

ABORDAGEM ALGÉBRICO-DIFERENCIAL DA
OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE PROCESSOS

Domingos Fabiano de Santana Souza

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS
EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Aprovada por:

Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Jr., D.Sc.

Dra. Roberta Chasse Vieira, D.Sc.

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

Prof. Tito Lívio Moitinho Alves, D.Sc.

Prof. Carlos Augusto Guimarães Perlingeiro, D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

SETEMBRO DE 2007

SOUZA, DOMINGOS FABIANO DE
SANTANA

Abordagem Algébrico-Diferencial da
Otimização Dinâmica de Processos [Rio de
Janeiro] 2007

XVIII, 167 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc.,
Engenharia Química, 2007)

Tese – Universidade Federal do Rio de
Janeiro, COPPE

1. Otimização Dinâmica
2. Abordagem Algébrico-Diferencial
3. Sistemas Descontínuos

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Dedicatória

A Deus

A minha família

Aos professores (as) da minha vida (da Escola Municipal do Povoado Triunfo, da Escola de 1º Grau Senador Lourival Baptista e do Colégio de 1º e 2º Graus Prof.

Abelardo Romero Dantas)

Agradecimentos

A Deus.

Aos meus dois orientadores Evaristo (Vavá) e Roberta (Beta), pela amizade e por tudo que aprendi (obrigado).

A minha família; os meus pais, irmãos, cunhada; aos meus tios e tias e padrinhos e madrinhas; ao meu sogro e sogra e a toda a família da minha esposa, Célia.

A minha esposa e amiga, Célia.

A todos os meus amigos (as) do Povoado Triunfo “Ferinha da Rola”, Município de Simão Dias, Sergipe.

Aos amigos(as) do LMSCP, PAN, NUCAT, LTFD e BIO, que certamente contribuíram muito para que eu chegasse até aqui.

Aos professores do LMSCP e aos demais professores e funcionários do PEQ/COPPE/UFRJ.

A todos os amigos(as) do Cenpes e em especial aos do COMEN.

À CAPES/CNPq pelo suporte financeiro.

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

ABORDAGEM ALGÉBRICO-DIFERENCIAL
DA OTIMIZAÇÃO DINÂMICA DE PROCESSOS

Domingos Fabiano de Santana Souza

Setembro / 2007

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Roberta Chasse Vieira

Programa: Engenharia Química

Problemas de otimização dinâmica com restrições de desigualdade são comuns em plantas industriais. Essas restrições descrevem as condições do processo quando este opera com valores extremos das variáveis, tendo como base os limites de econômicos e de segurança. Normalmente, algumas restrições são violadas durante a trajetória ótima, permanecendo ativas sob um certo período de tempo. Este comportamento pode produzir uma mudança no índice diferencial do sistema de EADs, denominado de índice flutuante e/ou variável. Este trabalho é motivado pelos altos custos computacionais tipicamente associados com as etapas de resolução do problema de índice variável. A nova metodologia proposta incorpora as vantagens das funções de regularização e os códigos numéricos que integram sistemas de EADs (de índice 1 ou superior). A principal vantagem da nova metodologia é que o sistema de EADs pode ser integrado continuamente, evitando assim a reinicialização da integração numérica toda vez que uma restrição de desigualdade é violada. Em todos os casos avaliados, a metodologia mostrou-se superior, com os resultados idênticos aos obtidos por outras abordagens descritas na literatura.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

DIFFERENTIAL-ALGEBRAIC APPROACH OF
DYNAMIC OPTIMIZATION PROCESSES

Domingos Fabiano de Santana Souza

September / 2007

Advisors: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Roberta Chasse Vieira

Department: Chemical Engineering

Problems of dynamic optimisation with inequality path constraints are common in industrial plants. These constraints describe conditions of the process when it operates with extreme values of the variables, based on safety and/or economics restraints. Normally, during the optimal trajectory some of the inequality constraints are activated, and those remain active during a certain period of time. This behaviour can produce a change in the differential index of the DAE system, leading to the so-called floating index phenomena. This contribution is motivated by the high computational costs typically associated with each of the steps for resolution of the floating index problem. The proposed new method allies the advantages of special regularisation functions with numerical codes which integrate DAE systems (index 1 or higher index). The main advantage of the new method is that the DAE system can be integrated continuously, preventing the restart of the numerical integration every time an inequality constraint is violated. In all cases evaluated, the methodology was shown better, with identical results to the obtained by other approaches described in the literature.

Índice

Capítulo 1 – Introdução	1
Introdução.....	1
Capítulo 2 – Otimização Dinâmica	3
2.1 – Introdução.....	3
2.2 – Método Indireto para Resolução do Problema de Otimização Dinâmica.....	7
2.3. – Métodos Diretos para Resolução do Problema de Otimização Dinâmica.....	10
2.3.1 – Programação Dinâmica Iterativa.....	11
2.3.2 – Abordagem Sequencial ou Parametrização da Variável de Controle.....	13
2.3.3 – Abordagem Simultânea.....	17
2.4 – Distinção entre as Metodologias de Resolução do Problema de Otimização Dinâmica.....	20
2.5 – Ferramentas de Diferenciação para a Otimização Dinâmica.....	21
2.5.1 – Diferenciação Numérica.....	22
2.5.2 – Diferenciação Automática e Simbólica.....	22
2.5.3 – Equações de Sensibilidade.....	23
2.5.3.1 – Método “ <i>Staggered Direct</i> ”.....	24
2.5.3.2 – Método “ <i>Simultaneous Corrector</i> ”.....	25
2.5.3.3 – Método “ <i>Staggered Corrector</i> ”.....	25
2.6 – Referências Bibliográficas deste Capítulo.....	26
Capítulo 3 – Funções de Regularização na Manipulação de Descontinuidades	33
3.1 – Introdução.....	33
3.2 – Tipos de Descontinuidades e suas Origens.....	34
3.3 – Funções de Regularização – Definição e Aplicações.....	40
3.4 – Escolha da Função de Regularização.....	41
3.5 – Proposta: Aplicação das Funções de Regularização na Manipulação de	43

Descontinuidades.....	
3.6 – Exemplos.....	44
3.6.1 – Modelo com apenas uma Equação Diferencial Ordinária e uma Restrição.....	45
3.6.2 – Modelo com apenas uma Equação Diferencial Ordinária e duas Restrições.....	46
3.6.3 – Gás Ideal e Líquido.....	48
3.6.4 – Secador Convectivo de Leito Fixo e Contracorrente.....	52
3.7 – Conclusões.....	56
3.8 – Referências Bibliográficas deste Capítulo.....	57
Capítulo 4 – Extensão da Nova Abordagem para a Resolução dos Problemas de Otimização Dinâmica	61
4.1 – Introdução.....	62
4.2 – A Otimização Dinâmica como um Problema com Descontinuidades.....	63
4.2.1 – Problemas de Otimização com Restrições de Igualdade.....	64
4.2.2 – Problemas de Otimização com Restrições de Desigualdade.....	66
4.2.2.1 – Utilização de variáveis de folga ou “ <i>slack variables</i> ”.....	66
4.2.2.2 – Suavização das Restrições.....	67
4.2.2.3 – Avaliação das Restrições em Pontos Pré-Definidos.....	68
4.3 – Resolução do Problema de Otimização Dinâmica com Restrições.....	69
4.3.1 – Reinicialização e Chaveamento entre Modelos.....	69
4.3.2 – Detecção de Restrições.....	71
4.4 – Aplicação da Técnica Proposta para Resolução do Problema de Otimização Dinâmica com Restrições.....	72
4.5 – Conclusões sobre a Metodologia.....	76
4.6 – Referências Bibliográficas deste Capítulo.....	77
Capítulo 5 – Estudos de Casos	81
5.1 – Introdução.....	81
5.2 – Estudos Preliminares para Seleção da Abordagem para Otimização Dinâmica.....	82

mica de Processos.....	
5.2.1 – Determinação do Perfil Ótimo de Temperatura em um PFR.....	83
5.2.2 – Estudo das Condições Ótimas para um Processo Semibatelada de Poli- condensação em Estado Fundido do Poli(Tereftalato de Etileno) (Pet).....	87
5.2.3 – Conclusões Preliminares.....	90
5.3 – Detecção de Descontinuidades via Função de Regularização.....	91
5.3.1 – Controle Singular de Bioreator Batelada Alimentada.....	91
5.3.1.1 – Eliminação das Variáveis Adjuntas.....	94
5.3.1.2 – Chaveamento entre Modelos.....	95
5.3.2 – Problema de Controle Ótimo com Restrições de Desigualdade nas Va- riáveis de Estado.....	99
5.3.3 – Oscilador de Van der Pol com Restrição de Desigualdade na Variável de Estado.....	104
5.3.4 – Problema de Controle Ótimo do Reator em Batelada com Restrição de Desigualdade na Pressão.....	107
5.4 – Conclusões.....	109
5.5 – Referências Bibliográficas deste Capítulo.....	110
Capítulo 6 – Considerações Finais e Sugestões	113
6.1 – Metas Atingidas.....	113
6.2 – Sugestões.....	114
APÊNDICE A	115
APÊNDICE B	126

"... Fazendo a vida valer a pena, tentando sempre, desistindo jamais. Tornando o sonho verdade, o erro em acerto, a barreira em passagem, o desespero em solução. Verdadeiro, simples, decidido e objetivo. Compreende a todos, mesmo sabendo que é incompreendido. Com coragem, através da honra, e pelo Amor, sempre."

(Ser Guerreiro, Daniel Jaoude)

Nomenclatura

Símbolos Latinos

\bar{c}_p	Calor específico médio do componente seco a pressão constante	[kJ/kg K]
$\bar{x}(t)$	Variável de estado, variáveis diferenciais	
A	Função	
a	Parâmetro de ajuste	
a	Constante	
a	Superfície específica do sólido	[m ² /m ³]
arg	Argumento	
b	Parâmetro de ajuste	
b	Constante	
C	Concentração	[mol/L]
c	Restrições de desigualdade	
c	Constante	
d	Operador diferencial	
dp	Diâmetro da partícula	[m]
F	Vetor de funções lineares ou não-lineares	
F	Vazão molar	[mol/s]
f	Vetor de funções lineares ou não-lineares	

G	Propriedades desejadas para o sistema no tempo final	
g	Vetor de restrições de desigualdade	
g	Restrições	
g	Constante	
G	Fluxo mássico em base seca	[kg/m ² s]
H	Hamiltoniano	
h	Vetor de restrições igualdade	
h	Passo de integração	
H	Entalpia específica do componente seco	[kJ/kg]
h_a	Coeficiente volumétrico efetivo de transferência de calor do sólido para o gás intersticial	[kJ/m ³ s K]
i	Contador	
J	Funcional objetivo	
J	Contador	
K	Constantes	
k_{Gx}, k_{Lx}	Constantes	[mol/atm s]
k_s	Coeficiente global volumétrico efetivo de transferência de massa lado sólida	[kg/m ³ s]
L	Termo vetorial na função objetivo	
L	Hamiltoniano	
L	Altura do leito	[m]
j	Contador	

M	Número de moles	[mol]
m	Ordem do polinômio	
max	Maximização	
min	Minimização	
N	Número de moles	[mol]
	Número de pontos de discretização	
n	Número de pontos de aproximação	
	Número de restrições	
O	Erro de truncamento	
P	Pressão	[atm] [Pa]
P	Concentração de produto	[g/L]
Pp	Pressão	[atm]
p	Vetor de parâmetros do modelo	
p	Parâmetros do modelo	
P	Pressão absoluta do sistema	[atm] [Pa]
R	Constante dos gases	[atm.L/mol.K] [J/mol K]
S	Concentração de substrato	[g/L]
s	Coeficientes de sensibilidade	

	Variáveis de folga	
T	Temperatura	[K]
T_p	Temperatura	[K]
t	Vetor de valores do tempo	
		[seg.]
t	Tempo	
		[h]
u	Vetor de variável de controle	
u	Variável de controle	
ū	Variável de controle normalizada	
UR	Umidade relativa do ar	[adm.]
V	Volume	[L]
V	Volume do sistema	[m ³]
w	Vetor de funções lineares ou não-lineares	
w	Variável de estado	
x	Variável de estado, variáveis diferenciais	
x	Concentração mássica	
Y	Constante de produtividade	[adm.]
y	Variável de estado, variável algébrica	
y	Razão mássica	[kg/kg]
z	Variável temporal	[adm.]

Símbolos Gregos

Δ	Diferença	
Φ	Matriz	
α	Variável de busca	
ε	Fator de relaxação, porosidade, produtividade específica	
ϕ	Restrição	
φ	Função spline, restrição de desigualdade	
γ	Multiplicadores de Lagrange	
η	Função de regularização	
	Variável adjunta	
λ	Parâmetro de penalidade	[kJ/kg]
	Calor latente de vaporização	
	Função barreira	
μ	Taxa de crescimento	
\mathbf{v}	Vetor de parâmetros	
ρ	Densidade	[kg/m ³] [mol/L]
τ	Tempo normalizado, parâmetro de regularização	
ξ	Parâmetro de ajuste da função de regularização	
ψ	Medida da violação	

Índices Subscritos

0	Inicial
10, 20, 30	Valores iniciais
1, 2, 3	Componentes
1p, 2p	Constantes
1s, 2s	Estados estacionários, constantes
c	Constante
d	Saída
e _{fe} , 1e _{fe} , 2e _{fe}	Efetivo
f	Final
G	Fase gás
g	Fase gás
gl	Fase gás-líquido
gv	Fase gás-vapor d'água
h	Restrições de igualdade
i	Contador
inter	Interpolada
j	Contador
k	Contador
L	Fase líquida

l	Fase líquida (água)
max	Máximo
n	Número de equações
out	Saída
p	Parâmetros
r	Referência
reg	Regularizada
s	Estado estacionário
s	Fase sólida
sat	Saturação
se	Equilíbrio
t	Total
Tr	Temperatura de referência
V	Vapor d'água

Índices Sobreescritos

.	Operador derivada
*	Valor definido, valor normalizado
(1), (2),...	Derivadas
i	Contador
j	Contador

m Ordem do polinômio

n Ordem do polinômio

T Transposto

Siglas

AD Automatic Differentiation

BDF Backward Differential Formula

BVP Boundary Value Problem

DA Diferenciação Automática

EAD Equações Algébrico-Diferenciais

EADP Equações Algébrico-Diferenciais Parciais

EDO Equações Diferenciais Ordinárias

ES Equações de Sensibilidade

IDP Interactive Dynamic Programming

KKT Condições de Karush-Kunh-Tucker

PDI Programação Dinâmica Iterativa

Capítulo 1

Introdução

As últimas décadas vêm sendo marcadas por uma série de avanços nos métodos e nas ferramentas numéricas aplicadas à simulação dinâmica de processos. Nos modernos métodos de simulação dinâmica, os modelos de processos são apresentados na sua forma algébrico-diferencial tal como foram concebidos, compostos por equações diferenciais referentes aos balanços de conservação e por equações algébricas, que representam as relações termodinâmicas, cinéticas de reação ou ainda restrições de operação.

Sob o ponto de vista numérico, a resolução dos modelos descritos por sistemas de equações algébrico-diferenciais depende de uma prévia análise do seu índice diferencial e da definição das condições iniciais adequadas para iniciar a integração, denominadas de condições iniciais consistentes. O conceito de índice diferencial foi introduzido para quantificar o nível de dificuldade que envolve a resolução de um sistema de equações algébrico-diferencial. O estado da arte dos códigos integradores de sistemas algébrico-diferenciais permite a integração de sistemas de índice superior a 1, bastando apenas definir o índice do sistema e as condições iniciais consistentes. Para estes problemas, há a necessidade, porém, de um arsenal numérico para caracterização do índice diferencial do sistema, redução do índice e definição das condições iniciais consistentes.

Na engenharia química, são poucos os problemas que se apresentam como problemas de índice superior, sendo uma das principais fontes os problemas de otimização dinâmica (e controle ótimo singular). Nestes problemas, informações relevantes como mudanças físicas de processo, limitações econômicas e de segurança são anexadas sob a forma de restrições de igualdade e desigualdade nas variáveis de estado. Um aspecto importante nestes problemas é a variação do índice diferencial como decorrência da ativação e desativação das restrições de desigualdade ao longo da trajetória de resolução. O alto custo computacional associado a cada uma das etapas envolvidas na resolução dos problemas de otimização dinâmica com índice variável

(identificação da ativação e desativação das restrições, redução do índice diferencial, chaveamento e reinitialização do modelo, além dos procedimentos iterativos de otimização) motivou este trabalho de tese que tem como objetivo a resolução de problemas de otimização dinâmica (que apresentam tais características de índice variável) com um número reduzido de procedimentos.

Para a melhor compreensão do trabalho é apresentada no Capítulo 2 uma concisa revisão sobre as principais abordagens para resolução dos problemas de otimização dinâmica, onde são discutidos os pontos fortes e fracos de cada abordagem. No Capítulo 3 é apresentada uma nova metodologia para o tratamento de descontinuidades em modelos dinâmicos. O ponto principal desta nova metodologia é o uso de funções de regularização que permitem a transposição automática das descontinuidades.

No Capítulo 4 é apresentada uma extensão da metodologia desenvolvida para detecção e manipulação de descontinuidades (apresentada no capítulo anterior) agora, aplicada à resolução de problemas de otimização dinâmica com restrições. O objetivo principal é a manipulação das restrições presente no problema, inserindo-as como equações adicionais do modelo matemático. Para demonstrar a viabilidade da abordagem proposta para resolução do problema de otimização dinâmica, exemplos da literatura são resolvidos no Capítulo 5.

Por fim, no Capítulo 6, são apresentadas as considerações finais sobre a metodologia desenvolvida, ressaltando as metas atingidas e as principais contribuições deste trabalho. Ainda no Capítulo 6, são apresentadas as sugestões para futuros trabalhos.

Capítulo 2

Otimização Dinâmica

Neste capítulo é apresentada uma breve introdução sobre a origem da otimização dinâmica e a sua definição. Ainda no mesmo capítulo são apresentadas as diferentes abordagens para resolução do problema de otimização dinâmica, ressaltando as dificuldades inerentes a cada uma, a fim de buscar todas as informações disponíveis na literatura. No final do capítulo são apresentadas as diferentes técnicas para geração das derivadas (gradiente e hessiana) utilizadas no auxílio aos métodos de otimização.

2.1 Introdução

A otimização dinâmica teve sua origem nos desafios matemáticos propostos no século 17 por Bernoulli aos seus contemporâneos. As resoluções apresentadas foram reunidas por Leonard Euler (1707 - 1783) com o título de *The Method of Finding Plane Curves that Show Some Property of Maximum or Minimum*, publicado em 1744. Os trabalhos publicados por Euler levaram Jean Louis Lagrange (1736 - 1813) a corresponder-se com o autor, apresentando-o um breve texto postulando a assim chamada *técnica das variações*, que depois foi renomeado (por Euler) de *cálculo das variações*. Em 1762, Lagrange publicou o método dos multiplicadores que foi adotado por Euler como as condições necessárias para alcançar uma solução estacionária (condições de primeira ordem), atualmente essa formulação é conhecida por *Equações de Euler-Lagrange*. Em 1836, Karl Gustav Jacob Jacobi (1804 - 1851) mostrou que as derivadas parciais da função objetivo em relação aos parâmetros de uma família de

extremos (chamada também de estados) obedecem a uma certa equação diferencial (condições de segunda ordem). No mesmo ano, William Rowan Hamilton (1805 - 1865) publicou um trabalho no qual divergia dos resultados apresentados por Jacobi. Quase 100 anos depois, Richard Ernest Bellman (1920 - 1984) reuniu os trabalhos de Hamilton e Jacobi em uma única equação - *Equação de Hamilton – Jacobi* que deu origem à *Programação Dinâmica* (também conhecida como *Nonlinear Optimal Feedback Control*). No início do último século, Karl Wilhelm Theodor Weierstrass (1876 - 1951) apresentou, em seus trabalhos, os primeiros fundamentos que serviram como predecessor ao princípio de máximo desenvolvido por Bellman e Pontryagin. Porém, foi somente em 1939 com McShane (1904 – 1989) que surgiu a participação mais substancial para o estabelecimento da teoria de controle ótimo. O método introduzido por McShane foi modificado por Pontryagin (1962) para manipular restrições de desigualdade na variável de controle, sendo depois anunciado como *Princípio do Máximo*, também conhecido com *Princípio do Máximo de Pontryagin*. Na década de 50, Kuhn e Tucker (EDGAR *et al.*, 2001) apresentaram as condições necessárias para que um sistema tenha um extremo local (conhecido como condições de Karush – Kunh – Tucker, KKT). Os primeiros códigos fundamentados nestas condições receberam os nomes de *Programação Linear* (em inglês, LP) e *Programação Não-linear* (em inglês, NLP). Entre os anos 60 e 70 surgiram as primeiras aplicações das condições de KKT na resolução numérica do problema de otimização dinâmica (BRYSON JR., 1999).

Os resultados históricos obtidos pelas diferentes vertentes (Cálculo Variacional, Programação Dinâmica e Programação Não-linear) incentivaram a busca por novas políticas ótimas para as unidades industriais. Em muitas plantas industriais, o perfil ótimo resultante da resolução do problema de otimização dinâmica pode ser utilizado como: (i) set point de controladores; (ii) no estabelecimento de estratégias seguras para partida ou paradas de unidades de processo ou, (iii) na especificação de qualidade de produtos durante a transição de seqüências de produção.

Mas o que vem a ser um problema de otimização dinâmica ?

BRYSON JR. (1999) define a otimização dinâmica como o procedimento que determina a “história” das variáveis de estado e de controle de um determinado modelo dinâmico de processo, sob um período de tempo finito e que leve a maximizar (ou minimizar) uma dada função objetivo. Para FEEHERY(1998), o problema de otimização dinâmica (também conhecido como problema de controle ótimo) requer a determinação do perfil temporal de um conjunto de variáveis de controle de um sistema

dinâmico e que maximize (ou minimize) uma dada medida de performance. Estas definições são matematicamente representadas na forma:

$$\max_{\mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t_f, t \in [0, t_f]} \mathbf{J}(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t_f)$$

$$\text{onde } \mathbf{J}(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t_f) = \varphi(\mathbf{x}(t_f), \dot{\mathbf{x}}(t_f), \mathbf{y}(t_f), \mathbf{u}(t_f), \mathbf{v}) + \int_0^{t_f} \mathbf{L}(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}) dt \quad (2.1)$$

$$\text{Sujeito a: } \mathbf{F}(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}) = \mathbf{0} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}(0), \dot{\mathbf{x}}(0), \mathbf{y}(0), \mathbf{u}(0), \mathbf{v}) = \mathbf{0} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{u}_{\text{inf}} \leq \mathbf{u}(t) \leq \mathbf{u}_{\text{sup}}, \quad \forall t \in [0, t_f] \quad (2.4)$$

$$\mathbf{v}_{\text{inf}} \leq \mathbf{v} \leq \mathbf{v}_{\text{sup}} \quad (2.5)$$

$$t_{f \text{ min}} \leq t_f \leq t_{f \text{ max}} \quad (2.6)$$

onde $\mathbf{x}(t)$ e $\dot{\mathbf{x}}(t)$ são os vetores que representam as variáveis de estado do sistema e suas derivadas, $\mathbf{y}(t)$ é o vetor das variáveis algébricas, $\mathbf{u}(t)$ é o vetor das variáveis de controle (variantes no tempo), \mathbf{v} são os parâmetros invariantes no tempo e \mathbf{u}_{inf} , \mathbf{u}_{sup} , \mathbf{v}_{inf} , \mathbf{v}_{sup} , $t_{f \text{ min}}$ e $t_{f \text{ max}}$ são os limites inferiores e superiores para as variáveis de decisão. A função $\mathbf{J}(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t_f)$ é aqui representada por dois termos: $\varphi(\mathbf{x}(t_f), \dot{\mathbf{x}}(t_f), \mathbf{y}(t_f), \mathbf{u}(t_f), \mathbf{v})$ e $\mathbf{L}(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v})$ que são as contribuições da função objetivo impostas no tempo final e sobre todo o intervalo de tempo.

Uma formulação matemática mais ampla do problema envolve, além das Equações (2.1) a (2.6), as restrições que delimitam a região de “viabilidade” para as variáveis de decisão (ou do sistema). Estas restrições podem ser impostas:

(a) no final do intervalo.

Neste caso, as restrições devem ser satisfeitas apenas no final da integração podendo então, ser incorporadas ao código de programação não-linear, ou seja:

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}(t_f), \dot{\mathbf{x}}(t_f), \mathbf{y}(t_f), \mathbf{u}(t_f), \mathbf{v}) = \mathbf{0} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}(t_f), \dot{\mathbf{x}}(t_f), \mathbf{y}(t_f), \mathbf{u}(t_f), \mathbf{v}) \leq \mathbf{0} \quad (2.8)$$

onde $\mathbf{h}(\mathbf{x}(t_f), \dot{\mathbf{x}}(t_f), \mathbf{y}(t_f), \mathbf{u}(t_f), \mathbf{v})$ e $\mathbf{g}(\mathbf{x}(t_f), \dot{\mathbf{x}}(t_f), \mathbf{y}(t_f), \mathbf{u}(t_f), \mathbf{v})$ são as restrições de igualdade e desigualdade respectivamente.

(b) no interior da região de busca ou durante toda a trajetória.

Esta classe de restrições requer que as mesmas sejam satisfeitas sobre determinados pontos no interior ou sobre todo o intervalo de integração, assim:

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t) = \mathbf{0} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t) \leq \mathbf{0} \quad (2.10)$$

O efeito da violação destas restrições sobre o procedimento numérico de integração do sistema dinâmico é equivalente à resolução de um sistema altamente rígido (BETTS *et al.*, 2002). A literatura apresenta vários métodos que permitem manipular tais classes de restrições porém, só recentemente foi possível re-interpretar o aumento da rigidez (como efeito da violação da restrição) sob a ótica da resolução de sistemas algébrico-diferenciais de índice superior e sujeito a descontinuidades (PARK e BARTON, 1996 e MAO e PETZOLD, 2002).

A literatura recente divide os métodos para resolução do problema de otimização dinâmica formado pelas Equações (2.1) a (2.10) em dois: os métodos indiretos e os métodos diretos. O método indireto fundamenta-se no cálculo variacional e em particular, no Princípio de Máximo de Pontryagin (PONTRYAGIN *et al.*, 1963), o qual compreende alguns aspectos teóricos aplicados aos problemas de controle ótimo¹. Para esta metodologia, a política de controle é definida com a maximização do Hamiltoniano (que conduz indiretamente à maximização da função objetivo - método indireto). As condições necessárias (de primeira ordem) que conduzem ao máximo são determinadas com as equações adjuntas, com condições de tempo final (originando um problema de valor no contorno em dois pontos). Entretanto, a incerteza na magnitude das variáveis adjuntas pode dificultar o procedimento de resolução. Uma versão híbrida do método indireto utiliza as técnicas de aproximação polinomial na resolução do problema de valor no contorno, aplicando-as diretamente às variáveis de estado e adjuntas (LYNN *et al.*, 1970). Nos métodos diretos, aplicam-se diretamente os fundamentos da programação não-linear e da programação dinâmica ao problema de otimização. Neste caso, os critérios que podem governar a função objetivo são: produção mínima de uma determinada substância contaminante, máxima produção de um componente chave ou minimização do tempo de partida de uma planta de processo.

¹ O Princípio de Máximo de Pontryagin na sua versão clássica não é aplicada a problemas de controle singular, sendo estudado à parte na teoria de controle.

Neste capítulo, os vários aspectos relacionados às metodologias de otimização dinâmica serão apresentados conforme o fluxograma contido na Figura 2.1 (seções 2.2 e 2.3). Na Seção 2.4, as vantagens e desvantagens de cada procedimento de otimização dinâmica são avaliadas. Por fim, na Seção 2.5, são apresentadas as principais ferramentas numéricas para obtenção de derivadas nos problemas de otimização: gradiente, jacobiana e hessiana.

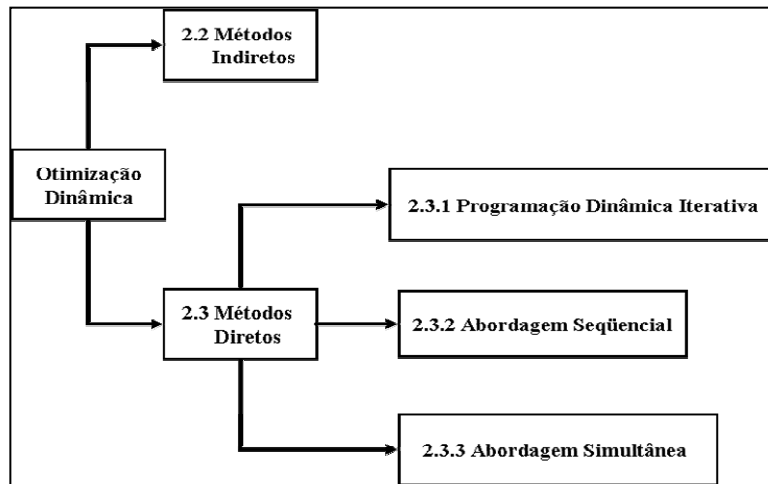


Figura 2.1 - Fluxograma sobre as metodologias de otimização dinâmica.

2.2 Método Indireto para Resolução do Problema de Otimização Dinâmica

A aplicação da teoria de controle de processos na engenharia química remota à década de 50. As técnicas, em sua maioria, são adaptações de trabalhos nos campos da engenharia elétrica e aeroespacial que ganharam um novo enfoque com o surgimento de técnicas computacionais mais eficientes (JACOBSON e LELE, 1969, BRYSON e HO, 1969, SARGENT 2000).

Dados o sistema dinâmico (na forma explícita ou semi-explícita), representado pela Equação (2.11), as condições iniciais, expressas pelas Equações (2.2) e (2.3), o funcional objetivo, Equação (2.1) e os limites para a ação da variável de controle expressos pelas Equações (2.4) e (2.5), as condições para maximizar o funcional objetivo são aquelas que maximizam o Hamiltoniano. Assim, para um determinado sistema dinâmico, Equação (2.11):

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \mathbf{u}(t) \cdot \mathbf{w}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \quad (2.11)$$

A formulação matemática do Hamiltoniano é representada pela seguinte equação:

$$H \equiv L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\lambda}^T [\mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) + \mathbf{u}(t) \cdot \mathbf{w}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))] \quad (2.12)$$

onde, $L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ é a contribuição da função objetivo (Equação 2.1), $\mathbf{w}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ é a contribuição do sistema dinâmico (Equação 2.11) e $\boldsymbol{\lambda}$, incógnitas do problema de otimização dinâmica, denominadas de variáveis adjuntas. As condições que maximizam a Equação (2.12) são determinadas derivando a equação em função do vetor de variáveis de controle, $\mathbf{u}(t)$, ou seja:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} = 0 \quad (2.13)$$

O vetor de variáveis adjuntas $\boldsymbol{\lambda}$, uma incógnita para o problema de otimização dinâmica, é determinada derivando o Hamiltoniano em função das variáveis de estado.

$$\frac{\partial \boldsymbol{\lambda}}{\partial t} = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \quad (2.14)$$

As condições para a resolução da Equação (2.14) são definidas somente em $t=t_f$, como função da seguinte equação:

$$\boldsymbol{\lambda}(t_f) = - \frac{\partial G_0}{\partial \mathbf{x}} \quad (2.15)$$

sendo G_0 , a contribuição da função objetivo imposta para o tempo final.

O princípio de máximo é formulado em termos das Equações (2.11) a (2.15). O resultado desta formulação é um problema de valor de contorno em dois pontos, onde as variáveis de estado são definidas, normalmente, no ponto inicial e as variáveis adjuntas, no ponto final. RAY (1989) apresenta o ferramental teórico para a resolução do sistema de Equações (2.11) a (2.15) utilizando as formulações (Fracca e Forte) do Princípio de Máximo de Pontryagin (PRONTRYAGIN *et al.*, 1963). Estas formulações podem ser aplicadas a sistemas de EDOs ou EADs de índice diferencial não superior 1 (ENGLAND *et al.*, 2005). HICKS e RAY (1971) apresentam uma breve revisão sobre técnicas clássicas aplicadas à otimização dinâmica. Os autores destacaram ainda os problemas encontrados pelo cálculo variacional quando aplicados a problemas não-lineares, dentre os quais:

- (a) converge muito lentamente para o ótimo;

- (b) requer a solução de equações auxiliares e de estado exigindo, com isso um grande esforço computacional durante a iteração;
- (c) geralmente não é aplicável a controle *feedback*;
- (d) não é conhecida a ordem de grandeza das variáveis adjuntas.

