = A_{n_y R \times n_u L} \Delta u_{n_u L \times 1} + (y_k + P)_{n_y R \times 1} \quad (37)$$

Obtendo o vetor erro a partir da diferença entre o vetor y^{sp} e vetor y^c , temos eq. (38):

$$e = -A \Delta u + e' \quad (38)$$

Onde:

$$e_k = y_k^{sp} - y_k$$

$$e' = e_k - P$$

Já a função objetivo a ser alcançada eq. (29):

$$j = e^T e + \Delta u^T R \Delta u \quad (29)$$

De modo análogo ao caso SISO, encontrando o mínimo da função j com relação as ações de controle, obtemos eq. (39):

$$\begin{aligned} \frac{\delta j}{\delta \Delta u} = 0 &\Rightarrow A^T A \Delta u - A^T e' + R \Delta u = 0 \\ \Delta u &= (A^T A + R)^{-1} A^T e' \end{aligned} \quad (39)$$

Contudo, em sistemas multivariáveis algumas variáveis controladas são mais importantes do que outras. Neste caso, é necessário ponderar diferentemente a influência das variáveis controladas na função objetivo. No qual, basta multiplicar a eq. (32) por uma matriz diagonal W , cujos valores da diagonal principal são proporcionais à importância da variável controlada eq. (40):

$$W e = -W A \Delta u + W e' \quad (40)$$

Sendo:

$$W = \begin{bmatrix} W_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & W_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & W_{n_y} \end{bmatrix}$$

Realizando novamente o procedimento para determinas o mínimo da função objetivo, obtemos eq. (40):

$$\frac{\delta j}{\delta \Delta u} = 0 \Rightarrow A^T W^T W A \Delta u - A^T W^T W e' + R \Delta u = 0$$

$$\Delta u = (A^T W^T W A + R)^{-1} A^T e' \quad (41)$$

3.2.1.2. QDMC

Os algoritmos originais IDCOM e DMC fornecem excelentes resultados em processos multivariáveis sem restrições. O QDMC é uma forma de remover esta limitação do algoritmo original. Tendo como maior diferença a inserção de restrições, onde trazem um maior complexibilidade ao problema, mas uma maior aproximação da situação real.

O procedimento mostrando anteriormente para o DMC e semelhante para este, o QDMC, pois ele usa as mesmas equações de predição do DMC, ou seja, a eq. (38) vale:

$$e = -A \Delta u + e' \quad (38)$$

Já a função objetivo eq. (42):

$$J(\Delta u) = \frac{1}{2} e^T W^T W e + \frac{1}{2} \Delta u^T R \Delta u \quad (42)$$

Substituindo a eq. (38) na eq. (42), obtemos eq. (43):

$$J(\Delta u) = \frac{1}{2} (-A \Delta u + e')^T W^T W (-A \Delta u + e') + \frac{1}{2} \Delta u^T R \Delta u \quad (43)$$

Desenvolvendo temos eq. (44):

$$J(\Delta u) = \frac{1}{2} [\Delta u^T (A^T W^T W A + R) \Delta u] - e'^T W^T W A \Delta u + \frac{1}{2} e'^T W^T W e' \quad (44)$$

O último termo e desprezado pois não depende da ação de controle e assim pode ser removido assim temos a eq. (45).

$$J(\Delta u) = \frac{1}{2} [\Delta u^T (A^T W^T W A + R) \Delta u] - e'^T W^T W A \Delta u \quad (45)$$

Dessa forma o problema do controlador se resume a eq. (46):

$$\min_{\Delta u} J = \frac{1}{2} [\Delta u^T (A^T W^T W A + R) \Delta u] - e'^T W^T W A \Delta u \quad (46)$$

Ou eq. (47),

$$\min_{\Delta u} J = \frac{1}{2} \Delta u^T H \Delta u + c^T \Delta u \quad (47)$$

Sendo eq. (48) e eq. (49):

$$H = (A^T W^T W A + R) \quad (48)$$

$$c^T = e^T W^T W A \Delta u \quad (49)$$

Além disso são incluídas restrições em ambas as variáveis manipuladas e controladas:

- Nos incrementos das manipuladas eq. (50):

$$-\Delta u_{\max} \leq \Delta u \leq \Delta u_{\max} \quad (50)$$

- Nos valores das manipuladas eq. (51):

$$u_{\min} \leq u \leq u_{\max} \quad (51)$$

- Nos valores das controladas eq. (52):

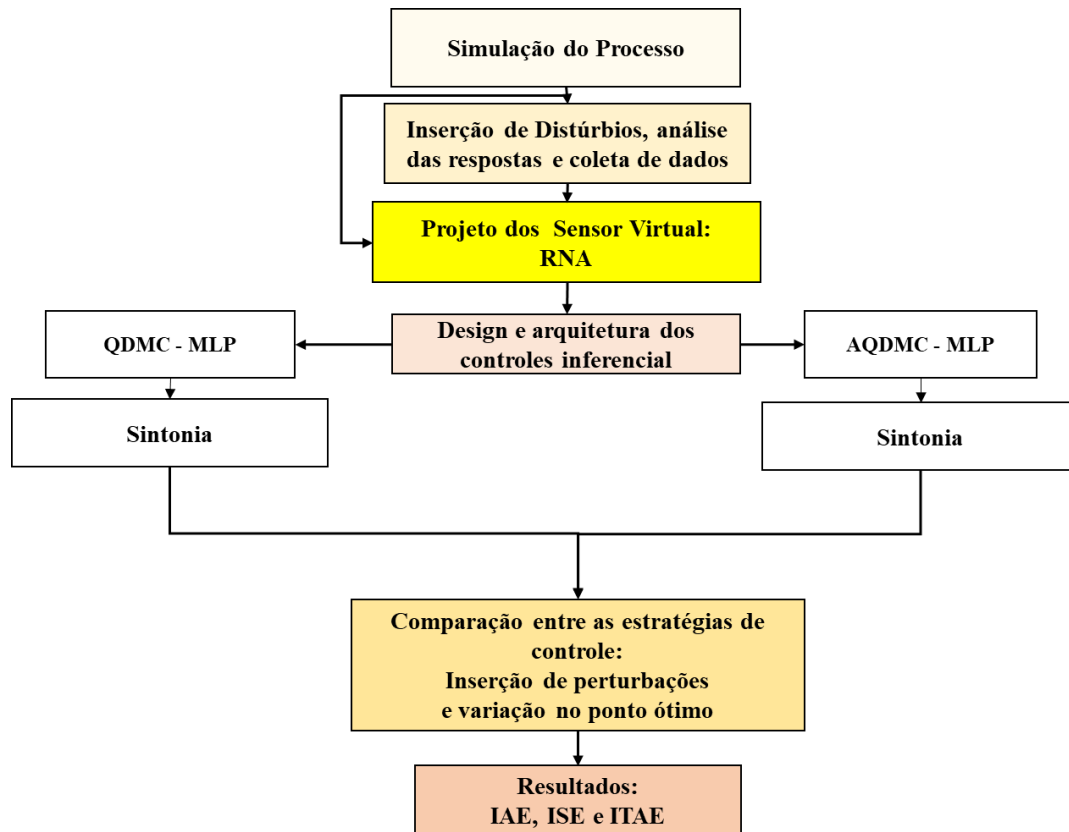
$$y_{\min} \leq y \leq y_{\max} \quad (52)$$

Dessa forma o problema de otimização que o QDMC resolve tem uma função objetivo quadrática em Δu e suas restrições são lineares. No qual é conhecido com um problema de programação quadrática (PQ).

4. METODOLOGIA

O fluxograma de atividades realizadas é apresentado na Figura 5. As simulações foram feitas em ambiente computacional: sistemas integrados de códigos em linguagem MATLAB®.

Figura 5 – Fluxograma da metodologia abordada

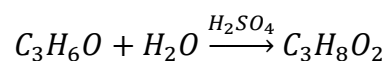


Fonte: o autor.

4.1. ESTUDO DE CASO – REATOR PRODUTIVO DE PROPILENOGLICOL

4.1.1. Modelagem do processo descrito por (Brandão, 2019)

O processo estudado tem como base o modelo proposto por Fogler (2009) de um reator CSTR para produção de propileno glicol. O propileno glicol é um líquido inodoro e incolor utilizado majoritariamente na produção de resinas de poliéster. Também é utilizado na indústria de alimentos, como solvente de fármacos e em degelo de aeronaves por causa suas propriedades anticongelantes. Este composto pode ser produzido pela hidrólise de óxido de propileno catalisada com ácido sulfúrico, conforme a seguinte reação:



No modelo proposto, o reator opera de forma contínua e possui uma serpentina de resfriamento, cujo líquido refrigerante é água. A vazão de alimentação do reator é composta por óxido de propileno (A), água (B) com ácido sulfúrico diluído e inerte metanol (M) conforme a Figura 5. Excesso de água (ponto de ebulição a 373,15 K à pressão atmosférica) é utilizado pois o óxido de propileno possui um relativo baixo ponto

de ebulição (307,4 K), enquanto metanol é adicionado para evitar separação de fases, uma vez que propileno glicol não é completamente solúvel em água

4.1.1.1 Cinética de reação

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

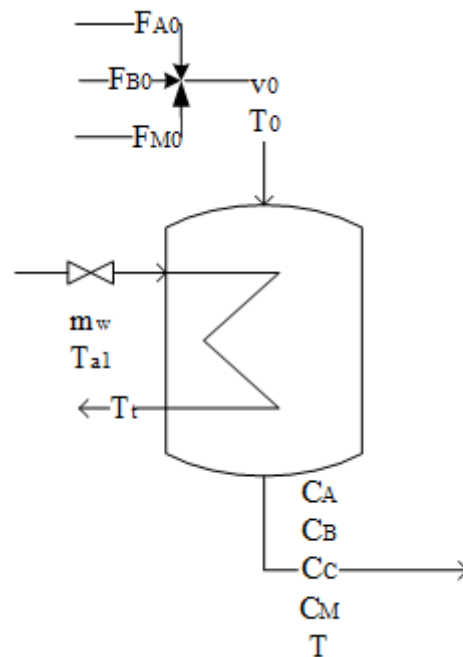
$$-r_A = kC_A \quad (53)$$

E a velocidade específica é definida por:

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} = 16,96 \times 10^{12} \left(e^{\frac{-32.400}{RT}} \right) h^{-1} \quad (54)$$

Sendo a unidade de E em Btu/lbmol.

