

ÍNDICE

Índice de figuras	v
Índice de tabelas	vii
Índice de corolários, condições, definições e teoremas	x
Índice de lemas e proposições e suas provas	xii
Índice de problemas e exemplos da PNL	xiii
Relação de siglas	xv
Nomenclatura geral	xvii
Resumo	xxxii
Abstract	xxxiii

Capítulo 1:	Introdução - o problema estudado	1
--------------------	---	----------

I.	Motivação - o problema de otimização da unidade FCC	1
II.	O ambiente industrial e a necessidade da otimização - o problema de otimização em tempo real	3
III.	Estudos realizados e relevância destes - objetivos e inovação	8
IV.	A tese - forma de apresentação	12

Capítulo 2:	O problema da PNL e seus algoritmos de solução	15
--------------------	---	-----------

I.	O problema de programação não linear (PPNL)	15
II.	Algoritmos de solução do PPNL	21
III.	Os algoritmos SQP	24

III.1	Introdução	24
III.2	Cálculo dos gradientes dos mapeamentos f, h, g	27
III.3	Cálculo do Hessiano	27
III.4	O problema da PQ e sua solução	31
III.5	Definição da função de mérito e o problema de busca unidirecional	51
III.6	Critérios de parada	54
Capítulo 3:	O algoritmo MISQPSOL	57
Capítulo 4:	Análise do algoritmo MISQPSOL	83
I.	Prólogo	83
II.	Elaboração de resultados básicos	86
II.1	Formalizações matemáticas	86
II.2	Resultados sobre a existência de solução do problema da PQ - formalização de condições necessárias ou suficientes	91
III.	Obtenção da direção de busca nos métodos SQP	97
IV.	Os problemas com restrições de desigualdade da PQ não convexos oriundos da PNL	101
V.	Análise do algoritmo MISQPSOL para problemas da PNL com restrições de desigualdade apenas	108
VI.	Extensão da análise do algoritmo MISQPSOL: problemas com restrições de igualdade	115
VII.	Comentários finais do algoritmo MISQPSOL	116
Capítulo 5:	Validação do algoritmo MISQPSOL	118

I.	Prólogo	118
II.	Problemas típicos da literatura	121
 Capítulo 6: Otimização de um conversor FCC em tempo real - abordagem de uma e duas camadas		133
I.	Prólogo: o problema de otimização do conversor FCC	133
II.	O processo	136
III.	As restrições operacionais	140
IV.	Os objetivos de otimização e controle	144
V.	O modelo econômico de maximização da produção de GLP	146
VI.	Os modelos do processo considerados	148
VI.1	Modelos dinâmicos de predição da trajetória de controle	148
VI.2	Modelos de predição do estado estacionário	150
VI.2.1	Obtenção dos valores de referência	150
VI.2.2	Relação das ações de controle com o ponto de operação	151
VI.2.3	Modelo do processo estático não linear	152
VI.2.4	Modelo do processo linear simplificado que leva em conta as ações de controle	156
VI.2.5	Modelos do processo lineares estáticos	157
VII.	A lei de controle do algoritmo preditivo na otimização em duas camadas	158
VIII.	Parâmetros de sintonia do algoritmo MISQPSOL	160
IX.	Otimização em duas camadas	162
IX.1	As abordagens consideradas	162
IX.2	Resultados da abordagem 1 - uso do modelo linear simplificado	170
IX.3	Resultados da abordagem 2 - uso do modelo linear com todas as variáveis	172
IX.4	Resultados da abordagem 3 - uso do modelo não linear	175

IX.5	Efeito de erros na obtenção dos ganhos estáticos no desempenho da estratégia	180
X.	Otimização em uma camada	182
X.1	A abordagem considerada	182
X.2	Inclusão de restrições nas ações de controle apenas para o primeiro instante de previsão	187
X.3	Inclusão de restrições nas ações de controle para todos os instantes	192
XI.	Comparação entre as estratégias de otimização	193
Capítulo 7:	Conclusões e sugestões para a continuidade da pesquisa	199
I.	Prólogo	199
II.	Principais conclusões sobre o desenvolvimento do algoritmo MISQPSOL	201
III.	Principais conclusões com relação ao problema de otimização em tempo real	202
IV.	Sugestões para a continuidade da pesquisa de desenvolvimento do algoritmo MISQPSOL	203
V.	Sugestões para a continuidade dos estudos de implementação da estratégia de otimização em tempo real	205
Capítulo 8:	Referências bibliográficas	207
Apêndice 1:	Apresentação das provas dos lemas do capítulo 4	222
Apêndice 1:	Exemplos usados na validação do algoritmo MISQPSOL	238

ÍNDICE DE FIGURAS

figura 1.II.1	esquema da otimização: (a) em duas camadas (b) em uma camada	4
figura 2.III.4.1	representação de um espaço típico viável da PQ	34
figura 2.III.4.2	estratégia de Varvarezos et ali (1994) para aumentar a eficiência do algoritmo SQP	49
figura 4.IV.1	representação do problema da PQ dado em (E2) com $a = 1$	102
figura 4.IV.2	representação do crescimento comparativo de termos da função objetivo de (E2)	103
figura 4.V.1	caracterização das soluções obtidas pelo algoritmo de solução dos problemas da PQ	113
figura 6.I.1	esquema de uma unidade FCC típica	133
figura 6.I.2	esquema da estratégia de otimização em duas camadas	112
figura 6.I.3	esquema da estratégia de otimização em uma camada	116
figura 6.IX.1.1	esquema da estratégia de otimização em duas camadas	162
figura 6.IX.2.1	evolução da função objetivo econômica na otimização em duas camadas com modelo simplificado	171
figura 6.IX.3.1	evolução da função econômica na otimização em duas camadas com o modelo linear incluindo todas as variáveis manipuladas	173
figura 6.IX.4.1	(a) evolução do ganho econômico (b) comportamento da malha de T_{rx}	179