Somados aos itens acima, podemos acrescentar o surgimento de singularidades, o baixo desempenho do código na resolução do problema de valor de contorno e a dificuldade no tratamento de restrições de igualdade e desigualdade. A solução destes problemas envolve técnicas numéricas específicas, as quais são detalhadas nos parágrafos seguintes.

A origem das singularidades em problemas de controle ótimo pode ser atribuída à dependência linear da função Hamiltoniano em relação à variável de controle que, sob certas condições, deixa de ser uma função explícita, não havendo informação sobre a tendência da variável ao longo do tempo. Uma das primeiras abordagens para resolução de problemas de controle singular foi apresentada por JOHNSON e GIBSON (1963) e consiste em diferenciar sucessivas vezes a função Hamiltoniano até que a variável de controle apresente-se de forma explícita (como função das variáveis de estado e adjuntas). No entanto, as dificuldades na obtenção de uma forma explícita para problemas de maior dimensão limitaram a propagação desta abordagem. Recentemente, ALVES *et al.* (1998), COSTA JR. *et al.* (2001) e VIEIRA e BISCAIA JR. (2001) utilizaram uma estratégia semelhante porém, o sistema resultante apresentava ordem elevada. Algumas modificações no vetor das variáveis adjuntas foram apresentadas por VIEIRA e BISCAIA JR. (2001) no intuito de contornar o problema de ordem elevada do sistema e diminuir o custo computacional associado.

Uma característica do princípio de máximo é a resolução de problemas de valor de contorno em dois pontos. A resolução de tais problemas envolve técnicas iterativas como os métodos de “chute” e “múltiplo chute” (ASCHER e PETZOLD, 1988). Nestas técnicas, faz-se necessário o conhecimento antecipado sobre a dimensão do “chute” para as variáveis arbitradas, no caso as variáveis adjuntas (uma incógnita no problema de controle ótimo). Uma abordagem alternativa foi apresentada por LYNN *et al.* (1970), a qual consiste na aproximação das variáveis de estado e adjuntas em termos de uma combinação linear de funções testes com parâmetros a determinar. Como resultado, o problema de valor de contorno é transformado em um problema de otimização paramétrica e aproximação funcional. HICKS e RAY (1971) comparam o desempenho

de dois algoritmos de busca, gradiente e gradiente conjugado, na solução do problema de valor de contorno e confrontaram os resultados obtidos com a metodologia apresentada por LYNN *et al.* (1970). Nos casos estudados, a melhor performance aponta para o método de gradiente conjugado. Os autores não fizeram comentários sobre a dimensão do chute inicial adotado para as variáveis adjuntas.

O interesse na solução de problemas que envolvem restrições de igualdade, desigualdade não é novo no cálculo variacional (ver JACOBSON *et al.*, 1970 e BRYSON e HO, 1969). As restrições de desigualdade nas variáveis de estado, quando ativas, podem ocasionar um aumento no índice do sistema (recentemente denominado de problemas com restrições de fase, FEEHERY e BARTON, 1998). BELL *et al.* (1996) e BELL e SARGENT (2000) propuseram um algoritmo para tratar os problemas de controle ótimo com restrições de desigualdades, aplicando-os a sistemas de EADs de índice igual ou superior a 1. A idéia principal é satisfazer as condições do Princípio de Máximo de Pontryagin, estendido a sistemas de EADs com ou sem restrições nas variáveis de estado. Funções barreira foram utilizadas para tratar as restrições de desigualdade, e as restrições de igualdade restantes foram tratadas por métodos de ponto interior. Uma metodologia semelhante para o tratamento das restrições de desigualdade foi apresentada por GOMES *et al.* (2000). As etapas de redução do índice e caracterização do sistema foram executadas por uma ferramenta de diferenciação simbólica.

O método indireto, como apresentado, possui uma formulação teórica bastante consistente. Entretanto, as limitações numéricas ligadas à resolução do problema de valor de contorno e ao tratamento de problemas de otimização dinâmica com restrições ainda persistem. Novos métodos foram então criados para contornar os problemas apresentados pelo cálculo variacional. Um comparativo entre as duas metodologias é apresentado na Seção 2.4.

2.3 Métodos Diretos para Resolução do Problema de Otimização Dinâmica

Nos métodos diretos, o problema de otimização dinâmica sofre uma modificação nas técnicas de resolução. O princípio de Máximo de Pontryagin é substituído pelas condições Karush-Kuhn-Tucker (EDGAR *et al.*, 2001). Associado a isto, as ferramentas

de programação não-linear e de programação dinâmica são utilizadas na resolução do problema de otimização. Uma concisa revisão sobre esta metodologia é dada por SRINIVASAN *et al.* (2003) e BIEGLER e GROSSMANN (2004). Os autores dividiram os métodos diretos em dois grandes grupos de acordo com o nível de discretização adotado: discretização parcial e discretização total. Na primeira metodologia, apenas a variável de controle é discretizada. O sistema de equações resultante pode ser resolvido por técnicas de programação dinâmica ou por estratégias de programação não-linear (NLP). A característica principal desta técnica é que a cada iteração do código NLP, para um dado valor da variável de controle, o sistema de EADs é integrado. Para a segunda metodologia, o sistema de EADs é totalmente discretizado e as equações algébricas resultantes são anexadas ao código NLP. Para CUTHRELL e BIEGLER (1987) uma das vantagens de se utilizar a discretização total é a necessidade de solucionar as EADs apenas uma vez.

Nesta seção, será adotada a classificação apresentada por BIEGLER e GROSSMANN (2004). Inicialmente, serão apresentadas as técnicas que utilizam a discretização parcial: programação dinâmica e o método seqüencial; em seguida, serão apresentadas as técnicas que utilizam a discretização total, sendo o método simultâneo o principal representante.

2.3.1 Programação Dinâmica Iterativa

A técnica de Programação Dinâmica Iterativa (ou PDI) utiliza as mesmas bases da programação dinâmica. O princípio do algoritmo de PDI foi introduzido por LUUS e ROSEN (1991) e é descrito brevemente aqui. No início do processo iterativo, o horizonte de tempo é dividido em P estágios, de tamanho L . A variável de controle é então discretizada gerando uma malha uniforme, u_i , sob todo o intervalo de tempo. Para cada estágio, o algoritmo deve encontrar o u_i que minimize uma dada função objetivo. O último subintervalo (estágio) é otimizado primeiro. Depois de achar um ótimo aproximado, o estágio precedente é otimizado resguardando a trajetória de vetor das variáveis de controle do último estágio como ótimo fixo. Este procedimento é repetido "para trás", até alcançar o tempo $t = 0$.

As propriedades de convergência apresentadas pela técnica estão inteiramente ligadas à escolha dos candidatos a variáveis de controle, que por sua vez são

armazenados em um vetor e selecionados no final do processo de otimização. Nesta etapa, possíveis candidatos a direções ótimas são descartados, estreitando com isso o critério de busca à região ótima. A primeira melhoria do algoritmo foi apresentada por DADEBO e McAULEY (1995) incluindo um critério aleatório de escolha para estes candidatos. MEKARAPIRUK e LUUS (2000) ampliaram o critério de escolha desenvolvido por DADEBO e McAULEY (1995) anexando também uma escolha determinística. Os candidatos determinísticos foram divididos em dois grupos: transferência, que apenas transfere valores das variáveis de controle ao longo do tempo prevenindo a estagnação do código em uma região de ótimo local; suavização, que tem como objetivo principal suavizar o perfil de controle e facilitar a convergência do algoritmo. Nos exemplos estudados pode-se evidenciar a melhoria das propriedades de convergência do código PDI com o uso do efeito combinado de escolha.

O algoritmo original de PDI não comporta o tratamento de problemas de otimização dinâmica com restrições. Para tal, faz-se necessária a utilização de ferramentas de programação não-linear como funções barreira e penalidades. Nas duas técnicas, os parâmetros de ajuste são as próprias constantes de barreira e penalidade, as quais também exercem uma forte influência sobre a convergência final do algoritmo. LUUS e ROSEN (1991) e LUUS (1993) adaptaram o algoritmo PDI a problemas com restrições de igualdade e desigualdade nas variáveis de estado. As restrições de igualdade e desigualdade foram incorporadas à função objetivo por meio de funções penalidades Mínimos Quadrados multiplicadas por um parâmetro de peso ou uma expressão condicional (para o caso de restrições de desigualdade). A incógnita para estas formulações é a correta escolha para o valor do fator de peso, sendo necessários vários chutes para a escolha do valor final do parâmetro. Outras formulações para a função penalidade foram testadas por DADEBO e McAULEY (1995) e MEKARAPIRUK e LUUS (1997), contemplando restrições tanto nas variáveis de estado como nas de controle. Do mesmo modo, foram necessários vários chutes para a determinação do valor final dos parâmetros sem uma melhoria significativa nos resultados.

Um atrativo para a utilização da PDI é a sua facilidade de implementação e o grande número de exemplos aplicados (LUUS e ROSEN, 1991, LUUS, 1993, DADEBO e McAULEY, 1995 e MEKARAPIRUK e LUUS, 2000). Contudo, os resultados apresentados pelo algoritmo têm um impacto limitado devido à dimensão dos problemas estudados e ao alto custo computacional associado ao número excessivo de

iterações, inerentes à forma como o algoritmo foi construído (com base na Programação Dinâmica).

2.3.2 Abordagem Seqüencial ou Parametrização da Variável de Controle

O método seqüencial compõe o conjunto de métodos de otimização dinâmica em que apenas a variável de controle é discretizada. Uma característica desse método é a reduzida necessidade de manipulação no sistema original de equações. Os parâmetros presentes na expressão funcional e que descrevem o comportamento da variável de controle são estimados a cada iteração do código de otimização, como se pode observar na Figura 2.2.

O problema de otimização paramétrica gerado a partir desta metodologia tem como vantagens a fácil substituição das ferramentas de otimização e dispensa a resolução de equações auxiliares e adjuntas, reduzindo com isso o tempo computacional por iteração (HICKS e RAY, 1971). Esta abordagem apresenta bons resultados quando o modelo é composto somente por equações de estado (BIEGLER e GROSSMANN, 2004) ou em modelos complexos, onde há necessidade de códigos específicos para a resolução do sistema de EADs.

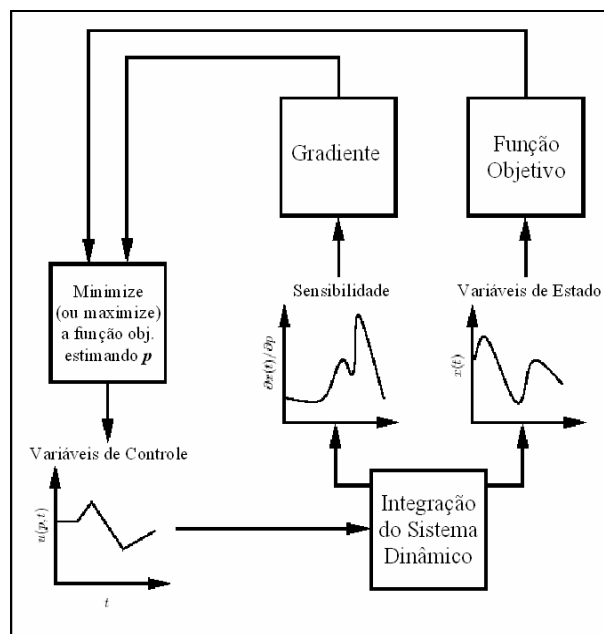


Figura 2.2 – Fluxograma da Abordagem Seqüencial (FEEHERY, 1998).

As aplicações do método seqüencial remontam da década de 70. POLLARD e SARGENT (1970) aplicaram a abordagem seqüencial na busca pelas condições ótimas para operação de uma coluna de destilação. A trajetória da variável de controle foi determinada por uma função constante por partes, representada pela Equação (2.16).

$$u(t) = u_i \quad (2.16)$$

Esta estratégia de aproximação da trajetória da variável de controle, apesar de fácil implementação, necessita de um número elevado de pontos de discretização². Como decorrência, o problema de otimização pode apresentar uma baixa convergência, devido ao aumento no número de variáveis de decisão. Esta dificuldade foi contornada pelos autores com a introdução de uma malha ajustável de controle.

HICKS e RAY (1971) confrontaram os resultados obtidos pelo cálculo variacional (Máximo de Pontryagin) e o método seqüencial para o problema de controle ótimo de um reator CSTR encamisado, sem a presença de restrições de igualdade e desigualdade. Os autores testaram duas formas funcionais para a aproximação da variável de controle. A primeira forma funcional (Equação 2.17) utiliza apenas a variável independente, tempo.

$$u(t) = u_s + \sum_{i=1}^m a_i t^i \quad (2.17)$$

onde u_s é o valor da variável de controle no estado estacionário e a_i são parâmetros a serem estimados.

A segunda forma de parametrização da variável de controle, Equação (2.18) (também conhecida pelo nome de Controle Ótimo Específico), envolve a parametrização do controle como função da(s) variável(eis) de estado, ou seja:

$$u(t) = u_s + \sum_{i=0}^{m_1} \sum_{j=0}^{m_2} a_{ij} \cdot (x_1 - x_{1s})^i \cdot (x_2 - x_{2s})^j \quad (2.18)$$

onde x_1 e x_2 são as respectivas variáveis de estado e x_{1s} e x_{2s} são os valores das variáveis de estado no estado estacionário.

Para HICKS e RAY (1971), esta forma funcional de aproximação conduz a variável de controle, facilmente, ao seu valor no estado estacionário. Os bons resultados obtidos pelos autores comprovaram a eficácia desta aproximação. BINDER *et al.* (2000) e SCHLEGEL *et al.* (2004) evidenciam a utilização de malhas adaptativas para a parametrização da variável de controle. No enfoque adaptativo, uma seqüência de

² O aumento no número de pontos de discretização pode ser justificado pela presença de descontinuidades na trajetória de controle.

malhas não uniformes e com poucas variáveis de decisão é gerada inicialmente. Com base na informação da já computada solução ótima (da iteração atual), uma nova malha de parametrização é criada. A nova malha inclui pontos altamente prospectivos e descarta os pontos que não contribuem para a melhoria da solução. Assim, o problema de otimização paramétrica é solucionado em várias malhas com uma diminuição do número de variáveis de parametrização. As onduletas foram utilizadas na avaliação dos pontos em potencial para a malha, bem como para comprimir a aproximação da solução ótima atual com base nas informações fornecidas pelo valor do gradiente da função de aproximação, neste caso uma função spline, representada pela Equação (2.19). Os autores empregaram a estratégia de refinamento adaptativo da malha, com sucesso, em um reator semibatelada exotérmico de polimerização.

$$u(t) = \sum_{j=1}^n b_j \cdot \varphi_j^m(t) \quad (2.19)$$

onde b_j são parâmetros de ajuste, $\varphi_j(t)$ é a função spline e m o grau do polinômio.

A Figura 2.3 apresenta os perfis temporais de algumas funções comumente utilizadas nos problemas de otimização dinâmica.

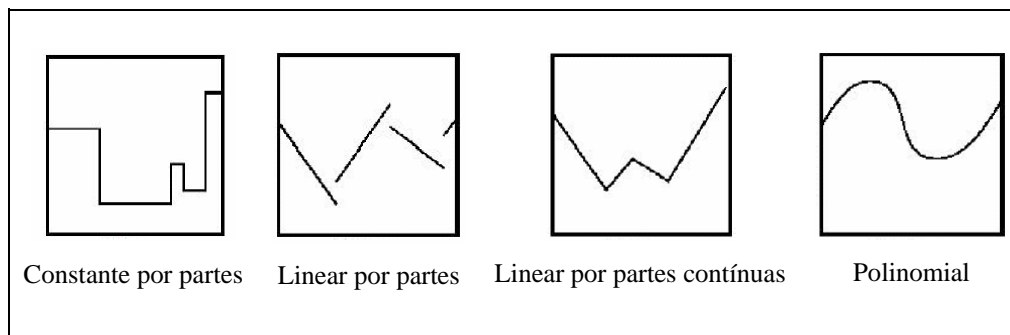


Figura 2.3 – Perfis temporais de algumas funções de aproximação.

A presença de restrições no problema de otimização dinâmica gera um estudo a parte na abordagem sequencial, principalmente quando estas são impostas sobre as variáveis de estado, devido ao grande número de implicações numéricas atreladas à resolução de tais problemas. Segundo FEEHERY e BARTON (1998), se as restrições de desigualdade nas variáveis de estado estão ativas em determinado trecho da curva de controle, tem-se então um problema de índice elevado onde, a cada restrição que se torna ativa, um grau de liberdade é perdido. Desta forma, a aproximação funcional utilizada para $u(t)$ na região de menor índice não é válida na região de índice superior. Dois problemas de otimização são então concebidos e estão relacionados às porções

restritas e não restritas da trajetória de controle, como pode ser observado na Figura 2.4. Segundo FIKAR (2001), as metodologias empregadas para avaliação das restrições de desigualdade (na abordagem seqüencial) podem ser agrupadas em quatro classes: (i) avaliação das restrições apenas no final da integração; (ii) no interior do intervalo; (iii) no interior e no ponto final de integração e por fim, (iv) variáveis de folga. No primeiro método, as dificuldades numéricas apresentadas estão associadas à sensibilidade dos parâmetros de penalidade e à utilização de operadores *max*, ambos causando uma descontinuidade no problema de otimização. Para a utilização da segunda metodologia, é necessário garantir que as restrições de desigualdade nas variáveis de estado não sejam violadas durante alguma porção da trajetória ótima. Convém lembrar que o tamanho do problema de parametrização da variável de controle também aumenta com o número de pontos para discretização das restrições (VASSILIADIS *et al.*, 1994a). Na aproximação via variável de folga, as restrições de desigualdade são transformadas em restrições de igualdade. A nova equação é diferenciada *k* vezes em relação ao tempo *t* até que a variável de controle *u* seja eliminada do sistema original (um procedimento semelhante à redução de índice, segundo GOMES *et al.*, 2000). Um problema na aplicação desta metodologia é a presença de arcos singulares, que afetam diretamente a convergência do método seqüencial. Os detalhes sobre cada uma das metodologias é apresentado no Capítulo 4.

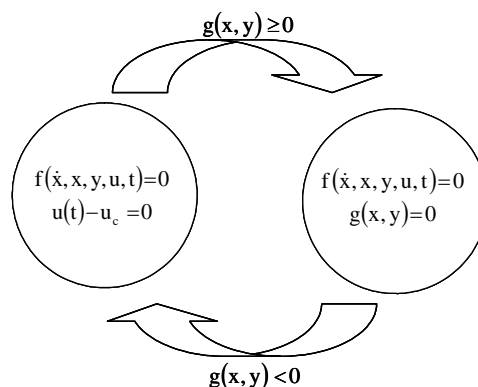


Figura 2.4 – Efeito de chaveamento para o tratamento de problema de otimização dinâmica com restrições.

Como exposto, o método seqüencial mostra-se robusto no tratamento de problemas complexos. As recentes ferramentas de integração de sistema de EADs são facilmente anexadas ao problema de otimização dinâmica e concedem aos códigos uma

maior flexibilidade e rapidez. Novas técnicas para o tratamento de problemas com restrições estão em constante desenvolvimento (FEEHERY e BARTON, 1998, SCHLEGEL *et al.*, 2005) e constituem uma nova fase na abordagem sequencial. Ainda cabe destacar a utilização de base de funções com malha adaptativo (BINDER *et al.*, 2000 e SCHLEGEL *et al.*, 2005) como uma alternativa para a aproximação do vetor de variáveis de controle.

2.3.3 Abordagem Simultânea (Discretização Total)

Na metodologia simultânea, as equações que compõem o problema de otimização dinâmica, bem como o conjunto de restrições (igualdade e desigualdade), são discretizados gerando um grande sistema algébrico (linear ou não-linear). A técnica mais empregada para a discretização do sistema de EAD é a aproximação polinomial via colocação ortogonal (BIEGLER, 1984). O sistema algébrico resultante da discretização apresenta a mesma exatidão das discretizações via diferenças finitas, só que com um número muito menor de pontos. Convém destacar que o tamanho do problema de otimização resultante da aproximação via abordagem simultânea cresce com o número de equações do sistema e do horizonte de tempo definido. Na Figura 2.5 é apresentado um fluxograma simplificado da abordagem simultânea.

No intuito de melhorar a performance da aproximação, CUTHRELL e BIEGLER (1987) utilizaram a técnica de colocação ortogonal em elementos finitos para converter o sistema dinâmico em um sistema algébrico. À resolução do sistema não-linear, Figura 2.5, somaram-se a localização das raízes dos polinômios, as condições de continuidade e o erro da aproximação, sendo estas consideradas variáveis do problema de programação não-linear. Para perfis descontínuos foram adicionados elementos extras, independente dos pontos de colocação utilizados na aproximação do sistema dinâmico, os quais foram denominados pelos autores de *super-elementos* e adicionados via inspeção do resultado final. VASANTHARAJAN e BIEGLER (1990) utilizaram a mesma abordagem de CUTHRELL e BIEGLER (1987) com a adição de um ajuste automático de elementos. A idéia principal era encontrar o número suficiente de divisões dos elementos de modo que o erro fosse menor ou igual à tolerância especificada. Nesta formulação, os erros foram normalmente distribuídos sobre todo o

intervalo e o número de elementos foi fornecido de maneira eficiente, sem a necessidade de avaliação prévia.

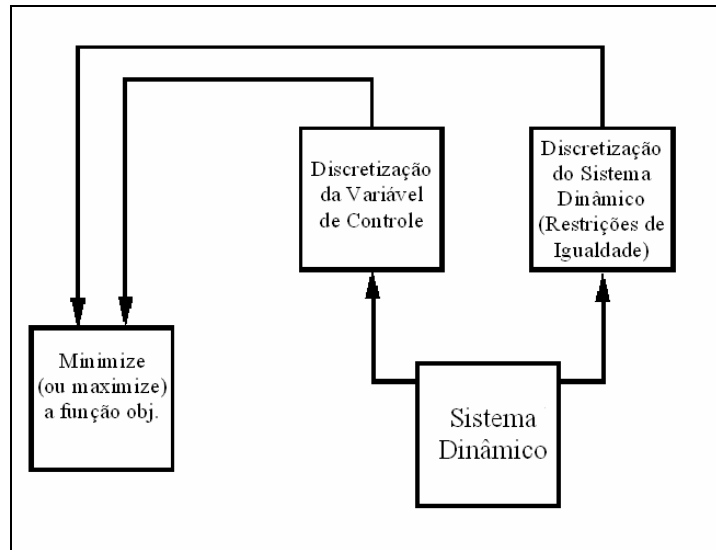


Figura 2.5 – Fluxograma da Abordagem Simultânea (BIEGLER, 1984).

A precisão empregada para as técnicas de aproximação polinomial não é geral, principalmente quando os problemas de otimização apresentam restrições que são funções das variáveis de estado ou arcos singulares. O surgimento de tais problemas (principalmente quando as restrições estão ativas) gera instabilidades durante as iterações do NLP, o que pode ser atribuído a flutuações no índice do sistema de EAD. Para controlar o erro e manter a estabilidade do método, há a necessidade de prever a ativação das restrições para então refinar o nível de discretização. Com base nesta informação, LOGSDON e BIEGLER (1989) criaram um critério global para controlar o erro da aproximação (com base nos métodos implícitos Runge-Kutta para índice elevado – BETTS *et al.*, 2002). Para os autores, a redução do erro durante a ativação das restrições pode afetar de modo global o erro da aproximação. Desta forma, a estratégia adotada segue a mesma linha de CUTHRELL e BIEGLER (1987), com a adição de pontos extras de modo a minimizar o erro, que por sua vez é diferenciado. A ordem do novo método de colocação pode então ser escolhida sem a necessidade de reformulação do problema. Os autores acrescentaram as equações adjuntas para reforçar o critério de minimização (com base no cálculo variacional). A nova estratégia foi testada, com sucesso, para três problemas de índice superior.

O sucesso da metodologia simultânea não depende somente da técnica de discretização, mas também do código de NLP empregado. A literatura de otimização

(GOTTFRIED e WEISMAN 1973, EDGAR *et al.*, 2001 e NOCEDAL e WRIGHT, 1999) apresenta uma série de algoritmos de programação não-linear para resolução de problemas e otimização com restrições, tais como: os códigos SQP (*Sucessive Quadratic Programming*), SLP (*Sucessive Linear Programming*), GRG (*Generalized Reduced Gradiente*) e os métodos Quasi-Newton.

Dentre os códigos apresentados, o SQP é o mais difundido na abordagem simultânea. Este método lineariza as restrições de desigualdade e igualdade construindo uma função objetivo quadrática convexa para o gradiente (restrições e função objetivo). A função quadrática resultante pode ser resolvida utilizando o algoritmo de programação quadrática (QP) de passo finito. A resolução do QP determina a direção de pesquisa enquanto uma minimização unidimensional ao longo desta direção localiza o próximo ponto. BIEGLER (1984) e BIEGLER *et al.* (1997) destacam as características principais do SQP, dentre as quais podemos citar:

(a) Converge rapidamente e requer poucas avaliações da função objetivo e do gradiente;

(b) Próximo da solução, o código pode ser inicializado mais precisamente devido às taxas de convergência local – Convergência Superlinear (LOGSDON e BIEGLER, 1993).

BIEGLER *et al.* (1997), BARCLAY (1999) e EDGAR *et al.* (2001) apresentam algoritmos mais atuais para códigos SQP. LOGSDON e BIEGLER (1993) desenvolveram uma estratégia para melhorar a eficiência do SQP, decompondo o modelo algébrico discretizado e aplicando uma relaxação ao sistema. Outra estratégia para códigos SQP foi apresentada por CERVANTES *et al.* (2000), a qual aproveita a estrutura do sistema de EADs. Os autores denominaram o novo código de rSQP (*reduced Sucessive Quadratic Programming*). O rSQP foi acrescido de um algoritmo de pontos interiores para o tratamento de problemas com restrições evitando, com isso, a escolha de um conjunto de restrições ativas.

Os atuais avanços nos métodos simultâneos (BIEGLER *et al.*, 2002) compreendem uma série de requisitos, dentre os quais: a introdução de algoritmos de pontos interiores para o tratamento de problemas com restrições de desigualdade, a utilização de códigos rSQP na melhoria da performance do NLP e mudanças nas técnicas de discretização com a junção da colocação ortogonal e elementos finitos

móveis. Os elementos finitos móveis são anexados aos problemas NLP no intuito de melhorar a discretização e diminuir a dimensão do NLP. A aplicação desta técnica de discretização pode introduzir instabilidades nos problemas que envolvem restrições de desigualdade. Assim, o aprimoramento da utilização da técnica de elementos finitos móveis concentra-se atualmente na escolha dos pontos de colocação e na avaliação do erro das restrições. Elementos extras (conforme apresentado acima) são adicionados para melhorar o desempenho do método de resolução em sistemas de índice superior. O critério utilizado para avaliar o número de elementos adicionados e os seus respectivos pontos estáveis é acompanhar o valor da derivada do Hamiltoniano da função de modo que este não exceda uma tolerância especificada. A adição de elementos finitos móveis constitui à face mais moderna da metodologia de solução simultânea.

2.4 Distinção entre as Metodologias de Resolução do Problema de Otimização Dinâmica

Nesta seção é apresentado um resumo sobre os métodos diretos e indiretos. O intuito é estabelecer uma base para avaliação das metodologias apresentando os pontos fracos e fortes inerentes a cada uma delas.

O método indireto ou cálculo variacional segue uma linha de formulação teórica mais consistente se comparado aos métodos diretos. Os problemas quase sempre tratados compreendem modelos a parâmetros agrupados e de dimensão reduzida. Entretanto, as mesmas formulações podem ser estendidas a modelos com parâmetros distribuídos (RAY, 1989). Entre os pontos negativos ou limitações apresentadas pelo método indireto, pode-se destacar a dificuldade em estabelecer um chute inicial para as variáveis adjuntas e o surgimento de singularidades durante etapa de resolução do BVP. Os aspectos positivos são o número de exemplos ilustrativos da aplicação da metodologia e o número de sucessos obtidos, o que torna esta abordagem uma forte candidata para a solução de problemas de otimização dinâmica.

Como apresentado, os métodos diretos são divididos em três grandes abordagens, a saber: Programação Dinâmica Iterativa (PDI), Seqüencial e Simultânea.

Programação Dinâmica Iterativa: Nesta abordagem, o interesse principal é a procura pelo perfil ótimo da variável de controle, seja discretizando a variável de controle em termos da variável independente tempo e avaliando a função objetivo nos

pontos discretizados. Dentre os métodos diretos, a programação dinâmica iterativa é a que apresenta maior facilidade de implementação. A principal desvantagem desta abordagem é o número excessivo de iterações, o que a torna inviável para o tratamento de problemas de grandes dimensões.

Abordagem Seqüencial: A abordagem seqüencial compreende uma série de inovações que têm como base o estado da arte nos códigos integradores de EADs e a utilização de ferramentas para redução de índice e geração das equações de sensibilidade. Dentre as abordagens apresentadas nesta seção, é a que apresenta maior eficiência na solução de problemas de grande dimensão e de modelos complexos (VASSILIADIS *et al.*, 1994a, 1994b e TOLSMAN e BARTON, 1998). Os atuais avanços dos métodos seqüenciais concentram-se na resolução de problemas de índice variável (ou flutuante) resultantes da ativação das restrições de igualdade e/ou desigualdade nas variáveis de estado. Para estes problemas, há a necessidade re-inicialização do sistema de EAD, o que pode dificultar o sucesso da estratégia.

Abordagem Simultânea: A abordagem simultânea, como os demais métodos diretos, apresenta-se também em contínuo desenvolvimento. Esta técnica envolve a discretização total do modelo. O resultado desta discretização é um grande sistema algébrico (linear ou não-linear), ao qual se aplicam as técnicas de programação não-linear, em especial a Programação Quadrática Sucessiva (em inglês, *Successive Quadratic Programming*, SQP) para extremar a função objetivo. O espectro de aplicação desta abordagem é limitado e compreende uma família de problemas particularmente simples (composto por modelos a parâmetros agrupados). Para problemas com grande número de restrições, há a necessidade da escolha de um conjunto ativo e de uma inicialização consistente para o NLP, o que pode encarecer o custo computacional associado.

2.5 Ferramentas de Diferenciação para a Otimização Dinâmica

A maior parte dos códigos de otimização não-linear requer o conhecimento sobre as derivadas da função objetivo, do modelo e restrições. Tais informações são utilizadas no cômputo do gradiente e da hessiana e podem ser fornecidas por: técnicas numéricas aproximativas ou diferenciação numérica (diferenças finitas), calculadas

diretamente (à mão) e por técnicas de diferenciação automática ou simbólica. Desta forma, a exatidão da solução e o custo computacional associado à resolução do problema de otimização estão interligados à escolha de uma das técnicas. Abaixo são apresentados mais detalhes sobre cada uma das técnicas.

2.5.1 Diferenciação Numérica

Com origem na Série de Taylor, a idéia principal desta técnica consiste em avaliar a resposta da função objetivo a pequenas perturbações. Dentre as vantagens contidas, pode-se destacar a relativa facilidade na geração das derivadas e a não necessidade de um profundo conhecimento sobre os detalhes do modelo, ou seja, o modelo é considerado uma “caixa preta”. Para exemplificar o procedimento, considere a aproximação por diferença finitas da derivada parcial de uma $f(x)$ em relação a uma dada variável x :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=x_k} = \frac{f(x_k) - f(x_k - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (2.20)$$

onde Δx é o tamanho da perturbação e x_k é o ponto para aproximação. Neste caso, a ordem da aproximação é controlada pelo termo onde a série de Taylor foi truncada.

Um problema apresentado pela técnica é o compromisso entre o erro de truncamento e o erro de arredondamento. Como a expansão só é válida na vizinhança do ponto de expansão, grandes “passos” (Δx), fazem com que o erro de truncamento seja significativo. Se o valor do “passo” é reduzido, o erro de arredondamento no numerador da Equação (2.20) pode ser amplificado, comprometendo o resultado obtido. Logo, existe um valor ótimo para Δx , que pode depender da função a ser diferenciada e das variáveis independentes. Outro problema apresentado pela técnica de diferenciação numérica é o seu custo computacional, de $n+1$ vezes o custo para avaliar a função (n é a dimensão do sistema).