Figura 6 – Esquematização do CSTR para síntese de propilenoglicol.



Fonte: o autor (Brandão, 2019).

4.1.1.2 Balanços matérias

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

$$\frac{dC_A}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{A0} - C_A}{V} \right) v_0 \quad (55)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{B0} - C_B}{V} \right) v_0 \quad (56)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = -r_A + \left(\frac{-C_C}{V} \right) v_0 \quad (57)$$

$$\frac{dC_M}{dt} = \left(\frac{C_{M0} - C_M}{V} \right) v_0 \quad (58)$$

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

$$C_{i0} = \frac{F_{i0}}{v_0} \quad (59)$$

$$v_0 = \frac{F_{A0}}{\rho_A} + \frac{F_{B0}}{\rho_B} + \frac{F_{M0}}{\rho_M} \quad (60)$$

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

4.1.1.3 Balanços energéticos

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

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

$$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^n E_i F_{i_{entrada}} - \sum_{i=1}^n E_i F_{i_{saída}} \quad (61)$$

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

$$\dot{W} = - \sum_{i=1}^n F_i P \tilde{V}_{i_{entrada}} + \sum_{i=1}^n F_i P \tilde{V}_{i_{saída}} + \dot{W}_s \quad (62)$$

Sendo P a pressão e $\tilde{V}_i$ o volume molar de cada espécie i . Combinando a Equação (61) com a (60) e agrupando os termos, obtém-se:

$$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_i (E_i + P \tilde{V}_i)_{entrada} - \sum_{i=1}^n F_i (E_i + P \tilde{V}_i)_{saída} \quad (63)$$

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

$$H_i = U_i + P \tilde{V}_i \quad (64)$$

E, portanto:

$$F_i H_i = F_i (U_i + P \tilde{V}_i) \quad (65)$$

Combinando as Equações (63), (64) e (65), obtém-se:

$$\frac{d\hat{E}_{sist}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_i H_{i_{entrada}} - \sum_{i=1}^n F_i H_{i_{saída}} \quad (66)$$

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

$$\begin{aligned}\hat{E}_{sist} &= \sum_{i=1}^n N_i E_i = \sum_{i=1}^n N_i U_i = \left[\sum_{i=1}^n N_i (H_i - PV_i) \right]_{sist} \\ &= \sum_{i=1}^n N_i H_i - P \underbrace{\sum_{i=1}^n N_i V_i}_V\end{aligned}\quad (67)$$

O último termo do lado direito da Equação (67) representa o produto entre a pressão total do sistema e o volume total, PV . Quando a variação desse termo em relação ao tempo puder ser desconsiderada, a combinação entre as Equações (66) e (67) fornece:

$$\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i = \left[\sum_{i=1}^n N_i \frac{dH_i}{dt} + \sum_{i=1}^n H_i \frac{dN_i}{dt} \right]_{sistema} \quad (68)$$

Temos que a derivada da entalpia pode ser definida como:

$$\frac{dH_i}{dt} = C_{P_i} \frac{dT}{dt} \quad (69)$$

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

$$\frac{dN_i}{dt} = -v_i r_A V + F_{i0} - F_i \quad (70)$$

Combinando as Equações (68), (69) e (70), obtém-se:

$$\begin{aligned}\dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i \\ = \sum_{i=1}^n N_i C_{P_i} \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^n v_i H_i (-r_A V) + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_i - \sum_{i=1}^n F_i H_i\end{aligned}\quad (71)$$

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

$$\begin{aligned} \dot{Q} + \sum_{i=1}^n F_{i0} C_{P_i} (T_0 - T_{ref}) \\ = \sum_{i=1}^n N_i C_{P_i} \frac{dT}{dt} + \Delta H_{Rx} (-r_A V) + \sum_{i=1}^n F_{i0} C_P (T - T_{ref}) \end{aligned} \quad (72)$$

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

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - F_{A0} \sum \Theta_i C_{P_i} (T - T_0) + (-\Delta H_{Rx}) (-r_A V)}{\sum N_i C_{P_i}} \quad (73)$$

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

$$\dot{Q} = \dot{m}_w C_{P_B} (T_{a1} - T) \left(1 - e^{\frac{-UA}{\dot{m}_w C_{P_B}}} \right) \quad (74)$$

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

Até então, foram definidas 5 variáveis de estado representadas por cada uma das equações diferenciais mostradas anteriormente, são essas: C_A , C_B , C_C , C_M e T . Este trabalho, no entanto, também traz como contribuição a dinâmica da temperatura no interior do trocador de calor a fim de obter uma sexta variável de estado, a temperatura do trocador, T_t .

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

$$\frac{dT_t}{dt} = \frac{\dot{m}_w C_{P_B} (T_{a1} - T_t) - \dot{Q}}{\rho_B V_t C_{P_B}} \quad (75)$$

4.1.1.4 Modelo de espaço de estados

$$\dot{x}(t) = F(x(t), u(t)) \quad (76)$$

$$y(t) = h(x(t), u(t)) \quad (77)$$

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

$$\dot{x} = Ax(t) + Bu(t) \quad (78)$$

$$y = Cx(t) + Du(t) \quad (79)$$

Com,

$$A = \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x,u} \quad (80) \quad ; \quad B = \left. \frac{\partial F}{\partial u} \right|_{x,u} \quad (81)$$

$$C = \left. \frac{\partial h}{\partial x} \right|_{x,u} \quad (82) \quad ; \quad D = \left. \frac{\partial h}{\partial u} \right|_{x,u} \quad (63)$$

Sendo.

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} C_A \\ C_B \\ C_C \\ C_M \\ T \\ T_t \end{bmatrix} \quad (84) \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} F_{A0} \\ F_{B0} \\ F_{M0} \\ \dot{m}_w \\ T_0 \\ T_{a1} \end{bmatrix} \quad (85) \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} C_A \\ C_B \\ C_C \\ C_M \\ T \\ T_t \end{bmatrix} \quad (86)$$

Temos que:

$$F_1 = \frac{dC_A}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{A0} - C_A}{V} \right) v_0 \quad (87)$$

$$F_2 = \frac{dC_B}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{B0} - C_B}{V} \right) v_0 \quad (88)$$

$$F_3 = \frac{dC_C}{dt} = -r_A + \left(\frac{-C_C}{V} \right) v_0 \quad (89)$$

$$F_4 = \frac{dC_M}{dt} = \left(\frac{C_{M0} - C_M}{V} \right) v_0 \quad (90)$$

$$F_5 = \frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - F_{A0} \sum \Theta_i C_{P_i} (T - T_0) + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{\sum N_i C_{P_i}} \quad (91)$$

$$F_6 = \frac{dT_t}{dt} = \frac{\dot{m}_w C_{P_B} (T_{a1} - T_t) - \dot{Q}}{\rho_B V_t C_{P_B}} \quad (92)$$

$$C = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial h_1}{\partial C_A}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial C_B}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial C_C}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial C_M}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial T}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial T_J}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_2}{\partial C_A}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial C_B}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial C_C}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial C_M}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial T}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial T_J}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_3}{\partial C_A}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial C_B}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial C_C}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial C_M}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial T}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial T_J}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_4}{\partial C_A}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial C_B}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial C_C}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial C_M}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial T}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial T_J}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_5}{\partial C_A}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial C_B}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial C_C}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial C_M}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial T}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial T_J}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_6}{\partial C_A}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial C_B}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial C_C}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial C_M}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial T}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial T_J}\right)_{EE} \end{bmatrix}$$

$$D = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial h_1}{\partial F_{A0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial F_{B0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial F_{M0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial \dot{m}_w}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial T_0}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_1}{\partial T_{a1}}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_2}{\partial F_{A0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial F_{B0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial F_{M0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial \dot{m}_w}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial T_0}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_2}{\partial T_{a1}}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_3}{\partial F_{A0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial F_{B0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial F_{M0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial \dot{m}_w}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial T_0}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_3}{\partial T_{a1}}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_4}{\partial F_{A0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial F_{B0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial F_{M0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial \dot{m}_w}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial T_0}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_4}{\partial T_{a1}}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_5}{\partial F_{A0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial F_{B0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial F_{M0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial \dot{m}_w}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial T_0}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_5}{\partial T_{a1}}\right)_{EE} \\ \left(\frac{\partial h_6}{\partial F_{A0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial F_{B0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial F_{M0}}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial \dot{m}_w}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial T_0}\right)_{EE} & \left(\frac{\partial h_6}{\partial T_{a1}}\right)_{EE} \end{bmatrix}$$

Já os estados estacionários:

$$\mathbf{x}_{EE} = \begin{bmatrix} C_A^{EE} \\ C_B^{EE} \\ C_C^{EE} \\ C_M^{EE} \\ T^{EE} \\ T_t^{EE} \end{bmatrix} \quad (93)$$

São obtidos a partir da solução do seguinte sistema:

$$\begin{aligned} F_1 &= 0 \\ F_2 &= 0 \\ F_3 &= 0 \\ F_4 &= 0 \\ F_5 &= 0 \\ F_6 &= 0 \end{aligned}$$

Resolvido a partir da ferramenta *fsolve* do MATLAB R2020a® e depois implementados para a obtenção das matrizes A, B, C e D.