figura 6.X.1.1	esquema da estratégia de otimização em uma camada	182
figura 6.X.2.1	variação da função objetivo na otimização em uma camada com limitação nas ações de controle apenas no primeiro instante	189
figura 6.X.2.2	comparação dos valores previstos na estratégia de otimização em uma camada efetivados pelo processo com limitação apenas na primeira ação de controle - T_{rx} e T_{rg2}	189
figura 6.X.2.3	comparação dos valores previstos na estratégia de otimização em uma camada efetivados pelo processo com limitação apenas na primeira ação de controle - T_{fp} e R_{ai}	189
figura 6.X.2.4	comparação dos valores previstos na estratégia de otimização em uma camada efetivados pelo processo com limitação apenas na primeira ação de controle - c_{TCV}	190
figura 6.X.2.5	influência da predição futura para uma adequada previsão do estado estacionário ótimo	192
figura 6.X.3.1	evolução da função objetivo econômica na otimização em uma camada com limitação em todas as ações de controle previstas	192
figura 6.XI.1	desempenho comparativo da função objetivo econômica para as diversas estratégias de otimização	194
figura 6.XI.2	comportamento da abertura da válvula TCV (a) ações de controle implementadas nos instantes iniciais (b) dinâmica da abertura da válvula	195
figura 6.XI.3	comportamento das variáveis manipuladas T_{fp} e R_{ai}	195
figura 6. XI.4	comportamento das variáveis controladas T_{rg2} e T_{rx}	196
figura A.1	representação do exemplo 6	248
figura A.2	representação da região viável do exemplo 11	256

ÍNDICE DE TABELAS

tabela 3.1	Nomenclatura empregada na descrição do algoritmo MISQPSOL	61
tabela 3.2	Sumário da sequência de operações do algoritmo MISQPSOL	66
tabela 3.3	Sumário das operações de resolução da condição da KKT da PQ para o caso irrestrito	73
tabela 5.I.1	Classificação de características indesejáveis de problemas da PNL	120
tabela 5.II.1	Quadro resumo das simulações realizadas	121
tabela 5.II.2	Caracterização das soluções obtidas	128
tabela 5.II.3	Quadro resumo das simulações para parâmetros fixos	129
tabela 5.II.4	Tempo computacional requerido para alguns problemas	131
tabela 5.II.5	Quadro resumo da estatística das simulações	131
tabela 6.II.1	Ponto de operação do conversor FCC anterior à otimização	138
tabela 6.II.2	Propriedades da carga	138
tabela 6.III.1	Restrições operacionais	140
tabela 6.V.1	Constantes do modelo de caracterização do rendimento em GLP	146
tabela 6.V.2	Constantes do modelo de conversão volumétrica	147
tabela 6.VI.2.3.1	Parâmetros do modelo rigoroso	155
tabela 6.VI.2.3.2	Variáveis operacionais não modeladas: valores típicos	156
tabela 6.VI.2.5.1	Ganhos estáticos do modelo linear estático	158

tabela 6.VIII.1	Os parâmetros do algoritmo MISQPSOL usados	160
tabela 6.VIII.2	Escalonamento efetuado	161
tabela 6.IX.2.1	Parâmetros de sintonia do controlador para a abordagem 1	170
tabela 6.IX.2.2	Resultados do estado estacionário ótimo obtido para a otimização em duas camadas - modelo simplificado	170
tabela 6.IX.3.1	Parâmetros de sintonia do controlador para a abordagem 2	172
tabela 6.IX.3.2	Resultados do estado estacionário obtido para a otimização em duas camadas com o modelo linear incluindo todas as variáveis manipuladas	172
tabela 6.IX.4.1	Ponto de operação previsto pelo otimizador com modelo não linear com grande limitação no teor de coque	176
tabela 6.IX.4.2	Ponto de operação previsto pelo otimizador com modelo não linear com pequena limitação no teor de coque	176
tabela 6.IX.4.3	Variações nas variáveis medidas fixas do modelo não linear	177
tabela 6.IX.4.4	Aumento da faixa de operação nas concentrações	178
tabela 6.IX.5.1	Efeito de variações nos parâmetros do modelo linear simplificado para a configuração 3	180
tabela 6.IX.5.2	Efeito de variações nos parâmetros do modelo linear incluindo todas as variáveis manipuladas	181
tabela 6.X.2.1	Parâmetros de sintonia usados na obtenção dos resultados da tabela 6.X.2.2	187
tabela 6.X.2.2	Efeito da matriz de supressão de movimentos no desempenho da otimização em uma camada - limitação apenas na primeira previsão das ações de controle	188
tabela 6.X.2.3	Ampliação do horizonte de predição	188
tabela 6.X.2.4	Parâmetros de sintonia usados na obtenção dos resultados da figura 6.X.2.5	191
tabela 6.X.3.1	Parâmetros de sintonia usados na obtenção dos resultados da	192

tabela 6.X.3.2

tabela 6.X.3.2	Resultados do estado estacionário obtido para a otimização em uma camada com limitação em todas as ações de controle	193
tabela A.1	Valores das constantes das funções do exemplo 10	253
tabela A.2	Constantes do modelo do exemplo 14	259
tabela A.3	Valores dos limites das variáveis do exemplo 14	260
tabela A.4	Constantes do modelo do exemplo 15	262
tabela A.5	Valores dos limites das variáveis do exemplo 15	262
tabela A.6	Constantes do modelo do exemplo 16	264
tabela A.7	Valores dos limites das variáveis do exemplo 16	264
tabela A.8	Valores dos limites das variáveis do exemplo 17	267