2.5.2 Diferenciação Automática e Simbólica

A diferenciação automática (e simbólica) é uma técnica computacional para determinar a derivada de uma função. Esta determinação poder ser via “banco” de

derivadas pré-determinadas (simbólica) ou aplicando a regra da cadeia em uma seqüência de operações aritméticas elementares contidas na função (automática).

Os melhores códigos de diferenciação simbólica estão implementados em sistemas de álgebra computacional pagos como *Maple* (CHAR *et al.*, 1988) e *Mathematica* (WOLFRAM, 1991), já os pacotes para diferenciação automática, como por exemplo o ADIFOR (BIRSCHOF *et al.*, 1998) e o ADOL-C (GRIEWANK *et al.*, 1996b) estão disponíveis ao público.

As aplicações mais diretas das ferramentas de diferenciação automática estão direcionadas ao auxílio a técnicas de otimização, sobretudo, na obtenção da matriz hessiana de sistemas de grande dimensão e relativamente esparsos. GRIEWANK e CORLISS (1991) apresentam alguns exemplos da utilização das ferramentas de diferenciação automática em otimização.

2.5.3 Equações de Sensibilidade

Quando o problema de otimização, representado pelas Equações (2.1) a (2.10), é solucionado utilizando a abordagem seqüencial (parametrização da variável de controle) há a necessidade do cômputo da derivada do modelo dinâmico (e da função objetivo) em relação as variáveis de controle (ou aos parâmetros presentes na função de controle, por exemplo a Equação 2.16). Essa informação pode ser determinada por diferentes técnicas (POLLARD e SARGENT, 1970, LEIS e KRAMER, 1985, CARACOTSIOS e STEWART, 1985, MALY e PETZOLD, 1986, KRISTENSEN *et al.*, 2004): (i) diferenciação numérica; (ii) equações adjuntas e (iii) equações de sensibilidade. A primeira técnica consiste da aproximação do modelo via técnica de diferenças finitas. Nesta técnica, não há necessidade de conhecimento prévio sobre as equações do modelo, ou seja, o modelo é considerado como uma “caixa preta”. O erro de truncamento associado ao método depende especialmente do tamanho da perturbação adotada. Na segunda técnica, a sensibilidade do modelo em relação aos parâmetros é gerada utilizando as equações de Euler-Lagrange que são integradas “para trás”, tais métodos não serão abordados neste texto.

As equações de sensibilidade possuem um importante papel em muitos problemas da engenharia, em especial, nos problemas de estimação de parâmetros, análise de projeto e em problemas de otimização (estacionária e dinâmica). Para ilustrar

a técnica de geração das equações de sensibilidade (ES), considere o seguinte sistema de EADs:

$$\mathbf{F}(\mathbf{t}, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, \mathbf{p}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x}(\mathbf{0}) = \mathbf{x}_0 \quad (2.21)$$

Neste sistema, n_y e n_p são respectivamente o número de equações originais do sistema de EADs e o número de parâmetros presente no modelo. Para a análise de sensibilidade é necessário encontrar as derivadas do sistema representado pela Equação (2.21) com respeito a cada parâmetro presente no modelo. Este procedimento gera um sistema adicional de dimensão $n_{ES} = n_p * n_x$, que é representado da seguinte forma:

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \dot{\mathbf{s}}_i + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{s}_i + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{p}_i} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{i} = 1, \dots, n_p \quad (2.22)$$

onde $\dot{\mathbf{s}}_i = \frac{d\dot{\mathbf{x}}}{d\mathbf{p}_i}$ e $\mathbf{s}_i = \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{p}_i}$ são os coeficientes de sensibilidades.

No geral, o sistema de EADs representado pela Equação (2.21) e o sistema de sensibilidade, Equação (2.22), são solucionados em seqüência ou simultaneamente, levando-se em conta a linearidade das equações de sensibilidade. LEIS e KRAMER (1985) apresentam detalhes sobre as duas metodologias para a resolução da Equação (2.22) com destaque para a metodologia simultânea. Segundo os autores, o método simultâneo elimina cálculos desnecessários devido à facilidade de interligação com os métodos de integração tipo BDF, desta forma, informações como: tamanho de passo de integração e cálculo da Jacobiana, podem ser facilmente utilizadas na geração das matrizes $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{x}}}$ e $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}}$. Dentre os vários métodos de geração e integração simultânea das equações de sensibilidade, três deles merecem destaque, a saber: *Staggered Direct*, *Simultaneous Corrector* e a *Staggered Corrector*.

2.5.3.1 Método “*Staggered Direct*” (CARACOTSIOS e STEWART, 1985)

Nesta técnica, as equações de sensibilidade são discretizadas com o mesmo esquema numérico adotado para as variáveis de estado. Em cada etapa de integração, as variáveis de estado do sistema de EADs são computadas por um corretor não-linear. Após convergência do código de resolução de equações não-lineares, a Equação (2.22) é solucionada para $s_{i(n+1)}$ diretamente sem utilizar as iterações de Newton. Convém frisar que esta implementação pode falhar se a matriz Jacobiana for mal-condicionada. LI *et*

al. (2000) apresentaram uma modificação deste método de modo a evitar mal-condicionamento da matriz Jacobiana.

2.5.3.2 Método “*Simultaneous Corrector*” (MALY e PETZOLD, 1996)

Uma segunda classe de método é chamada *simultaneous corrector*. A técnica desenvolvida por MALY e PETZOLD (1996) considera o sistema composto pelas Equações (2.21) e (2.22) como um único sistema de equação. Essa equação “global” é solucionada como um sistema dinâmico (sem utilizar a linearidade das equações de sensibilidade). Recentemente, SCHLEGEL *et al.* (2004) apresentaram novas formulações para a geração numérica das equações de sensibilidade, utilizando a estratégia desenvolvida por MALY e PETZOLD (1996). A equação “global”, formada pelo sistema de EADs e as equações de sensibilidade, foram integradas com base no método de Euler implícito.

2.5.3.3 Método “*Staggered Corrector*” (FEEHERY e BARTON, 1997)

Este método é similar ao apresentado por CARACOTSIOS e STEWART (1985) com uma importante diferença, a matriz Jacobiana só é atualizada quando o método de Newton falhar em uma determinada iteração. A avaliação completa sobre as abordagens e sua integração em conjunto com o sistema de EADs é apresentada por LI *et al.* (2000) e KRISTENSEN *et al.* (2004).

Um exemplo (e também uma contribuição do presente trabalho) do impacto das equações de sensibilidade é apresentado no APÊNDICE A. Duas abordagens para geração das equações de sensibilidade paramétrica são confrontadas: perturbação numérica (com base na Equação 2.20) e diferenciação simbólica. Neste caso, a técnica de diferenciação simbólica é utilizada somente para a geração das matrizes de sensibilidade $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \hat{\mathbf{x}}}$, $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}}$ e $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{p}}$ (geração da Equação 2.22), que são incorporadas ao modelo. As duas abordagens foram anexadas ao código de estimação de parâmetros, ESTIMA (NORONHA *et al.*, 1993). Como resultado, a segunda abordagem mostrou-se bem sucedida para os exemplos avaliados.

Nos problemas de otimização dinâmica, seja por meio dos métodos diretos (em especial a abordagem seqüencial) ou pelos métodos indiretos, torna-se imprescindível a utilização das ferramentas de diferenciação numérica e automática, em particular, na geração matrizes de sensibilidade. A aplicação e as informações carregadas pelas equações de sensibilidade são de extremo interesse no desenvolvimento de técnicas seguras e robustas de otimização e, conforme apresentado no APÊNDICE A, de estimação de parâmetros. A literatura apresenta uma série de exemplos bem sucedidos da aplicação destas equações, contudo a sua extensão a problemas de otimização dinâmica com restrições de desigualdade e/ou com arcos singulares ainda necessita de maiores desenvolvimentos.

2.6 Referências Bibliográficas deste Capítulo

- ALVES, T. L. M., COSTA, A. C., HENRIQUES, A., LIMA, E. L., 1998, “Adaptive Optimal Control of Fed-Batch Alcoholic Fermentation”, *Applied Biochemistry and Biotechnology*, v.70-72, pp.2385-2404.
- ASCHER, U. M., PETZOLD, L., 1998, *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*, Classics in Applied Mathematics Series, SIAM.
- BARCLAY, A., 1999, *SQP Methods for Large-Scale Optimization*, Doctor Philosophy in Mathematics, University of California, San Diego, EUA.
- BELL, M. L. SARGENT, R. W. H., 2000, “Optimal Control of Inequality Constrained DAE Systems”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 2385-2404.
- BELL, M. L., LIMEBEER, D. J. N., SARGENT, R. W. H., 1996, “Robust Receding Optimal Control”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 20, Suppl., pp. 781-786.
- BETTS, J., BIEHN, N., CAMPBELL, S. L., 2002, “Convergence of Nonconvergent IRK Discretizations of Optimal Control Problems with State Inequality Constraints”, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 23, n. 6, pp. 1981 – 2007.

- BIEGLER, L. T., 1984, "Solution of Dynamic Optimization Problems by Successive Quadratic Programming and Orthogonal Collocation", *Computers and Chemical Engineering*, v. 8, n. 3/4, pp. 243-248.
- BIEGLER, L. T., CERVANTES, A. M., WÄCHTER, A., 2002, "Advanced in Simultaneous Strategies for Dynamic Process Optimization", *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 575-593.
- BIEGLER, L. T., GROSSMANN, I. E., 2004, "Retrospective on Optimization", *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 1169-1192.
- BIEGLER, L. T., GROSSMANN, I. E., WESTERBERG, A. W., 1997, *Systematic Methods of Chemical Process Design*, 1^o ed., Prentice Hall PTR, New Jersey, EUA.
- BINDER, T., CRUSE, A., CRUZ VILLAR, C. A., MARQUARDT, W., 2000, "Dynamic Optimization Using a Wavelet Based Adaptive Control Vector Parameterization Strategy", *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 1201-1207.
- BISCHOF, C. H., CARLE, A., CORLISS, G. F., GRIEWANK, A., HOVLAND, P., 1992, "ADIFOR: Generating Derivative Codes from Fortran Programs", *Scientific Programming*, v. 1, pp. 1-29.
- BRYSON JR., A. E., 1999, *Dynamic Optimization*, Addison-Wesley Logman Inc., California, EUA.
- BRYSON JR., A. E., HO, Y.-C., 1969, *Applied Optimal Control Optimization, Estimation, and Control*, Blaisdell Publishing Company, Massachusetts, EUA.
- CARACOTSIOS, M., STEWART, W., 1985, "Sensitivity Analysis of Initial Value Problems with Mixed ODEs and Algebraic Equations", *Computers and Chemical Engineering*, v. 9, n. 4, pp. 359-365.
- CERVANTES, A. M., WÄCHTER, A., TÜTÜNCÜ R. H., BIEGLER, L. T., 2000, "A Reduced Space Interior Point Strategy for Optimization of Differential Algebraic Systems", *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 39-51.
- CHAR, B. W., GEDDES, K. O., GONNET, G. H., MONAGAN, M. B., WATT, S. M., 1988, *MAPLE Reference Manual*, Watcom Pub., Waterloo, Ontario, Canada.

- COSTA JR., E. F., VIEIRA, R.C., SECCHI, A.R., BISCAIA, E.C., 2001, "Automatic Structural Characterization of DAE Systems", *11^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 11*, Denmark.
- CUTHRELL, J. E., BIEGLER, L. T., 1987, "On the Optimization of Differential-Algebraic Process Systems", *AIChE Journal*, v. 33, 8, pp. 1257-1270.
- DADEBO, S. A., McAULEY, K. B., 1995, "Dynamic Optimization of Constrained Chemical Engineering Problems Using Dynamic Programming", *Computers and Chemical Engineering*, v. 19, 5, pp. 513-525.
- EDGAR, T. F., HIMMELBLAU, D. M., LASDON, L. S., 2001, *Optimization of Chemical Processes*, 2^o ed., McGraw Hill, Boston, EUA.
- ENGLAND, R., GÓMEZ, S., LAMOUR, R., 2005, "Expressing optimal control problems as differential algebraic equations", *Comput. Chem. Eng.*, Vol. 29, n. 8, pp 1720-1730.
- FEEHERY, W. F., 1998, *Dynamic Optimization with Path Constraints*, Doctor Philosophy in Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, EUA.
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1998, "Dynamic Optimization with State Variable Path Constraints", *Computers and Chemical Engineering*, v. 22, n. 9, pp.1241-1256.
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1999, "Dynamic Optimization with Equality Path Constraints", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 38, pp. 2350-2363.
- FIKAR, M., 2001, "On Inequality Path Constraints in Dynamic Optimisation", *Technical Report MF0102*, Laboratoire des Sciences du Genie Chimique, CNRS, Nancy, France. URL: <http://www.kirp.chtf.stuba.sk/~fekar/research/dynopt!/dynopt.htm>.
- GOMES, E. O., HENRIQUE, H. M., MURATA, V. V., 2000, "Otimização Algébrico-Diferencial com Restrições de Desigualdade na Variável de Estado", *In: Anais 13^o Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, Águas de São Pedro, Brasil.
- GOTTFRIED, B. S. e WEISMAN, J., 1973, *Introduction to Optimization Theory*, 1^o ed., Prentice-Hall Inc., New Jersey, EUA.

- GRIEWANK, A. E CORLISS, G. F., 1991, *Automatic Differentiation of Algorithms: Theory, Implementation, and Application*, 1° ed., SIAM, Philadelphia, EUA.
- GRIEWANK, A., JUEDES, D., MITEV, H., UTKE, J., VOGEL, O., WALTHER, A., 1996b, “ADOL-C: A Package for the Automatic Differentiation of Algorithms Written in C/C++”, *ACM TOMS*, v. 22, n. 2, pp. 131-167.
- HICKS, G. A, RAY, W. H., 1971, “Approximation Methods of Optimal Control Systems”, *Can. J. Chem. Engng*, v.49, pp.522 - 528.
- JACOBSON, D. H., GERSHWIN, S. B., LELE, M. M., 1970, “Computational of Optimal Singular Controls”, *IEEE Trans. Autom. Control*, v. 15, n. 1, 67 – 73.
- JACOBSON, D. H., LELE, M. M., 1969, “A Transformation Technique for Optimal Control Problems with a State Variable Inequality Constraint”, *IEEE Trans. Autom. Control*, v. 14, pp. 457–464.
- JOHNSON, C. D., GIBSON, J. E., 1963, “Sinular Solutions in Problems of Optimal Control”, *IEEE Trans. Autom. Control*, v. 8, n. 1, pp. 4 – 15.
- KRISTENSEN, M. R., JØRGENSEN, J. B., THOMSEN, P. G. E, JØRGENSEN, S. B., 2004, “An ESDIRK Method with Sensitivity Analysis Capabilities”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, n. 12. pp. 2695-2707.
- KUHN, H. W., TUCKER, A. W., 1951, “Nonlinear programming”. *Proceedings of 2nd Berkeley Symposium*, pp. 481-492, Berkeley: University of California Press.
Citado por: EDGAR, T. F., HIMMELBLAU, D. M., LASDON, L. S., 2001, *Optimization of Chemical Processes*, 2° ed., McGraw Hill, Boston, EUA.
- LEIS, J. R., KRAMER, M. A., 1985, “Sensitivity Analysis of Systems of Differential and Algebraic Equations”, *Comput. Chem. Eng.*, v.9, n. 1, pp. 93-96.
- LI, S., PETZOLD, L., ZHU, W., 2000, “Sensitivity Analysis of Differential-Algebraic Equations: A Comparison of Methods on a Special Problem”, *Applied Numerical Mathematics*, v. 32, pp. 161-174.
- LOGSDON, J. S., BEIGLER, L. T., 1989, “Accurate Solution of Differential-Algebraic Optimization Problems”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 28, pp.1628-1639.

- LOGSDON, J. S., BEIGLER, L. T., 1993, "A Relaxed Reduced Space SQP Strategy for Dynamic Optimization Problems", *Computers and Chemical Engineering*, v. 17, n. 4, pp. 367-372.
- LUUS, R., 1993, "Application of Dynamic Programming to Differential-Algebraic Process Systems", *Computers and Chemical Engineering*, v. 17, n. 4, pp. 373-377.
- LUUS, R., ROSEN, O., 1991, "Application of Dynamic Programming to Final State Constrained Optimal Control Problems", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 30, pp. 1525-1530.
- LYNN, L. L., PARKIN, E. S., ZAHRADNIK, R., 1970, "Near-Optimal Control by Trajectory Approximation", *I&EC Fundamentals*, v. 9, n. 1, pp.58-63.
- MALY, T., PETZOLD, L. R., 1996, "Numerical Methods and Software for Sensitivity Analysis of Differential-Algebraic Systems", *Applied Numerical Mathematics*, v. 20, pp. 57-79.
- MAO, G., PETZOLD, L. R., 2002, "Efficient Integration over Discontinuities for Differential Algebraic Systems", *Computers and Mathematics with Applications*, v. 43, pp. 65-79.
- MEKARAPIRUK, W., LUUS, R., 1997, "Optimal Control of Inequality State Constrained Systems", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 36, pp. 1686 - 1694.
- MEKARAPIRUK, W., LUUS, R., 2000, "Optimal Control by Iterative Dynamic Programming with Deterministic and random Candidates for Control", *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, pp. 84-91.
- NOCEDAL, J., WRIGHT, S., 1999, *Numerical Optimization*, 1° ed., Springer-Verlag Inc., New York, EUA.
- NORONHA, F. B., PINTON, J. C., MONTEIRO, J. L., LOBÃO, M. W., SANTOS, T. J. ESTIMA - Um Pacote Computacional para Estimaco de Parâmetros e Projeto de Experimentos. Guia de Usuários, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1993.
- PARK, T., BARTON, P. I., 1996, "State event location in differential-algebraic models" *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, v. 6, pp. 137-165.

- POLLARD, G. P., SARGENT, R. W. H., 1970, "Off line Computation of Optimum Controls for a Plate Distillation Column", *Automatica*, v. 6, pp. 59 - 76.
- PONTRYAGIN, L. S., BOLTYANSKII, V. G., GAMKRELIDZE, R. V., MISCHENSKO, Y.F., 1963, *The Mathematical Theory of Optimal Processes*, 1^o ed, Interscience, New York, EUA.1963.
- RAY, H. W., 1989, *Advanced Process Control*, McGraw-Hill Book Company, New York, EUA.
- SARGENT, R. W. H., 2000, "Optimal Control", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 124, pp. 361-371.
- SCHLEGEL, M., MARQUARDT, W., EHRIG, R., NOWAK, U., 2004, "Sensitivity Analysis of Linearly-Implicit Differential-Algebraic System by One-Step Extrapolation", *Applied Numerical Mathematics*, v. 48, pp. 83-102.
- SCHLEGEL, M., STOCKMANN, K., BINDER, T., MARQUARDT, W., 2005, "Dynamic Optimization using Adaptive Control Vector Parameterization", *Computers and Chemical Engineering*, v.29, n. 8, pp. 1731 – 1751.
- SOUZA, D. F. S., 2002, *Unificação da Modelagem e Simulação de Secadores de Sólidos*, Tese de Mestrado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil
- SRINIVASAN, B., PALANKI, S., BONVIN, D., 2003, "Dynamic Optimization of Batch Processes I: Characterization of the Nominal Solution", *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, pp: 1 – 26.
- TOLSMA, J. E., BARTON, P. I., 1998, "On Computational Differentiation", *Computers and Chemical Engineering*, v. 22, n. 4/5, pp.475-490.
- VASANTHARAJAN, S., BIEGLER, L. T., 1990, "Simultaneous Strategies for Optimization of Differential-Algebraic Systems with Enforcement of Error Criteria", *Computers and Chemical Engineering*, v. 14, 10, pp. 1083-1100.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994a, "Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems. 1. Problems without Path Constraints", *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, pp. 2111-2122.

- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994b, "Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems 2. Problems with Path Constraints", *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, pp. 2123-2133.
- VIEIRA, R.C., BISCAIA JR., E.C., 2001, "Dynamic Optimization of Fed-batch Reactors Based on Automatic Differentiation Tools", In: *Proceedings of 11^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 11*, Denmark.
- WOLFRAM, S., 1991, *Mathematica: a System for Doing Mathematics by Computer*, 2^a ed., Addison-Wesley, Redwood City, CA.

Capítulo 3

Funções de Regularização na Manipulação de Descontinuidades

As principais famílias de métodos numéricos para manipulação de descontinuidades em modelos dinâmicos são apresentadas neste capítulo. Uma nova abordagem é proposta para a transposição de descontinuidades. A base para esta nova abordagem é a utilização de funções de regularização apropriadas que, ao mesmo tempo, as detectam e as suavizam cada vez que são encontradas. As diferentes etapas do procedimento numérico proposto são ilustradas por exemplos da literatura.

3.1 Introdução

A presença de restrições em modelos de processos, decorrentes de alterações nas condições operacionais ou por limitações inerentes aos modelos (comum em processos de separação que envolve equilíbrio termodinâmico), pode resultar em descontinuidades durante a resolução numérica. Tais descontinuidades são, no geral, assinaladas por uma mudança brusca na estimativa do passo de integração. Como consequência, o código de integração realiza uma drástica redução no tamanho do passo ou, em alguns casos, uma

redução na ordem do método de integração (GEAR e OSTERBY, 1984). Esse procedimento é repetido até que o integrador ultrapasse a descontinuidade, do contrário a integração pode ser interrompida prematuramente. Um enfoque alternativo permite que as restrições sejam tratadas em separado, o que é possível com a utilização de um procedimento iterativo para detectar o instante em que as restrições são violadas. Após a detecção, uma nova etapa é requerida para determinação de novas condições iniciais consistentes que servirão na reinicialização do novo sistema de equações.

Outra fonte de descontinuidade são os problemas de otimização (estacionária e dinâmica) com restrições de desigualdade. Nesses problemas, o valor ótimo da função objetivo deve estar delimitado pelas restrições que representam os limites físicos ou padrões de qualidade de uma determinada variável (ou conjunto de variáveis). A violação das restrições implica em uma extrapolação da região de validade do modelo matemático. O tratamento numérico aplicado a esta classe de problemas consiste em penalizar as restrições de desigualdade transformando-as em restrições de igualdade. As novas restrições de igualdade são então anexadas à função objetivo e um procedimento iterativo é realizado até que o mínimo (ou máximo) seja alcançado.

Neste capítulo são apresentados os detalhes sobre os tipos de descontinuidades, como surgem e os procedimentos numéricos envolvidos na sua manipulação focando, sobretudo os problemas de simulação dinâmica e otimização. Uma nova metodologia é proposta através da regularização das descontinuidades presentes no modelo. As descontinuidades são tratadas por meio de funções de regularização apropriadas (VIEIRA e BISCAIA JR., 2002) que, ao mesmo tempo, as detectam e as suavizam cada vez que são encontradas. As diferentes etapas do procedimento numérico proposto são ilustradas por exemplos típicos da literatura os quais servirão de base para os desdobramentos apresentados nos capítulos seguintes.

3.2 Tipos de Descontinuidades e suas Origens

Descontinuidades surgem na simulação dinâmica de processos toda vez que uma restrição física ou operacional é atingida, como por exemplo, a abertura ou fechamento de uma válvula em um sistema de transporte de gás ou uma seqüência de chaves presentes em um circuito elétrico. Tal restrição, que pode ser representada por uma nova

informação ou equação, prevalece apenas durante um intervalo de tempo determinado. O tempo exato da ocorrência da descontinuidade pode, ou não, ser conhecido e a sua violação depende da evolução do sistema que está sendo integrado. A resolução numérica desta classe de problemas envolve as etapas de detecção da ativação da restrição e localização da descontinuidade. Após a realização dessas etapas, um novo conjunto de condições iniciais deve ser computado para a reinicialização da integração (GEAR e OSTERBY, 1984).

As primeiras classificações apresentadas na literatura (GEAR e OSTERBY, 1984 e PRESTON e BERZINS, 1991) para os tipos de descontinuidades focavam-se apenas no custo numérico associado para reiniciar o processo de integração (em um método de integração de múltiplo passo), após a violação de uma restrição. Neste caso, as sucessivas reduções no tamanho do passo e os ajustes na ordem do método de integração foram os principais fatores adotados para a classificação dos tipos de descontinuidades. Dentre as classificações apresentadas para as descontinuidades, a mais utilizada consiste em subdividi-las de acordo com a sua forma de ocorrência, que explícita ou implícita. Na forma *explícita* de ocorrência, as descontinuidades surgem em um tempo previamente determinado, já na ocorrência *implícita*, o tempo da violação das restrições de desigualdade só é conhecido quando determinadas condições são satisfeitas, o que equivale a encontrar o zero da restrição. Para uma melhor compreensão, considere o seguinte sistema sujeito à descontinuidades representado pelas Equações (3.1) a (3.2):

$$f(t,u,x,\dot{x},p) = \begin{cases} f_1(t,u,x,\dot{x},p) & \text{se } t > t^* \\ f_2(t,u,x,\dot{x},p) & \text{se } t \leq t^* \end{cases} \quad (3.1)$$

$$f(t,u,x,\dot{x},p) = \begin{cases} f_1(t,u,x,\dot{x},p) & \text{se } g(t,x) > 0 \\ f_2(t,u,x,\dot{x},p) & \text{se } g(t,x) \leq 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

Nas Equações (3.1) e (3.2), f_1 e f_2 representam um subconjunto de modelos matemáticos ou ações que são vinculadas e desvinculadas ao modelo global quando as restrições são violadas. No sistema disjuntivo representado pela Equação (3.1), a ocorrência da descontinuidade é definida *explicitamente* com o valor t^* , neste caso, não há a necessidade de maiores tratamentos para a mudança de condição. Contudo, para o sistema disjuntivo representado pela Equação (3.2), o tempo de violação da restrição só é conhecido quando, em algum instante da integração, a função $g(t,x)$ for igual ou maior

que zero, indicando uma *forma implícita* de ocorrência. A correta manipulação desta classe de descontinuidades requer um rebuscado ferramental numérico conforme pode ser observado nos parágrafos seguintes e constitui o principal foco de estudo deste capítulo.

Uma primeira maneira para tratar as restrições (na forma implícita) presentes nos modelos dinâmicos de processos consiste em interromper a integração em pontos determinados e avaliar se as restrições de desigualdades são violadas. A avaliação da violação das restrições é comumente feita através de equações condicionais (*if-else*), entretanto, este tipo de estratégia, por introduzir fortes variações nas variáveis do processo, dificulta enormemente o prosseguimento da integração numérica (principalmente em métodos tipo passos múltiplos), podendo até inviabilizar o prosseguimento do processo por seu término prematuro. Uma alternativa ao uso direto de operadores condicionais é a realização de uma etapa de redução do passo de integração nas proximidades da descontinuidade. Desta forma, é possível prosseguir a integração sem a introdução de sobressaltos numéricos (ocasionado pelo uso direto da equação condicional). Apesar da fácil programação, esta alternativa requer um procedimento iterativo para escolha do menor tamanho de passo de integração que permita passar pelas descontinuidades.

Na formulação desenvolvida por CARVER (1978), a descontinuidade é considerada parte integrante do modelo. No procedimento proposto por CARVER (1978), a descontinuidade é descrita através de uma variável auxiliar associada a uma nova equação diferencial adicionada ao modelo original, ou seja:

$$\dot{x}_{n+1} = \phi(t, x) \quad (3.3)$$

onde $\phi(t, x) = g(t, x)$ e, $g(t, x)$, é a condição de disjunção, representada pela Equação (3.4).

$$\begin{cases} f_1(t, u, x, \dot{x}, p) & \text{se } g(t, x) > 0 \\ f_2(t, u, x, \dot{x}, p) & \text{se } g(t, x) \leq 0 \end{cases} \quad (3.4)$$

A mudança no sinal de $\phi(t, x) \cdot \phi(t+h, x)$, indica a violação da restrição imposta a uma determinada variável. Para cada mudança de sinal, um conjunto de suposições lógicas é avaliado com o intuito de: refinar ou descartar a localização da descontinuidade. A metodologia desenvolvida reduz o número de avaliações da restrição nas proximidades da descontinuidade, contudo o método ainda depende do

contínuo ajuste do tamanho do passo de integração, h , para uma correta detecção do ponto de violação da restrição.

O pleno estabelecimento do enfoque algébrico-diferencial na resolução de sistemas dinâmicos, na década de 80, permitiu abordar as descontinuidades presentes como restrições algébricas adicionais (ou seja, como uma equação adicional do modelo). Esta abordagem foi adotada por BRENAN *et al.* (1989), PRESTON e BERZINS (1991), PARK e BARTON (1996), MAO e PETZOLD (2002) e mais recentemente por ESPOSITO e KUMAR (2007). No código desenvolvido por BRENAN *et al.* (1989), DASSLRT (o código fonte pode ser encontrado no site <http://www.netlib.org>), apenas os sinais da condição de disjunção são avaliados. Neste caso, se os sinais de $\phi(t, x)$ e $\phi(t+h, x)$ forem diferentes, então o código calcula a raiz de $\phi(t, x_{inter})=0$ no intervalo $[t, t+h]$, sendo a variável x_{inter} , calculada por interpolação no referente intervalo. O código ainda determina, para o caso de um vetor de funções disjuntivas, o tempo e a ordem com que as restrições são violadas. Após a detecção, o sistema é então reconstruído e um novo conjunto de condições iniciais consistentes é computado, reiniciando a integração. Duas diferentes versões do algoritmo utilizado no código DASSRT foram apresentadas por PRESTON e BERZINS (1991). As principais modificações consistiam na utilização do método da biseção combinado a fórmulas específicas de interpolação para localização e detecção de descontinuidades. Os algoritmos foram avaliados para uma classe específica de problemas de engenharia química, com o índice diferencial não superior a 1.

Segundo PARK e BARTON (1996), a principal diferença entre os algoritmos desenvolvidos para detecção de descontinuidades está na fórmula de interpolação utilizada para o cálculo de x_{inter} . Porém, para os autores, nenhum dos algoritmos apresentados satisfaz todas as exigências para uma correta localização de descontinuidades, dentre elas: (i) determinação de novas condições iniciais já consistentes; (ii) suporte para manipulação de equações lógicas (*not*, *and*, *or*) e (iii) identificação de falsas detecções em sistemas de equações algébrico-diferenciais. No algoritmo desenvolvido pelos autores, duas etapas mereceram destaques: (a) detecção da violação e (b) localização correta da descontinuidade e reinicialização. Na etapa de detecção, as equações lógicas foram reinterpretadas com o uso de funções booleanas. Desta forma, é possível detectar a violação das restrições de desigualdade monitorando apenas os valores obtidos da função booleana. Após a detecção, são seguidas as etapas de

refinamento da localização e reconstrução do sistema de equações. Na determinação das novas condições iniciais consistentes para a reinicialização da integração, uma variável auxiliar foi associada à nova equação algébrica adicional. Essa variável adicional é semelhante às variáveis de folga (utilizadas na caracterização de restrições de desigualdade em problemas de otimização) e sua troca de sinal indica a direção da violação da restrição (procedimento semelhante ao utilizado por MAJER *et al.*, 1995).

As questões levantadas por PARK e BARTON (1996) motivaram MAO e PETZOLD (2002) a revisitar o código DASSRT (BRENAN *et al.*, 1989), com o objetivo de implementar subrotinas adicionais que permitam suportar restrições representadas sob a forma de equações lógicas e identificar falsas detecções. O código foi avaliado utilizando problemas numéricos consagrados pela literatura. Cabe destacar que, apesar dos bons resultados, os autores ainda não disponibilizaram o código.

Conforme apresentado no início do capítulo, uma segunda fonte de descontinuidades são os problemas de otimização com restrições de desigualdade. Quando tais restrições são impostas às variáveis de estado (semelhantes à Equação 3.4), a sua violação pode resultar em descontinuidades implícitas durante as iterações do otimizador. Esta classe de problema pode ser resolvida avaliando as restrições somente nas proximidades da região viável¹, de modo que seus valores nunca excedam os limites estabelecidos. O método, concebido na década de 50, se baseia na conversão das restrições de desigualdade em igualdade com a introdução de uma função penalidade. A função objetivo é então reescrita para admitir a nova expressão, conforme apresentado nas Equações (3.5) e (3.6):

$$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) \\ & \text{Sujeito a :} \\ & \quad c_i(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \text{com } i=1, \dots, n \end{aligned} \tag{3.5}$$

sendo n o número de restrições de desigualdade.

$$\underset{\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) + \lambda \cdot \sum_{i=1}^n c_i^2(\mathbf{x}) \tag{3.6}$$

onde λ é o parâmetro de penalidade ($\lambda > 0$) e o seu valor é ajustado iterativamente até que a função objetivo atinja o mínimo (ou máximo).