Já o ponto de operação utilizado para realização das simulações e mostrado na tabela a seguir:

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

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

4.2 ESTRATEGIAS DE CONTROLE

O objetivo de controle considerado em todos os esquemas é o mesmo: controlar a concentração de produto (C_C) e temperatura do reator (T) através da manipulação da vazão de água do trocador de calor (m_w) e vazão molar de óxido de propileno (F_{A0}).

4.2.1 IMPLEMENTAÇÃO DE ESTRATÉGIAS DE CONTROLE INFERENCIAL

São testadas e comparadas duas configurações de controle inferencial para o processo. Todas as malhas de controle são compostas pelo **controlador**, o **processo** e o

sensor virtual. Em todos os casos o sensor virtual é construído a partir de uma rede neural MLP no papel de soft sensor das saídas e entradas do processo.

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

$$IAE = \int_0^t |e(t)| dt \quad (94)$$

$$ISE = \int_0^t e(t)^2 dt \quad (95)$$

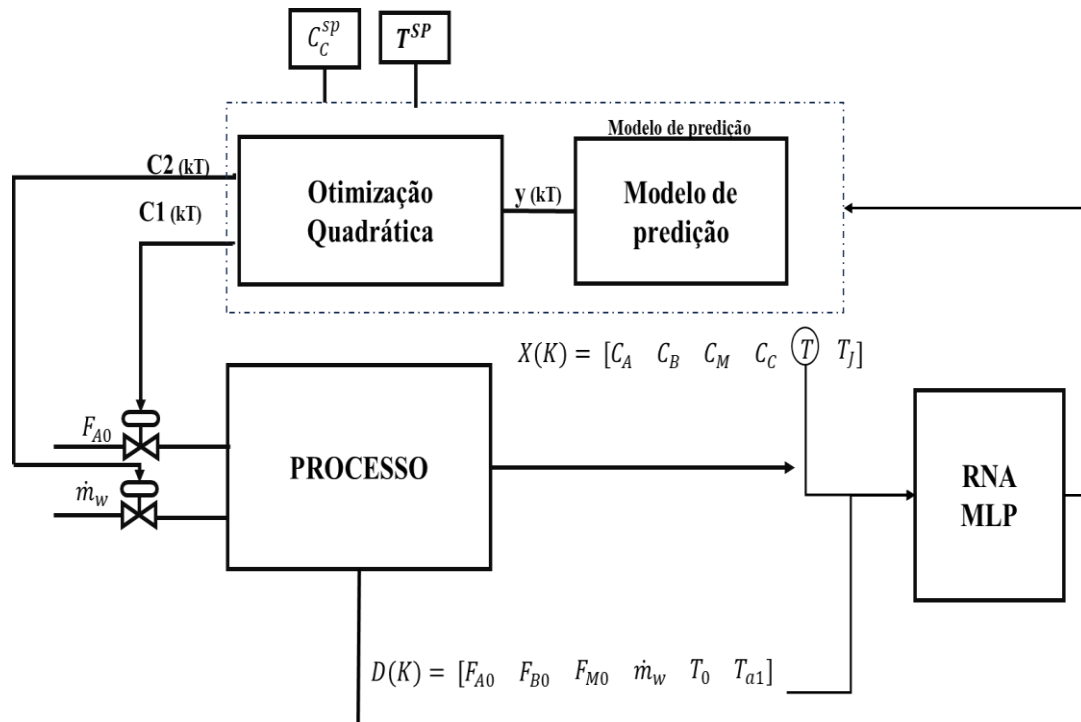
$$ITAE = \int_0^t |e(t)| t dt \quad (96)$$

$$ITSE = \int_0^t e(t)^2 t dt \quad (97)$$

4.2.2 Controle QDMC com modelo linear estático

Um controlador linear MPC é implementado na primeira estratégia de controle, como apresentado na Figura 11. O algoritmo de otimização usado neste trabalho é o PQ, este algoritmo é implementado pela função *quadprog* do MATLAB.

Figura 7 – Esquematização da aplicação de um controlador LMPC inferencial



Fonte: o autor.

O algoritmo do controle é discreto da seguinte forma:

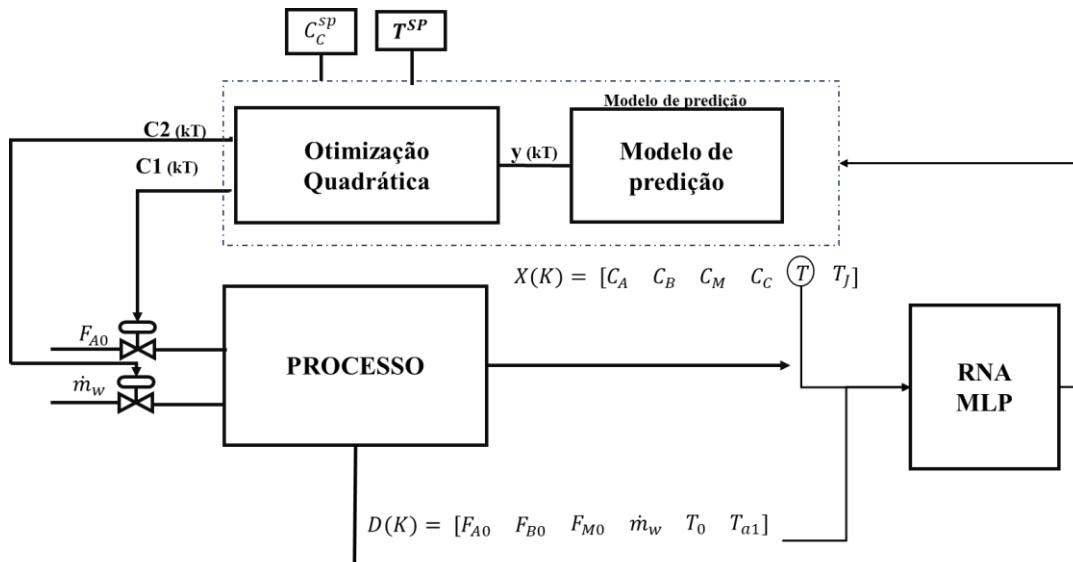
- **Previsão do Modelo:** O MPC utiliza o modelo linear do sistema, que foi linearizado em torno do ponto de operação atual, para fazer previsões sobre como o sistema evoluirá ao longo de um horizonte de previsão futuro. Isso inclui prever o comportamento das variáveis de estado ao longo do tempo com base nas entradas de controle previstas.
- **Definição do Critério de Desempenho:** O controlador especifica um critério de desempenho que deseja otimizar. Isso pode ser, por exemplo, a minimização do erro em relação a uma referência desejada, a minimização do consumo de energia ou a maximização da eficiência.
- **Formulação do Problema de Otimização:** Com base nas previsões do modelo e no critério de desempenho escolhido, o MPC formula um problema de otimização. Isso envolve a escolha das variáveis de controle ao longo de um horizonte de controle que otimizará o critério de desempenho.
- **Resolução do Problema de Otimização:** O MPC utiliza algoritmos de otimização para resolver o problema formulado. O objetivo é encontrar o conjunto de valores das variáveis de controle que minimizam ou maximizam o

critério de desempenho, sujeito a restrições operacionais, como limites nas variáveis de controle.

- **Aplicação do Sinal de Controle Ótimo:** Uma vez resolvido o problema de otimização, o MPC aplica o sinal de controle ótimo calculado ao sistema. Isso afeta o comportamento futuro do sistema.
- **Observação e Coleta de Dados em Tempo Real:** O MPC continua monitorando o sistema em tempo real e coletando medições reais das variáveis de estado. Isso permite que o controlador ajuste o próximo cálculo de controle com base nas condições atuais do sistema.
- **Iteração Contínua:** O processo de previsão, formulação do problema de otimização, resolução do problema e aplicação do controle é repetido em um ciclo contínuo. O MPC se adapta às mudanças nas condições do sistema e nas perturbações, recalculando o sinal de controle ótimo a cada iteração.