ÍNDICE DE COROLÁRIOS, CONDIÇÕES, DEFINIÇÕES E TEOREMAS

corolário 2.II.4.1	da fatoração QR	39
corolário C1	do critério de otimalidade da PL	96
condição C1	qualificação de restrições	17
condição C2	condição de otimalidade	17
condição C3	qualificação de restrições	18
condição C4	qualificação de restrições	18
condição C5	qualificação de restrições	18
condição KKT	condição de otimalidade de Karush Kuhn Tucker	18
condições p1 a p3	condições de otimalidade para problemas da PQ	91
condições p4 a p6	condições de otimalidade para problemas da PQ	92
definição 2.I.1	do ponto regular	17
definição 2.I.2	do plano tangente Π	19
definição D1	da solução de KKT	86
definição D2	do problema da PQ indefinido	86
definição D3	do problema da PQ crítico	86
definição D4	do problema da PQ ardiloso	86
definição D5	do sistema da KKT estendido	87
definição D6	do resíduo do sistema estendido ou do resíduo do problema de mínimos quadrados associado ao sistema de KKT	87
teorema 2.I.1	condição de otimalidade suficiente do problema P1	17

teorema 2.I.2	condição de otimalidade necessária para casos particulares dos problemas P1 e P2	17
teorema 2.I.3	condição suficiente de otimalidade	19
teorema 2.I.3: (variante 1)	condição suficiente de otimalidade	19
teorema 2.I.3: (variante 2)	condição suficiente de otimalidade	19
teorema 2.III.4.1	da região viável mínima da PQ	34
teorema 2.III.4.2	da fatoração QR	39
teorema TL1	teorema de Penrose	87
teorema TL2	da localização de soluções ótimas em problemas com f convexas	93
teorema TL3	da localização de soluções ótimas em problemas da PQ não estritamente convexas	93
teorema TL4	da fronteira relativa	94
teorema TL5	do critério de otimalidade da PL	95

ÍNDICE DE LEMAS E PROPOSIÇÕES E SUAS PROVAS

Lema/Proposição	Enunciado	Apresentação da prova
proposição P1	94	trivial
proposição P2	112	trivial
proposição P3	112	trivial
proposição P4	113	trivial
lema L1	88	222
lema L2	88	222
lema L3	88	223
lema L4	88	225
lema L5	89	226
lema L6	92	228
lema L7	93	229
lema L8	93	230
lema L9	94	230
lema L10	95	231
lema L11	96	231
lema L12	96	232
lema L13	108	233
lema L14	108	233
lema L15	108	234
lema L16	108	235
lema L17	109	235
lema L18	109	236
lema L19	110	237

ÍNDICE DE PROBLEMAS E EXEMPLOS DA PNL

exemplo 1	239
exemplo 2	240
exemplo 2.III.3.1	28
exemplo 3	242
exemplo 4	244
exemplo 5	245
exemplo 6	246
exemplo 7	248
exemplo 8	250
exemplo 9	251
exemplo 10	253
exemplo 11	254
exemplo 12	256
exemplo 13	258
exemplo 14	259
exemplo 15	261
exemplo 16	264
exemplo 17	266
exemplo 18	268
exemplo 19	269

exemplo 20	271
exemplo 21	272
exemplo 22	274
exemplo 23	275
exemplo 24	277
exemplo (E1)	93
exemplo (E2)	101
exemplo (E3)	104
exemplo (E4)	105
problema 2.III.4.1 - forma padrão da PQ	31
problema 2.III.4.5 - forma reduzida do problema da PQ	36
problema 4.I.1 - forma padrão da PQ	84
problema 4.I.2 - definição das restrições ativas	84
problema 4.I.4 - forma padrão do problema de máximo da PQ	85
problema (P1) - forma padrão do PPNL	15
problema (P2) - forma padrão do PPNL para solução local	15
problema (P3) - forma padrão do PPNL segundo o algoritmo MISQPSOL	61
problema (P4) - forma padrão das restrições de limites	61

RELAÇÃO DE SIGLAS

ARX	...	“autoregressive extra input model”
ASR	...	“absolutely strongly redundant” - absolutamente fortemente redundantes
AWR	...	“absolutely weakly redundant” - absolutamente fracamente redundantes
BFGS	...	Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
CS	...	“column sufficient” - colunas suficientes
diag	...	diagonal
DFP	...	Davidson-Fletcher-Powell
DMC	...	“dynamic matrix controller” - controlador de matriz dinâmica
DMCE	...	controlador de matriz dinâmica estendido
FCC	...	“fluidized catalytic cracking” - conversor catalítico em leito fluidizado
GLP	..	gás liquefeito de petróleo
ker	...	“kernel” - espaço nulo
KKT	...	Karush-Kuhn Tucker
LD	...	linearmente dependente
LI	...	linearmente independente
MISQPSOL	...	algoritmo SQP proposto nesta tese
ND	...	negativa definida
NSD	...	negativa semidefinida
NP	...	não polinomial
NPSOL	...	algoritmo SQP de Gill et ali (1986)
nul	...	“kernel” - espaço nulo
PCL	...	problema complementar linear
PD	...	positiva definida
PID	...	proporcional, integral e derivativo
PL	...	programação linear
PNL	...	programação não linear

PPNL	... problema da programação não linear
PQ	... programação quadrática
PSB	... Powell-Symmetric-Broyden
PSD	... positiva semidefinida
QP	... “quadratic programming”, o mesmo que PQ
rank	... posto de matriz
RWR	... “relatively weakly redundant” - relativamente fracamente redundante
RTO	... “real time optimization” - otimização em tempo real
SLP	... “sequential linear programming” - programação linear sucessiva
SOR	... “successive overrelaxation splitting”
SQP	... “sequential quadratic programming” - programação quadrática sucessiva