Nesta metodologia, quando λ tende a infinito, \mathbf{x} atinge o valor máximo demarcado pela restrição (fronteira da região viável). Há, porém, métodos cujo

¹ Região delimitada pelas restrições de desigualdade.

parâmetro aproxima-se de zero quando \mathbf{x} aproxima-se do contorno demarcado pela restrição. Tais métodos são denominados de métodos barreira e possuem a seguinte forma:

$$\underset{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) - \mu \cdot \sum_{i=1}^n \log(c_i(\mathbf{x})) \quad (3.7)$$

onde μ é o parâmetro de barreira ($\mu > 0$), cujo valor é reduzido (quando μ tende a zero) iterativamente até que a função objetivo atinja o mínimo (ou máximo).

A literatura (NOCEDAL e WRIGHT, 1999, EDGARD *et al.*, 2001) apresenta diferentes formas funcionais para os métodos penalidade e barreira, com o intuito de reduzir o número de iterações e evitar futuras discontinuidades nas proximidades do contorno viável (onde λ tende a infinito e μ tende a zero). Dentre as formulações, a que possui melhores propriedades de convergência (convergência finita) foi a desenvolvida por CHEN e VASSILIADIS (2003), representada pela Equação (3.8):

$$\underset{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) - \mu \cdot \sum_{i=1}^n \gamma_i \ln\left(1 + \frac{c_i(\mathbf{x})}{\mu}\right) \quad (3.8)$$

sendo γ_i , os multiplicadores de Lagrange e μ , o parâmetro de barreira ($\mu > 0$). Nesta nova formulação, uma vez que os multiplicadores de Lagrange tenham sido ajustados (em um ciclo externo), um ciclo interno é realizado para minimizar o parâmetro de barreira.

Uma alternativa para a manipulação de restrições de desigualdade consiste em converter (da mesma forma que nos métodos anteriores) as restrições de desigualdade em igualdade, com a introdução de *variáveis de folga*. O novo problema de otimização, representado pela Equação (3.9), considera a variável de folga como uma nova variável de busca sendo o seu valor ótimo determinado com base nas informações dos multiplicadores de Lagrange, originando o método do Lagrangiano Aumentado (NOCEDAL e WRIGHT, 1999).

$$\begin{aligned} &\underset{\mathbf{x}, \mathbf{s}}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) \\ &\text{Sujeito a :} \\ &\mathbf{c}_i(\mathbf{x}) - \mathbf{s}_i = \mathbf{0} \\ &\mathbf{s}_i \geq \mathbf{0} \end{aligned} \quad (3.9)$$

com i variando de 1 até n (n sendo o número de restrições de desigualdade).

Os resultados obtidos com as diferentes metodologias apresentadas para o tratamento de restrições no problema de otimização permitiram que estas metodologias ainda fossem utilizadas nos recentes códigos de otimização (LANCELOT, MINOS e

GAMS) e são a base para diversos métodos de otimização de modelos dinâmicos com restrições, os quais serão apresentados no Capítulo 4.

3.3 Funções de Regularização – Definição e Aplicações

As funções de regularização são funções matemáticas com características que permitem “imitar” o efeito de uma equação condicional (onde há modificação de uma ou mais condições), com o adicional de ser uma função contínua e suave. Essa característica especial pode ser observada em funções do tipo degrau que são utilizadas em problemas de controle. Como exemplo, pode-se citar a ação de fechar ou abrir uma determinada válvula em um modelo dinâmico. Essa modificação de ação pode ser descrita pelo uso direto de uma equação condicional (*if - else*) ou por uma função de regularização (VIEIRA e BISCAIA JR., 2002).

Uma aplicação para as funções de regularização é a inicialização de sistemas algébrico-diferenciais (EADs). Na resolução numérica de sistemas de EADs, há a necessidade de determinação de condições iniciais adequadas para principiar a integração (também conhecidas como condições iniciais consistentes²). Estas condições podem ser obtidas admitindo uma pseudocondição física como estado inicial do problema. Para estes casos, o estado estacionário do problema pode ser considerado como condição de partida da integração (pseudocondição física), desde que as condições de continuidade sejam preservadas durante os primeiros passos de integração. O método direto de inicialização tem como ponto principal a garantia da continuidade do vetor de parâmetros do sistema de equações durante a passagem de uma pseudocondição física, u_0 , para a condição estabelecida para o modelo matemático real u_1 , ou seja:

$$u(t) = u_0 + (u_1 - u_0) \cdot \eta(t, \xi) \quad 0 \leq \eta(t, \xi) \leq 1 \quad (3.10)$$

onde ξ é o parâmetro de ajuste da função de regularização.

Como vantagem, o método direto é de fácil implementação, bastando apenas a escolha de uma trivial pseudocondição inicial. VIEIRA e BISCAIA JR. (2002) testaram o novo enfoque para inicialização em vários exemplos numéricos de interesse na

² Um conjunto de condições iniciais é dito consistente se ele for solução não apenas do sistema de EADs original, mas também de todas as equações intermediárias geradas quando o sistema é convertido em um sistema de EDOs (VIEIRA, 2001).

engenharia química obtendo sucesso em todas as condições estabelecidas para partida da integração do sistema de EADs.

3.4 Escolha da Função de Regularização

Conforme apresentado no sub-tópico anterior, as discontinuidades inerentes a inicialização de sistemas de EADs podem ser transpostas com o uso de funções de regularização. No entanto, tais funções devem apresentar características especiais: (i) devem ser contínuas; (ii) diferenciáveis e (iii) contínuas em suas derivadas primeiras. Outra característica desejada é que a função tenha um comportamento semelhante a uma função degrau. VIEIRA (2001) apresenta um grupo de funções com tais características e com apenas um ou dois parâmetro de ajuste (Equações 3.11 a 3.13). Em todas as funções proposta, quanto menor o parâmetro, mais próximas estão às funções da perturbação degrau, como pode ser visto na Figuras 3.1.

$$\eta(t, \tau) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \frac{t^*}{\sqrt{(t^*)^2 + 1}} & t \geq 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

$$\eta(t, \tau) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 - \exp(-t^*) & t \geq 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

$$\eta(t, n, \tau) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 - \exp(-n \cdot t^*) \cdot \sum_{j=0}^{n-1} \frac{1}{j!} \cdot (n \cdot t^*)^j & t \geq 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

nestas funções, $t^* = t/\tau$, t é o tempo e τ , o parâmetro de regularização.

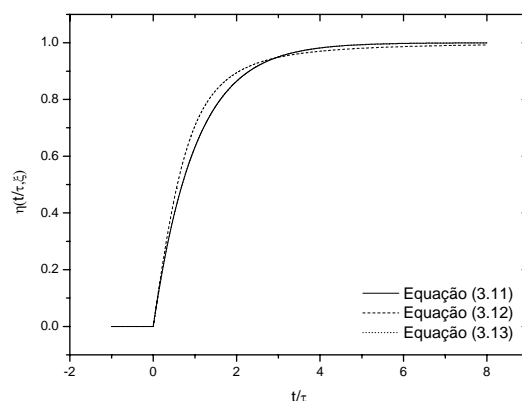


Figura 3.1 – Avaliação das funções de regularização para diversos t/τ .

Segundo VIEIRA (2001), a diferença acumulada entre a perturbação degrau e a perturbação regularizada, *Erro de Regularização*, é apenas função do valor dos parâmetros adotados, τ e n . Desta forma, se os valores adotados para o parâmetro estiverem de acordo com a ordem de grandeza das tolerâncias adotadas para as variáveis do sistema, o erro de regularização pode ser considerado desprezível.

Dentre as funções de regularização apresentadas, as únicas que possuem algum significado físico são as descritas pelas Equações (3.12) e (3.13). Estas funções podem ser interpretadas como a resposta dinâmica ao degrau de n sistemas de 1º ordem em série, sendo o parâmetro τ , uma constante de tempo. VIEIRA e BISCAIA JR. (2002) adotaram estas funções devido a sua versatilidade para a inicialização dos exemplos numéricos propostos. A Figura 3.2 ilustra o comportamento da função com a variação dos parâmetros τ e n .

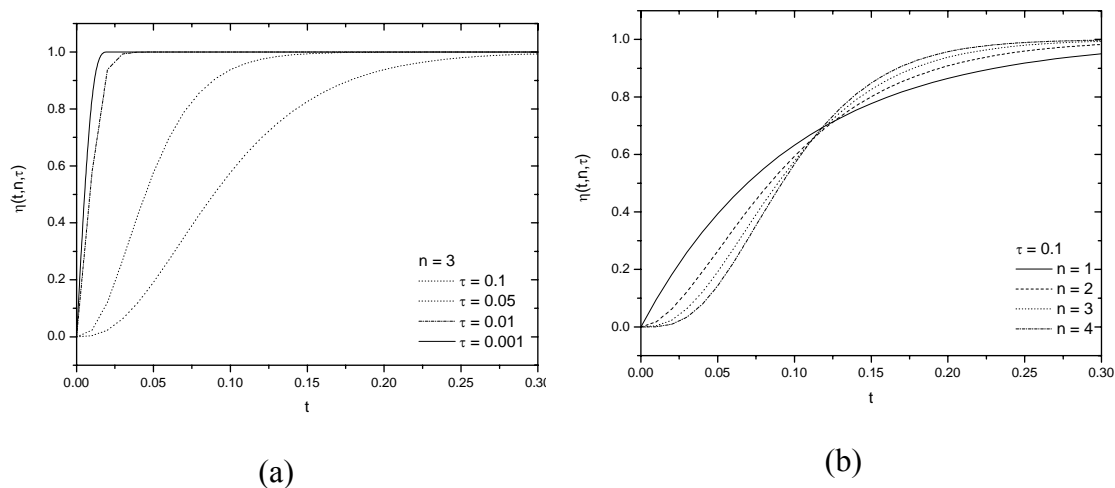


Figura 3.2 – Avaliação Equação (3.12) em relação aos parâmetros: (a) τ e (b) n .

3.5 Proposta: Aplicação das Funções de Regularização na Manipulação de Descontinuidades

Em seu trabalho, VIEIRA (2001) sugere a utilização de funções de regularização na transposição de descontinuidades que são inerentes do sistema dinâmico. A autora, porém, não apresentou uma formulação para o tratamento numérico destes problemas.

Este trabalho segue a sugestão de VIEIRA (2001) e avalia a potencialidade das funções de regularização na integração de modelos dinâmicos com descontinuidades. A essência dessa abordagem é a caracterização das inequações através de funções de regularização, permitindo automatizar a comutação entre equações, dispensando a determinação de novas condições iniciais consistentes. Nesta nova formulação, a restrição, matematicamente representada pela Equação (3.14), é agora representada por uma única equação algébrica que representa a soma ponderada das duas funções que caracterizam a descontinuidade:

$$y = \begin{cases} g_1(x, t) & \text{se } f(x, t) < f_{\max} \\ g_2(x, t) & \text{se } f(x, t) \geq f_{\max} \end{cases} \quad (3.14)$$

$$y = \eta(f - f_{\max}, \xi) \cdot g_1(x, t) + [1 - \eta(f - f_{\max}, \xi)] g_2(x, t) \quad (3.15)$$

onde: $\eta(f - f_{\max}, \xi)$ é a chamada função de regularização que apresenta a propriedade:

$$\eta(\text{arg}, \xi) \cong \begin{cases} 1 & \text{para } \text{arg} < 0 \\ 0 & \text{para } \text{arg} \geq 0 \end{cases} \quad (3.16)$$

Para atender a propriedade representada na Equação (3.16), a função de regularização, Equação (3.11), foi modificada. Na nova equação, Equação (3.17), ξ é um parâmetro definido pelo usuário (normalmente $0 < \xi \ll 1$). A Figura 3.3 ilustra o comportamento da Equação (3.17) com a variação do parâmetro de ajuste ξ , neste caso f_{\max} é igual a zero e $f(x,t)$ igual a t .

$$\eta(f - f_{\max}, \xi) = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{\left(\frac{f_{\max} - f(x, t)}{\xi} \right)}{\sqrt{1 + \left(\frac{f_{\max} - f(x, t)}{\xi} \right)^2}} \right) \quad (3.17)$$

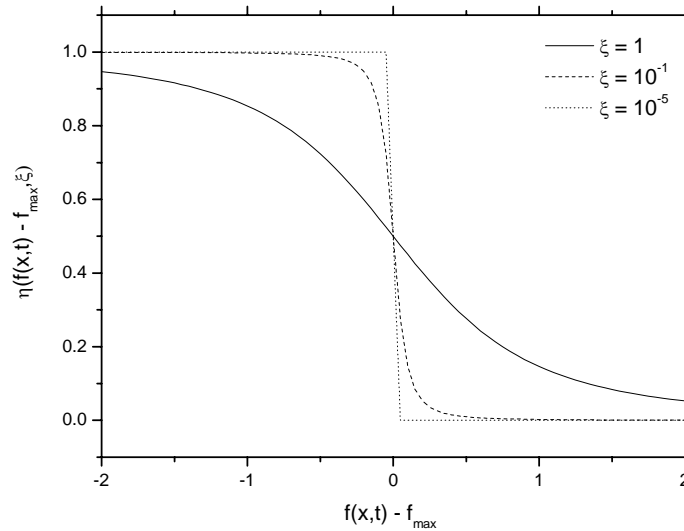


Figura 3.3 – Avaliação da Equação (3.17) para diversos de ξ , com $f(x,t) - f_{\max} = t$.

Cabe ressaltar que a escolha da Equação (3.11) deve-se apenas a facilidade e generalidade desta equação no tratamento das mais diversas formas funcionais de disjunção. As demais equações, Equações (3.12) e (3.13), também foram utilizadas e sofreram pequenas modificações para atender à condição representada pela Equação (3.16), conforme veremos na seção de exemplos.

3.6 Exemplos

Nesta seção, a nova abordagem para a transposição de discontinuidades presentes em modelos dinâmicos é aplicada a um conjunto de exemplos numéricos (CARVER, 1978, ELLISON, 1981, PARK e BARTON, 1996, MOUDGALYA e RYALI, 2001). O objetivo principal é ilustrar a aplicação da nova abordagem e avaliar o

comportamento das funções de regularização na manipulação de disjunções. Em todos os exemplos foi utilizado o código DASSL (PETZOLD, 1989) para a integração numérica.

3.6.1 Modelo com apenas uma Equação Diferencial Ordinária e uma Restrição (CARVER, 1978 e PARK e BARTON, 1996)

O problema foi inicialmente apresentado por CARVER (1978) e utilizado por PARK e BARTON (1996) na avaliação do algoritmo de detecção desenvolvido pelos autores. O modelo dinâmico disjuntivo consiste da seguinte equação:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) \text{ onde } f(t, x) = \begin{cases} x(t)^2 & \text{se } \sin(4\pi t) > 0 \\ 0 & \text{se } \sin(4\pi t) \leq 0 \end{cases} \quad (3.18)$$

onde $x(0) = 0,1$.

Com base na Equação (3.15), o novo sistema disjuntivo é então representado por uma única equação, conforme apresentado:

$$\frac{dx}{dt} = \eta(f - f_{\max}, \xi) \cdot 0,0 + (1 - \eta(f - f_{\max}, \xi)) \cdot x(t)^2 \quad (3.19)$$

sendo $f(x,t) = \sin(4\pi t)$, $f_{\max} = 0,0$ e ξ igual a 10^{-5} .

Testes numéricos foram executados com o objetivo de verificar a potencialidade da nova abordagem frente aos resultados reportados pela literatura. A Equação (3.19) foi integrada, inicialmente, de $t_0 = 0,0$ a $t_f = 0,9$ com uma tolerância de 10^{-6} (a mesma adotada por PARK e BARTON, 1996), em seguida, foi adotada a tolerância de 10^{-4} . Nos dois testes, os resultados obtidos coincidem com os reportados por PARK e BARTON (1996). Esta evidência pode ser observada nas Figuras 3.4a e 3.4b. Na Tabela 3.1 são apresentadas a comparação do custo computacional associado a integração numérica da Equação (3.18), tendo como base os resultados reportados por PARK e BARTON (1996) e os resultados obtidos com a nova formulação.

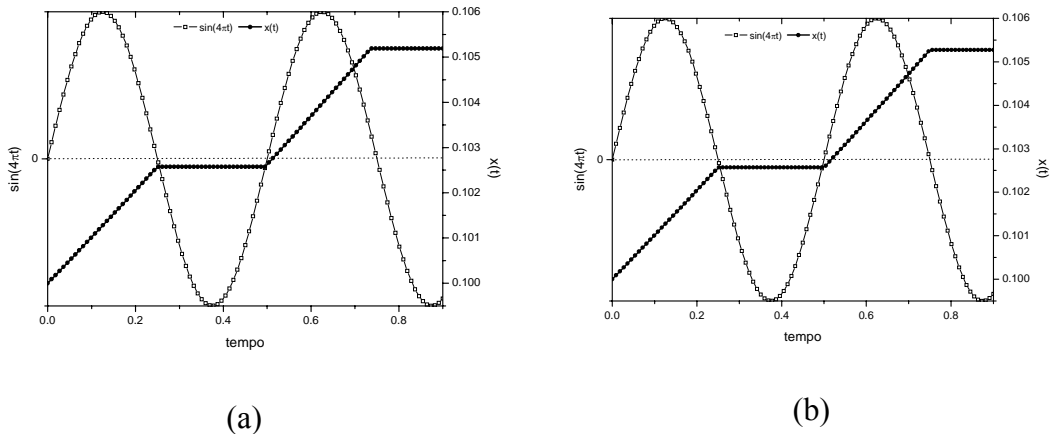


Figura 3.4 – Resolução do exemplo 1 para as seguintes tolerâncias:
 (a) $\text{tol} = 10^{-4}$ e (b) $\text{tol} = 10^{-6}$.

Tabela 3.1: Comparação do Custo Computacional Associado à Integração³.

	NStep ^a	NRes ^b	NJac ^c
CARVER (1978)	--	--	--
PARK e BARTON (1996)	312	1250	167
Função de Regularização	73	144	71

^aNStep : número de passos de integração realizados

^bNRes : número de avaliações dos resíduos.

^cNJac : número de avaliações da Jacobiana.

Os resultados reportados na Tabela 3.1 mostram que a nova formulação possui um número significativamente menor de avaliações, o que se atribui a não necessidade de etapas como: busca da localização da descontinuidade e refino do passo integração; comum nos outros algoritmos apresentados.

3.6.2 Modelo com uma Equação Diferencial Ordinária e duas Restrições (CARVER, 1978).

Este segundo problema também foi apresentado por CARVER (1978) para avaliação do algoritmo de detecção, especialmente quando o número restrições é maior do que o número de equações diferenciais:

³ Os valores apresentados na Tabela 3.1 para algoritmos de CARVER (1978) e PARK e BARTON (1996) foram reportados pelo último autor em seu trabalho.

$$\frac{dx}{dt} = -A \cdot x(t) + \sin(w \cdot t) \text{ onde } A = \begin{cases} 0,5 & \text{se } x - 0,5 \geq 0 \\ 0,2 & \text{se } x + 0,5 \leq 0 \\ 1,0 & \text{se } x + 0,5 > 0 \text{ e } x - 0,5 < 0 \end{cases} \quad (3.20)$$

onde $x(\pi/4) = 0.0$ e $w = 1,0$. O sistema foi integrado de $t_0 = \pi/4$ a $t_f = 12,5$.

Um aspecto importante deste problema é o maior grau de complexidade do sistema disjuntivo, se comparado ao exemplo 1. Uma análise da função disjuntiva, Equação (3.20), mostra 3 situações possíveis para o modelo dinâmico. Para um melhor entendimento do problema, CARVER (1978) reescreveu o sistema disjuntivo em termos de duas funções restrição: $g_1(t,x) = x - 0.5$ e $g_2(t,x) = -(x + 0.5)$. Uma proposta para representação das funções $g_1(t,x)$ e $g_2(t,x)$ apresentadas acima envolve a associação de duas funções de regularização, $\eta_1[g_1(t,x) - g_{1\max}, \xi]$ e $\eta_2[g_2(t,x) - g_{2\max}, \xi]$, aqui representada pela Equação (3.21). A Figura 3.5 traz mais detalhes sobre o comportamento da nova equação. Os testes foram realizados com a tolerância de 10^{-4} e os resultados obtidos são apresentados na Figura 3.6.

$$A_{\text{reg}} = \eta_1(g_1 - g_{1\max}, \xi) \cdot (1 - \eta_2(g_2 - g_{2\max}, \xi)) \cdot 0,5 + \eta_2(g_2 - g_{2\max}, \xi) \cdot (1 - \eta_1(g_1 - g_{1\max}, \xi)) \cdot 0,2 + (1 - \eta_1(g_1 - g_{1\max}, \xi)) \cdot (1 - \eta_2(g_2 - g_{2\max}, \xi)) \cdot 1,0 \quad (3.21)$$

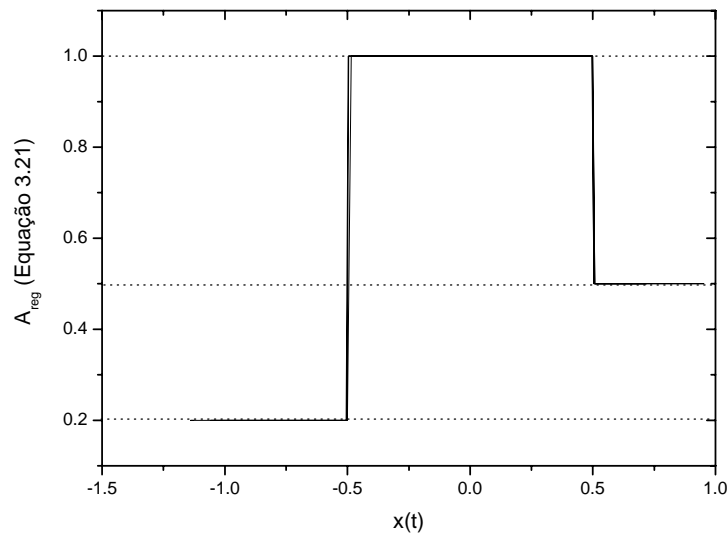


Figura 3.5 – Comportamento da Equação 3.21 durante a simulação.

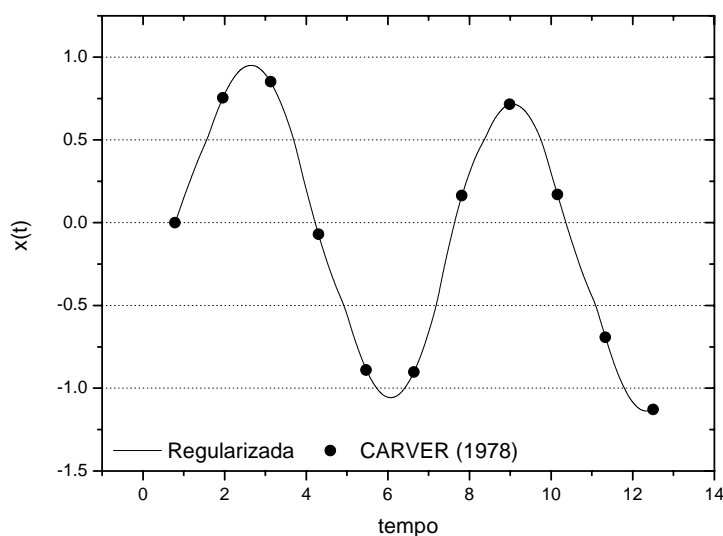


Figura 3.6 – Resolução do sistema, Equações (3.20) e (3.21) com tolerância igual a 10^{-4} .

Sete violações foram detectadas nos respectivos pontos (0.5, -0.5). Este número de violações foi o mesmo obtido por CARVER (1978) utilizando um algoritmo de busca de raízes para localização das discontinuidades. No entanto, o método desenvolvido pelo autor realizou 387 avaliações da Equação (3.20), contra 292 realizado com a nova formulação. Desta forma, um menor esforço computacional foi despendido para integração do sistema.

3.6.3 Gás Ideal e Líquido (MOUDGALYA e RYALI, 2001)

Neste exemplo, o sistema em questão é um vaso, fechado, onde coexiste uma certa quantidade de líquido e gás. O vaso apresenta uma única saída que a depender do nível de cada uma das fases dentro do vaso, pode permitir a saída de gás (referenciada como modelo gás) ou líquido (referenciada como modelo líquido), conforme apresentado na Figura 3.7. Este comportamento descontínuo foi apresentado por MOUDGALYA e RYALI (2001) e consiste basicamente de duas equações diferenciais que representam os balanços de massa para as duas fases. Os autores adotaram as seguintes suposições para formulação do modelo: (i) não há reação entre as duas fases; (ii) a pressão de vapor do líquido é desprezível para as condições adotada; (iii) a

dissolução do gás no líquido é considerada desprezível; (iv) não há bolhas de gás; (v) a dinâmica da válvula é desprezada; (vi) a vazão através da válvula é proporcional a diferença entre a pressão no tanque e a pressão ambiente e (vii) a temperatura, vazões de alimentação, pressão ambiente e constante de abertura da válvula são consideradas constantes. O modelo matemático disjuntivo é representado pelas Equações (3.22) e (3.23).

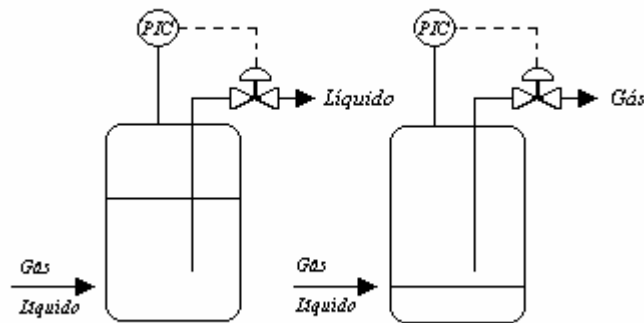


Figura 3.7 – Esquema do sistema descontínuo apresentado por MOUDGALYA e RYALI (2001).

$$\frac{dM_G}{dt} = \begin{cases} F_G & \text{se } M_L / \rho_L > V_d \text{ (modelo líquido)} \\ F_G - k_G \cdot x \cdot \left(\frac{M_G \cdot R \cdot T}{V - M_L / \rho_L} - P_{out} \right) & \text{se } M_L / \rho_L < V_d \text{ (modelo gás)} \end{cases} \quad (3.22)$$

$$\frac{dM_L}{dt} = \begin{cases} F_L - k_L \cdot x \cdot \left(\frac{M_G \cdot R \cdot T}{V - M_L / \rho_L} - P_{out} \right) & \text{se } M_L / \rho_L > V_d \text{ (modelo líquido)} \\ F_L & \text{se } M_L / \rho_L < V_d \text{ (modelo gás)} \end{cases} \quad (3.23)$$

Neste modelo, R é a constante dos gases, M_G e M_L , o número de moles da fase gás e líquido, F_G e F_L , as vazões molares de alimentação nas respectivas fases, $k_G \cdot x$ e $k_L \cdot x$, as constantes relacionadas a abertura (ou fechamento) da válvula para as fases gás e líquido, ρ_L , a densidade do líquido, P_{out} , a pressão externa (ambiente), V_d , o volume abaixo do tubo de saída e por fim, P e T, a pressão e temperatura do sistema. A Tabela 3.2 contém os valores adotados para as respectivas constantes apresentadas acima.

Tabela 3.2: Valores das constantes adotados por MOUDGALYA e RYALI (2001).

$R = 0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}/\text{mol}\cdot\text{K}$ $\rho_L = 50 \text{ mol/L}$ $V = 10 \text{ L}$ $V_d = 5 \text{ L}$ $T = 300 \text{ K}$ $P_{\text{out}} = 1 \text{ atm}$ $k_G \cdot x = 0,1 \text{ (mol/atm s)}$ $k_L \cdot x = 0,1 \text{ (mol/atm s)}$

Para a resolução do modelo disjuntivo representado pelas Equações (3.22) e (3.23), MOUDGALYA e RYALI (2001) utilizaram operadores condicionais (*if - else*) associado a um pequeno passo de integração, no caso 10^{-8} . Desta forma, todo o esforço numérico requerido para a transposição das discontinuidades dependerá somente do tamanho do passo e do tipo de código de integração utilizado (no caso, o código DASSL). Cabe ressaltar que os autores não mencionaram o tempo computacional gasto para a realização da integração.

No presente exemplo, o modelo dinâmico disjuntivo é reescrito com base na função de regularização (Equação 3.17). O novo modelo é representado pelas Equações (3.24) e (3.25). As condições utilizadas para a avaliação da estratégia adotada para a integração do modelo disjuntivo são apresentadas na Tabela 3.3. Os resultados da simulação para as condições contidas na tabela a seguir são apresentados nas Figuras 3.8a e 3.8b e 3.9a e 3.9b.

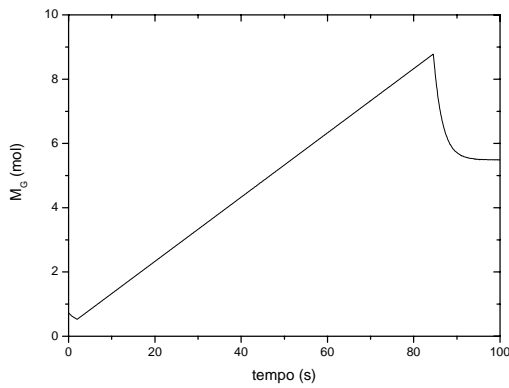
$$\frac{dM_G}{dt} = [1 - \eta(M_L, \rho_L, V_d)] \cdot \left[F_G - k_G \cdot x \cdot \left(\frac{M_G \cdot R \cdot T}{V - M_L / \rho_L} - P_{\text{out}} \right) \right] + \eta(M_L, \rho_L, V_d) \cdot F_G \quad (3.24)$$

$$\frac{dM_L}{dt} = [1 - \eta(M_L, \rho_L, V_d)] \cdot F_L + \eta(M_L, \rho_L, V_d) \cdot \left[F_L - k_L \cdot x \cdot \left(\frac{M_G \cdot R \cdot T}{V - M_L / \rho_L} - P_{\text{out}} \right) \right] \quad (3.25)$$

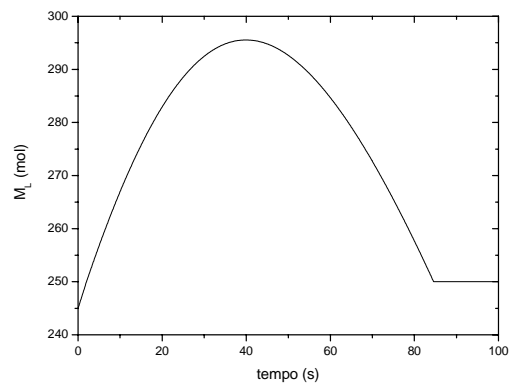
Tabela 3.3: Conjunto de condições utilizadas

por MOUDGALYA e RYALI (2001).

1º Condição	2º Condição
$F_G = 0,1 \text{ mol/s}$	$F_G = 2,0 \text{ mol/s}$
$F_L = 2,5 \text{ mol/s}$	$F_L = 1,0 \text{ mol/s}$
$P(t = 0) = 3,5 \text{ atm}$	$P(t = 0) = 1,0 \text{ atm}$
$M_L(t = 0) = 245 \text{ moles}$	$M_L(t = 0) = 249 \text{ moles}$
$t_f = 100 \text{ seg.}$	$t_f = 10 \text{ seg.}$

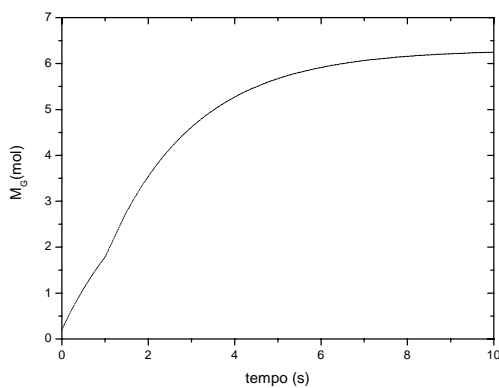


(a)

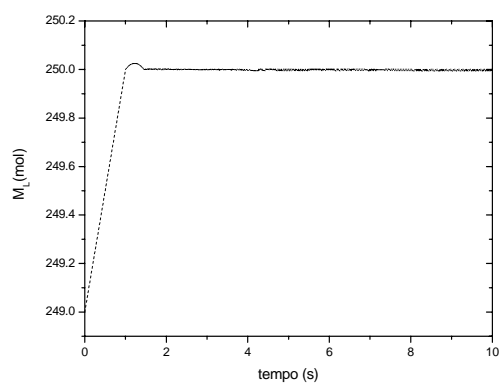


(b)

Figura 3.8 – Resultados de simulação utilizando a 1ª condição (Tabela 3.3), sendo: (a) perfil de pressão e (b) perfil de temperatura.