4.2.3 Controle AQDMC inferencial com modelo de previsão linear por Linearização Sucessiva

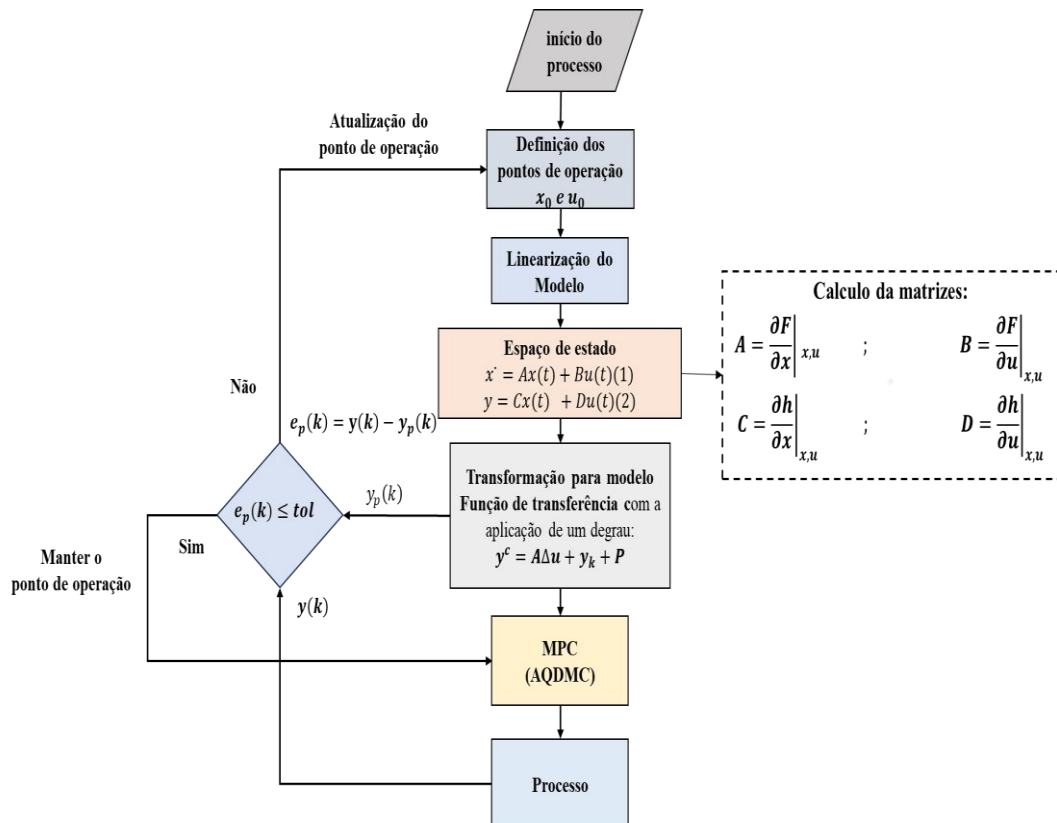
Figura 8 – Esquematização da aplicação de um controlador LMPC inferencial por Linearização Sucessiva



Fonte: o autor.

Com relação a atualização do modelo de predição o próximo ponto de operação não é diretamente medido, mas é determinado pelo Controle Preditivo com Modelos Lineares por Linearização Sucessiva (MPC) com base nas previsões do modelo e nas medições em tempo real do sistema. Abaixo segue o fluxograma do processo QDMC inferencial com modelo de predição linear por Linearização Sucessiva:

Figura 9 – Fluxograma do processo de Linearização sucessiva



Fonte: o autor.

Descrição,

- **Ponto de Operação Atual:** A linearização sucessiva começa com a determinação do ponto de operação atual do sistema. Este é o estado e as condições de entrada em que o sistema se encontra no momento.
- **Modelo Linear Local:** Com o ponto de operação atual definido, o próximo passo é criar um modelo linear local do sistema. Isso é feito calculando as derivadas parciais das equações que descrevem o comportamento do sistema em relação às variáveis de estado e entrada. Essas derivadas parciais são conhecidas como gradientes ou matrizes jacobianas.

- **Modelo Linear Resultante:** Ao calcular esses gradientes, se obtém uma representação linear do sistema em torno do ponto de operação atual. Isso é expresso na forma de uma matriz de espaço de estados que descreve como as variáveis de estado evoluem ao longo do tempo em resposta às entradas e a partir desse modelo se gera um modelo de resposta ao degrau unitário.
- **Validade Local:** É importante notar que o modelo linear é válido apenas em torno do ponto de operação atual. À medida que o sistema se move para diferentes estados de operação, o modelo precisa ser recalculado. Isso torna o MPC adaptável a mudanças nas condições do processo.
- **Previsão e Controle:** Com o modelo linear em mãos, o MPC usa-o para fazer previsões sobre como o sistema evoluirá ao longo de um horizonte de previsão e, em seguida, calcula o sinal de controle ótimo para otimizar o desempenho com base nessas previsões. O sinal de controle é aplicado ao sistema e o processo continua em um ciclo.
- **Iteração Contínua:** O processo de linearização sucessiva, previsão e controle é repetido continuamente em tempo real para manter o controle do sistema.

4.2.3.1 Função custo de otimização

$$\min_{\Delta u} J = \frac{1}{2} [\Delta u^T (A^T W^T W A + R) \Delta u] - e^T W^T W A \Delta u \quad (46)$$

Ou

$$\min_{\Delta u} J = \frac{1}{2} \Delta u^T H \Delta u + c^T \Delta u \quad (47)$$

Sendo:

$$H = (A^T W^T W A + R) \quad (48)$$

$$c^T = e^T W^T W A \Delta u \quad (49)$$

4.2.3.2. Sintonia dos Controladores

A sintonia do algoritmo MPC adaptativo e linear será realizada off-line e seguindo a recomendação de Seborg et al. (1989) e Ulusoy (2018), no qual:

- Admitir N normalmente é maior ou igual ao tempo de estabilização em malha aberta, que é igual ao tempo para a resposta ao degrau em malha aberta 99% completa;
- Com T_e e N , calcular T_s pela Eq. (98);

$$T_s = \frac{T_e}{N} \quad (98)$$

- Quanto ao horizonte de predição (R) (99);

$$R \geq \frac{T_e}{T_s} \quad (99)$$

- Uma estimativa de L recomenda-se 1/10 e 1/5 de do horizonte de predição Eq. (100);

$$\frac{R}{5} \geq L \leq \frac{R}{10} \quad (100)$$

Sujeito a:

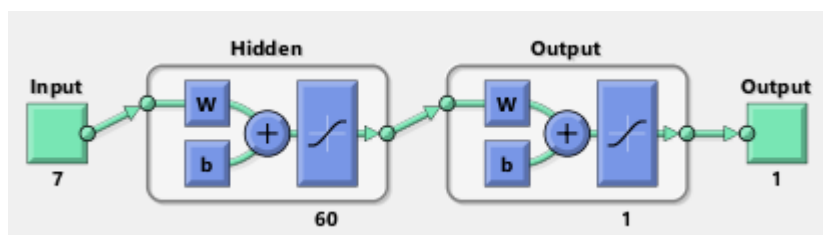
Como as variáveis escolhidas para MV são: F_{A0} e $\dot{m}_w$, foram assumidas restrições de +/- 80% em cima dos seus valores estacionários, e também e mostra as restrições nas PV:

$$\begin{aligned} [36.30 - 0.8 \cdot 36.30] \left(\frac{kmol}{h} \right) &\leq F_{A0} \leq [0.8 \cdot 36.30 + 36.30] \left(\frac{kmol}{h} \right) \\ [453.60 - 0.8 \cdot 453.60] \left(\frac{kmol}{h} \right) &\leq \dot{m}_w \leq [0.8 \cdot 453.60 + 453.60] \left(\frac{kmol}{h} \right) \\ [2.29 - 2.29 \cdot 0.8] \left(\frac{kmol}{m^3} \right) &\leq C_c \leq [0.8 \cdot 2.29 + 2.29] \left(\frac{kmol}{m^3} \right) \\ 250 (K) &\leq T \leq 355.4 (K) \end{aligned}$$

4.3 DESENVOLVIMENTO DOS SENSORES VIRTUAIS

A RNA empregada será Perceptron multicamadas (MLP). Utilizando os dados fornecidos pelo modelo não linear, em malha aberta, as redes foram submetidas ao treinamento supervisionado pelo método de Levenberg-Marquardt e validação cruzada combinada com parada antecipada, sendo tangente sigmóide a função de ativação da camada intermediária e o critério de tolerância igual a zero. A estrutura da rede está exibida a seguir.

Figura 10 – Estrutura da rede MLP (MATLAB R2020a®).



Fonte: MATLAB R2020a®

Os algoritmos foram desenvolvidos no MATLAB R2020a® e o erro quadrado médio (MSE), fornecido pelo software, foi o critério de seleção da melhor topologia do sensor virtual, isto é, a quantidade ótima de neurônios na camada oculta/intermediária. O procedimento de análise topológica está descrito a seguir.

Tabela 2 – Análise topológica dos sensores virtuais.

Número de Camadas Ocultas	Nº de Neurônios
1	20, 25 e 30.
2	[20 20], [15 20] e [20 25].
3	[20 20 20], [10 15 5] e [30 30 30].