NOMENCLATURA GERAL

letras arábicas

a	... número de restrições ativas (capítulo 4 e apêndice 1)
a_{dmc}	... coeficientes da resposta a degraus nas variáveis manipuladas
a_i	... com i inteiro, vetor real
a_{ij}	... constantes dos modelos econômicos (capítulo 6)
a_k	... vetor real
A	... restrições ativas do problema da PQ
A_{est}	... estimativa da severidade
A_E	... matriz Jacobiana das restrições de igualdade da PNL, ou seja, corresponde às restrições de igualdade do problema da PQ (2.III.4.1)
A_{ineq}	... restrições reduzidas de desigualdade não nulas do problema da PQ conforme definição no passo 9 do algoritmo MISQPSOL (página 68)
$A_i ; i=1,2$... matrizes auxiliares
A_I	... matriz Jacobiana das restrições de desigualdade da PNL, ou seja, corresponde às restrições de desigualdade do problema da PQ (2.III.4.1)
A_N	... matriz auxiliar
A_{oTCV}	... área da seção transversal da tubulação a montante da válvula TCV
A_{vTCV}	... área de passagem da válvula TCV
\tilde{A}	... matriz auxiliar
\bar{A}	... matriz auxiliar
\bar{A}_N	... matriz auxiliar
$\bar{A}_i ; i = 1,2$... matrizes auxiliares
A^+	... inversa de Penrose de uma matriz A qualquer
b	... valor das restrições ativas da PQ

b_E	... valor das restrições de igualdade do problema da PQ (2.III.4.1)
b_I	... limite superior das restrições de desigualdade do problema da PQ (2.III.4.1)
b_{ineq}	... limite superior das restrições de desigualdade reduzidas não nulas do problema da PQ (capítulo 6)
b_{Ir}	... limite superior das restrições de desigualdade do problema da PQ reduzido (2.III.4.5)
b_{pornul}	... limite superior das restrições de desigualdade reduzidas nulas do problema da PQ (capítulo 6)
\bar{b}	... vetor auxiliar
$\overline{\bar{b}}$... vetor auxiliar
B	... matriz auxiliar
B_1	... particionamento de B
B_2	... particionamento de B
$B_\delta(.)$... bola aberta de raio δ em torno do ponto $(.)$
c	... gradiente da função objetivo da PNL, corresponde ao termo linear da função objetivo do problema da PQ conforme a equação (2.III.4.1)
car_{12}	... fator empírico obtido a partir de dados industriais
$c_{arbi} ; i=1,2$... taxa da reação de queima de coque no $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
c_B	... partição de c
c_{cat}	... concentração de coque no catalisador presente no <i>riser</i>
c_N	... partição de c
$c_{rci} ; i=1,2$... concentração de coque no catalisador no $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
c_{sc}	... concentração de coque no catalisador na saída do reator
c_{stp}	... teor de coque na saída da seção de retificação, i.e., na entrada do regenerador
c_{testp}	... constante empírica para o cálculo de c_{stp}
c_{TCV}	... abertura da válvula TCV
$c_{TCV,o}$... constante do modelo de predição (equações 6.VI.2.3 e 6.VI.2.3.4), valor de c_{TCV} em relação ao qual os ganhos estáticos foram obtidos
c_1 e c_2	... particionamentos de c ou constantes do modelo econômico (capítulo 6)
c_3 a c_6	... constantes do modelo econômico
\bar{c}_N	... vetor auxiliar

CO_{di}	... concentração de monóxido de carbono na $i^{ésima}$ fase diluída do regenerador
CO_{dig}	... concentração de monóxido de carbono na fase diluída geral do regenerador
CO_i	... quantidade de monóxido de carbono na fase densa do $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
CO_{mg}	... concentração de monóxido de carbono na entrada da fase diluída geral
$CONVV$... conversão em % volumétrica
CO_{2i}	... quantidade de dióxido de carbono na fase densa do $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
CO_{2di}	... concentração de dióxido de carbono na $i^{ésima}$ fase diluída do regenerador
d	... variável de decisão do problema da PQ
$d_{i,k}$... componente de d_k
d_k	... direção de busca do algoritmo SQP, corresponde à solução obtida para o problema da PQ
d_{testp}	... constante empírica para o cálculo de c_{isp}
d_V	... limite máximo de violação, conforme procedimento da figura 2.III.4.2
\bar{d}	... solução de $A_E \bar{d} = b_E$
$\overline{\bar{d}}$... vetor auxiliar
\tilde{d}	... vetor auxiliar
\hat{d}	... vetor real
d_1	... vetor real, podendo corresponder a componentes ou porção de d
d_2	... vetor real, podendo corresponder a componentes ou porção de d
D	... matriz auxiliar
DD	... dificuldade relativa
DF	... diferenças finitas
$D20$... densidade 20/4 da carga
$D60$... densidade 60/60 da carga
e	... curva, definida na condição (C3)
e_i	... vetor unitário sendo que o elemento não nulo ocupa a $i^{ésima}$ posição
E	... conjunto aberto contido em IR ou matriz auxiliar
E_{cc}	... energia de ativação da reação de formação de coque

E_{co}	...	energia da reação de combustão de CO a CO ₂ nas fases diluídas do regenerador
E_{cr}	...	energia de ativação da reação de craqueamento
E_{or}	...	energia de ativação da reação de combustão de coque
E_{rco}	...	constante para o cálculo da relação de CO/CO ₂ formados na queima do coque
E_n	...	espaço Euclidiano
E_1	...	conjunto contido no espaço IR
EX	...	exemplo considerado (capítulo 5)
f	...	função objetivo do problema da PNL, ou seja, corresponde a um mapeamento do tipo: $IR^n \rightarrow IR$
far_{12}	...	fração de ar que passa para o 2º estágio do regenerador
$fator_i$...	razão mássica entre oxigênio consumido e o coque queimado no $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
f_{eco}	...	função objetivo econômica conforme definição da equação 6.IV.1
$\hat{f}(x)$...	função objetivo escalonada conforme equação (2.III.4.14)
$F(x, \lambda, \mu) = 0$...	sistema de equações não lineares correspondente à condição de KKT
F_{gkg}	...	vazão mássica total de gás efluente
$F_{gki} ; i=1,2$...	vazão de gás efluente do $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
F_{gmg}	...	vazão total molar de gás efluente
$F_{gmi} ; i=1,2$...	vazão molar dos gases de combustão na fase densa do 1º estágio do regenerador
FL	...	falhas de convergência relatadas na literatura (capítulo 5)
FSF	...	fator de caracterização da carga
$F1$...	constante para o cálculo de $CONVV$
$F2$...	constante para o cálculo de $CONVV$
g	...	restrições de desigualdade do problema da PNL, ou seja, corresponde a um mapeamento do tipo: $IR^n \rightarrow IR^p$
g_i	...	vetor auxiliar ou componente de g
$g_{j,i}$...	componente de g_i
g_I	...	restrições de desigualdade que estão ativas
$\nabla g_L^T(x_k)$...	porção das restrições de desigualdade linearizadas