(a)



(b)

Figura 3.9 – Resultados de simulação utilizando a 2ª condição (Tabela 3.3), sendo: (a) perfil de pressão e (b) perfil de temperatura.

Como base nos testes realizados, podê-se dizer que a nova abordagem foi capaz de reproduzir as condições adotadas por MOUDGALYA e RYALI (2001), porém com uma maior simplicidade na comutação entre modelos. Como principal vantagem da metodologia, pode-se citar o reduzido esforço computacional empregado na integração do sistema disjuntivo (o passo de integração adotado para este exemplo foi de 10^{-4}), não havendo a necessidade de redução do passo de integração nas proximidades da violação da restrição.

3.6.4 Secador Convectivo de Leito Fixo e Contracorrente (SOUZA, 2002)

O presente exemplo retrata o uso das funções de regularização na manipulação de descontinuidades intrínsecas ao modelo. Estas descontinuidades ocorrem, conforme apresentado nos subtópicos anteriores, quando uma determinada propriedade física e/ou química é violada durante alguma etapa da simulação. Um exemplo de descontinuidades intrínsecas ocorre em modelos matemáticos de secadores convectivos, neste caso, o secador de leito fixo. Na secagem em leito fixo, sob determinadas condições, pode ocorrer a condensação do vapor de água presente na fase gasosa. O fenômeno surge quando uma grande quantidade de umidade, removida inicialmente pelo ar quente, encontra as camadas superiores do leito de sólidos que estão mais frias. Assim o vapor de água contido no gás atinge o ponto de orvalho e se condensa na superfície do sólido. Esse fenômeno resulta em uma descontinuidade durante a integração numérica que pode ser representada matematicamente pelo seguinte sistema disjuntivo.

$$y_{gl} = \begin{cases} 0 & \text{para } UR < 1 \\ y_g - y_{gv} & \text{para } UR \geq 1 \end{cases} \quad (3.26)$$

sendo y_g , a umidade absoluta do gás (no caso, o ar), y_{gv} , a umidade do gás nas condições de saturação, y_{gl} , a massa de água condensada e UR, a umidade relativa, calculada pela seguinte relação psicrométrica:

$$UR = \frac{y_g}{0,622 + y_g} \cdot \frac{P_{sat}(T_g)}{P_t} \quad (3.27)$$

Os trabalhos existentes na literatura que abordam o fenômeno de condensação do vapor de água utilizam equações constitutivas do tipo condicional para a incorporação da terceira fase. SUN *et al.* (1995) e, posteriormente, CALÇADA (1998) dividiram a equação do balanço de massa da fase gasosa em dois termos distintos não aditivos (Equação 3.26), os quais representam a condição de saturação e a de não saturação do ar de secagem. Contudo, conforme discutido por SUN *et al.* (1995), estas equações condicionais podem resultar em uma descontinuidade assimétrica quando incorporadas ao modelo, impossibilitando a sua resolução numérica.

Para evitar o uso de equações condicionais na descrição do fenômeno de condensação do vapor d'água; no presente trabalho, a umidade relativa calculada pelo balanço global, Equação (3.27), é reescrita em termos da função de regularização representada na Equação (3.29).

$$\eta(\text{UR}, \xi) = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{\left(\frac{\text{UR} - 1}{\xi} \right)}{\sqrt{1 + \left(\frac{\text{UR} - 1}{\xi} \right)^2}} \right) \quad (3.28)$$

com ξ , o parâmetro de ajuste da função de regularização (conforme apresentado na seção 3.5) e UR, a umidade relativa do ar de secagem.

$$\text{UR}_{\text{reg}} = \eta(\text{UR}, \xi) \cdot \text{UR} + [1 - \eta(\text{UR}, \xi)] \cdot 1 \quad (3.29)$$

A massa de vapor d'água condensada, definida anteriormente pela Equação (3.26), é agora redefinida pela Equação (3.30).

$$y_{\text{gl}} = y_{\text{g}} - y_{\text{gv}} \quad (3.30)$$

onde a umidade do gás na saturação, y_{gv} , é obtida pela seguinte relação psicrométrica:

$$y_{\text{gv}} = \frac{0,622 \cdot \text{UR}_{\text{reg}} \cdot P_{\text{sat}}(T_{\text{g}})}{[P_{\text{t}} - \text{UR}_{\text{reg}} \cdot P_{\text{sat}}(T_{\text{g}})]} \quad (3.31)$$

Observa-se, pela Equação (3.26), que a fase condensada só existirá ($y_{gl} > 0$) se, e somente se, na Equação (3.27), $UR > 1^4$. Caso contrário, a menos de um erro $\leq \xi$, $\eta(UR, \xi) > 0$, implicando em $UR_{reg} = UR$ pela Equação (3.29); $y_{gv} = y_g$ pela Equação (3.31) e $y_{gl} = 0$ pela Equação (3.30).

Devido o efeito de condensação, o balanço de energia foi reescrito conforme apresentado por SOUZA (2002).

$$H_{gv} = H_g + y_{gv} \cdot H_v + y_{gl} \cdot H_l = \bar{c}_{pg} \cdot (T_g - T_r) + y_{gv} \cdot \bar{c}_{pv} \cdot (T_g - T_r) + y_{gv} \cdot \lambda_{Tr} + y_{gl} \cdot \bar{c}_{pl} \cdot (T_g - T_r) \quad (3.32)$$

Com esta abordagem, chega-se a um sistema de equações do tipo não condicional para descrever o comportamento das fases gasosa e condensada durante a secagem de sólidos. A Tabela 3.4 apresenta todas as equações constitutivas usadas no modelo para secagem da alumina e a Tabela 3.5 contém os valores de todos os parâmetros e condições iniciais utilizados na simulação.

Tabela 3.4: Equações constitutivas usadas no modelo (SOUZA, 2002).

Alumina
$y_{se} = \frac{0,12 \cdot UR}{(1 - 0,54 \cdot UR) \cdot (1 - 0,54 \cdot UR)}$
$k_s a = -5,522 \cdot G_g + 0,00073 \cdot (T_g + T_r) + 0,0185 \cdot G_g \cdot (T_g + T_r)$
$ha = 4286,5 \cdot \left[\frac{G_g \cdot (T_g + T_r)}{P_t} \right]^{0,6011}$
$\lambda_{Tr} = 2500,8$

Tabela 3.5: Condições iniciais e parâmetros usados para simulação (SOUZA, 2002).

$y_{s0} = 0,61 \text{ kg/kg}$	$d_p = 0,0043 \text{ m}$
$T_{s0} = 22,0 \text{ °C}$	$\varepsilon = 0,40 \text{ m}^3/\text{m}^3$
$y_{g0} = 0,017 \text{ kg/kg}$	$\rho_s = 1690 \text{ kg/m}^3$
$T_{g0} = 57,7 \text{ °C}$	$\bar{c}_{ps} = 2,50 \text{ kJ/kg}$
$T_r = 273,15 \text{ K}$	$\bar{c}_{pl} = 4,186 \text{ kJ/kg}$
$G_{g0} = 0,90 \text{ kg/m}^2\text{s}$	$\bar{c}_{pv} = 1,890 \text{ kJ/kg}$
$P_t = 101325,03 \text{ Pa}$	$\bar{c}_{pg} = 1,020 \text{ kJ/kg}$
$t_f = 5 \text{ h}$	
$L = 0,4 \text{ m}$	

⁴ A umidade relativa, UR, calculada numericamente, pode alcançar sob determinadas condições, valores superiores a 1.

O sistema de equações diferencial parcial e algébrico (EADPs), resultante da formulação entálpica, é resolvido pela discretização da variável espacial z , efetuada através de fórmulas de Euler implícito. Neste caso, cada camada do secador é considerada como uma mistura perfeita das variáveis diferenciais e algébricas. O sistema de equações algébrico-diferenciais resultantes (num total de 600 equações) foi integrado pelo pacote computacional DASSL (PETZOLD, 1989). O problema de inicialização associado à formulação algébrico-diferencial foi contornado através das técnicas propostas por VIEIRA e BISCAIA JR. (2002).

Nas Figuras 3.10a e 3.10b, podem ser observados a contribuição da função de regularização, representada pela Equação (3.28), para cálculo da umidade relativa durante todo o processo de secagem. A umidade relativa calculada diretamente pelo balanço de massa total da fase gasosa, quando não regularizada excede a curva de saturação indicando que parte do vapor tem sido condensado. Este efeito foi evitado quando utilizamos a umidade relativa regularizada.

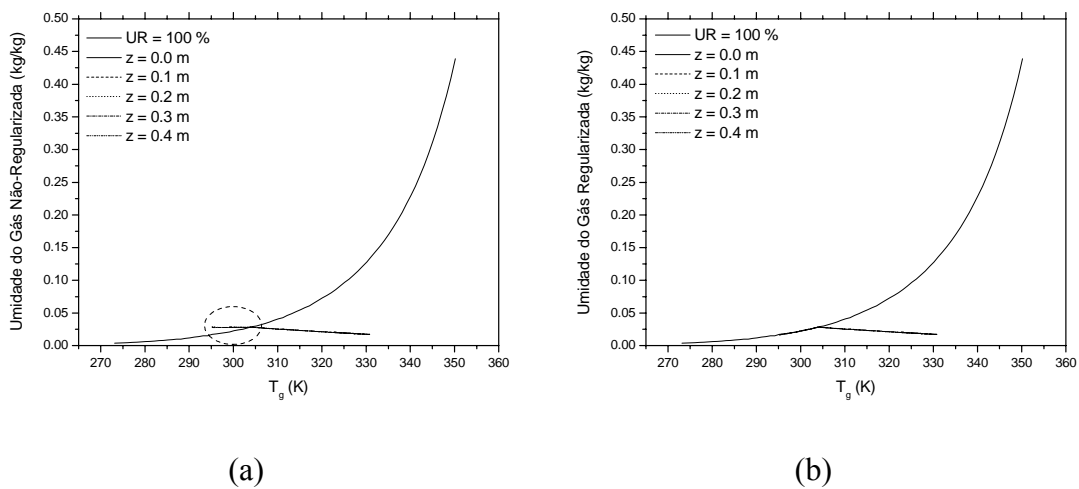


Figura 3.10 – Resultados de simulação: (a) umidade do gás regularizada e (b) umidade do gás não-regularizada.

Análogo ao secador de leito fixo, nos secadores de leito deslizante o tipo de escoamento e contato entre as fases, sólida e gasosa, pode também propiciar o aparecimento da terceira fase, no entanto, não há relatos na literatura sobre a incorporação da fase condensada aos modelos matemáticos. Os poucos trabalhos existentes que abordam a modelagem e simulação de secadores de leito convectivo

utilizam equações condicionais para evitar que UR alcance valores superiores a 1 (BRUCE e GINER, 1993 e VALENÇA, 1999).

No presente trabalho utilizou-se, de maneira similar ao leito fixo, uma função regularizadora (Equação 3.28), a qual estabelece a existência ou não da fase condensada. O novo enfoque permitiu equacionar de forma precisa o fenômeno de condensação no leito deslizante resultando em uma das contribuições do presente trabalho.

O problema de convergência associado à resolução de modelos contracorrentes foi superado utilizando a técnica de “falso transiente” (KUBÍCEK e HLAVÁČEK, 1983). A técnica de resolução consiste em obter o estado estacionário por meio da integração numérica do modelo transiente que é constituído de equações diferenciais parciais e algébricas (sistema de EADPs). A variável tempo, t , é considerada como parâmetro de continuação. Neste caso, o programa avançará no tempo até que o estado estacionário final seja alcançado.

O conjunto formado pelas equações diferenciais parciais e algébricas, mais as equações que descrevem a condensação do vapor de água no leito foram discretizadas na variável espacial z , utilizando Euler implícito e gerando um sistema de EADs em cada célula de discretização. A altura do secador foi dividida em n células, similarmente ao secador de leito fixo. O sistema de EADs foi integrado pelo pacote computacional DASSL (PETZOLD, 1989) e inicializado com o método direto propostas por VIEIRA e BISCAIA JR. (2002).

Em decorrência dos bons resultados obtidos, este trabalho foi aceito, inicialmente, para apresentação oral no **International Drying Symposy** no ano de 2004 e, conseqüentemente, publicado na revista **Drying Technology**. Demais detalhes sobre a técnica de resolução e o modelo matemático para a configuração contracorrente são apresentadas no APÊNDICE B.

3.7 Conclusões

Conforme foi apresentado, as discontinuidades podem surgir da violação de restrições de desigualdades originárias: da própria formulação do modelo matemático e, de problemas de otimização (estacionária ou dinâmica), onde tais restrições são

inerentes. O “ponto chave” desta classe de problemas são as descontinuidades que ocorrem na forma implícita (ou seja, quando o tempo da violação das restrições de desigualdade só é conhecido depois que determinadas condições são satisfeitas).

O esforço computacional requerido para os algoritmos apresentados, que pode ser atribuída às estratégias de busca e localização das descontinuidades e aos procedimentos de reinicialização da integração, motivou a concepção de uma nova abordagem para manipulação de descontinuidades. A essência dessa abordagem é a caracterização das inequações através de funções de regularização (VIEIRA e BISCAIA JR., 2002), permitindo comutação automática entre equações. Os resultados obtidos ilustram a facilidade de implementação da nova estratégia que se mostrou eficiente na manipulação de disjunções, sejam elas explícitas ou implícitas. Em todos os exemplos abordados foram utilizados valores ponderados de tolerância e como consequência, um menor esforço computacional foi despendido no procedimento de integração e transposição da violação das descontinuidades. Cabe frisar, como decorrência do sucesso da nova abordagem, a aceitação e publicação de um dos exemplos estudados (secador de leito deslizante contracorrente) em um periódico internacional de grande impacto na engenharia química.

3.8 Referências Bibliográficas deste Capítulo

- ALVES, T. L. M., COSTA, A. C., HENRIQUES, A., LIMA, E. L., 1998, “Adaptive Optimal Control of Fed-Batch Alcoholic Fermentation”, *Applied Biochemistry and Biotechnology*, v.70-72, pp.2385-2404.
- ASCHER, U. M., PETZOLD, L., 1998, *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*, Classics in Applied Mathematics Series, SIAM.
- BARTON, P. I., ALLGOR, R. J., FEEHERY, W. F. GALAN, S., 1998, “Dynamic Optimization in a Discontinuous World”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 37, pp. 966–981.

- BISCAIA JR., E. C., VIEIRA, R. C., 2000, "Heuristic Optimization for Consistent Initialization of DAEs", *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, n. 9\10, pp.2183-2191.
- BRENAN, K. E., CAMPBELL, S. L., PETZOLD, L. R., 1989, *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*, Classics in Applied Mathematics,. SIAM.
- BRUCE, D. M., GINER, S. A., 1993, "Mathematical Modelling of Grain Drying in Counter-Flow Beds: Investigation of Crossover of Air and Grain Temperatures", *J. Agric. Engng. Res.*, v. 55, pp. 143-161.
- CALÇADA, L. A., 1998, *Secagem de Materiais Granulares Porosos*, Tese de Doutorado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- CARVER, M. B., 1978, "Efficient Integration over Discontinuities in Ordinary Differential Equation Simulations", *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 20, pp. 190–196.
- CHEN, T. W. C. e VASSILIADIS, V. S., 2003, "Solution of General Nonlinear Optimization Problems using the Penalty/Modified Barrier Method with the use of Exact Hessians", *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, pp. 501-525.
- EDGARD, T. F., HIMMELBLAU, D. M., LASDON, L. S., 2001, *Optimization of Chemical Processes*, 2º ed., McGraw Hill, Boston, EUA.
- ELLISON, D., 1981, "Efficient Automatic Integration of Ordinary Differential Equations with Discontinuities", *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 23, n. 1, ,pp. 12-20.
- ESPOSITO, J. M., KUMAR, V., 2007, "State Event Detection Algorithm for Numerically Simulating Hybrid Systems with Model Singularities", *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, v. 17 , n. 1, pp.1-22.
- KUBICEK, M.; HLAVACEK, V., 1993, *Numerical Solution of Nonlinear Boundary Value Problems with Applications*, Prentice Hall PTR, EUA.
- MAJER, C., MARQUARDT, W., GILLES, E. D., 1995, "Reinitialization of DAE's after Discontinuities", *Computers and Chemical Engineering*, v. 19, Suppl., pp. 507-512.

- MAO, G., PETZOLD, L. R., 2002, “Efficient Integration over Discontinuities for Differential Algebraic Systems”, *Computers and Mathematics with Applications*, v. 43, pp. 65–79.
- MOUDGALYA, K. M., RYALI, V., 2001, “A Class of Discontinuous Dynamical Systems I. An Ideal Gas–Liquid System”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, n. 11, pp. 3595-3609.
- NOCEDAL, J., WRIGHT, S., 1999, *Numerical Optimization*, 1° ed., Springer-Verlag Inc., New York, EUA.
- GEAR, C. W. e ØSTERBY, O. 1984, “Solving Ordinary Differential Equations with Discontinuities”, *ACM Transactions on Mathematical Software*, v. 10, n. 1, pp. 22–44.
- PARK, T., BARTON, P. I., 1996, “State Event Location in Differential-Algebraic Models”, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, v. 6, n. 2, pp. 137–165.
- PETZOLD, L.R., 1989, *DASSL: A Differential-Algebraic System Solver*, Computer and Mathematical Research Division, Lawrence Livermore National Laboratory, CA.
- PRESTON, A. J., BERZINS, M., 1991, “Algorithms for the Location of Discontinuities in Dynamic Simulation Problems”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 15, n. 10, pp. 701–713.
- SOUZA, D. F. S. 2002, *Unificação da Modelagem Matemática de Secadores Convectivos*, Tese de Mestrado da COPPE, UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil.
- SUN, Y., PANTELIDES, C. C., CHALABI, Z. S., 1995, “Mathematical Modelling and Simulation of Near-Ambient Grain Drying”, *Computers and Electronics in Agriculture*, v. 13, pp. 243-271.
- VALENÇA, C. G., 1999, *Secagem de Grãos em Fluxos Contracorrentes e Concorrentes*, Tese de Doutorado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- VIEIRA, R. C., 2001, *Técnicas de Inicialização de Sistemas Algebrico-Diferenciais*, Tese de Doutorado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

VIEIRA, R. C., BISCAIA JR., E. C., 2002, "Direct Methods for Consistent Initialization of DAE Systems", *Computers and Chemical Engineering*, v. 25, pp. 1299-1311.

Capítulo 4

Extensão da Nova Abordagem

para a Resolução dos Problemas de

Otimização Dinâmica

Nos problemas de otimização dinâmica, a presença de restrições de igualdade e desigualdade nas variáveis de estado pode resultar em descontinuidades, principalmente quando estas restrições estão ativas. Neste capítulo, será ampliada a discussão apresentada no Capítulo 3, focando, agora, os problemas de otimização dinâmica e a sua relação com a resolução de sistemas dinâmicos sujeitos a descontinuidade.

4.1 Introdução

No Capítulo 2, foram apresentadas as principais abordagens para a resolução do problema de otimização dinâmica. Entretanto, assuntos relacionados ao tratamento numérico de restrições de igualdade e desigualdade e o seu impacto no índice diferencial do sistema de EADs foram pouco mencionados, sendo o objetivo do presente capítulo.

Os primeiros artigos científicos referentes à interpretação de problemas de otimização dinâmica com restrições como problemas de índice superior surgiram há cerca de 10 anos (conforme apresentado no Capítulo 2). Porém, os primeiros relatos sobre possíveis problemas de índice superior e/ou variável (antes mesmo da consolidação do conceito de índice diferencial) datam do final da década de 60 (BRYSON JR. e HO, 1969). Nestes trabalhos, os problemas eram resolvidos (e ainda são) por técnicas rigorosas fundamentadas na teoria de controle singular ou então por técnicas aproximativas, nas quais eram utilizados algoritmos de pontos interiores associados a funções penalidade. Já com o avanço numérico (e teórico) da abordagem algébrico-diferencial foi possível reinterpretar o problema de otimização dinâmica, considerando as restrições como equações adicionais do sistema dinâmico. No entanto, um aspecto pouco analisado na literatura é o fato da forma funcional das restrições afetar o índice diferencial do sistema algébrico-diferencial descritivo do sistema dinâmico. Podendo este índice até, existindo restrições de desigualdade como funções das variáveis de estado, variar ao longo do tempo. Uma das alternativas promissoras para a resolução de problemas de índice variável (FEEHERY, 1998) envolve um conjunto de ferramentas computacionais para: (i) detecção da ativação e desativação das restrições; (ii) identificação automática da variação do índice diferencial ao longo da simulação; (iii) geração, por diferenciação automática, das equações de sensibilidade; e (iv) reinicialização do sistema após a detecção. Porém, cada uma das ferramentas apresentadas pode requerer um maior esforço computacional.

Neste capítulo serão abordadas, inicialmente, questões referentes ao surgimento de problemas de índice variável na otimização dinâmica. Serão apresentadas e discutidas, com base em trabalhos da literatura, as principais estratégias para resolução dos problemas de otimização dinâmica com restrições. Dando seqüência, como extensão do capítulo anterior, a nova abordagem para resolução de problemas dinâmicos com

descontinuidades (apresentada no Capítulo 3) é reutilizada na manipulação das restrições presentes no problema de otimização dinâmica. O problema de otimização reescrito tem como principal característica, um reduzido esforço computacional, tanto nas etapas de integração como para a otimização.

4.2 A Otimização Dinâmica como um Problema com Descontinuidades

Os tratamentos empregados para a solução dos problemas com restrições diferem da forma como estas possam se apresentar, ou seja, se as restrições são da forma de igualdade (incluindo os problemas de arcos singulares) ou de desigualdades. Em todos os casos, o conjunto combinado de componentes contínuos (\dot{x}) mais as restrições, podem ser solucionados simultaneamente:

$$F(x(t), \dot{x}(t), y(t), u(t), v, t) \quad t \in [t_0, t_f] \quad (4.1)$$

$$h(x(t), \dot{x}(t), y(t), u(t), v, t) = 0 \quad t \in [t_0, t_f] \quad (4.2)$$

$$g(x(t), \dot{x}(t), y(t), u(t), v, t) \leq 0 \quad t \in [t_0, t_f] \quad (4.3)$$

onde $x(t)$ são os vetores das variáveis diferenciais, $y(t)$, o vetor das variáveis algébricas, $u(t)$, o vetor das variáveis de controle e v , são os vetores de parâmetros invariantes no tempo.

Entretanto, a adição de m novas equações ao sistema dinâmico pode remover um número igual de graus de liberdade do problema. Isto implica, segundo VASSILIADIS *et al.* (1994b), que o novo sistema de EADs composto pelo sistema dinâmico acrescido das restrições, Equações (4.2) e (4.3), pode apresentar índice superior a 1.

Uma primeira idéia sobre o surgimento de descontinuidades em problemas de otimização dinâmica (também caracterizada pela elevação do índice diferencial) foi apresentada por BRYSON JR. e HO (1969). Nesta abordagem, sucessivas diferenciações e substituições foram executadas na restrição de igualdade com o objetivo de explicitá-la como função do vetor das variáveis de controle. Apesar do conceito de índice diferencial ainda não ter sido apresentado na época, os autores aplicaram a idéia em problemas com restrições de igualdade e desigualdade.

Com a consolidação das teorias sobre sistemas de equações algébrico-diferenciais e índice diferencial, surgiram novas abordagens para a resolução de problemas de otimização dinâmica, capazes de manipular e resolver sistemas com restrições de igualdade e de desigualdade. A alternativa apresentada por LOGSDON e BIEGLER (1989) para resolução de problemas de otimização dinâmica consiste na utilização dos métodos Runge-Kutta implícitos para a integração de sistema do índice superior. Os autores modificaram os critérios de erro local no intuito de conceder uma maior robustez ao método de integração. O sucesso da nova abordagem pôde ser comprovado em três exemplos práticos de otimização dinâmica apresentados no trabalho de LOGSDON e BIEGLER (1989). Recentemente, BETTS *et al.* (2002) avaliaram a convergência dos métodos Runge-Kutta implícitos para problemas de controle ótimo com restrições de desigualdade. Os autores alertam sobre a possibilidade da não convergência do método com o aumento do índice diferencial do sistema.

Na abordagem apresentada por VASSILIADIS *et al.* (1994a e 1994b) e FEEHERY e BARTON (1998 e 1999), o sistema dinâmico é acrescido da restrição de igualdade, representado pela Equação (4.2). Em seguida, são empregadas as etapas de redução do índice e cômputo das condições consistentes. Como resultado, o novo sistema de EADs com índice diferencial não superior a 1 é integrado. Contudo, para a manipulação das restrições de desigualdade, um conjunto maior de técnicas numéricas é adicionado. Para um melhor entendimento, os detalhes sobre as abordagens utilizadas no tratamento de restrições de igualdade e desigualdade serão apresentados em dois subtópicos seguintes.

4.2.1 Problema de Otimização Dinâmica com Restrições de Igualdade

Antes do pleno estabelecimento dos códigos de integração para sistemas de EADs, as restrições de igualdade eram manipuladas por um conjunto de técnicas já consagradas no tratamento de restrições em problemas estacionários, como a utilização de funções penalidade (ver Capítulo 2). No entanto, as dificuldades numéricas para a localização do ótimo motivaram o desenvolvimento de outras técnicas cujo principal enfoque é a medida da violação (pelo otimizador), no tempo final ou em intervalos de tempo pré-definidos pelo usuário, ou seja:

$$\varphi = \int_{t_0}^{t_f} \mathbf{h}^T \cdot \mathbf{h} \cdot dt = \mathbf{0} \text{ ou } \varphi_i = \int_{t_0}^{t_f} \mathbf{h}_i^2 \cdot dt = 0, \quad i=1 \dots n_h \quad (4.4)$$

Em ambos os casos, um número maior de informações é passada ao otimizador podendo até reduzir a eficiência numérica na busca pelo ótimo (FEEHERY, 1998).

O entendimento do problema de otimização dinâmica (descritos pelas Equações 4.1 e 4.2) sob o enfoque algébrico-diferencial foi inicialmente abordado por VASSILIADIS *et al.* (1994b). No entanto, a inclusão direta de restrições de igualdade ao sistema dinâmico original, como uma equação adicional, requer segundo os autores, que uma das variáveis de controle seja promovida a variável de estado do problema. Sem esta consideração, o novo sistema algébrico-diferencial pode ser sobre-determinado, ou seja, há mais equações no novo sistema de EADs que variáveis. Contudo, os autores ressaltam que diferentes escolhas para a partição do vetor de variáveis de controle¹ pode também resultar em diferentes índices para o sistema. Para a formulação desenvolvida VASSILIADIS *et al.* (1994b), o índice máximo do novo sistema foi considerado como igual a 1.

As conseqüências da abordagem apresentada por VASSILIADIS *et al.* (1994b) (possibilidade do índice diferencial continuar superior a 1) motivaram o uso de algoritmos para redução de índice (PANTELIDES *et al.*, 1988 e MATTSSON e SÖDERLIND, 1993). Essa metodologia foi utilizada por FEEHERY e BARTON (1999) para resolução de problema de otimização dinâmica com restrições de igualdade que resultassem em sistemas com índice diferencial superior a 1. COSTA JR. *et al.* (2001) aplicaram a formulação desenvolvida por PANTELIDES *et al.* (1988) para redução do índice em um problema de controle ótimo com arcos singulares. O surgimento de arcos singulares, de modo semelhante às restrições de igualdade, eleva o índice do sistema EADs (SARGENT, 2000, VIEIRA, 2001). No problema tratado por COSTA JR. *et al.* (2001), otimização da produção de etanol em um reator batelada alimentada, o código foi capaz de caracterizar corretamente e gerar as condições iniciais consistentes para o sistema reduzido (COSTA JR., 2002).

¹ A partição tem origem na escolha dentre quais variáveis de controle deve ser promovida a variável de estado.

4.2.2 Problema de Otimização Dinâmica com Restrições de Desigualdade

As abordagens apresentadas até o momento envolvem problemas de otimização dinâmica constituído pelas Equações (4.1) e (4.2). Todavia, a inclusão de restrições de desigualdades, Equação (4.3), necessita de maiores cuidados. As restrições de desigualdade quando inativas não exercem nenhuma influência no sistema de equações. Contudo, quando ativas, esta informação funciona como uma restrição de igualdade (e com as mesmas conseqüências). Logo, o índice do sistema pode variar sobre a trajetória de solução, conforme a restrição esteja ativa ou não.

Diversos métodos têm sido desenvolvidos para a manipulação de restrições de desigualdade, sobretudo com o intuito de evitar tais descontinuidades. Neste contexto, o tratamento empregado às desigualdades envolve a utilização de procedimentos aproximativos, onde as restrições de desigualdade são avaliadas nas proximidades da região de viabilidade. Dentre as formulações, três métodos merecem destaque:

4.2.2.1 Utilização de Variáveis de folga ou “slack variables”

A introdução de variáveis de folga ou “*slack variables*”, convertendo as restrições de desigualdade em igualdade, foi apresentada primeiramente por JACOBSON e LELE (1969). Neste caso, a variável de ajuste, $s(t)$, pode ser considerada uma variável de controle a ser determinada durante a otimização, ou seja:

$$g(x(t), \dot{x}(t), y(t), u(t), v, t) - \frac{1}{2}s(t)^2 = 0 \quad t \in [t_0, t_f] \quad (4.5)$$

Na formulação original proposta por JACOBSON e LELE (1969), aplicada apenas a sistemas de equações diferenciais ordinárias, a Equação (4.5) é diferenciada n vezes, no tempo, até o aparecimento explícito da variável de controle $u(t)$. VASSILIADIS *et al.* (1994b) alertam que tal procedimento pode também resultar em um sistema de EADs de índice elevado, com possível formação de arcos singulares. FEEHERRY (1998) aplicou procedimentos de diferenciação automática permitindo assim, a resolução do sistema com índice na superior a 1.

4.2.2.2 Suavização das Restrições

Este método consiste na adição de novas variáveis diferenciais para cada restrição de desigualdade presente, conforme representado pela Equação (4.6).

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \psi(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t) \quad (4.6)$$

onde, ψ é a medida da violação da restrição sob todo o intervalo de tempo de integração.

Na formulação proposta por GOH e TEO (1988), a função $\psi(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t)$ é aproximada “suavemente“ pela Equação (4.7). Porém, uma desvantagem da equação disjuntiva proposta é a redução dos limites da região de viabilidade (representado pela variável ε , Equação 4.7) não permitindo identificar a ativação e desativação da restrição.

$$\psi = \begin{cases} g(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t) & \text{se } g > \varepsilon \\ \frac{(-g(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t) - \varepsilon)^2}{4 \cdot \varepsilon} & \text{se } -\varepsilon \leq g \leq \varepsilon \\ 0 & \text{se } g \leq -\varepsilon \end{cases} \quad (4.7)$$

VASSILIADIS *et al.* (1994b) propõem uma formulação híbrida que envolve a avaliação da função $\psi(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t)$ em pontos distintos no tempo (discretizado por elementos finitos), conforme apresentado na Equação (4.8).

$$\psi = [\max(0, g(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}, t))]^2 \quad (4.8)$$

As condições iniciais e finais estabelecidas para a indexação da Equação (4.8) são $\bar{\mathbf{x}}(0) = \mathbf{0}$ e $\bar{\mathbf{x}}(t_f) \leq \varepsilon$, onde ε , representa um fator de relaxação. Neste caso, a motivação dos autores é o menor número de manipulações possíveis que resulte em um sistema de índice diferencial menor ou igual a 1.

4.2.2.3 Avaliação das Restrições em Pontos Pré-Definidos

A idéia principal deste método é a avaliação das restrições de desigualdade no final de cada segmento de tempo discretizado (elementos finitos de tempo). Como resultado, uma seqüência de problemas de otimização dinâmica é gerada onde, em cada problema, há um aumento no número de pontos de discretização.

$$\mathbf{g}_i(\mathbf{x}(t_i), \dot{\mathbf{x}}(t_i), \mathbf{y}(t_i), \mathbf{u}(t_i), \mathbf{v}, t_i) \leq \varepsilon \quad (4.9)$$

com i variando de zero até o número de pontos de discretização do tempo.

Apesar da facilidade numérica para implementação, este método requer um número elevado de pontos de discretização para a correta detecção da violação da restrição. CHEN e VASSILIDADES (2004) mostram que esta formulação pode ser aplicada a problemas que resultem em sistemas de EADs com índice superior. Os autores demonstram que as propriedades de convergência desejadas para a correta detecção da violação das restrições podem ser alcançadas em um número finito de pontos e a uma determinada tolerância, ε (especificada pelo usuário).