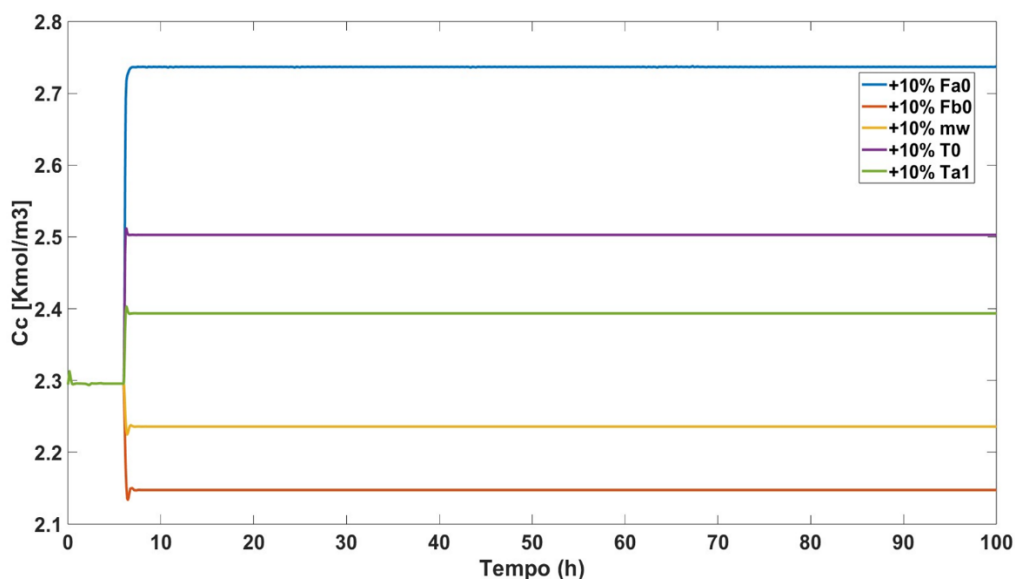
Assim, tomando como base a Tabela 5, foram avaliadas 9 RNAs para a estimativa da concentração de CC.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Foram inseridas perturbações de +10% nas seguintes variáveis: $[F_{A0} \ F_{B0} \ \dot{m}_w \ T_0 \ T_{a1}]$, sendo os resultados são apresentados na Figura 11:

Figura 11. Analise sensibilidade do processo



Fonte: Autor

A partir dos resultados obtidos e possível se retirar as seguintes observações:

- Percebe-se que, quando a vazão $FA0$ aumenta em 10% ($t = 8h$), o estado estacionário sofre grande variação, como é o reagente limitante, impacta diretamente na formação de produto.
- De maneira bastante semelhante ao que foi observado, o sistema sofre mudanças bruscas para quando a variável F_{B0} opera a 10% acima ($t = 8h$) do valor de projeto. Apesar de ser um reagente, água é alimentada em excesso e não participa da cinética da reação. Sendo assim, um aumento em F_{B0} acaba por retardar o desempenho do reator através de um aumento na constante de tempo e resfriando o processo.
- Quando se aumenta a vazão de água no trocador, mas o reator é resfriado e uma queda na temperatura do reator é percebida, consequentemente, causando uma diminuição na formação de propilenoglicol (CC).
- Após analisadas as vazões de entrada dos processos, os próximos distúrbios foram nas temperaturas dessas correntes. A penúltima variável avaliada foi a temperatura da corrente de alimentação do reator, T_0 , que apresentou grandes variações no processo semelhantes aos casos de mudanças em $FA0$ e $FB0$.
- Por último, o comportamento do sistema frente a perturbações na temperatura de entrada do fluido do trocador de calor, T_{a1} , é avaliado. Pode-se perceber que o sistema sofre um deslocamento brusco do estado estacionário quando aumenta a

temperatura do fluido de refrigeração, resfriando menos efetivamente a reação e aumentando sua taxa.

5.2. SENSOR VIRTUAL PARA O CONTROLE INFERENCIAL

5.2.1. Avaliação de Desempenho e Modelos Finais para Inferência

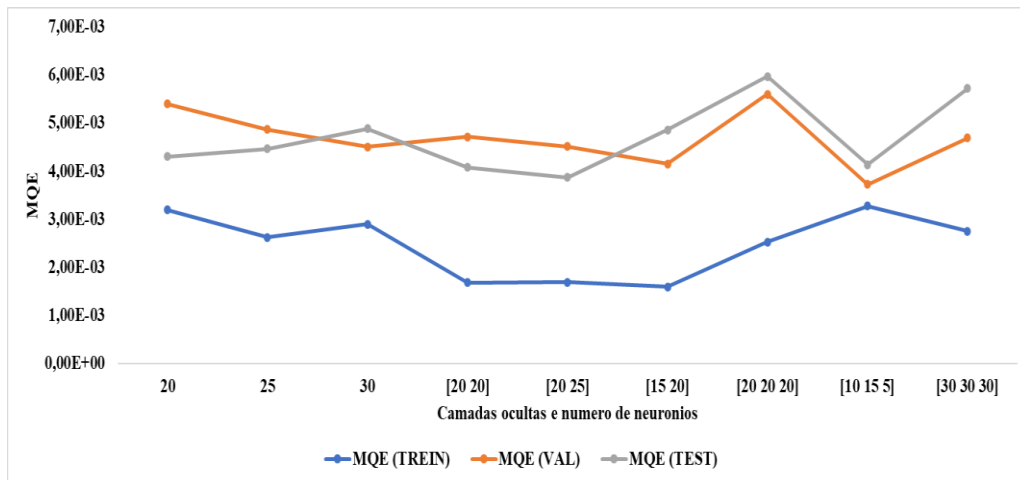
Nesta seção, são apresentadas as melhores RNA dos melhores modelos selecionados no estudo a partir do croos-vaidation. Essas redes foram avaliadas por meio do erro médio quadrático (MQE) nas etapas de treinamento, validação e teste. No qual a função de ativação utilizada foi tansig e o algoritmo de otimização Levenberg-Marquardt, foram escolhidos a partir de testes de desempenho e tempo de convergência. Os resultados aqui apresentados são referentes à saída CC, onde o modelo escolhido $[F_{A0} \ F_{B0} \ F_{M0} \ \dot{m}_w \ T_0 \ T_{a1} \ T]$. Logo, a Tabela 3 apresenta os valores das melhores RNA para o modelo correlacionado com a saída CC.

Tabela 3 - Melhores RNA do tipo MLP (Levenberg-Marquardt) para inferência da Concentração de CC.

Número de Camadas Ocultas	Número de Neurônios da(s) Camada(s) Oculta(s)	Funções de Ativação	Número de Épocas	MQE (TREIN)	MQE (VAL)	MQE (TEST)
1	20	tansig-tansig	14	3,19E-03	5,40E-03	4,30E-03
1	25	tansig-tansig	23	2,63E-03	4,87E-03	4,47E-03
1	30	tansig-tansig	22	2,90E-03	4,51E-03	4,89E-03
2	[20 20]	tansig-tansig	19	1,69E-03	4,71E-03	4,08E-03
2	[20 25]	tansig-tansig	16	1,69E-03	4,51E-03	3,87E-03
2	[15 20]	tansig-tansig	27	1,59E-03	4,15E-03	4,86E-03
3	[20 20 20]	tansig-tansig	15	2,53E-03	5,60E-03	5,97E-03
3	[10 15 5]	tansig-tansig	19	3,27E-03	3,72E-03	4,14E-03
3	[30 30 30]	tansig-tansig	16	2,75E-03	4,69E-03	5,72E-03

A Tabela 3 apresentam os valores obtidos do MQE para a topologias testadas, com uma, duas e três camadas ocultas. A Figuras 12 descreve, respectivamente, as 9 (nove) melhores RNA pré-selecionadas das etapas de treinamento e validação na estimativa de CC.

Figura 12 - 9 melhores RNA (MQE), Etapa Treinamento, validação e Teste das RNA para a saída CC.



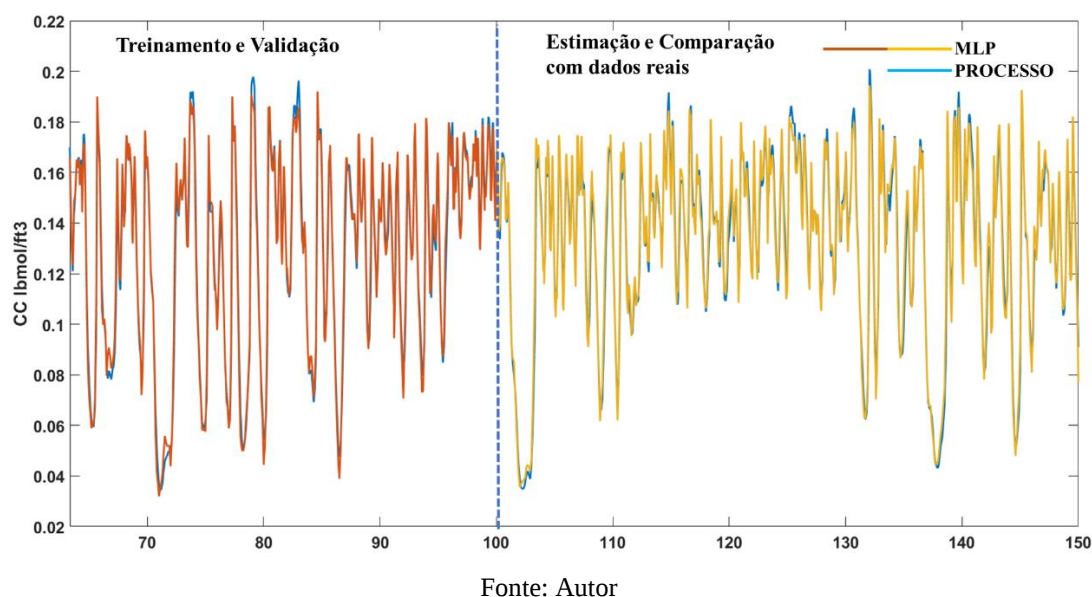
Fonte: Autor

Por fim, a RNA com 2 (duas) camadas ocultas e que utiliza nessa camada e na de saída, a função de ativação tangente sigmóide (no software Matlab® tansig), configuração [15 20], foi aquele que forneceu a melhor arquitetura à construção do sensor virtual de CC.