$\hat{g}(x)$... restrições de desigualdade escalonadas conforme equação (2.III.4.14)
G	... matriz auxiliar
GD	... grau de dificuldade
GLPV	... rendimento volumétrico em GLP
h	... restrições de igualdade do problema da PNL, ou seja, corresponde a um mapeamento do tipo: $IR^n \rightarrow IR^m$
h_{i,j_k}	... índice dos componentes de H_k
$\hat{h}(x)$... restrições de igualdade escalonadas conforme equação (2.III.4.14)
\tilde{h}	... porção de h que corresponde às linhas LI da matriz de restrições de igualdade linearizadas
H	... matriz Hessiana do problema da PQ (2.III.4.1) (termo quadrático da função objetivo, ou seja, matriz Hessiana da função Lagrangeana da PQ) ou índice que denota a transposta conjugada de uma matriz
$H(x_k, \lambda_k, \mu_k)$... aproximação da matriz Hessiana da função Lagrangeana do problema da PNL (P1), avaliada em x_k, λ_k, μ_k
ΔH_{cr}	... calor da reação de craqueamento
ΔH_{fv}	... calor latente de vaporização do gasóleo
ΔH_{fCO}	... entalpia de formação de CO
ΔH_{fCO_2}	... entalpia de formação de CO ₂
H_k	... o mesmo que $H(x_k, \lambda_k, \mu_k)$
H_n	... partição da matriz Hessiana conforme equação (3.3)
H_r	... matriz Hessiana reduzida em relação à base Z_a (capítulo 4)
H_{ra}	... quantidade de catalisador no reator
H_{rg1}	... quantidade de catalisador no 1º estágio do regenerador
H_{rg2}	... quantidade de catalisador no 2º estágio do regenerador
ΔH_{rg1}	... calor de combustão no 1º estágio do regenerador
ΔH_{rg2}	... calor de combustão no 2º estágio do regenerador
H_{ris}	... quantidade de catalisador no <i>riser</i>
H_2O_i	... quantidade de vapor de água na fase densa do $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
\overline{H}	... partição da matriz Hessiana conforme equação (3.3)

\tilde{H}	... matriz Hessiana reduzida conforme equação definição dada no passo 9 do algoritmo MISQPSOL (página 68)
i	... número inteiro
i_{max}	... inteiro auxiliar
I	... conjunto ativo das restrições ativas do problema da PNL ou matriz identidade
I_i	... conjunto de restrições não ativas (apêndice 1)
I_j	... conjunto ativo das restrições ativas do problema da PQ
I_M	... matriz unitária
I_N	... conjunto que contém os índices das linhas nulas de $\nabla g^T(x_k)Z$
I_r	... índice das restrições de desigualdade do problema da PQ reduzido (2.III.4.5)
I_R	... conjunto que contém os índices das linhas não nulas de $\nabla g^T(x_k)Z$
IT	... número de iterações requerido pelo algoritmo (capítulo 5)
ITMAX	... máximo número de iterações fixado para as simulações (apêndice 2)
$j_k(i)$... elemento de J_k
J	... conjunto das restrições não ativas
J_k	... contém o índice das restrições ativas na solução do problema da PQ na iteração k do algoritmo MISQPSOL
k	... iteração do algoritmo MISQPSOL
k_{cr}	... constante cinética da reação de craqueamento
k_{cc}	... constante cinética da reação de formação de coque
k_{co}	... constante cinética da reação de combustão de CO a CO ₂ nas fases diluídas do regenerador
k_{or}	... constante cinética da reação de combustão de coque
k^{max}	... número máximo de iterações do algoritmo MISQPSOL
k_{qp}	... iteração do algoritmo de resolução do problema da PQ do algoritmo MISQPSOL
k_{rco}	... constante para o cálculo da relação de CO/CO ₂ formados na queima do coque
l	... limite inferior das variáveis de decisão conforme o problema (P4)
l_i	... limite inferior na variável i
l_r	... limite inferior das variáveis reduzidas

L	... matriz auxiliar correspondente ao fator de Cholesky
$L(x,\lambda,\mu)$... função Lagrangeana do problema da PNL
m	... número de restrições de igualdade
$m_{n,i}$... vetor unitário
m_r	... posto da matriz A_E
M	... matriz da forma padrão do PCL ou matriz auxiliar usada para a resolução do sistema de KKT
M_n	... matriz auxiliar
M_{n_1}	... matriz auxiliar
M_{n_2}	... matriz auxiliar
\overline{M}_n	... matriz auxiliar constituída de vetores unitários
$\overline{\overline{M}}_n$... matriz auxiliar
M_1	... matriz auxiliar
M_2	... matriz auxiliar
\tilde{M}_1	... matriz auxiliar
$\overline{\overline{M}}_1$... matriz auxiliar
n	... número de variáveis de decisão
na	... número de restrições ativas
nc	... não convergiu (capítulo 5)
$ncalc$... ordem do modelo de convolução
$ncon$... número de variáveis controladas
nl	... horizonte de controle
$nman$... número de variáveis manipuladas
nr	... número de variáveis reduzidas ou horizonte de predição
NEQ	... número de restrições de igualdade
NIQ	... número de restrições de desigualdade
NTERM	... número de termos
NVAR	... número de variáveis do problema
N_{2_i}	... quantidade de nitrogênio na fase densa do $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador
o	... número inteiro usado para caracterizar uma dimensão
O_{dig}	... concentração de oxigênio na fase diluída geral
O_{di}	... concentração de oxigênio na fase diluída do $i^{\text{ésimo}}$ estágio