Para FEEHERY e BARTON (1998), os procedimentos aproximativos não garantem a correta detecção da violação sobre algum ponto da trajetória ótima de solução. Os autores reforçam a idéia de utilização de um procedimento direto para resolver o sistema de índice variável. O cerne do método desenvolvido é a detecção da ativação e desativação das restrições de desigualdade (ou, detecção de descontinuidades), permitindo um ajuste sobre os graus de liberdade do sistema. De modo semelhante ao método apresentado por VASSILIADIS *et al.* (1994b), parte do vetor de variáveis de controle é promovida a variáveis algébricas. A dimensão do sistema é ampliada para manter o número de graus de liberdade invariante durante a ativação e desativação das restrições. A seqüência de ativações e desativações é transferida para as equações de sensibilidade necessárias para a solução do problema. Se o novo sistema, ativo ou inativo, apresentar índice diferencial superior a 1, então uma etapa de redução e busca de condições iniciais consistentes é efetuada. Desta forma, toda vez que uma restrição de desigualdade é alcançada, um novo sistema de DAE deve ser construído, um novo conjunto de condições iniciais consistentes deve ser determinado e um método de redução de índice deve ser aplicado para reiniciar a integração numérica (MAJER *et al.*, 1995, PARQUE e BARTON, 1996, MAO e

PETZOLD, 2002). Esta abordagem encontra-se implementada no software ABACUSS (URL: <http://yoric.mit.edu/abacuss2/abacuss2.html>).

Apesar dos argumentos apresentados por FEEHERY e BARTON (1998) em favor da sua metodologia, convém enfatizar que não há uma unanimidade na literatura (SCHELEGEL *et al.*, 2005, SRINIVASAN *et al.* 2003) sobre qual a melhor abordagem para tratar as restrições de desigualdades presentes no problema de otimização dinâmica, sobretudo quando estas resultem em um problema de índice variável.

4.3 Resolução do Problema de Otimização Dinâmica com Restrições

No Capítulo 3, foi apresentada uma nova abordagem para a manipulação de descontinuidades presentes em modelos dinâmicos. A estratégia permitiu, de uma forma computacionalmente simples, comutar entre diferentes modelos sem a necessidade de reinicialização do sistema. Os resultados obtidos motivaram a utilização desta abordagem na manipulação de restrições e, principalmente, na resolução de problemas de otimização dinâmica que se caracterizem em um problema de índice variável. Para um melhor entendimento sobre a aplicação da abordagem proposta no capítulo 3 aos problemas de otimização dinâmica com restrições, este tópico foi dividido nos seguintes subtópicos: reinicialização e chaveamento entre os modelos; metodologia utilizada para detecção da ativação e desativação das restrições e reinicialização do sistema de EAD após a violação e resolução de sistemas algébrico-diferenciais de índice variável.

4.3.1 Reinicialização e Chaveamento entre Modelos

Durante a resolução de problemas de controle ótimo singular e nos problemas de otimização dinâmica com restrições, o índice do sistema pode variar ao longo da trajetória ótima. Usualmente, a resolução destes problemas envolve etapas de identificação do ponto onde ocorre a descontinuidade (no caso, a elevação do índice) e, em seguida, a passagem para o novo sistema (chaveamento entre modelos). Como podem ocorrer descontinuidades em algumas das variáveis, o novo sistema nem sempre

pode ser integrado utilizando como condições iniciais da nova etapa as condições finais da etapa anterior (sistema antigo). Para superar tal dificuldade, é necessário algum procedimento para cômputo das novas condições iniciais consistentes.

Para ilustrar este comportamento, considere a otimização do seguinte sistema dinâmico (diferencial ou algébrico-diferencial) com dimensão \mathbf{n} , representado pelas Equações (4.10) e (4.11) e contendo apenas uma variável controle e uma restrição (neste caso, função das variáveis diferenciais e algébricas do modelo dinâmico):

$$f(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, u) = 0 \quad (4.10)$$

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0 \quad (4.11)$$

No procedimento de otimização e, enquanto a restrição está inativa, o comportamento do modelo é influenciado apenas pela ação da variável de controle, u_c , (que é a variável de decisão do otimizador). Esta ação é descontinuada quando a restrição de desigualdade torna-se ativa. O efeito descrito pode ser representado matematicamente pelas Equações (4.12) a (4.14).

$$f(\dot{\mathbf{x}}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, u) = 0, \text{ onde:} \quad (4.12)$$

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{cases} 0, & \text{se } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) < 0 \\ g(\mathbf{x}, \mathbf{y}), & \text{se } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0 \end{cases} \quad (4.13)$$

$$u = \begin{cases} u_c, & \text{se } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) < 0 \\ 0, & \text{se } g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \geq 0 \end{cases} \quad (4.14)$$

O novo sistema de EADs² formado pelas Equações (4.12) a (4.14) é definido como sistema *disjuntivo*, com base no fato de que apenas uma ou outra destas restrições pode estar ativa.

No presente trabalho de tese, uma sistemática de resolução é proposta. Esta proposta, tem como base a abordagem apresentada no Capítulo 3 e consiste em substituir o sistema disjuntivo por uma simples equação algébrica que executa a soma ponderada das duas equações excludentes. A ponderação é feita através de um peso que

² Após ativação, a restrição torna-se uma equação adicional do sistema.

varia ao longo do processo de integração, assumindo o valor 1 se a restrição de desigualdade estiver inativa, 0 se estiver ativa e um valor intermediário ao longo da transição.

$$\eta[g(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \xi] \cdot (u - u_c) + [1 - \eta[g(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \xi]] \cdot g(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \quad (4.15)$$

Na implementação computacional deste procedimento, adotou-se uma função contínua de regularização, Equação (3.11) ou (3.12), para a passagem do valor 1 para o valor 0 (ou vice-versa) do peso η . Desta forma, os valores das variáveis de estado obtidos no final da integração da primeira etapa intervalo são utilizados como condições iniciais da etapa subsequente, eliminando em decorrência a etapa de determinação de novas condições iniciais para continuar a integração (ver Capítulo 3). Há situações, no entanto, que a função de regularização é função unicamente do tempo. Para este caso é necessário conhecer a priori, o tempo de chaveamento. Para tais problemas, conforme veremos no Capítulo 5, foi utilizado o algoritmo de CARVER (1978) para detecção do tempo de violação associado a função de regularização.

Cabe aqui a comparação da técnica proposta com o trabalho de FEEHERY e BARTON (1998). Apesar de os autores apresentarem um equacionamento semelhante ao presentemente proposto, os parâmetros presentes na sua abordagem assumem apenas valores binários, traduzindo o *ligar* e o *desligar* das restrições do problema. Como ocorre uma alternância brusca entre modelos, um algoritmo de caracterização do novo sistema de EADs deve ser implementado, com as decorrentes etapas de redução de índice e de reinicialização do sistema.

4.3.2 Detecção de Restrições

A detecção da ativação e desativação das restrições de desigualdade nos problemas de otimização dinâmica representa, conforme já comentado, o coração do método de resolução dos problemas de índice variável. Vale destacar que estas restrições podem estar ativadas ou desativadas a cada avanço da simulação, dificultando mais ainda a resolução desta classe de problemas.

As primeiras idealizações sobre a detecção e inserção das restrições (no sistema dinâmico) em problemas de otimização dinâmica partiram dos trabalhos de FEEHERY

e BARTON (1996 e 1998). A metodologia desenvolvida pelos autores consiste de duas etapas distintas: a detecção da ativação e, em seguida a desativação. Neste caso, a restrição é considerada numericamente ativa quando, durante a simulação, a equação $g(x,y)$ atingir um valor menor (ou maior, se $g(x,y) \geq 0$) do que zero. O procedimento numérico formulado para a detecção da desativação da restrição de desigualdade, no entanto, é muito mais complexo. Para que a restrição seja considerada inativa, várias condições devem ser satisfeitas, conforme apresentadas por FEEHERY e BARTON (1998).

Neste trabalho, todas as restrições de desigualdade são descritas por funções contínuas apropriadas (Equação 3.17) sendo então detectadas automaticamente. A abordagem utilizada segue o mesmo procedimento proposto no Capítulo 3 para detecção de restrições em sistemas dinâmicos, ou seja, as restrições de desigualdade são transformadas em novas equações algébricas e o sistema de EAD resultante é integrado continuamente. Para um melhor entendimento, todos os “passos” necessários à resolução do problema de otimização dinâmica com restrição de igualdade e desigualdade nas variáveis de estado são ilustrados na Seção 4.4 seguinte.

4.4 Aplicação da Técnica Proposta para Resolução do Problema de Otimização Dinâmica com Restrições

Na resolução de problemas de otimização dinâmica com restrições de igualdade (neste caso, os problemas de controle ótimo singular são considerados como problemas de otimização dinâmica com restrições de igualdade) e desigualdade proposta aplica-se, após a identificação do índice diferencial³ do correspondente sistema algébrico-diferencial, uma técnica apropriada para integração numérica, caso o sistema apresente um índice menor ou igual a 1. Para a resolução numérica de sistemas de índice superior, as estratégias adotadas consistem em: (i) reduzir o índice do sistema para 1 ou 0 ou, (ii) utilizar um código adequado para sistemas de índice superior.

³ O índice diferencial de um sistema de EADs, definido por GEAR e PETZOLD (1984), é o número mínimo de vezes que um sistema de EADs (ou equações derivadas dele) precisa ser diferenciado em relação à variável independente t até ser transformado em um sistema de EDOs explícito do tipo $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u})$. Deste modo, um sistema composto apenas por EDOs apresenta índice 0.

O índice do sistema pode ser reduzido através da diferenciação das restrições algébricas. Nesta etapa, podem ser obtidas outras equações algébricas que estavam “escondidas” no sistema de equações original. O sistema estendido final é formado pelas equações originais (algébricas e diferenciais) acrescido das equações “escondidas” resultantes das diferenciações efetuadas no sistema até transformá-lo em um sistema puramente diferencial. Há diversos trabalhos na literatura sobre métodos para redução de índice de EADs, e todos sugerem que, de alguma forma, as restrições algébricas sejam introduzidas novamente no sistema (BACHMANN *et al.*, 1990). Uma alternativa à estratégia de redução de índice é a utilização de códigos que permitam a integração de sistemas algébrico-diferenciais de índice superior a 1. O código PSIDE (LIOEN *et al.*, 1998) e o pacote MANPAK (RHEINBOLDT, 1996a e 1996b) são bons exemplos, porém destinam-se a sistemas específicos, que geralmente incluem índice menor ou igual a três e alguma restrição relativa à estrutura.

No presente trabalho, inicialmente, foi utilizado o código PSIDE para a resolução numérica de problemas com índice diferencial variável. O objetivo, nesta fase do trabalho, é verificar a eficácia do código na resolução de um problema específico que apresenta característica de índice variável, no caso, o controle ótimo singular de um bioreator batelada alimentada, apresentado em detalhes como um estudo de caso do Capítulo 5.

Pensando em uma alternativa ao uso de códigos de integradores de índice superior, foi desenvolvida uma estratégia de redução de índice direcionada a problemas de otimização dinâmica com restrições de desigualdade. O principal aspecto desta abordagem é a resolução do sistema sem mudança no índice, logo, podendo ser integrado com uso de pacotes consagrados para índice 1 ou 0. O exemplo seguinte, Equações (4.16) a (4.21), ilustra as etapas necessárias a resolução de problemas com índice variável.

$$\begin{aligned} & \underset{u(t)}{\text{Minimize}} \quad x_3(t_f) \\ & \text{Sujeito a :} \end{aligned} \tag{4.16}$$

$$\dot{x}_1 = x_2, \text{ com } x_1(0) = x_{101} \tag{4.17}$$

$$\dot{x}_2 = x_2 + u, \text{ com } x_2(0) = x_{20} \quad (4.18)$$

$$\dot{x}_3 = x_1^2 + x_2^2 + u^2, \text{ com } x_3(0) = x_{30} \quad (4.19)$$

$$g(x_2, t) = x_2(t) - f(t) \leq 0 \quad (4.20)$$

$$u_{\text{inf}} \leq u(t) \leq u_{\text{sup}} \quad (4.21)$$

Etapa 1 – Criação de uma nova variável algébrica, y_{efe} .

Na metodologia proposta, a restrição de desigualdade é transformada em uma nova equação algébrica, nomeada de y_{efe} que representa a soma “ponderada” das condições que caracterizam a região de viabilidade e inviabilidade da solução. As equações que descrevem o comportamento do sistema na região de viabilidade e inviabilidade são determinadas por uma análise do comportamento da restrição antes e depois da ativação. Aqui, y_{efe} é igual à variável de estado $x_2(t)$, quando a restrição está inativa e igual a $f(t)$, quando a restrição está ativa. Assim:

$$y_{\text{efe}} = \eta[g(x_2, t), \xi] \cdot x_2 + [1 - \eta[g(x_2, t), \xi]] \cdot f(t) \quad (4.22)$$

onde η é a função de regularização definida no Capítulo 3 e que apresentada a seguinte propriedade:

$$\eta(\text{arg}, \xi) \cong \begin{cases} 1 & \text{para } \text{arg} < 0 \\ 0 & \text{para } \text{arg} \geq 0 \end{cases} \quad (4.23)$$

Etapa 2 – Criação de uma nova variável de controle, u_{efe} .

Quando a restrição se encontra ativa, a derivada da variável de estado $x_2(t)$ deve ser fixa em um valor definido pela forma funcional da restrição, ou seja a expressão $\dot{x}_2 - x_2 - u = 0$ deve ser satisfeita. Desta forma, fazendo $x_2 = f(t)$ e $\dot{x}_2 = \frac{df(t)}{dt}$, uma restrição adicional é introduzida, Equação (4.24), neste caso para a variável de controle.

$$u_{efe} = \eta[g(x_2, t), \xi] \cdot u + [1 - \eta[g(x_2, t), \xi]] \cdot \left[\frac{df(t)}{dt} - f(t) \right] \quad (4.24)$$

Etapa 3 – Reescrevendo o sistema de equações.

Um novo problema de otimização dinâmica deve ser considerado, agora substituindo a variável de estado x_2 , presente nas Equações (4.17) e (4.19), por y_{efe} e substituindo a variável de controle u , presente na Equação (4.19), por u_{efe} . As demais equações permanecem na forma original, assim:

$$\begin{aligned} & \text{Minimize } x_3(t_f) \\ & \quad \quad \quad u(t) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Sujeito a :

$$\dot{x}_1 = y_{efe}, \text{ com } x_1(0) = x_{10} \quad (4.26)$$

$$\dot{x}_2 = x_2 + u(t), \text{ com } x_2(0) = x_{20} \quad (4.27)$$

$$\dot{x}_3 = x_1^2 + y_{efe}^2 + u(t)_{efe}^2, \text{ com } x_3(0) = x_{30} \quad (4.28)$$

$$y_{efe} = \eta[g(x_2, t), \xi] \cdot x_2 + [1 - \eta[g(x_2, t), \xi]] \cdot f(t) \quad (4.29)$$

$$u_{efe} = \eta[g(x_2, t), \xi] \cdot u + [1 - \eta[g(x_2, t), \xi]] \cdot \left[\frac{df(t)}{dt} - f(t) \right] \quad (4.30)$$

$$u_{inf} \leq u(t) \leq u_{sup} \quad (4.31)$$

Etapa 4 - Integração do novo sistema

O novo problema de otimização dinâmica, representado pelo sistema de Equações (4.25) a (4.31) apresenta índice diferencial igual a 1. Logo, podem ser utilizados códigos para integração de EAD destinados a sistemas de índice menor ou igual a 1, com exemplo o código DASSL (PETZOLD, 1989).

4.5 Conclusões sobre a Metodologia

Diante do que foi apresentado, cabe destacar que a metodologia proposta neste trabalho para a manipulação de restrições de igualdade e desigualdade depende do modelo a ser resolvido. Porém, esta especificidade não compromete a sua utilização, principalmente devido à simplicidade da formulação final do problema. Outros aspectos importantes nesta abordagem são: a autonomia do modelo após a violação da(s) restrição(ões), reduzindo o custo computacional da etapa de otimização e a não necessidade de ajuste dos graus de liberdade do sistema (desta forma, evita-se a etapa de partição do vetor de variáveis de controle). Vale ainda ressaltar que, durante a resolução numérica do problema de otimização, o índice diferencial do sistema de equações algébrico-diferenciais permanece inalterado. As principais etapas numéricas apresentadas neste capítulo para a resolução do sistema algébrico-diferencial de índice superior e/ou variável são aplicadas a diversos exemplos da literatura, apresentados no capítulo seguinte. Cabe destacar que os resultados obtidos com esta abordagem foram publicados no *European Symposium on Computer Aided Process Engineering* (ESCAPE 15 e 16), reapresentados no APÊNDICE B.

4.6 Referências Bibliográficas deste Capítulo

- ASCHER, U. M., PETZOLD, L., 1998, *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*, Classics in Applied Mathematics Series, SIAM.
- BACHMANN, R., BRÜLL, L., MRZIGLOD, Th., PALLASKE, U., 1990, “On methods for reducing the index of differential-algebraic equations”, *Computers and Chemical Engineering*, v.14 n. 11 pp.1271-1273.
- BARTON, P. I., ALLGOR, R. J., FEEHERY, W. F., GALAN, S., 1998, “Dynamic Optimization in a Discontinuous World”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 37, n. 3, pp. 966-981.
- BELL, M. L., SARGENT, R. W. H., 2000, “Optimal Control of Inequality Constrained DAE Systems”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, n. 11, pp. 2385-2404.
- BETTS, J., BIEHN, N., CAMPBELL, S. L., 2002, “Convergence of Nonconvergent IRK Discretizations of Optimal Control Problems with State Inequality Constraints”, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 23, n. 6, pp. 1981 – 2007.
- BRYSON JR., A. E., HO, Y.-C., 1969, *Applied Optimal Control Optimization, Estimation, and Control*, Blaisdell Publishing Company, Massachusetts, EUA.
- CARVER, M. B., 1978, “Efficient Integration over Discontinuities in Ordinary Differential Equation Simulations”, *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 20, pp. 190–196.
- CHEN, T. W. C., VASSILIADIS, V. S., 2004, “Inequality Path Constraints in Optimal Control: a finite iteration ε - convergent scheme based on pointwise discretization”, *Journal of Process Control*, v. 15, n. 3, pp. 353-362.
- COSTA JR., E. F., 2002, *Resolução Automática de equações Algébrico-Diferenciais de índice Superior*, Tese de Doutorado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

- COSTA JR., E. F., VIEIRA, R.C., SECCHI, A.R., BISCAIA, E.C., 2001, "Automatic Structural Characterization of DAE Systems", *11^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 11*, Denmark.
- FEEHERY, W. F., 1998, *Dynamic Optimization with Path Constraints*, Doctor Philosophy in Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology. Dept. of Chemical Engineering, EUA.
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1996, "Dynamic Simulation and Optimization with Inequality Path Constraints", *Computers and Chemical Engineering*, v. 20, Suppl., pp. S707-S712.
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1998, "Dynamic Optimization with State Variable Path Constraints", *Computers and Chemical Engineering*, v. 22, n. 9, pp.1241-1256.
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1999, "Dynamic Optimization with Equality Path Constraints", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 38, n. 6, pp. 2350-2363.
- GOH, C. J., TEO, K. L., 1988, "Control Parametrization: A Unified Approach to Optimal Control Problems with General Constraints", *Automatica*, v. 24, n. 1, pp. 3-18.
- JACOBSON, D. H., LELE, M. M., 1969, "A Transformation Technique for Optimal Control Problems with a State Variable Inequality Constraint", *IEEE Trans. Autom. Control*, v. 14, pp. 457-464.
- JACOBSON, D. H., LELE, M. M., SPEYER, J. L., 1971, "New Necessary Conditions of Optimality for Control Problems with State-Variable Inequality Constraints", *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, v. 35, n. 2, pp. 255-284.
- LIOEN, W. M., DE SWART, J. J. B., VAN DER VEEN, W. A., 1998, "[PSIDE](#) users guide", Report MAS-R9834, C W I, Amsterdam, Holanda. URL: <http://www.cwi.nl/cwi/projects/PSIDE>.
- LOGSDON, J. S., BIEGLER, L. T., 1989, "Accurate Solution of Differential-Algebraic Optimization Problems", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 28, n. 11, pp. 1628-1639.
- MAJER, C., MARQUARDT, W., GILLES, E. D., 1995, "Reinitialization of DAE's after Discontinuities", *Computers and Chemical Engineering*, v. 19, Suppl., pp. 507-512.

- MAO, G., PETZOLD, L. R., 2002, “Efficient Integration over Discontinuities for Differential Algebraic Systems”, *Computers and Mathematics with Applications*, v. 43, pp. 65–79.
- MATTSSON, S., E., SÖDERLIND, G., 1993, “Index Reduction in Differential-Algebraic Equations using Dummy Derivatives”, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 14, n. 3, pp.677 – 692.
- PANTELIDES, C. C., GRITSIS, D., MORISON, K. R., SARGENT, R. W. H., 1988, “The Mathematic Modeling of Transient Systems Using Differential-Algebraic Equations”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 12, n. 5, pp.449-454.
- PARK, T., BARTON, P. I., 1996, “State Event Location in Differential-Algebraic Models”, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, v. 6, n. 2, pp. 137–165.
- PETZOLD, L.R., 1989, *DASSL: A Differential-Algebraic System Solver*, Computer and Mathematical Research Division, Lawrence Livermore National Laboratory, CA.
- RHEINBOLDT, W. C., 1996a, “MANPAK: A Set of Algorithms for Computations on Implicitly Defined Manifolds”, *Computers Math. Applic.*, v. 32, 12, pp. 15-28.
- RHEINBOLDT, W. C., 1996b, “Solving Algebraically Explicit DAEs with the MANPAK – Manifold - Algorithms”, *Computers Math. Applic.*, v. 33, 3, pp. 31-43.
- SARGENT, R. W. H., 2000, “Optimal Control”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 124, n. 1/2, pp. 361-371.
- SCHLEGEL, M., STOCKMANN, K., BINDER, T., MARQUARDT, W., 2005, “Dynamic optimization using adaptative control vector parameterization”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, n. 8, pp. 1731 – 1751.
- SOUZA, D. F. S., VIERA, R. C., BISCAIA JR., E. C., 2005, “Strategies for Numerical Integration of Discontinuous DAE Models”, In: *Proceedings of 15^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 15*, Barcelona.
- SOUZA, D. F. S., VIERA, R. C., BISCAIA JR., E. C., 2006, “Floating Index of Inequality Constrained DAE Systems”, In: *Proceedings of 16^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 16*, Holanda.

- SRINIVASAN, B., PALANKI, S., BONVIN, D., 2003, “Dynamic Optimization of Batch Processes I: Characterization of the Nominal Solution“, *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, pp: 1 – 26.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994a, “Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems. 1. Problems without Path Constraints”, *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, pp. 2111-2122.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994b, “Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems 2. Problems with Path Constraints”, *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, pp. 2123-2133.
- VIEIRA, R. C., 2001, *Técnicas de Inicialização de Sistemas Algebrico-Diferenciais*, Tese de Doutorado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Capítulo 5

Estudos de Caso

Neste capítulo, os estudos realizados sobre as metodologias para resolução do problema de otimização dinâmica e a metodologia proposta no Capítulo 4 são empregados em exemplos da literatura (estudos de casos). Os resultados obtidos validam a metodologia proposta para a abordagem de sistemas algébrico-diferenciais de índice variável.

5.1 Introdução

Conforme apresentado nos Capítulos 3 e 4, o problema de otimização dinâmica com restrições de igualdade e desigualdade pode ser interpretado como um problema de integração sujeito a descontinuidades, onde as restrições são consideradas parte integrante do modelo. No entanto, devido à forma funcional destas restrições, o sistema de EADs resultante pode se apresentar como índice superior e/ou variável, o que requer um maior esforço computacional para a resolução.

Motivado pelo alto custo computacional tipicamente associado com cada um dos passos para a resolução do problema de índice variável foi proposta uma nova metodologia que reúne as vantagens de funções de regularização com códigos numéricos para integração de sistemas de EADs de índice 1 ou superior. Neste caso, todas as restrições de desigualdade são descritas por funções contínuas apropriadas e o sistema de EADs resultante pode ser integrado usando códigos numéricos como PSIDE (LIOEN *et al.*, 1998) ou DASSL (PETZOLD, 1989).

O novo procedimento, conforme descrito no Capítulo 4, foi aplicado em exemplos típicos da literatura e os resultados obtidos são apresentados e discutidos ao longo do texto. Para um melhor entendimento das escolhas adotadas no procedimento proposto, são apresentados na Seção 5.2 os estudos iniciais que motivaram a opção pela abordagem de resolução do problema de otimização dinâmica, no caso, a abordagem seqüencial (conforme visto no Capítulo 2). Como contribuição desse estudo, tem-se a determinação do perfil ótimo de temperatura de um reator de semibatelada (aplicado à produção do Politereftalato de Etileno - PET), em parceria com OLIVEIRA (2006). Na Seção 5.3, a metodologia desenvolvida no Capítulo 4 é utilizada na resolução de problemas que envolvem restrições de igualdade (controle ótimo singular do biorreator batelada alimentada) e de desigualdade. Por fim, na Seção 5.4 são apresentadas as conclusões obtidas.

5.2 Estudos Preliminares para Seleção da Abordagem para Otimização Dinâmica de Processos

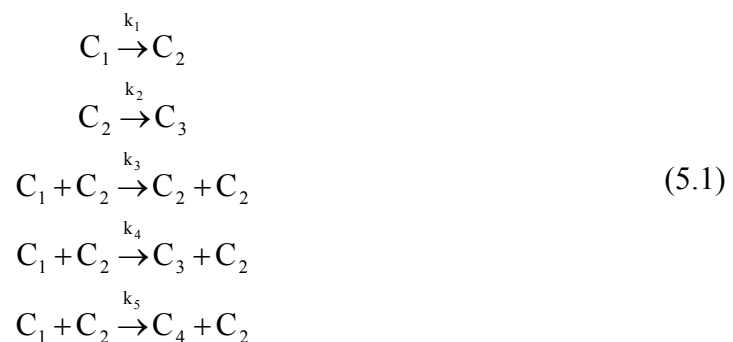
No Capítulo 2 foi mostrado que os problemas de otimização dinâmica podem ser solucionados via métodos indiretos ou por métodos diretos. Esta última metodologia, por sua vez, pode ainda ser dividida em duas diferentes abordagens: simultânea e seqüencial. Na abordagem simultânea, o sistema dinâmico e a variável de controle são discretizadas, no tempo, e inseridas no código de otimização como restrições adicionais. O conjunto formado pelas novas restrições e as restrições pré-existentes é solucionado por métodos de otimização fundamentados em métodos de programação não-linear (NLP). Na abordagem seqüencial, somente a variável de controle é discretizada. Como resultado, o sistema dinâmico é integrado em cada intervalo de tempo pré-definido e o perfil da variável de controle é estimado pelo otimizador.

O sucesso da abordagem seqüencial está atrelado à facilidade de implementação e aos bons resultados apresentados para modelos de maior complexidade. Porém, um fator importante e que pode comprometer os resultados é a escolha da forma funcional para a variável de controle. Dentre as formas funcionais adotadas, há um consenso na literatura (POLLARD e SARGENT, 1970, VASSILIADIS *et al.*, 1994a e 1994b, SCHLEGEL *et al.*, 2005) na utilização de polinômios interpoladores (de grau 1 ou 2) ou funções spline sendo a primeira a mais empregada.

Como uma primeira etapa do trabalho, a abordagem seqüencial foi adotada para a otimização dinâmica de dois problemas de interesse: (i) Determinação do perfil ótimo de temperatura em um reator PFR (ESPOSITO e FLOUDAS, 2000) e o (ii) Estudo das Condições Ótimas para um Processo Semibatelada de Policondensação em Estado Fundido do Poli(Tereftalato de Etileno) (Pet) (OLIVEIRA *et al.*, 2005). No primeiro exemplo, o perfil temporal da variável de controle foi aproximado utilizando uma função interpolação (linear). Para o segundo exemplo, de maior dimensão, o perfil para a variável de controle foi aproximada por elementos finitos (também linear).

5.2.1 Determinação do Perfil Ótimo de Temperatura em um PFR

Este problema foi reformulado por ESPOSITO e FLOUDAS (2000) e envolve a determinação do perfil ótimo de temperatura em um reator PFR. A reação de interesse foi a pirólise de um óleo combustível, representada pela Equação (5.1). A pirólise é uma reação de degradação térmica na ausência de um agente oxidante e com temperaturas iniciais na faixa de 400 °C. Dentre as principais aplicações da pirólise, pode-se citar a formação do carvão vegetal, gás combustível (GLP) e o Bio-óleo (URL: <http://www.ambientebrasil.com.br>).



O problema de otimização foi formulado para maximizar a produção de C_2 no tempo final ($t_f = 10$ seg.) sendo os produtos de interesse, C_1 e C_2 , conforme apresentado na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Formulação completa do problema proposto por ESPOSITO e FLOUDAS (2000).

$$\begin{aligned} & \underset{u(t)}{\text{Minimize}} C_2(t_f) \\ & \text{Sujeito a :} \end{aligned} \tag{5.2}$$

$$\dot{C}_1 = -k_1 \cdot C_1 - (k_3 + k_4 + k_5) \cdot C_1 \cdot C_2, \text{ com } C_1(0) = 1 \tag{5.3}$$

$$\dot{C}_2 = k_1 \cdot C_1 + k_2 \cdot C_2 + k_3 \cdot C_1 \cdot C_2, \text{ com } C_2(0) = 0 \tag{5.4}$$

$$698.15 \leq u \leq 748.15 \tag{5.5}$$

onde $k_i = a_i \cdot \exp(-(b_i/R)/u)$, com i variando de 1 até 5; R é a constante dos gases e a_i e b_i são parâmetros da constante de reação e seus valores estão contidos na Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Valores para as constantes a e b (ESPOSITO e FLOUDAS, 2000).

i	$\ln a_i$	b_i/R
1	8.86	10215.4
2	24.25	18820.5
3	23.67	17008.9
4	18.75	14190.8
5	20.70	15599.8

A resolução do problema de otimização dinâmica pela abordagem sequencial requer a avaliação da variável de controle (Equação 5.5) em intervalos de tempo pré-definidos. Para facilitar o procedimento de otimização, a variável de controle foi reescalada entre 0 e 1, conforme representado pela Equação (5.6).

$$u = 698.15 + 50 \cdot \bar{u} \tag{5.6}$$

Neste exemplo, foi proposto uma função interpolação linear para a aproximação da variável de controle nos respectivos intervalos de tempo, representado pela Equação (5.7).

$$\bar{u}(t) = \alpha_{i-1} \frac{(t_i - t)}{\Delta t} + \alpha_i \frac{(t - t_{i-1})}{\Delta t}, \quad t_{i-1} \leq t \leq t_i \quad (5.7)$$

sendo α_{i-1} e α_i , variáveis de busca do otimizador.

Na resolução do problema de otimização empregou-se a técnica Quase-Newton que se encontra implementada na subrotina DBCONF (IMSL). A integração numérica do sistema dinâmico foi realizada pelo código DASSL (PETZOLD, 1989). Tanto o código de integração como o de otimização possui tolerâncias fixas em 10^{-5} .