5.2.2. Análise Gráfica do Sensor Virtual da CC

O modelo final de inferência é definido como modelo de múltiplas entradas e única saída (MISO). Para o modelo é utilizada as medições das seguintes variáveis: $[F_{A0} \ F_{B0} \ F_{M0} \ \dot{m}_w \ T_0 \ T_{a1} \ T]$. Os gráficos das Figuras 14 apresenta, os resultados do conjunto de dados de treinamento e validação do sensor virtual neural para estimativa do CC e comparação com novos dados reais extraídos do modelo não linear que não foram utilizados na etapa de treinamento e validação, diante dos resultados produzidos pelo MATLAB R2020a® a partir da simulação do modelo não linear.

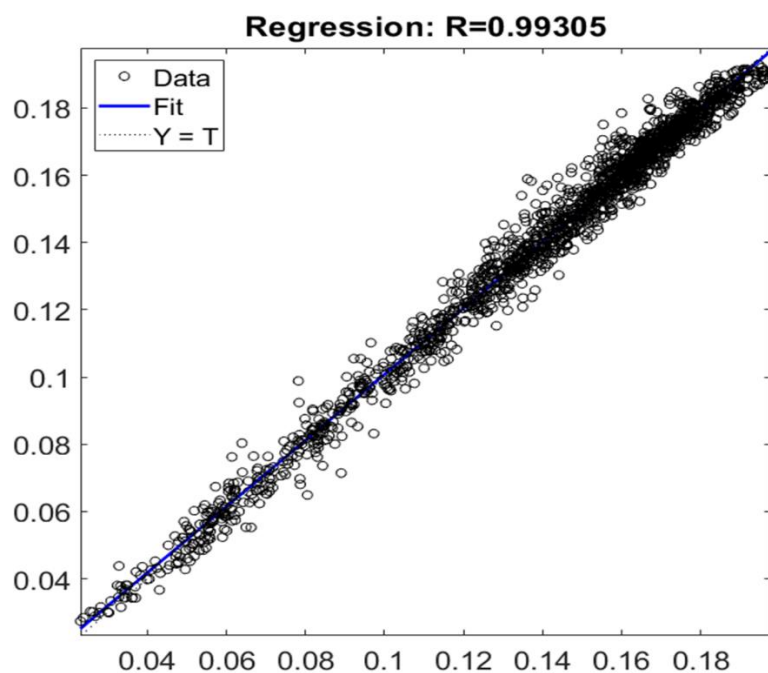
Figura 13. Dados de Treinamento, validação e reais do modelo: Sensor virtual neural do CC fornecida pelo simulador



Conforme a Figura 14, o sensor virtual foi submetido ao treinamento em um ambiente extremamente perturbado, mesmo assim ocorre sobreposição dos valores fornecidos pelo MATLAB R2020a®. Em observância aos mesmos gráficos, foi comparado com dados fora dos utilizados no treinamento e validação, e ela teve um bom desempenho na estimativa da variável e interesse. Assim sendo capaz de criar padrões de aprendizado e fornecer de maneira eficaz a concentração, CC. A validação cruzada foi utilizada nesse trabalho como critério de parada das RNA, onde o treinamento é interrompido a cada C iterações (épocas) e a partir do momento em que o erro medido no conjunto de teste apresentar crescimento, o treinamento é encerrado. Vale ressaltar que essa etapa foi alimentada com um conjunto de dados distintos dos quais elas foram treinadas (15% dos dados totais), entretanto sem extrapolar os limites de treinamento.

Além disso, realizamos uma análise de regressão dos dados como uma técnica para modelar o relacionamento entre duas ou mais variáveis.

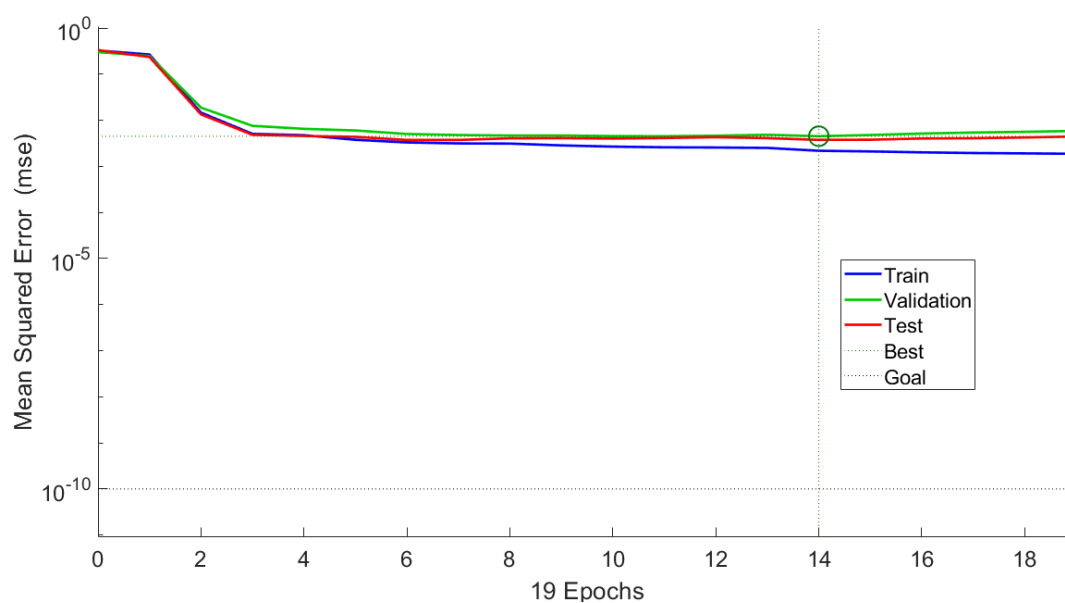
Figura 14. Dispersões dos dados estimados pelos SVN: regressão dos dados para CC



Fonte: Autor

No qual partir da regressão e possível mostra que o modelo se adequou-se bem aos dados com um $R=0.99305$. Ainda, para uma melhor avaliação do sensor virtual construído a partir do modelo de rede neural, foi empregado como índice de desempenho o erro médio quadrático médio gerado pelo MATLAB R2020a®; outros critérios podem ser utilizados como o da média do erro absoluto percentual (MAPE). O gráfico da Figura 14 apresentam, os valores de MQE durante as etapas do sensor virtual de CC.

Figura 15. Erro Médio Quadrático do sensor virtual de CC



Fonte: Autor

O gráfico de erros da Figura 15 mostra como a simulação se mostrou próxima da real, gerada pelo simulador, gerando um erro da ordem de 10^{-3} para CC, se mostrando eficaz para sua finalidade como sensor virtual.

5.3. ESTRATÉGIA DE CONTROLE PREDITIVO

5.3.1. Sintonia

Dois controles de modelo preditivo linear foram construídos e seu desempenho frente a distúrbios na planta e mudanças no setpoint foram comparados. Esta seção descreve os resultados obtidos nas etapas de sintonia, resposta do processo a perturbações e imposição de restrições do processo ao controlador. Na qual os parâmetros escolhidos para os controladores são mostrados a seguir na tabela 4, de acordo com a sintonia foi proposta por Seborg, Edgar e Mellichamp (1989), e se baseia no modelo de resposta ao degrau unitário na variável manipulada. A partir dessa resposta e com o auxílio das correlações fornecidas no item 4.2.3.2, foi possível obter uma primeira estimativa para o tempo de amostragem (T_s), horizonte de controle (L), horizonte de predição (R) e fator de supressão de movimento da entrada e saída (R e Q). Normalmente, os parâmetros estimados por esta técnica são bons pontos de partida para a sintonia, requerendo em algumas situações, apenas ajuste fino.

Tabela 4 – Parâmetros de sintonia dos controladores utilizados

Controladores	Tempo de amostragem (T_s)	Horizontes	Matrizes de ponderação
QDMC	0.015 h	$L=24$, $R=60$	$Q=[1;1]$, $R=[1e-1;1e-4]$ e $N=80$;
AQDMC		$L=12$, $R=60$	$Q=[1;1]$, $R=[1e-1;1e-4]$ e $N=80$;

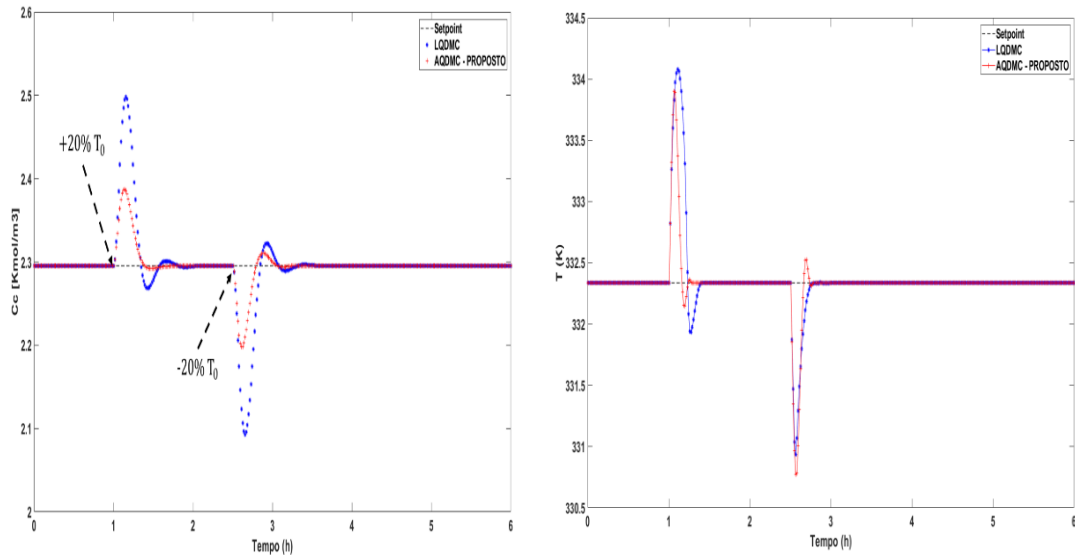
5.3.2. Comparação entre as estratégias de controle propostas

Para avaliar o desempenho de cada estratégia de controle, foram realizadas perturbações e modificações no setpoint do processo. Além da avaliação quantitativa utilizando métricas como ITAE, ITSE, IAE e ISE, também foi analisado o overshoot percentual para destacar o processo que menos se afastou do ponto operacional.