O_{fgi}	... concentração de oxigênio na fase densa do $i^{\text{ésimo}}$ estágio
O_{2i}	... quantidade de oxigênio na fase densa do $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador
O_{2mg}	... concentração de oxigênio na entrada da fase diluída geral
p	... número de restrições de desigualdade
pr	... número de restrições de desigualdade linearizadas reduzidas não nulas
P	... matriz de permutação ou índice que indica um subconjunto de I
PA	... ponto de anilina
P_{A^H}	... projeção ortogonal sobre o espaço das colunas de A^H
PC	... ocorrência de problemas da PQ críticos (capítulo 5)
P_{circ}	... pressão corrigida considerando o efeito da pressão na circulação de catalisador
P_{colrg}	... pressão da coluna de leito sobre a válvula TCV, assumida constante
$PEMVF$... ponto de ebulição da carga
P_{ra}	... pressão no reator
P_{rg}	... pressão no regenerador
P_S	... matriz auxiliar (apêndice 1)
P_1	... matriz auxiliar, corresponde a uma partição de P
P_{12}	... matriz auxiliar, corresponde a uma partição de P
P_2	... matriz auxiliar, corresponde a uma partição de P
P_{21}	... matriz auxiliar, corresponde a uma partição de P
q	... vetor real ou dimensão conveniente
$q(x)$... conjunto de restrições não lineares ativas, i.e., $q(x) = \begin{bmatrix} h \\ g_I \end{bmatrix}$
Q	... matriz da fatoração QR ou índice que indica um subconjunto de I
Q_1	... matriz da fatoração QR ou uma partição da matriz Q
Q_2	... matriz da fatoração QR ou uma partição da matriz Q
\hat{Q}_2	... matriz obtida na fatoração QR
\tilde{Q}	... matriz auxiliar
\tilde{Q}_2	... matriz auxiliar
\overline{Q}	... matriz auxiliar
\overline{Q}_2	... matriz auxiliar
r_i	... componente de R

$ratio$... razão de ar alimentada no 1º estágio do regenerador
R	... matriz da fatoração QR
R_{ai}	... vazão de ar alimentada no conversor FCC
$R_{rai,o}$... constante do modelo de predição (equações 6.VI.2.5.3 e 6.VI.2.5.4), valor de R_{ai} em relação ao qual os ganhos estáticos foram obtidos
R_{ai}	... vazão de ar alimentado no $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
$RAZCO$... relação entre catalisador e óleo
R_{cbi}	... taxa de combustão de coque no $i^{ésimo}$ estágio do regenerador
R_{coi}	... taxa da reação de combustão de CO a CO ₂ na $i^{ésima}$ fase diluída do regenerador
R_{codig}	... taxa da reação de oxidação de CO na fase diluída geral
R_{cf}	... taxa da reação de formação de coque
R_{mai}	... vazão molar de ar no $i^{ésimo}$ estágio do regenerador já levando em conta o arraste de ar do 1º para o 2º estágio
R_{oc}	... taxa da reação de craqueamento
R_{re}	... vazão de catalisador no <i>riser</i>
R_{rc1}	... vazão de catalisador do 1º para o 2º estágio da fase densa do regenerador
R_{sc}	... vazão de catalisador gasto
R_{tf}	... vazão de gasóleo alimentada no conversor FCC
$R_{tf,o}$... constante do modelo de predição (equações 6.VI.2.5.1 a 6.VI.2.5.4), valor de R_{tf} em relação ao qual os ganhos estáticos foram obtidos
R_{12}	... partição da matriz R
R_2	... matriz obtida na fatoração QR
R_{21}	... partição da matriz R
\hat{R}	... matriz auxiliar
\hat{R}_2	... matriz obtida na fatoração QR
s_a	... calor específico do ar e do gás de combustão efluente
s_c	... calor específico do catalisador
sim	... número de casos simulados (capítulo 5)
s_{tf}	... calor específico do gasóleo
sv	... solução viável (capítulo 5)
S	... teor de enxofre da carga (capítulo 6) ou poliedro (capítulo 4)

SEV	... severidade da reação para fins de controle
ST	... variável que indica a incidência de problemas durante a resolução do problema da PNL (P3) pelo algoritmo MISQPSOL
t	... vetor auxiliar
t_i	... instante em que as variáveis controladas são preditas ou vetor real (apêndice 1)
\tilde{t}	... vetor auxiliar
T	... matriz correspondente a uma base (e.g. base para o espaço das colunas de A_E)
$T(.)$... estimativa de $H(x_k, \lambda_k, \mu_k)$ no ponto $(.)$
T_{ai}	... temperatura do ar na entrada do conversor
TCV	... válvula de catalisador regenerado
T_{di}	... temperatura da fase diluída do $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador
T_{dig}	... temperatura da fase diluída geral do regenerador
TNB	... teor de nitrogênio básico
T_{fp}	... temperatura da carga
$T_{fp,o}$... constante do modelo de predição (equações 6.VI.2.5.1 a 6.VI.2.5.4), valor de T_{fp} em relação ao qual os ganhos estáticos foram obtidos
T_{ra}	... temperatura do reator
T_{rgi}	... temperatura da fase densa do $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador
$T_{rg2,o}$... constante do modelo de predição (equações 6.VI.2.5.2 e 6.VI.2.5.4), valor de T_{rg2} em relação ao qual os ganhos estáticos foram obtidos
T_{rx}	... temperatura do <i>riser</i>
$T_{rx,o}$... constante do modelo de predição (equações 6.VI.2.5.1 e 6.VI.2.5.3), valor de T_{rx} em relação ao qual os ganhos estáticos foram obtidos
T_s	... período de amostragem ou intervenção do controlador
u	... limite superior nas variáveis de decisão conforme o problema (P4) ou vetor real (apêndice 1)
uat	... valor atual das variáveis manipuladas
u_i	... limite superior na variável i
u_r	... limite superior nas variáveis reduzidas
u_{viol}	... amplitude da violação nas variáveis manipuladas (item VII do capítulo 6)