Para avaliar o impacto da função de interpolação proposta na convergência do procedimento de otimização, o tempo final foi discretizado em n pontos (igualmente espaçados). Os perfis obtidos para as iáveis C_1 , C_2 e \bar{u} (variável de controle), para diferentes valores de n pontos testados, são apresentados na Figuras 5.1 e 5.2. O tempo final (em minutos) gasto para todos os números de pontos de discretização e os respectivos valores para função objetivo são apresentados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3: Avaliação do número de pontos para discretização
(chute inicial igual a 0.01).

n	tempo (seg.)	função objetivo
6	0.547	-0.3529
8	1.625	-0.3529
10	1.453	-0.3515
12	2.421	-0.3526

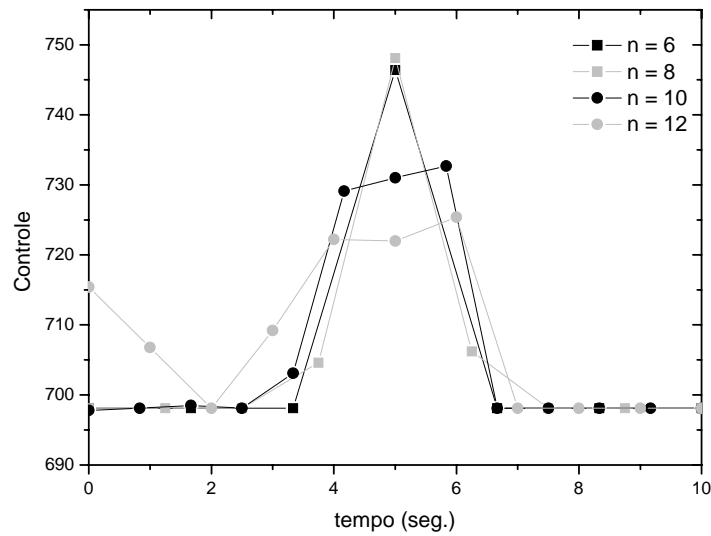


Figura 5.1 – Perfis ótimos da variável de controle (Tabela 5.1)

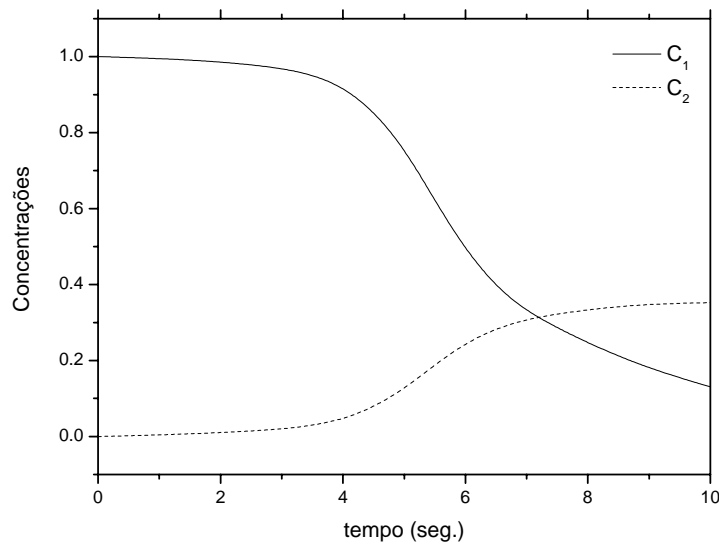


Figura 5.2 – Perfis ótimos de concentração com o tempo.

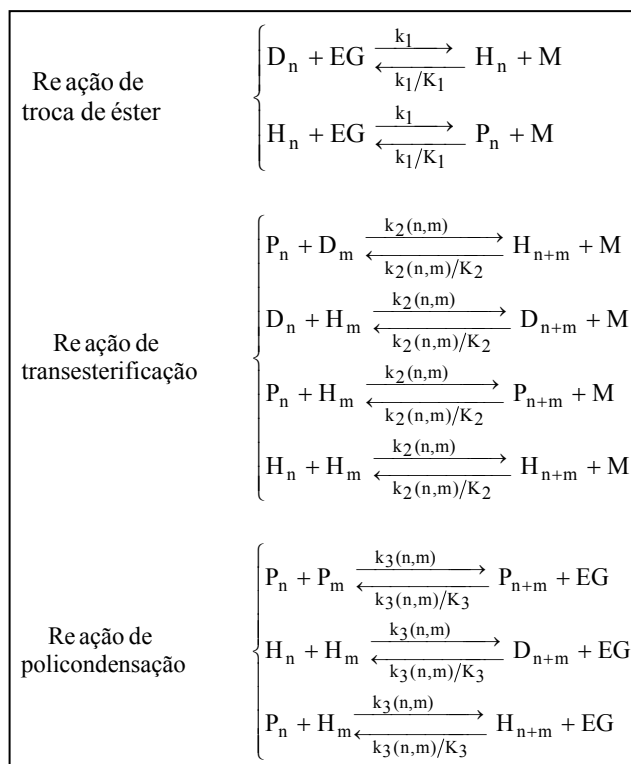
Com base nas Figuras 5.1 e 5.2, pode-se verificar que as soluções possuem diferentes perfis para a variável de controle, o que indica a possível existência de máximos locais e globais (conforme relatado por ESPOSITO e FLOUDAS, 2000). Segundo ESPOSITO e FLOUDAS (2000) o resultado ótimo para função objetivo pode estar entre os valores -0.3517 a -0.3533. Para todos os n pontos de discretização avaliados, a função interpoladora proposta mostrou-se de fácil ajuste (ver a Tabela 5.3).

Cabe destacar que dentre o número de pontos adotados, o mais concordante com os resultados de ESPOSITO e FLOUDAS (2000) foi com n igual a 10.

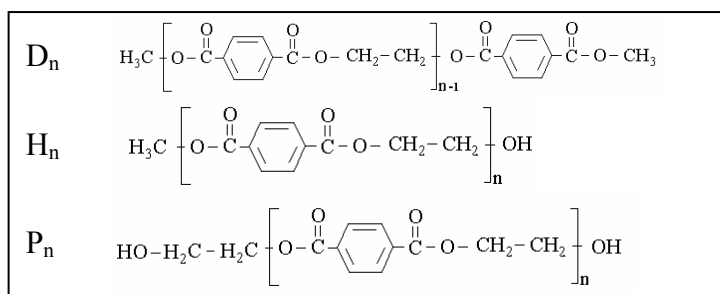
5.2.2 Estudo das Condições Ótimas para um Processo Semibatelada de Policondensação em Estado Fundido do Poli(Tereftalato de Etileno) (Pet)

“... O Poli(tereftalato de etileno) (PET) é um dos termoplásticos mais importantes do mundo, tanto do ponto de vista comercial quanto da enorme gama de possíveis aplicações... Durante o processo de fabricação dos polímeros em geral, o monitoramento e o controle da curva de distribuição de pesos moleculares (CDPM) é de grande interesse prático, já que, a partir desta propriedade, é possível inferir de forma segura outras propriedades físicas e reológicas que caracterizam o produto final...” (OLIVEIRA, 2006).

Segundo OLIVEIRA (2006), o controle ótimo da curva CDPM pode ser efetuado, indiretamente, através de duas variáveis operacionais, temperatura e pressão. No presente exemplo, a abordagem seqüencial é utilizada para identificar os melhores perfis de condições operacionais (temperatura e pressão) que maximize as propriedades moleculares do polímero (neste caso, o peso molecular médio do polímero, M_w) durante uma das etapas de formação do PET em estado fundido (processo de semibatelada de oligomerização). O modelo matemático de oligomerização do PET em estado fundido utilizado neste exemplo foi desenvolvido por OLIVEIRA (2006) e envolve as reações principais, laterais (reações de formação de acetaldeído, água, dietileno glicol, livre e ligado à cadeia) e de redistribuição de cadeias, ou seja:



Onde:



Cabe ressaltar que os mecanismos cinéticos para a formação do PET resultam em modelos de dimensão infinita. Para transpor esta dificuldade, OLIVEIRA (2006) propôs uma abordagem numérica que envolve a técnica de colocação ortogonal com adaptação da função de referência. O novo sistema, apresentado na sua forma algébrico-diferencial, possui um total de 214 equações a serem solucionadas (o sistema original pode apresentar até 1050 equações).

Neste exemplo, foram avaliadas duas formas funcionais para a aproximação das variáveis de controle, temperatura e pressão. Inicialmente, foi utilizada uma função interpoladora com base na Equação (5.7). A segunda função de aproximação utilizada é representada pelas Equações (5.8) e (5.9).

$$T(t) = \frac{Tp_{i+1} - Tp_i}{\tau_{i+1} - \tau_i} \cdot (z - \tau_i) + Tp_i, \tau_i \leq z \leq \tau_{i+1} \quad (5.8)$$

$$P(t) = \frac{Pp_{i+1} - Pp_i}{\tau_{i+1} - \tau_i} \cdot (z - \tau_i) + Pp_i, \tau_i \leq z \leq \tau_{i+1} \quad (5.9)$$

onde Tp_i , Tp_{i+1} , Pp_i , e Pp_{i+1} são as variáveis de busca do otimizador.

O sistema de equações algébrico-diferenciais foi integrado utilizando o código DASSL (PETZOLD, 1989). Para o procedimento de otimização, foi utilizado o código DBCONF (IMSL) sendo o gradiente calculado por derivação numérica.

Nos testes iniciais realizados, observou-se que o código de otimização DBCONF é sensível à escolha dos chutes-iniciais. Como alternativa para a estimativa dos perfis das variáveis de controle, foi empregado um código estocástico, Particle Swarm Optimization (KENNEDY e EBERHART, 1995).

As primeiras estimativas dos perfis ótimos de temperatura e pressão usando a Equação (5.7) necessitaram de um número elevado de pontos de discretização aumentando com isso, o número de avaliações da função objetivo. Desta forma, para os testes seguintes foi utilizado as Equações (5.8) e (5.9) na busca dos perfis ótimos. O perfil ótimo obtido e o comportamento da evolução da CDPM (para o perfil ótimo) são apresentados nas Figuras 5.3 e 5.4.

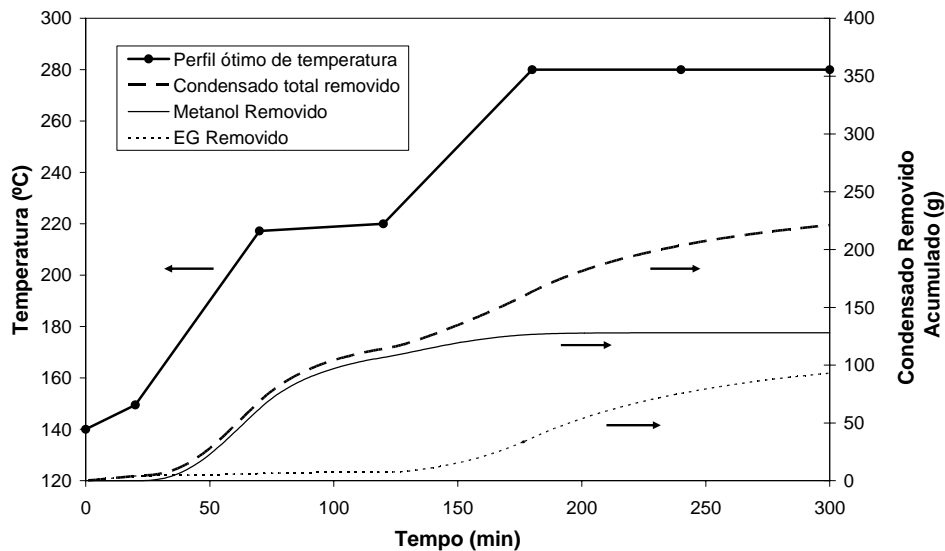


Figura 5.3 - Perfil ótimo de temperatura obtido.

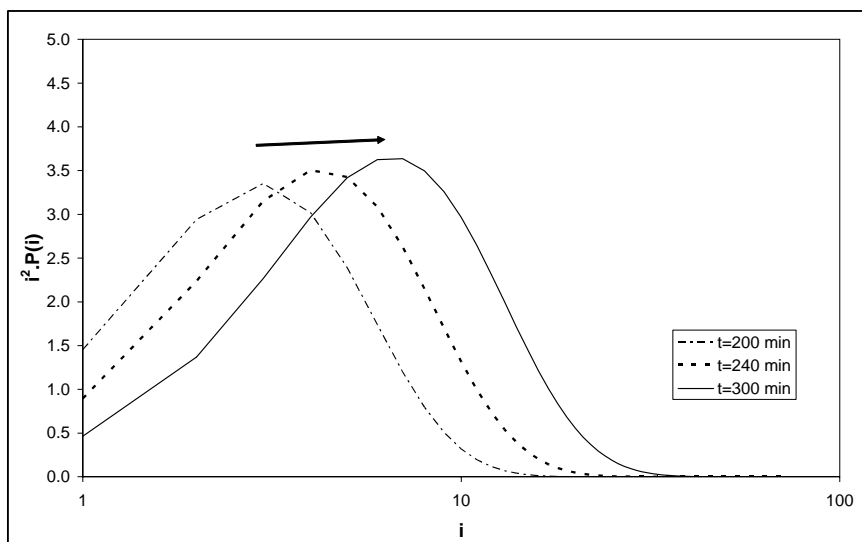


Figura 5.4 – Distribuição ótima de peso molecular para diferentes valores de tempo.

O perfil ótimo de temperatura do reator sob a forma de um degrau crescente foi obtido discretizando o tempo de integração em 6 elementos finitos com intervalos de tempo previamente estabelecidos. O tempo total gasto para as estimativas dos perfis de temperatura e pressão usando o código Particle Swarm Optimization foi de aproximadamente 5 minutos. Este resultado mostra a capacidade do código de otimização na busca dos perfis ótimos das variáveis de controle, principalmente em sistemas de maior complexidade. Como contribuição, este estudo foi publicado no 8º Congresso Brasileiro de Polímeros (8º CBPOL) com o título: Estudo das Condições Ótimas para um Processo Semibatelada de Policondensação em Estado Fundido do Poli(Tereftalato de Etileno) (PET) (OLIVEIRA *et al.*, 2005, representada no APÊNDICE B).

5.2.3 Conclusões Preliminares

Nos estudos realizados acima, utilizou-se a abordagem seqüencial (sob a forma de único chute) como metodologia de resolução do problema de otimização dinâmica. Duas formas funcionais foram empregadas para a aproximação do perfil da variável de controle. A primeira trata-se de uma função interpoladora de primeiro grau com dois parâmetros de ajuste; já a segunda forma funcional é uma aproximação linear em elementos finitos com dois parâmetros de ajuste. Apesar da semelhança (seja pelo número de parâmetros a estimar ou pelo erro da aproximação), a segunda função

necessita de um número menor de pontos de discretização. Esta característica foi preponderante para adotá-la no ajuste da variável de controle no segundo exemplo. Contudo, vale ressaltar o sucesso da forma interpoladora proposta neste trabalho (Equação 5.7) nos exemplos estudados.

5.3 Detecção de Descontinuidades via Funções de Regularização

No Capítulo 4 foi mostrado que, a depender da forma funcional das restrições de desigualdades, o índice diferencial do sistema pode alterar-se (a alteração no índice diferencial é considerada como um tipo de descontinuidade). Uma nova metodologia foi desenvolvida para tratar tais restrições; inserido-as no modelo dinâmico como equações adicionais.

Nesta seção, exemplos da literatura são utilizados para avaliar a metodologia proposta. O exemplo inicial é uma revisão do problema de controle singular, abordado neste trabalho como um problema de índice variável. Os exemplos seguintes envolvem restrições de desigualdades nas variáveis de estado. Nestes exemplos, o índice diferencial pode atingir valores superiores a 2 (quando as restrições estão ativas). Todos os resultados obtidos são concordantes com os resultados reportados na literatura.

5.3.1 Controle Singular de Biorreator Batelada Alimentada

A operação em batelada alimentada pode ser definida com a busca pela política ótima de adição de um dos reagentes. No entanto, em determinadas condições de operação, a política de adição ótima pode encontrar uma singularidade, quando não é mais possível abordar o problema pelo método convencional de controle ótimo. Esta singularidade ocorre para um valor do tempo não conhecido e o lugar geométrico em que ocorre é chamado de arco singular. Como consequência, neste modo de operação, uma nova equação algébrica referente ao arco singular deve ser acrescentada ao sistema original, podendo resultar em uma variação do índice diferencial do sistema de equações. Os problemas que apresentam este efeito de variação do índice diferencial ao longo do tempo são denominados de problemas de índice variável. Efeitos similares

foram investigados por VASSILIADIS et al. (1994a e 1994b) e FEHERY e BARTON (1996) durante a resolução de problemas de otimização dinâmica com restrições de desigualdade (como função das variáveis de estado).

A formulação convencional de resolução de problemas de controle ótimo é a fundamentada no Princípio de Máximo de Pontryagin (PONTRYAGIN et al., 1963). Esta metodologia envolve a geração das equações relativas às variáveis adjuntas, detecção da ativação do arco singular, chaveamento entre os modelos sem e com singularidade, caracterização do índice diferencial do novo sistema dinâmico, redução do índice e reinicialização do sistema. No entanto, esta abordagem de resolução possui algumas conseqüências:

1. Aumento da dimensão do sistema como resultado da inserção das equações adicionais obtidas com a redução do índice;
2. Geração das condições iniciais consistentes, necessárias para a reinicialização.

Acrescida a estas conseqüências está a resolução do problema de valor no contorno resultante da inclusão das equações relativas às variáveis adjuntas. Neste caso, a dificuldade está inteiramente ligada à definição dos chutes iniciais para as variáveis adjuntas. Uma alternativa promissora foi apresentada por VIEIRA e BISCAIA JR. (2001) para a formulação do problema de controle ótimo singular sem a necessidade de resolução do problema de valor no contorno. Os autores utilizam o fato do Hamiltoniano ser linear em relação às variáveis adjuntas e à variável de controle, ou seja:

$$H = H_0(\mathbf{x}, \lambda) + u \cdot w(\mathbf{x}, \lambda) \quad (5.10)$$

onde $\lambda(t)$ são as variáveis adjuntas e \mathbf{x} , o vetor de variáveis de estados.

Desta forma, a expressão para a variável de controle no arco singular (quando w assume valor igual a zero) pode ser obtida através de sucessivas diferenciações da função $w(\mathbf{x}, \lambda)$ até que a variável de controle apareça de forma explícita. Com base nesta informação, o sistema foi então reescrito na forma matricial:

$$\Phi = \begin{bmatrix} w(x, \lambda) \\ w^{(1)}(x, \lambda) \\ w^{(2)}(u, x, \lambda) \\ \vdots \\ w^{(k)}(u, u^{(1)}, \dots, u^{(k-2)}, x, \lambda) \\ \vdots \\ w^{(n-1)}(u, u^{(1)}, \dots, u^{(n-3)}, x, \lambda) \end{bmatrix} = A(u, u^{(1)}, \dots, u^{(n-3)}, x) \cdot \lambda = 0 \quad (5.11)$$

onde A_{ij} é igual a $\partial w_i / \partial \lambda_j$.

Como a solução trivial $\lambda = 0$ não é fisicamente possível, é mandatário que o determinante da matriz A seja nulo. Assim sendo, o novo sistema dinâmico, sem as equações referentes às variáveis adjuntas, apresenta-se como um problema de valor inicial. Cabe ressaltar que se $n = 2$, o sistema é de índice superior.

Neste exemplo é utilizada a abordagem sugerida no Capítulo 4 para a resolução do problema de índice variável resultante do problema de controle ótimo. A nova abordagem consiste na resolução do problema de índice variável sem a necessidade de redução do índice diferencial, empregando-se o código integrador PSIDE (LIOEN *et al.*, 1998). No chaveamento entre os modelos (sem e com singularidades), utilizou-se uma função regularizadora, o que permitiu a passagem de um modelo para outro de forma suave, sem a necessidade de reinicialização do sistema de EADs. Para avaliar as propostas de resolução de sistemas de índice variável, foi utilizado o problema do biorreator em batelada alimentada (APÊNDICE B). Foi empregado, a título de ilustração, o problema de maximização da produção de etanol apresentado por HONG (1986). O modelo matemático que descreve o problema é constituído pelo seguinte sistema de equações:

$$\frac{dx_1}{dt} = \mu(S, P) \cdot x_1 \quad (5.12)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \varepsilon(S, P) \cdot x_1 \quad (5.13)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = u \quad (5.14)$$

onde x_1 , x_2 e x_3 representam a massa de células, massa de produto e volume do sistema, respectivamente.

Neste problema, é considerado que as expressões para a taxa de crescimento, μ , e produtiva específica, ε , são funções de S (substrato) e P (concentração de produto), conforme apresentado:

$$\mu(S, P) = \frac{\mu_0 \cdot S}{\left(1 + \frac{P}{K_{1p}}\right) \cdot (K_{1s} + S)} \quad (5.15)$$

$$\varepsilon(S, P) = \frac{g_0 \cdot S}{\left(1 + \frac{P}{K_{2p}}\right) \cdot (K_{2s} + S)} \quad (5.16)$$

Onde:

$$S = S_f + \frac{(c - x_1)}{(Y \cdot x_3)} \quad (5.17)$$

$$P = \frac{x_2}{x_3} \quad (5.18)$$

A política ótima de controle pode então ser determinado aplicando o Princípio de Maximo de Pontryagin (PONTRYAGIN *et al.*, 1963), com o Hamiltoniano, H, representado pela seguinte equação:

$$H = H_0 + w \cdot u = (\lambda_1 \cdot \mu + \lambda_2 \cdot \varepsilon) \cdot x_1 + \lambda_3 \cdot u \quad (5.19)$$

A condição que dá origem ao arco singular, $w = 0$, resulta na eliminação da variável adjunta λ_3 da Equação (5.19). Desta forma, quando a restrição que representa o arco singular está ativa, a ação de controle que conduz ao ótimo é aquela que maximiza o Hamiltoniano do problema definido por $H_0 = 0$, ou seja:

$$(\lambda_1 \cdot \mu + \lambda_2 \cdot \varepsilon) = 0 \quad (5.20)$$

5.3.1.1 Eliminação das Variáveis Adjuntas

Conforme discutido anteriormente, um dos inconvenientes da formulação do problema de controle ótimo com base no Princípio de Máximo de Pontryagin é a geração das equações referentes as variáveis adjuntas, o que resulta em um problema de valor no contorno de difícil resolução. Uma alternativa atraente apresentada por VIEIRA e BISCAIA JR. (2001) consiste em explorar a linearidade do Hamiltoniano, Equação (5.19), em relação a variável de controle, u. Como neste exemplo ilustrativo, a

função $w(\mathbf{x}, \lambda)$ e todas suas derivadas são funções lineares de λ . Assim, derivando-se uma vez a Equação (5.20) em relação à x_3 a seguinte equação é obtida:

$$\left(\lambda_1 \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} + \lambda_2 \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \right) x_1 = 0 \quad (5.21)$$

Com base na Equação (5.11) é possível então representar as Equações (5.20) e (5.21) em termos do seguinte sistema:

$$\begin{aligned} w(\mathbf{x}, \lambda) &= \lambda_1 \cdot \mu + \lambda_2 \cdot \varepsilon \\ w^{(1)}(\mathbf{x}, \lambda) &= \lambda_1 \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} + \lambda_2 \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \end{aligned} \quad (5.22)$$

Reescrevendo o sistema representado pela Equação (5.22) em termos de uma matriz chega-se a:

$$\begin{pmatrix} \mu & \varepsilon \\ \frac{\partial \mu}{\partial x_3} & \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (5.23)$$

Como consequência, fazendo o determinante da matriz representada pela Equação (5.23) igual a zero, obtém-se a seguinte restrição adicional:

$$\mu \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} - \varepsilon \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} = 0 \quad (5.24)$$

Cabe destacar que a Equação (5.24) representa a ação de controle quando a restrição do arco singular está ativa e que constitui um sistema de índice 2.

5.3.1.2 Chaveamento entre Modelos

Durante a resolução do problema de controle ótimo proposto, a ação de controle que conduz ao arco singular, Equação (5.20), pode tornar-se ativa em algum tempo. Logo, a resolução permanecerá sobre a região de arco singular até que alguma restrição seja atingida, que para este exemplo específico corresponde ao volume máximo do biorreator. O problema definido deste modo constitui um problema de índice variável (FEEHERY e BARTON, 1998), conforme apresentado na Figura 5.5.

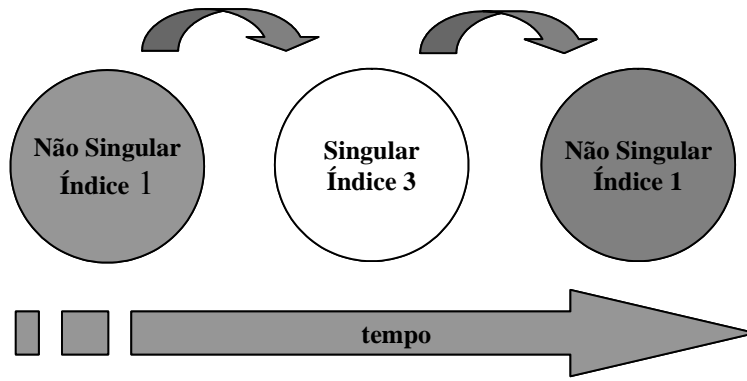


Figura 5.5 – Variação do índice Diferencial sob a Trajetória Ótima.

O sistema de índice 1 é então representado, inicialmente, pelas Equações (5.12) a (5.18) e paralelamente é avaliado o sinal da Equação (5.24) (utilizando a abordagem de CARVER, 1978). O arco singular é considerado ativo quando o valor da equação for igual a zero. Como consequência, o novo sistema, agora de índice 3, é acrescido da restrição Equação (5.24) que é válida até o volume atingir o seu valor máximo.

Na proposta apresentada para o chaveamento (Capítulo 4), a passagem entre os modelos é realizada por intermédio de funções regularizadoras, de forma suave e sem a necessidade de reinicialização. A função de regularização utilizada neste exemplo é a forma generalizada da Equação (3.12). Cabe ressaltar que outra função de regularização também poderia ser utilizada sem alteração substancial na resposta. A função regularizadora utilizada neste exemplo (VIEIRA e BISCAIA JR, 2002) tem então a seguinte forma:

$$\eta(\Delta t) = 1 - \exp\left(-3 \cdot \frac{\Delta t}{\tau}\right) \left(1 + 3 \cdot \frac{\Delta t}{\tau} + \frac{9}{2} \cdot \left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)^2\right) \quad (5.25)$$

onde o parâmetro τ , expressa o erro associado à regularização da derivada.

A Equação (5.26) representa a soma ponderada dos três sistemas representados na Figura 5.5, onde o peso é 0 ou 1 dentro do intervalo de integração. O novo sistema pode então ser descrito pelas Equações (5.12) a (5.18) mais uma equação algébrica adicional que pode representar o sistema de índice 1, quando o arco singular está inativo, e o sistema de índice 3, quando o arco singular está ativo.

$$\eta(\nabla t) \cdot (u - u_c) + (1 - \eta(\nabla t)) \cdot \left(\mu \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} - \varepsilon \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_3} \right) = 0 \quad (5.26)$$

Para a resolução numérica do problema de índice variável foi empregado o código PSIDE (LIOEN *et al.*, 1998). O código resolve sistemas com índice não maior

que 3, bastando apenas indicar o índice relativo a cada uma das variáveis presente no modelo. Neste caso, os índices diferenciais adotados para as variáveis $[x_1 \ x_2 \ x_3 \ u]$ foram $[1 \ 1 \ 1 \ 3]$. O conjunto de condições iniciais e os respectivos valores das constantes utilizadas na resolução do problema são apresentados na Tabela 5.4 (HONG, 1986).

Como se pode observar na Figura 5.6, a ação de controle, inicialmente na condição mínima, percorreu a trajetória de tempo até a restrição de arco singular torna-se ativa. Neste instante, o sistema (que era de índice 1) foi chaveado para o sistema de índice 3. A solução ótima percorreu o arco singular até atingir a restrição de volume máximo. As Figuras 5.7 e 5.8 apresentam os resultados obtidos para as massas de células, produto e o perfil de volume obtido após a ação de controle.

Tabela 5.4: Condições Iniciais e Constantes Utilizadas.

<i>Variáveis</i>	<i>Valores</i>
x_0	1,0 g/L
S_0	150,0 g/L
P_0	10^{-5} g/L
V_0	10,0 L
u_{sup}	10,0 L
u_{inf}	0,0 L
V_{max}	200,0 L
K_{1p}	16 g/L
K_{2p}	71,5 g/L
K_{1s}	0,22 g/L
K_{2s}	0,44 g/L
Y	0,1
μ_0	$0,408 \text{ h}^{-1}$
g_0	$1,0 \text{ h}^{-1}$
S_f	150 g/L
c	10 g
t_f	62 h

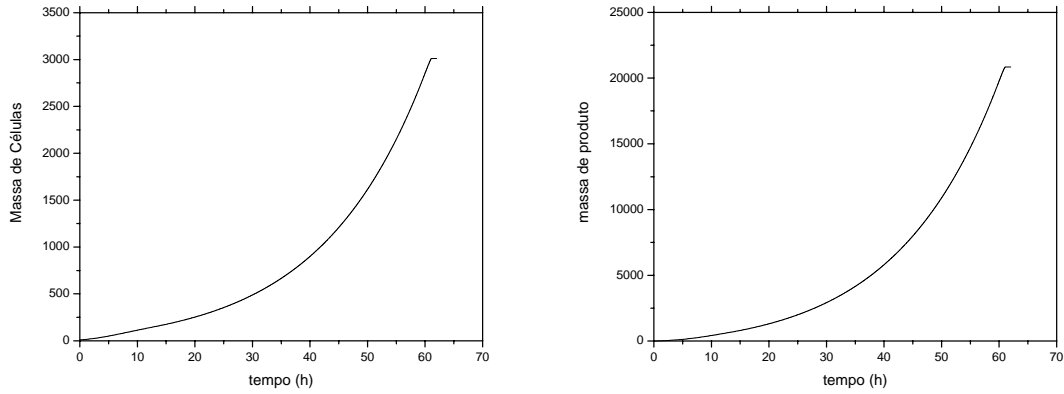


Figura 5.6 - Resultados Obtidos – (a) massa de células; (b) massa de produto.

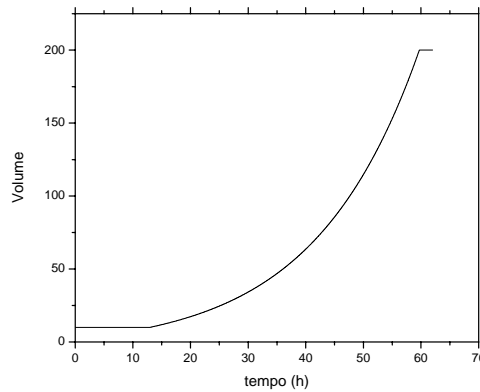


Figura 5.7 - Variação do Volume do Biorreator com o Tempo.

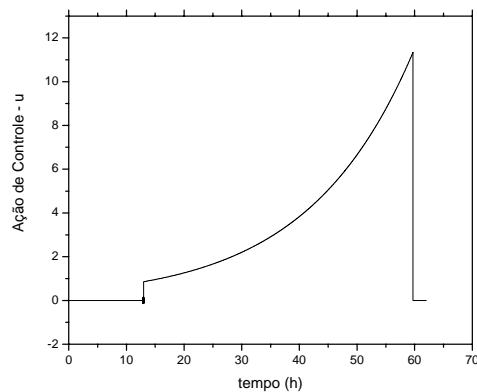


Figura 5.8 - Ação de Controle sob a Trajetória Ótima.

Os resultados obtidos apontam para o sucesso das propostas neste trabalho. Cabe destacar que a alternativa apresentada por VIEIRA e BISCAIA JR. (2001) e utilizada neste trabalho facilitou, em muito, a resolução do problema. As dificuldades inerentes à

solução do problema de índice variável foram superadas sem a necessidade de manipulações excessivas, como as apresentadas na literatura. Neste problema, em especial, apenas uma ação de controle foi utilizada. No entanto, o ferramental numérico aqui proposto pode ser estendido a múltiplas ações de controle.

Apesar do exemplo original datar de 1986, foi apenas neste trabalho que o mesmo foi classificado como um problema de índice variável. Os resultados obtidos motivaram a apresentação deste exemplo na *ESCAPE 15* com o título de *Strategies for Numerical Integration of Discontinuities DAE Models* (APÊNDICE B).

5.3.2 Problema de Controle Ótimo com Restrições de Desigualdade nas Variáveis de Estado

Este problema foi originalmente apresentado por JACOBSON e LELE (1969) e consiste na minimização da variável de estado x_3 no tempo final ($t_{\text{final}} = 1$), manipulando a variável de controle $u(t)$ que está limitada entre $-3,0$ e 20 , respectivamente. O problema completo é apresentado na Tabela 5.5.

Tabela 5.5: Formulação completa do problema proposto por JACOBSON e LELE (1969).

$$\begin{aligned} & \underset{u(t)}{\text{Maximizar}} \quad x_3(t_f) \\ & \text{Sujeito a :} \end{aligned} \tag{5.27}$$

$$\dot{x}_1 = x_2, \text{ com } x_1(0) = 0 \tag{5.28}$$

$$\dot{x}_2 = -x_2 + u(t), \text{ com } x_2(0) = -1 \tag{5.29}$$

$$\dot{x}_3 = x_1^2 + x_2^2 + 0,005 \cdot u(t)^2, \text{ com } x_3(0) = 0 \tag{5.30}$$

$$g(x_2, u, t) = x_2(t) - 8 \cdot (t - 0,5)^2 + 0,5 \leq 0 \tag{5.31}$$

$$u_{\text{inf}} \leq u(t) \leq u_{\text{sup}} \tag{5.32}$$

Conforme apresentado no Capítulo 4, a idéia principal da metodologia proposta é suavizar, durante a resolução numérica, a transição entre as regiões limitadas e não limitadas pela restrição. Neste procedimento é preciso: (a) a seleção da função de regularização e (b) determinação das condições que descrevem a região viável e inviável para busca da solução.