Primeiramente, introduzimos uma perturbação na temperatura da corrente de alimentação (T_0). O tempo de simulação para todos os testes foi de 6 horas. Realizamos

duas perturbações em degrau: +20% em $t = 1$ h e -20% em $t = 2.5$ h. Os resultados dinâmicos estão representados na Figura 29.

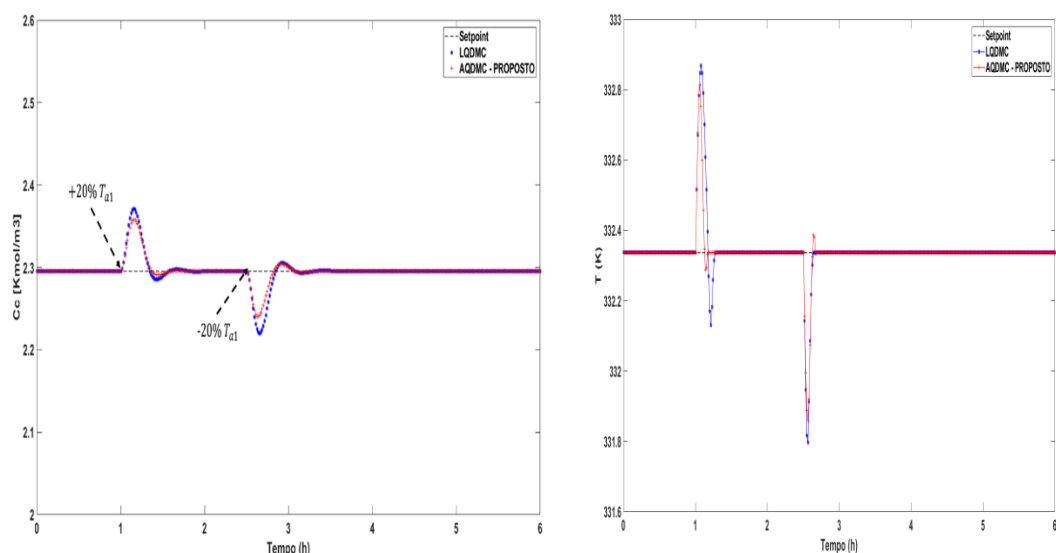
Figura 16 – Resposta dos controles a perturbações em T_0



Fonte: o autor.

Ambos os esquemas de controle conseguiram manter a variável do processo próxima ao setpoint diante das perturbações. No entanto, o controlador proposto AQDMC demonstrou ter um overshoot menor e um tempo de estabilização mais curto em comparação ao outro controlador. Ao perturbar a temperatura da corrente de alimentação de água do trocador de calor, T_{a1} , observamos um comportamento semelhante, com o controlador AQDMC apresentando um overshoot ligeiramente menor em comparação ao outro controlador.

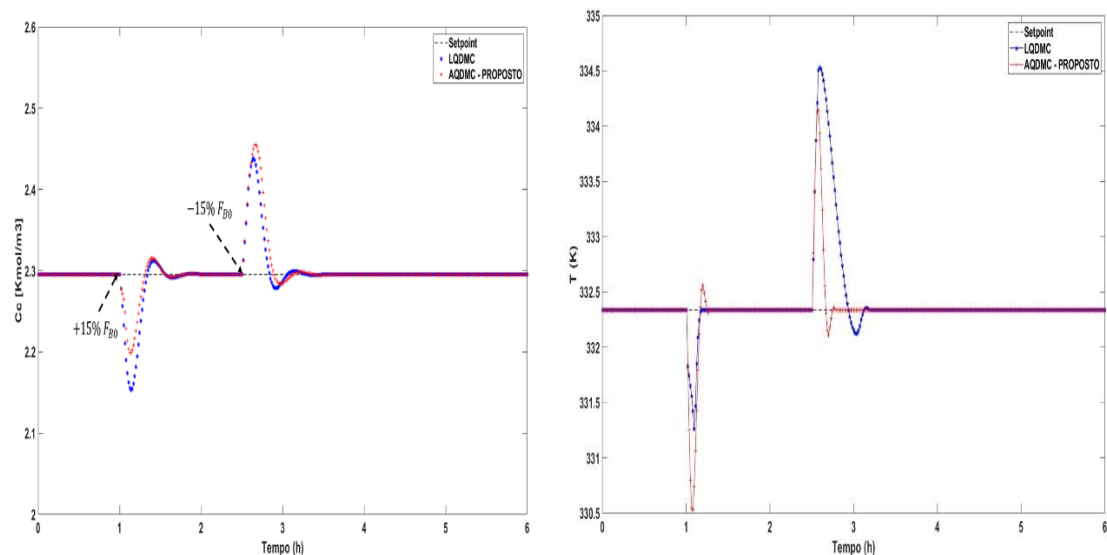
Figura 17 – Resposta dos controles a perturbações em T_{a1}



Fonte: o autor.

Aplicando uma perturbação na vazão de entrada de interne F_{B0} , observamos que ambos os controladores conseguiram contornar a perturbação e devolver o processo ao setpoint. Ambos apresentaram um desempenho muito semelhante em termos de overshoot e tempo de estabilização.

Figura 18 – Resposta dos controles a perturbações em F_{B0}

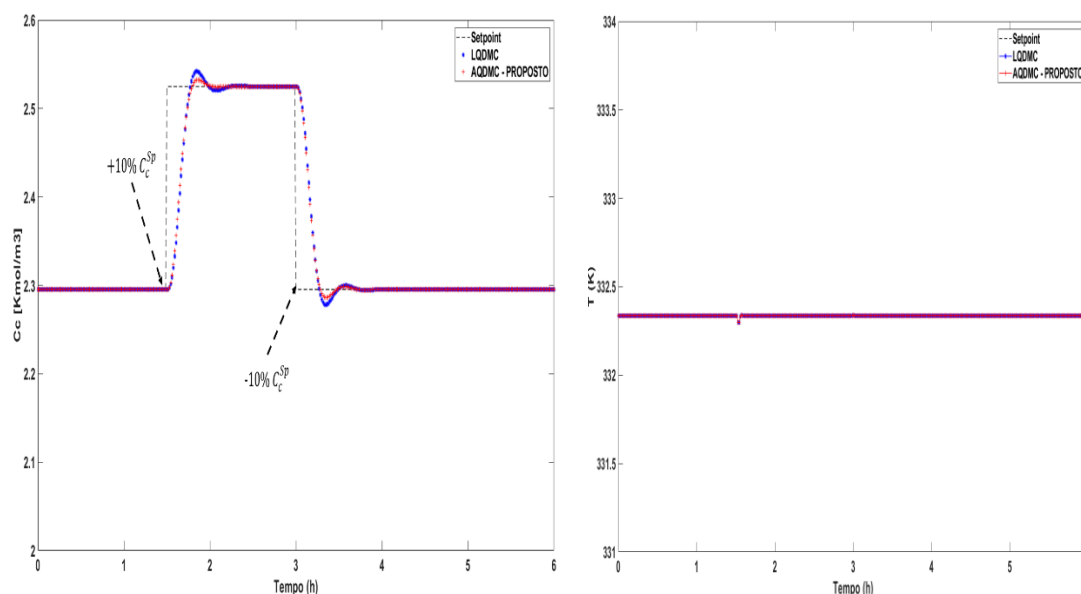


Fonte: o autor.

A análise dos gráficos nas Figuras 16 a 18 revela que os controladores LQDMC e AQDMC tiveram um comportamento semelhante na rejeição de perturbações, demonstrando um desempenho satisfatório. No entanto, o AQDMC se destacou, exibindo um menor overshoot e um tempo de estabilização mais curto, enfatizando que o controlador proposto é superior ao MPC linear convencional.

Para avaliar o comportamento servo dos controladores foi feito uma modificação no setpoint de concentração de propileno glicol (CC): -10% em $t = 1,5$ h; e +10% em $t = 3$ h

Figura 19 – Resposta dos controles a variações no setpoint.



Fonte: o autor.

A Figura 19 mostra que tanto o controlador linear convencional quanto o com linearizações sucessivas seguem trajetórias semelhantes ao novo ponto de operação quando as alterações no novo setpoint são aplicadas. No entanto, é importante notar que o controlador proposto apresentou um desempenho ligeiramente superior ao controlador simples. Para uma avaliação quantitativa, utilizamos os valores dos critérios de erro obtidos nos casos apresentados até então, conforme detalhado na Tabela 5. Os resultados destacam que o AQDMC apresentou valores menores de ITAE, ITSE, IAE e ISE em todos os casos analisados, consolidando sua superioridade em relação ao controlador de comparação.