Δu	... amplitude das ações de controle
Δu_i^{max}	... máxima amplitude de variação na variável manipulada i
u_1	... porção de u
u_2	... porção de u
U	... matriz auxiliar
v	... vetor real
V_{dig}	... volume da fase diluída geral do regenerador
V_{dij}	... volume da fase diluída do $j^{ésimo}$ estágio do regenerador
w	... vetor real
w_i	... com i inteiro, vetores reais
W_1	... peso da função objetivo econômica
W_2	... peso da predição da trajetória de controle
W_3	... peso da amortização das ações de controle
x	... variáveis de decisão da forma padrão do problema da PNL, $x \in IR^n$
x_a	... variável auxiliar da forma padrão da PNL (P3) segundo o algoritmo MISQPSOL
x_b	... vetor auxiliar
x_g	... solução estacionária de mínimo global (capítulo 5)
x_i	... no capítulo 5 e no apêndice 2 corresponde a uma solução estacionária ou a uma estimativa inicial ou nos demais capítulos e apêndice corresponde a um componente(s) de x
$x_{i,k}$... componente de x_k
x_k	... valor das variáveis de decisão na iteração k do algoritmo SQP
x_n	... vetor auxiliar
x_M	... solução estacionária de máximo (capítulo 5 e apêndice 2)
x^0	... estimativa inicial das variáveis de decisão
x_r	... variáveis de decisão do problema da PNL que se quer resolver na forma padrão da PNL do algoritmo MISQPSOL, a saber, (P3)
x_S	... solução estacionária (capítulo 5 e apêndice 2) ou vetor real (apêndice 1)
x_V	... ponto pertencente à região viável do problema da PNL (P1)
x^*	... solução ótima do problema da PNL (P1) ou (P2)
\hat{x}	... variáveis de decisão escalonadas conforme equação (2.III.4.15) ou o mesmo que x_r (capítulo 4)

\hat{x}	... vetor auxiliar
\tilde{x}	... vetor auxiliar
y	... vetor real
y_{at}	... valor medido das variáveis controladas
y_p	... variáveis controladas preditas (item VI do capítulo 6)
y_{pf}	... previsão das variáveis controladas levando em conta a implementação das ações de controle (item VI do capítulo 6)
y_s	... valores de referência do controlador ou valores das variáveis controladas no ponto de operação ótimo predito
\tilde{y}	... vetor real
y_1	... vetor real
y_2	... vetor real
Y	... espaço conveniente
z	... vetor real
z_k	... vetor real usado como variável auxiliar para a atualização da matriz Hessiana pelos métodos quasi-Newtonianos (item III.3 do capítulo 2)
Z	... base do espaço nulo das restrições de igualdade linearizadas, A_E ou base de IR^n
Z_a	... base conveniente (capítulo 4)
Z_1	... partição de Z
Z_2	... partição de Z
\bar{Z}	... base para o espaço nulo das restrições linearizadas da PNL ativas

símbolos gregos

α_k	... fator de atenuamento da direção de busca
β	... parâmetro usado pelo procedimento de Biegler & Cuthrell (1985) na busca unidirecional
β_i	... relação molar entre CO_2 e CO no $i^{\text{ésimo}}$ estágio do regenerador
χ	... razão entre o número de átomos de hidrogênio e carbono no coque
X	... espaço viável do problema da PNL
X_o	... subconjunto aberto contido em IR^n

X_l	... espaço viável do problema da PQ correspondente a uma linearização obtida da de 1ª ordem de X
X_{lb}	... espaço viável ampliado do problema da PQ segundo Schmid & Biegler (1994)
X_{lc}	... espaço viável ampliado do problema da PQ segundo Bartholomew Biggs & Hernandez (1995)
X_r	... espaço viável do problema da PQ reduzido (2.III.4.5)
$X(x_k)$... o mesmo que X_l
δ	... escalar real
ε_p	... tolerância para o cálculo do critério de parada
ε_V	... tolerância numérica abaixo da qual um número é considerado igual a zero
ε_A	... perturbação a ser realizada em um componente da matriz de restrições de igualdade linearizadas, quando esta é nula
ε_Z	... perturbação realizada no critério de parada modificado de Edgar & Himmelblau (1989)
γ_{ij}	... ganhos estáticos dos modelos de predição lineares conforme equações (6.VI.2.5.1 a 6.VI.2.5.4). O ganho estático relaciona a variável controlada i com a variável manipulada j e sendo que ij assume um dos seguintes valores 11, 12, 13, 14, 21, 22, 23, 24.
η	... parâmetro usado pelo procedimento de Biegler & Cuthrell (1985) na busca unidirecional
η_{dd}	... parâmetro usado pelo procedimento de Biegler & Cuthrell (1985) na busca unidirecional
η_{LS}	... parâmetro usado pelo procedimento de Biegler & Cuthrell (1985) na busca unidirecional
η_k	... fator de penalidade usado na função de mérito
ϑ	... vetor real
λ	... multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade dos problemas da PQ ou da PNL
λ^0	... estimativa inicial dos multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade

λ_i	... para i inteiro, componente de λ
λ_k	... multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade na iteração k do algoritmo SQP
λ^*	... valores dos multiplicadores de Lagrange das restrições de igualdade correspondentes à solução ótima do problema da PNL
μ	... multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade
μ_a	... vetor auxiliar, correspondente ao resíduo do sistema de KKT estendido
μ^0	... estimativa inicial dos multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade
μ_i	... para i inteiro, componente de λ
μ_k	... multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade na iteração k do algoritmo SQP
μ_{I_j}	... multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade ativas do problema da PQ
μ^I	... parâmetro de sintonia do algoritmo MISQPSOL, valor imposto para os multiplicadores de Lagrange no caso da ocorrência de problemas da PQ críticos ou inviáveis
μ_{max}	... variável auxiliar, máximo valor em módulo dos multiplicadores de Lagrange de restrições de desigualdade ativas
μ^*	... valores dos multiplicadores de Lagrange das restrições de desigualdade correspondentes à solução ótima do problema da PNL
$\hat{\mu}$... vetor auxiliar
$\bar{\mu}$... vetor auxiliar
μ_1	... vetor real
μ_2	... vetor real
v	... escalar real
\bar{v}	... constante real
Π	... plano tangente
Θ	... parâmetro usado pelo procedimento de Biegler & Cuthrell (1985) na busca unidirecional ou espaço conveniente (capítulo 4 e apêndice 1)
ρ	... escalar, fator de penalidade das funções de mérito
ρ_{tf}	... densidade da carga