Tabela 5 – Critérios de erro integrado para os controladores

Distúrbio	Controle	IAE		ISE	
		CC	T	CC	T
FB0	LQDMC	0.00062	0.19086	3,80E-02	0.49483
	AQDMC	0.00059	0.10789	3,55E-02	0.25518
T0	LQDMC	0,00089	0.13757	7,64E-06	0.29517
	AQDMC	0,00038	0.09156	1,55E-06	0.18686

TA1	LQDMC	0,00034	0.03154	1,07E-06	0.021953
	AQDMC	0,00025	0.02121	6,51E-07	0.013609
SP	LQDMC	0,00079	0.00040	8,78E-06	2.52e-05
	AQDMC	0,00084	0.00039	8,44E-06	2.45e-05

Tabela 4 – Critérios de erro integrado para os controladores
continua

ITAE		ITSE	
CC	T	CC	T
0.00128	0.46757	8,30E-03	1.252
0.00120	0.19822	7,24E-03	0.4665
0,00174	0.22054	1,46E-05	0.4389
0,00072	0.16806	2,89E-06	0.34116
0,00066	0.051109	2,04E-06	0.0359
0,00048	0.03853	1,16E-06	0.0246
0,0019	0.000633	2,04E-05	3.90e-05
0,002	0.000648	1,96E-05	3.79e-05

6. CONCLUSÕES

Este estudo teve como objetivo principal o desenvolvimento e a aplicação de metodologias voltadas para a construção e implementação de sensores virtuais em um contexto industrial. O foco recaiu na estimativa de variáveis que tradicionalmente são desafiadoras de medir. Além disso, buscou-se implementar esquemas de controle inferencial para lidar com as complexidades de um processo industrial caracterizado por altas não linearidades e restrições operacionais significativas. No decorrer da pesquisa, realizamos simulações dinâmicas do sistema para avaliar o impacto dos distúrbios do processo na estabilidade operacional. A partir dessas simulações, construímos e implementamos redes neurais como sensores virtuais, com o intuito de estimar com precisão as variáveis de difícil medição, fornecendo uma base sólida para o controle inferencial. Em seguida, realizamos uma análise comparativa entre estratégias de controle, colocando em perspectiva o controle preditivo convencional (QDMC) e o controle preditivo adaptativo (AQDMC). Os resultados foram notáveis, uma vez que o

AQDMC demonstrou um desempenho superior. Ele manteve o processo próximo ao ponto operacional com menor overshoot e tempo de estabilização em comparação com o QDMC, o que é de suma importância na operação de sistemas altamente dinâmicos e sensíveis a perturbações. Além disso, avaliamos o desempenho dos controladores em face de perturbações no ponto ótimo do processo e em variáveis de distúrbios. Essas análises aprofundadas destacaram a robustez e a adaptabilidade dos controladores propostos, fortalecendo ainda mais sua eficácia no contexto industrial. Portanto, este estudo oferece uma contribuição relevante para o campo da engenharia de controle e automação, mostrando que a implementação de sensores virtuais baseados em redes neurais e estratégias de controle inferencial, como o AQDMC, tem o potencial de aprimorar substancialmente a eficiência e a qualidade dos processos industriais, sobretudo em ambientes altamente complexos e não lineares.

7. REFERÊNCIAS

- BEALE, Mark Hudson; HAGAN, Martin T.; DEMUTH, Howard B. Neural Network Toolbox: User's Guide. 7. ed. [S. l.: s. n.], 2010.
- BOUSSAADA, Zina *et al.* A Nonlinear Autoregressive Exogenous (NARX) Neural Network Model for the Prediction of the Daily Direct Solar Radiation. *Energies*, [s. l.], 2018.
- BRANDÃO, W. Y. A. Uso de observadores de estado aplicados no controle inferencial preditivo de processos não lineares. 2019. Dissertação – Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba.
- CURRERI, Francesco *et al.* Input Selection Methods for Soft Sensor Desing: A Survey. *Future internet*, [s. l.], 4 jun. 2020.
- Cutler CR, Ramaker BL (1980) Dynamic matrix control - a computer control algorithm. *Jt Autom Control Conf* 17:72
- DUWAISH, H., GHOUTI, L., HALAWANI, T., AND MOHANDÉS, M. Use of artificial neural networks process analyzers: a case study. *ESANN'2002 proceedings - European Symposium on Artificial Neural Networks Bruges (Belgium)*, pp. 465-470, 2002.
- FOGLER, H. S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**, 4ª Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.
- FORSTER, Carlos Henrique Q. CC-226 Aula 03 - Análise de Regressão. [S. l.: s. n.], 2008.
- GEORGE, Edward I. The Variable Selection Problem. The Variable Selection Problem, University of Texas, 2000.
- GOODFELLOW, Ian; BENGIO, Yoshua; COURVILLE, Aaron. Deep Learning. [S. l.: s. n.], 2016.
- JANG, J. S. R.; SUN, C. T.; e MIZUTANI, E. Neuro-fuzzy and soft computing. Editora Prentice Hall, New Jersey, 1ª edição, 1997.
- KWONG, W. Introdução ao Controle Preditivo com MATLAB. [S.l.]: São Carlos, SP, 2005.
- Li S, Jiang P, Han K (2019) RBF neural network based model predictive control algorithm and its application to a CSTR process. In: 2019 Chinese Control Conference (CCC), IEEE, Guangzhou, China, pp 2948–2952, <https://doi.org/10.23919/ChiCC.2019.8865797>.
<https://ieeexplore.ieee.org/document/8865797/>
- LI, Dongfeng; LI, Zhirui; SUN, Kai. Development of a Novel Soft Sensor with Long Short-Term Memory Network and Normalized Mutual Information Feature Selection. *Mathematical Problems in Engineering*, [s. l.], 2020.
- 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.

MANDIC, Danilo P.; CHAMBERS, Jonathon A. RECURRENT NEURAL NETWORKS FOR PREDICTION. [S. l.]: John Wiley & Sons Ltd, 2001.

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

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

OSICH, A.; OCAMPO-MARTINEZ, C. Real-time experimental implementation of predictive control schemes in a small-scale pasteurization plant. In: Developments in Model-Based Optimization and Control. [S.l.]: Springer, 2015. p. 255–273.

P. Mendis, C. Wickramasinghe, M. Narayana and C. Bayer, "Adaptive Model Predictive Control with Successive Linearization for Distillate Composition Control in Batch Distillation," *2019 Moratuwa Engineering Research Conference (MERCon)*, Moratuwa, Sri Lanka, 2019, pp. 366-369, doi: 10.1109/MERCon.2019.8818777.

Piche S, Sayyar-Rodsari B, Johnson D, Gerules M (2000) Nonlinear model predictive control using neural networks. *IEEE Control Sys* 20(3):53–62, <https://doi.org/10.1109/37.845038>

POPESCU, MARIUS-CONSTANTIN *et al.* Multilayer Perceptron and Neural Networks. *WSEAS TRANSACTIONS on CIRCUITS and SYSTEM*, [s. l.], v. 8, 1 jul. 2009.

Prasad GM, Kedia V, Rao AS (2020) Multi-model predictive control (MMPC) for non-linear systems with time delay: an experimental investigation. In: 2020 First IEEE International Conference on Measurement, Instrumentation, Control and Automation (ICMICA), IEEE, Kurukshetra, India, pp 1–5, <https://doi.org/10.1109/ICMICA48462.2020.9242772>. <https://ieeexplore.ieee.org/document/9242772/>

Richalet J, Rault A, Testud JL, Papon J (1978) Model predictive heuristic control. *Automatica* 14(5):413–428, [https://doi.org/10.1016/0005-1098\(78\)90001-8](https://doi.org/10.1016/0005-1098(78)90001-8)

RICHALET, J.; O'DONOVAN, D. Predictive functional control: principles and industrial applications. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009.

S. Li, P. Jiang and K. Han, "RBF Neural Network based Model Predictive Control Algorithm and its Application to a CSTR Process," *2019 Chinese Control Conference (CCC)*, Guangzhou, China, 2019, pp. 2948-2952, doi: 10.23919/ChiCC.2019.8865797.

SCHWEDERSKY, B. B. Contribuições para o controle preditivo não linear prático com modelos identificados por redes de estado de eco. 2022. Tese – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

SCHWENZER, Max *et al.* Review on model predictive control: An engineering perspective. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v. 117, n. 5-6, p. 1327-1349, 2021.

SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A. Process Dynamics and Control. 1. ed. United States of America: John Wiley & Sons, 1989.

SHAFI, Imran *et al.* Impact of Varying Neurons and Hidden Layers in Neural Network Architecture for a Time Frequency Application. IEEE International Multitopic Conference, [s. l.], 2006.

SHALEV-SHWARTZ, Shai; BEN-DAVID, Shai. UNDERSTANDING MACHINE LEARNING: From Theory to Algorithms. [S. l.: s. n.], 2014.

SILVA, I. N.; SPATTI, D. H.; e FLAUZINOR, R. A. Redes neurais artificiais para engenharia e Ciências aplicadas: curso prático. São Paulo, Editora Artliver, 2010.

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

VARELLA, Carlos Alberto Alves. Análise de Componentes Principais: Análise Multivariada Aplicada as Ciências Agrárias. Análise de Componentes Principais, [s. l.], 11 dez. 2008.