σ_F	... fator de escalonamento da função objetivo
σ_H	... vetor de escalonamento das restrições de igualdade
σ_G	... vetor de escalonamento das restrições de desigualdade
σ_o	... vetor de escalonamento das variáveis de decisão conforme equação (2.III.4.16)
$\sigma_{o,i}$... componente de σ_o
σ_x	... vetor de escalonamento das variáveis de decisão conforme equação (2.III.4.16)
$\sigma_{x,i}$... componente de σ_x
τ	... escalar contido em E
ϖ_1	... vetor auxiliar
ϖ_2	... vetor auxiliar
$\zeta(v)$... curva conforme definição da página 16
ξ	... variável artificial definida para ampliar a região viável dos problemas da PQ
Ξ	... espaço conveniente (capítulo 4 e apêndice 1)
$\Psi(x,\lambda,\mu)$... função de mérito conforme definições do item III.5 do capítulo 2
\mathfrak{X}	... espaço conveniente (capítulo 4 e apêndice 1)
∇	... matriz Jacobiana ou gradiente
∇^2	... matriz Hessiana

índices (acompanham quaisquer das variáveis definidas anteriormente)

k	... iteração
H	... transposto conjugado
T	... transposto
$+$... pseudo - inversa
\perp	... ortogonal

RESUMO

A principal motivação desta tese é mostrar o que é necessário para se resolver o problema de otimização em tempo real (RTO) de processos químicos contínuos. Como exemplo, tomamos o problema de maximização da produção de GLP nas unidades FCC. São mostradas as abordagens de otimização em uma e duas camadas, as quais podem ser entendidas num contexto mais amplo como problemas da PNL. A primeira resolve os problemas de controle e otimização do processo separadamente enquanto que na última a solução para os dois é obtida simultaneamente. Para ambas as estratégias urge que um algoritmo confiável de resolução da PNL e bons modelos de processo estejam disponíveis. Diversos resultados de simulação são mostrados indicando o procedimento requerido para a resolução do RTO. O papel do engenheiro na confecção de hipóteses é ressaltado. Finalmente, a estratégia deve ser adequadamente sintonizada de forma que a estabilidade e o desempenho da malha fechada sejam asseverados durante toda a operação da planta.

O método SQP é tido como o melhor para a resolução de problemas da PNL pelo menos para problemas de pequeno e médio porte. Apesar disso, inúmeras dificuldades durante a resolução podem surgir, as quais são discutidas com pormenores. Ainda, um novo algoritmo SQP é apresentado que segue a mais recente tendência da literatura em se trabalhar com problemas da PQ não convexos. Inconsistências nos problemas da PQ são analisadas e um novo tratamento é proposto. Contribuições também são feitas no tocante à caracterização das soluções estacionárias dos problemas da PQ através da condição de (KKT). O novo tratamento possibilita a identificação de variados problemas como a existência de redundância na descrição das restrições, a ocorrência de problemas da PQ não finitos ou inviáveis ou que tenham acentuadas características de não convexidade. O novo algoritmo é testado para vários exemplos padrão da área de programação matemática que mostram um desempenho superior do algoritmo em relação a outros códigos da literatura.

Inobstante as inúmeras contribuições, a pesquisa pode ser continuada em várias áreas: estudar o efeito de distúrbios na estratégia de otimização adotada e desenvolver regras de sintonia robusta que possam ser facilmente aplicáveis; estender o algoritmo elaborado para sistemas de grande porte e melhor caracterizar a busca unidimensional; e, finalmente, estender os estudos para a integração de processos, área de pesquisa esta, ainda incipiente.

ABSTRACT

The main motivation of this thesis is to show what is needed to solve the real time optimization (RTO) problem of continuous chemical engineering processes. The maximization of the LPG production in a FCC unit is taken as an example. Two approaches of optimization are shown, namely the one-layer and two-layers approach. They can be viewed as non-linear programming (NLP) problems. The first one solves the control problem apart from the optimization one while the latter solves them together. For both of the approaches not only a reliable NLP solver but also a good model of the process must be available. Several simulation results are given, which address the procedure that must be undertaken to solve the RTO. The importance of the role of the engineer is strengthened since during the implementation the RTO strategy many hypothesis must be assumed. Also the chosen strategy must be robustly tuned to ensure stability and a good performance of the closed loop system.

As far as the solver is under concern, the sequential quadratic programming (SQP) method is considered as the best choice at least for solving small to medium sized problems. In spite of it, several problems may arise. These are discussed in detail. Moreover a new SQP algorithm is presented that follows the latest approach of the literature and makes use of non-convex quadratic programs (QP). Inconsistencies in the QP problems are analyzed and a new treatment is also proposed. Some contribution is made in the characterization of the stationary solutions of the QP by means of the Karush Kuhn Tucker (KKT) condition. The new approach can identify the existence of several problems during the resolution of the QP like non-finite QPs, redundancy in the description of the constraints, unfeasibility and strong non convexities in the QP. The new solver is tested in several bench mark problems from the mathematical programming area and is shown to behave better than the other available codes.

Though several results are reported, the research started here can be continued in many ways: the effect of disturbance in the RTO must be studied as well as tuning rules for the one-layer RTO strategy; the unidirectional search in the SQP code can be improved and the algorithm can be extended for large scale processes and finally the process integration problem should be addressed, which corresponds to a new challenging research area.