No presente exemplo, a desigualdade é convertida em uma nova equação algébrica, y_{efe} que é igual à variável de estado x_2 , quando a restrição de desigualdade está inativa, e igual a $8(t - 0,5)^2 - 0,5$, quando a restrição de desigualdade está ativa. Além disso, quando a restrição está ativa, a derivada x_2 no tempo, representada pelo lado direita da Equação (5.29), deve ser igual a $16(t - 0,5)$, o que resulta em uma restrição adicional para a variável de controle. Neste exemplo, a soma das condições que caracterizam a região viável e inviável é representada pelas Equações (5.33) e (5.34):

$$y_{efe} = \eta[g(x_2, u, t), \xi] \cdot x_2 + [1 - \eta[g(x_2, u, t), \xi]] \cdot [8 \cdot (t - 0,5)^2 - 0,5] \quad (5.33)$$

onde η é a função de regularização definida no Capítulo 3.

$$u_{efe} = \eta[g(x_2, u, t), \xi] \cdot u + [1 - \eta[g(x_2, u, t), \xi]] \cdot [8 \cdot (t - 0,5)^2 - 0,5 + 16 \cdot (t - 0,5)] \quad (5.34)$$

A variável de estado x_2 e de controle $u(t)$ são substituídos, nas Equações (5.28) e (5.30), pelas novas variáveis y_{efe} e u_{efe} . Então, um novo sistema dinâmico é reconstruído com as novas Equações (5.28) a (5.30) e as Equações (5.33) e (5.34). Para a integração numérica do sistema de EADs correspondente, foi utilizado o código PSIDE (LIOEN *et al.*, 1998). Cabe ressaltar que o problema original possui índice diferencial igual a 2 (quando a restrição está ativa), no entanto na formulação proposta, o índice diferencial apresenta-se como igual a 1 durante todo o intervalo de integração. O perfil inicial adotado para variável de controle foi a Equação (5.7), discretizada em 14 elementos. Na resolução do problema de otimização, utilizou-se a subrotina de otimização DBCONF (IMSL). Os resultados obtidos são apresentados nas Figuras 5.9 e 5.11.

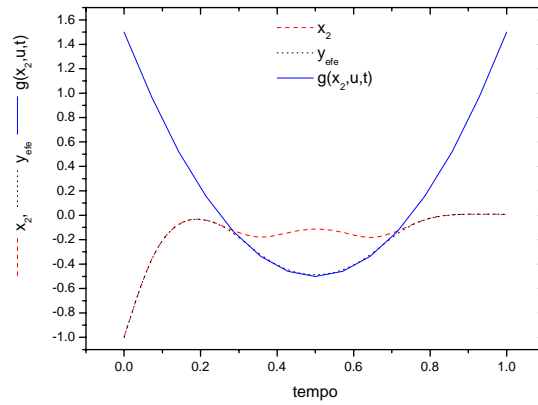


Figura 5.9 - Comparativos dos resultados obtidos para as variáveis de estado x_2 e y_{efe} .

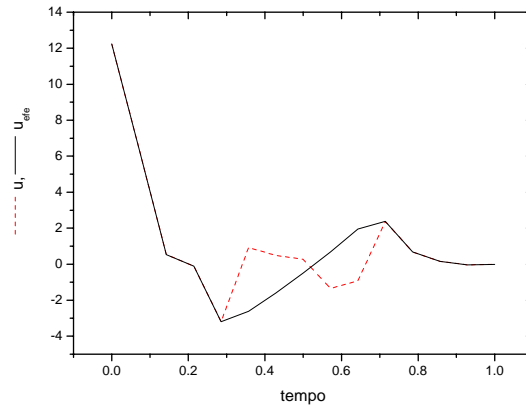


Figura 5.10 - Comparativos dos resultados obtidos para as variáveis de controle u e u_{efe} .

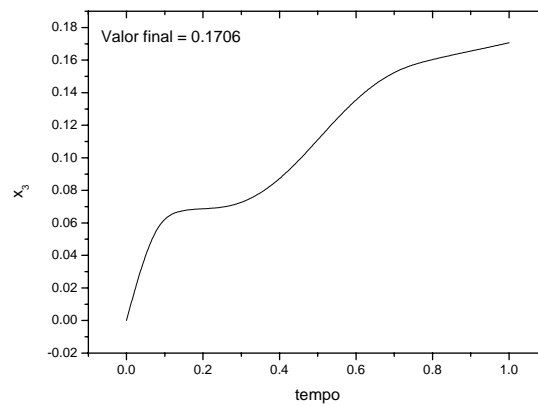


Figura 5.11 - Resultado obtido para a variável x_3 (variável maximizada).

Pode-se observar na Figura 5.10 que a variável de controle, $u(t)$, continua sendo alterada de modo independente. Logo, neste intervalo, a ação de controle depende somente de u_{efe} , que cessa após a desativação da restrição. Vale aqui destacar que este efeito da modificação automática da variável de controle não altera o custo computacional de resolução do problema (que para este problema foi de aproximadamente 15 segundos).

Em uma segunda formulação, JACOBSON e LELE (1969) modifica a forma funcional da restrição de desigualdade, representada pela Equação (5.35). Uma análise do sistema dinâmico mostra que, quando esta restrição está ativa, o índice do sistema torna-se igual a 3.

$$g(x_1, u, t) = x_1(t) - 8 \cdot (t - 0,5)^2 + 0,5 \leq 0 \quad (5.35)$$

De uma forma semelhante ao exemplo anterior, a desigualdade é convertida em uma nova equação algébrica, y_{efe1} que é igual a variável de estado x_1 , quando a restrição de desigualdade está inativa, e igual a $8(t - 0,5)^2 - 0,5$, quando a restrição de desigualdade está ativa. Porém, quando a restrição está ativa, a derivada x_2 no tempo, representada pelo lado direito das Equações (5.29), deve ser igual respectivamente a $16(t - 0,5)$ o que resulta em duas novas restrições adicionais, uma para a variável de controle, expressa por $16t + 8,0$ e outra para a variável de estado x_2 . Desta forma, as condições que caracterizam a região viável e inviável são representadas pelas Equações (5.36), (5.37) e (5.38):

$$y_{efe1} = \eta[g(x_1, u, t), \xi] \cdot x_1 + [1 - \eta[g(x_1, u, t), \xi]] \cdot [8 \cdot (t - 0,5)^2 - 0,5] \quad (5.36)$$

$$y_{efe2} = \eta[g(x_1, u, t), \xi] \cdot x_2 + [1 - \eta[g(x_2, u, t), \xi]] \cdot [16 \cdot (t - 0,5)] \quad (5.37)$$

$$u_{efe} = \eta[g(x_1, u, t), \xi] \cdot u + [1 - \eta[g(x_2, u, t), \xi]] \cdot [16 \cdot t + 8] \quad (5.38)$$

As variáveis de estado x_1 e x_2 , e de controle, $u(t)$, são substituídas apenas na Equação (5.30), pelas novas variáveis y_{efe1} e y_{efe2} e u_{efe} . Um novo sistema dinâmico é reconstruído com as novas Equações (5.28) a (5.30) e as Equações (5.36), (5.37) e (5.38). Os resultados obtidos são apresentados nas Figuras 5.12, 5.13 e 5.14.

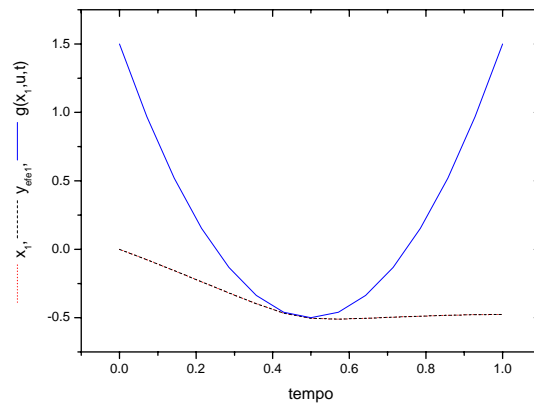


Figura 5.12 - Comparativos dos resultados obtidos para as variáveis de estado x_1 e y_{efe1} .

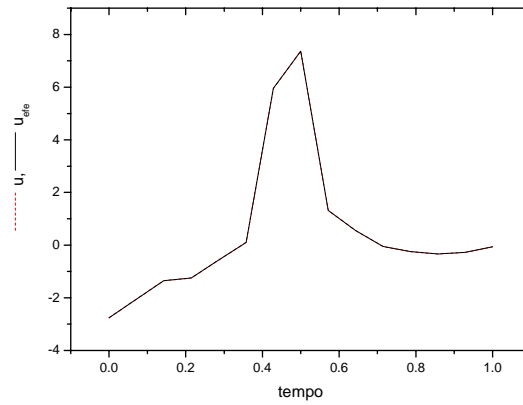


Figura 5.13 - Comparativos dos resultados obtidos para as variáveis de controle u e u_{efe} .

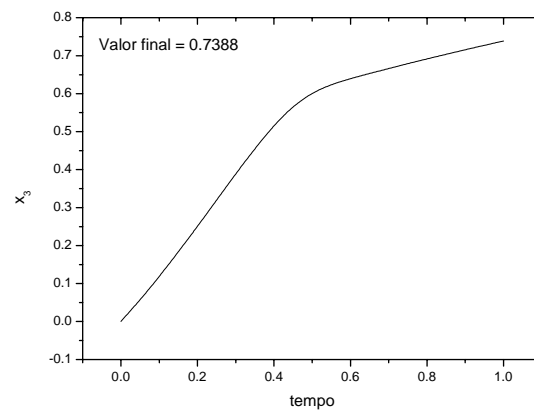


Figura 5.14 - Resultado obtido para a variável x_3 (variável maximizada).

A Figura 5.12 mostra que a ativação da restrição ocorre em um pequeno intervalo de tempo. Como consequência, os perfis das variáveis $u(t)$ e u_{efe} tornaram-se indistinguíveis, se comparados aos perfis apresentados na Figura 5.10 (o que enaltece o perfil adotado para variável de controle, Equação 5.7).

O tempo gasto para resolução do deste problema foi de aproximadamente 10 segundos e os valores finais obtidos são concordantes com os valores obtidos pela literatura (JACOBSON e LELE, 1969 e, FEEHERY, 1998).

5.3.3 Oscilador de Van der Pol com Restrição de Desigualdade na Variável de Estado

Este problema foi apresentado por VASSILIADIS *et al.* (1994b) e consiste na minimização da variável x_3 no tempo final ($t_{final} = 5$), manipulando a variável de controle $u(t)$, limitada entre -0,3 e 1,0, respectivamente. O problema ainda apresenta uma restrição de desigualdade na variável de estado x_1 que pode elevar o índice diferencial do sistema para 2. A Tabela 5.6 apresenta a formulação completa do problema.

Tabela 5.6: Formulação completa do problema proposto por VASSILIADIS *et al.* (1994b)

$\text{Maximize}_{u(t)} x_3(t_f)$	(5.39)
Sujeito a :	
$\dot{x}_1 = (1 - x_2^2) \cdot x_1 - x_2 + u(t)$, com $x_1(0)=0$	(5.40)
$\dot{x}_2 = x_1$, com $x_2(0)=1$	(5.41)
$\dot{x}_3 = x_1^2 + x_2^2 + u(t)^2$, com $x_3(0)=0$	(5.42)
$g(x_1) = -x_1(t) - 0,4 \leq 0$	(5.43)
$u_{inf} \leq u(t) \leq u_{sup}$	(5.44)

Neste exemplo, quando a restrição, representada pela Equação (5.43) está ativa, a derivada da variável x_1 no tempo (representada pelo lado direito de Equação 5.40) deve ser nula, o que conduz a uma restrição adicional para a variável de controle. Conseqüentemente, duas novas equações algébricas são acrescentadas ao sistema original para representar as restrições na variável de estado e de controle.

$$y_{efe} = \eta[g(x_1), \xi] \cdot x_1 + [1 - \eta[g(x_1), \xi]] \cdot (-0,4) \quad (5.45)$$

$$u_{efe} = \eta[g(x_1), \xi] \cdot u + [1 - \eta[g(x_1), \xi]] \cdot [x_2 + 0,4 \cdot (1 - x_2^2)] \quad (5.46)$$

A variável de estado, x_1 , e de controle, $u(t)$, são substituídos nas Equações (5.41) e (5.42), pelas novas variáveis y_{efe} e u_{efe} . Assim, o novo sistema dinâmico representado pelas Equações (5.40) a (5.42) e as Equações (5.45) e (5.46) são integrados numericamente pelo o código PSIDE (LIOEN *et al.*, 1998). Da mesma forma que o exemplo anterior, o perfil inicial adotado para variável de controle foi a Equação (5.7), também discretizada em 14 elementos. O problema de otimização foi resolvido utilizando a subrotina de otimização DBCONF (IMSL), sendo os resultados obtidos apresentados nas Figuras 5.15, 5.16 e 5.17.

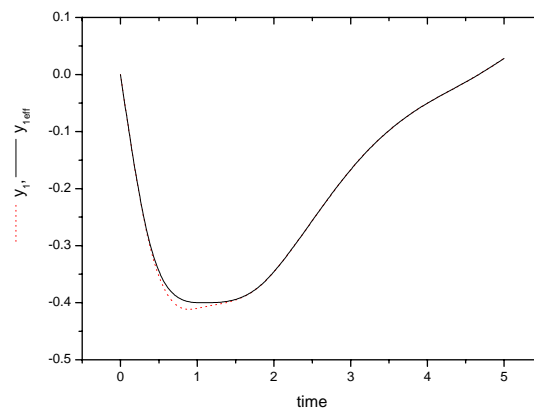


Figura 5.15 - Comparativos dos resultados obtidos para as variáveis de estado x_1 e y_{efe} .

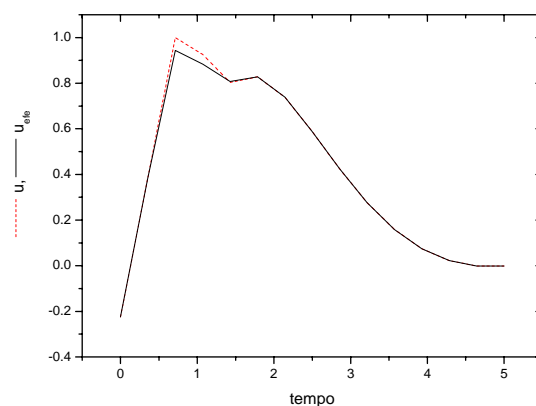


Figura 5.16 - Comparativos dos resultados obtidos para as variáveis de controle u e u_{efe} .

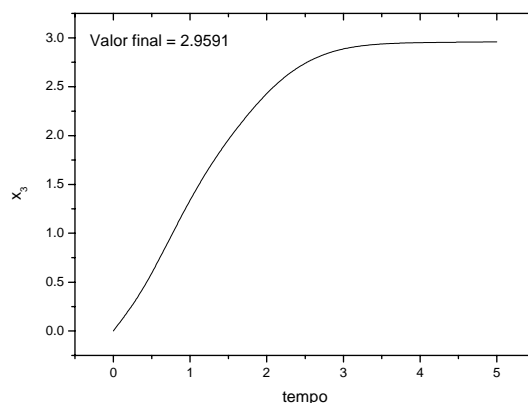


Figura 5.17 - Resultado obtido para a variável x_3 (variável maximizada).

Observa-se na Figura 5.15 que, após a ativação da restrição de desigualdade, a variável de estado não regularizada, x_1 , ultrapassa os valores estabelecidos pela restrição (x_1 deve ser maior ou igual a $-0,4$). Este comportamento se deve à atuação do controle $u(t)$ sobre a variável x_1 (vale lembrar que $u(t)$ não foi substituído na Equação 5.40 por u_{efe}) que após um intervalo de tempo, a conduz a valores superiores ao estabelecido pela restrição. Para este exemplo, o tempo total gasto para resolução do problema foi de aproximadamente 8 segundos, sendo o valor obtido para função objetivo igual ao publicado por VASSILIADIS *et al.* (1994b).

5.3.4 Problema de Controle Ótimo do Reator em Semi-Batelada com Restrição de Desigualdade na Pressão

Este exemplo foi apresentado por FEEHERY (1998) e HUANG *et al.* (2002) e envolve uma reação em batelada (o reator opera isotermicamente) com limite máximo na pressão de operação. Este limite foi imposto com intuito de aumentar o rendimento do produto de interesse. A reação em questão é representada pela Equação (5.47). A formulação completa do problema de otimização é apresentada na Tabela 5.7.



Os valores das constantes de reação, volume e temperatura do reator, apresentados por HUANG *et al.* (2002), são respectivamente: $k_1 = 0,8 \text{ (h}^{-1}\text{)}$, $k_2 = 0,02 \text{ m}^3\text{/(mol h)}$, $k_3 = 0,003 \text{ m}^3\text{/(mol h)}$, $V = 1,0 \text{ m}^3$ e $T = 400 \text{ K}$. Para este exemplo, o tempo de reação considerado foi de 2 horas.

Tabela 5.7: Formulação completa do problema proposto por FEEHERY (1998) e HUANG *et al.* (2002).

Maximize $C_3(t_f)$	(5.50)
Sujeito a :	
$\dot{C}_1 = -k_1 \cdot C_1 + k_2 \cdot C_2 + \frac{F(t)}{V} - k_3 \cdot C_1 \cdot C_2$, com $C_1(0)=100$	(5.51)
$\dot{C}_2 = k_1 \cdot C_1 - k_2 \cdot C_2 - k_3 \cdot C_1 \cdot C_2$, com $C_2(0)=0$	(5.52)
$\dot{C}_3 = k_3 \cdot C_1 \cdot C_2$, com $C_3(0)=0$	(5.53)
$N = V \cdot (C_1 + C_2 + C_3)$	(5.54)
$P \cdot V = N \cdot R \cdot T$	(5.55)
$P \leq 340000$	(5.56)
$0,0 \leq F(t) \leq 8,5$	(5.57)

Neste exemplo, o sistema de equações apresenta índice diferencial igual a 2 depois da ativação da restrição. Utilizando a metodologia proposta, duas novas equações algébricas são acrescentadas ao sistema original para representar as restrições na variável de estado e de controle (determinada após uma análise do sistema de equações), ou seja:

$$P_{efe} = \eta[g(P), \xi] \cdot P + [1 - \eta[g(P), \xi]] \cdot (340000) \quad (5.48)$$

$$F_{efe} = \eta[g(P), \xi] \cdot F + [1 - \eta[g(P), \xi]] \cdot [k_3 \cdot C_1 \cdot C_2 \cdot V] \quad (5.49)$$

A variável de controle, $F(t)$, é substituída na Equação (5.51), pela nova variável F_{efe} . O novo sistema dinâmico representado pelas Equações (5.48) a (5.57) foi integrado pelo PSIDE (LIOEN *et al.*, 1998). Para o perfil inicial da variável de controle, também utilizou-se a Equação (5.7), aqui discretizada com 15 elementos. Os resultados obtidos são apresentados nas Figuras 5.18 a 5.21.

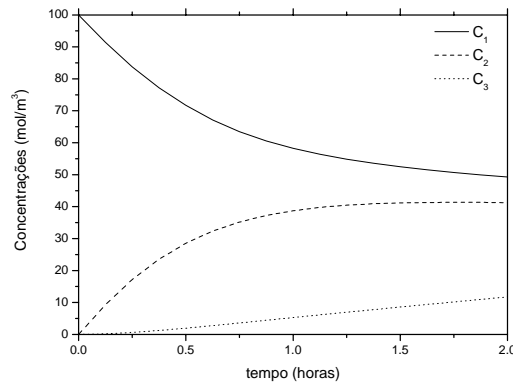


Figura 5.18 - Perfis ótimos de concentração.

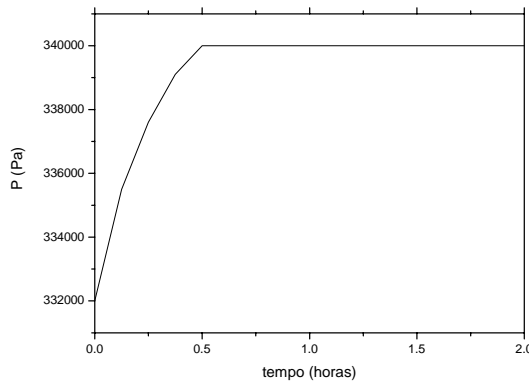


Figura 5.19 - Perfil de pressão do reator.

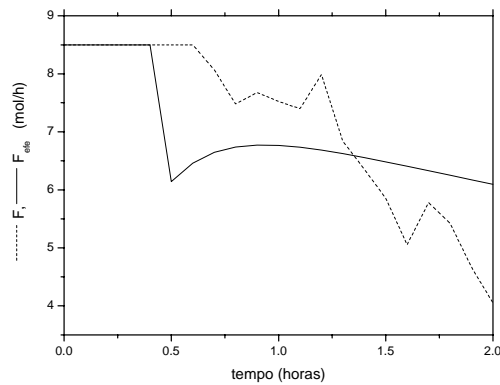


Figura 5.20 - Comparativos dos resultados obtidos para as variáveis de controle F e F_{efe} .

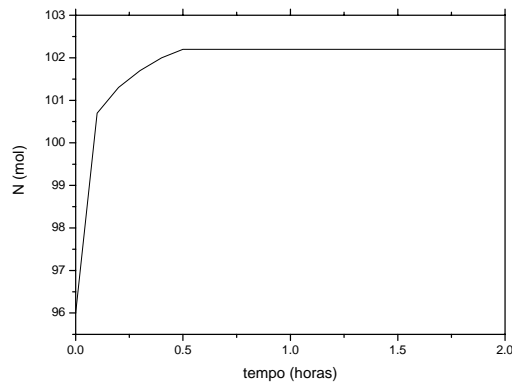


Figura 5.21 - Variação do número de moles total.

Pode-se observar na Figura 5.19 que após 0,5 horas de operação (aproximadamente), o reator atinge a pressão estabelecida. Neste instante, a variável de controle passa a ser influenciada somente por F_{efe} (Equação 5.49), permanecendo assim até o final da reação. Cabe ressaltar que o valor ótimo obtido para a função objetivo foi exatamente o mesmo obtido por FEEHERY (1998), neste caso o valor final obtido para a função objetivo foi 11,7284 com o tempo de CPU aproximado de 5 segundos (mesmo valor obtido por FEEHERY, 1998).

5.4 Conclusões

Uma avaliação dos resultados obtidos em todos os exemplos abordados (com restrições de desigualdade) mostra que a metodologia proposta para manipulação de

restrições depende das particularidades do modelo (taylor made). Porém, a facilidade de manipulação das restrições e o reduzido esforço computacional enaltecem a abordagem. Cabe destacar que o tempo computacional gasto para todos os exemplos com restrições não foi superior a 15 segundos, sendo os resultados obtidos iguais aos apresentados pela literatura. Como contribuição, os bons resultados obtidos com a nova metodologia resultaram em um artigo apresentado *Proceedings of 16^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 16* (neste caso, com uma apresentação oral).

5.5 Referências Bibliográficas deste Capítulo

- ESPOSITO, R. W., FLOUDAS, C. A., 2000, “Deterministic Global Optimization in Nonlinear Optimal Control Problems”, *Journal of Global Optimization*, v. 17, n. 1/4, pp. 97–126.
- FEEHERY, W. F., 1998, *Dynamic Optimization with Path Constraints*, Doctor Philosophy in Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology. Dept. of Chemical Engineering, EUA.
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1996, “Dynamic Simulation and Optimization with Inequality Path Constraints”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 20, Suppl., pp. S707-S712.
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1998, “Dynamic Optimization with State Variable Path Constraints”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 22, n. 9, pp.1241-1256.
- HAUNG, Y. J., REKLAITIS, G. V., VENKATASUBRAMANIAN, V., 2002, “Model decomposition based method for solving general dynamic optimization problems”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 26, pp. 863 – 873.
- HONG, J., 1986, “Optimal Substrate Feeding Policy for a Fed Batch Fermentation with Substrate and Product Inhibition Kinetics”, *Biotechnology and Bioengineering*, v. 28, pp. 1421-1431.
- IMSL, DNCONF, Visual Numerics Inc., San Ramon, California, EUA.

- KENNEDY, J. e EBERHART, R., 1995, “Particle Swarm Optimization”, *Proceedings IEEE International Conference Neural Networks*, Perth, Australia, pp. 1942-1948.
- JACOBSON, D. H., LELE, M. M., 1969, “A Transformation Technique for Optimal Control Problems with a State Variable Inequality Constraint”, *IEEE Trans. Autom. Control*, v. 14, pp. 457–464.
- LIOEN, W. M., DE SWART, J. J. B., VAN DER VEEN, W. A., 1998, “[PSIDE](http://www.cwi.nl/cwi/projects/PSIDE) users guide”, Report MAS-R9834, C W I, Amsterdam, Holanda. URL: <http://www.cwi.nl/cwi/projects/PSIDE>.
- OLIVEIRA, J. A., 2006, *Oligomerização E Policondensação Em Estado Fundido Do Poli(Tereftalato De Etileno) - Estudo Experimental E De Modelagem Da Curva De Distribuição De Pesos Moleculares*, Tese de Doutorado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- PETZOLD, L.R., 1989, *DASSL: A Differential-Algebraic System Solver*, Computer and Mathematical Research Division, Lawrence Livermore National Laboratory, CA.
- POLLARD, G. P., SARGENT, R. W. H., 1970, “Off line Computation of Optimum Controls for a Plate Distillation Column”, *Automatica*, v. 6, pp. 59 - 76.
- PONTRYAGIN, L. S., BOLTYANSKII, V. G., GAMKRELIDZE, R. V., MISCHENSKO, Y.F., 1963, *The Mathematical Theory of Optimal Processes*, 1º ed, Interscience, New York, EUA.1963.
- SCHLEGEL, M., STOCKMANN, K., BINDER, T., MARQUARDT, W., 2005, “Dynamic optimization using adaptative control vector parameterization”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, n. 8, pp. 1731 – 1751.
- SOUZA, D. F. S., VIERA, R. C., BISCAIA JR., E. C., 2005, “Strategies for Numerical Integration of Discontinuous DAE Models”, In: *Proceedings of 15º European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 15*, Barcelona.
- SOUZA, D. F. S., VIERA, R. C., BISCAIA JR., E. C., 2006, “Floating Index of Inequality Constrained DAE Systems”, In: *Proceedings of 16º European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 16*, Holanda.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994a, “Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems. 1. Problems without Path

Constraints”, *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, pp. 2111-2122.

VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994b, “Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems 2. Problems with Path Constraints”, *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, pp. 2123-2133.

VIEIRA, R.C., BISCAIA JR., E.C., 2001, "Dynamic Optimization of Fed-batch Reactors Based on Automatic Differentiation Tools", In: *Proceedings of 11^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 11*, Denmark.

VIEIRA, R. C., BISCAIA JR., E. C., 2002, “Direct Methods for Consistent Initialization of DAE Systems”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 25, pp. 1299-1311.

Capítulo 6

Considerações Finais e Sugestões

6.1 Metas Atingidas

Neste trabalho de tese utilizou-se uma sistemática objetiva para os estudos de otimização dinâmica de sistemas algébricos-diferenciais. O enfoque principal foi a inserção e o tratamento das restrições no próprio modelo dinâmico de processo (integração de sistemas na presença de descontinuidades). Para este tipo de abordagem, foram empregadas funções regularizadoras que permitiram transpor as descontinuidades sem a necessidade de reintegração do sistema, conforme apresentado no Capítulo 3. Em todos os exemplos estudados obteve-se sucesso na integração dos modelos disjuntivos. Como principais conclusões desta etapa destacam-se: a facilidade de implementação e adaptação da função de regularização aos diferentes tipos de disjunções dos modelos utilizados e o baixo custo computacional da abordagem (se comparado a outros métodos de resolução). Como contribuição, parte deste trabalho foi publicado na revista **Drying Technology** (APÊNDICE B).

A metodologia desenvolvida no Capítulo 3 foi adaptada a problemas de otimização dinâmica com restrições (os problemas de otimização dinâmica com restrições são, sob certos aspectos, semelhantes aos problemas de integração de modelos na presença de descontinuidades) principalmente em problemas onde ocorre o fenômeno de variação do índice diferencial do sistema dinâmico. Para os casos estudados (ver Capítulo 5), foi possível obter as soluções ótimas (os valores obtidos foram concordantes com os resultados apresentados pela literatura) e que permitiram chegar às seguintes conclusões: (i) redução do custo computacional devido à não

necessidade de reinicialização do sistema após a ativação das restrições de igualdade e/ou desigualdade; (ii) após a ativação, o modelo torna-se autônomo, ou seja, não há interdependência com o otimizador; retornando somente após a desativação da restrição e (iii) apesar de casuística, a metodologia é de fácil entendimento e implementação (se comparado a outras técnicas de manipulação de restrições em problemas de otimização dinâmica). Estes resultados motivaram os trabalhos publicados no *Proceedings of 15^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 15* e no *Proceedings of 16^o European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE 16* (neste caso, com uma apresentação oral).

Vale ressaltar os estudos realizados para a seleção da abordagem de resolução do problema de otimização dinâmica, com ênfase na abordagem seqüencial. Para estes estudos, foram propostas duas formas funcionais para a variável de controle e os resultados obtidos foram bastante satisfatórios.

6.2 Sugestões

Nos casos estudados, foi possível observar que a escolha da forma funcional para a variável de controle pode conduzir a melhores resultados. A escolha deve ser guiada de modo a satisfazer o equilíbrio entre uma forma funcional matematicamente simples, porém com boas propriedades de adequação. Esse “jogo” nem sempre é analisado pela literatura, ou seja, as formas funcionais são complexas ou com muitos parâmetros de ajuste. Um estudo mais aprofundado e que permita guiar a escolha das formas funcionais pode ser um ponto importante para a resolução dos problemas de otimização dinâmica.

Na resolução de alguns dos problemas de índice variável, foi necessário a diferenciação da variável de controle. Esta diferenciação foi necessária devido ao tipo de código de integração utilizado (o sistema foi integrado com índice não superior a 1). Estes problemas poderiam ser resolvidos sem a necessidade de diferenciação da variável de controle (conforme observado no exemplo do controle singular do biorreator). Este enfoque requer maiores detalhes que envolvem a reinicialização do código de integração e do otimizador, sendo considerado uma extensão do trabalho.

APÊNDICE A

Desdobramentos

O estudo sobre as ferramentas numéricas que auxiliam a otimização resultou em um dos desdobramentos da tese: a utilização de equações de sensibilidade paramétrica em problemas de estimação de parâmetros. A potencialidade das equações de sensibilidade é avaliada em dois exemplos de interesse e os resultados obtidos são confrontados com a abordagem tradicional implementada nos códigos de estimação.

1 Introdução

A sensibilidade existente nas variáveis de estado a variações dos parâmetros e a correlação entre os mesmos são duas características de grande importância para o desempenho de algoritmo de estimação de parâmetro. A análise de sensibilidade é feita através dos chamados *coeficientes de sensibilidade paramétrica* e sua determinação fornece informações que auxiliam à gênese de modelos simplificados e permitem a avaliação prévia da correlação existente entre os parâmetros (CARACOTSIOS e STEWART, 1985). Estes coeficientes são na realidade as derivadas parciais das variáveis de estado em relação a cada um dos parâmetros e podem ser calculados em acordo com dois procedimentos distintos (BARD, 1974):

Perturbação Numérica: Consiste na aproximação das derivadas via diferenças finitas. São comumente empregadas aproximações de 1^o e 2^o

ordem. O código ESTIMA (NORONHA *et al.*, 1993) emprega diferenças centrais de 2^o ordem, como segue:

$$\left. \frac{dy}{dp} \right|_p \cong \frac{y|_{p+\Delta p} - y|_{p-\Delta p}}{2\Delta p} \quad (\text{A.1})$$

Nesta técnica, é inevitável o erro de truncamento da derivação. Além disto, são necessários “chutes iniciais” não só para todas as variáveis (parâmetros) como também para as perturbações, Δp . O método de diferenciação é muito sensível ao valor de p especialmente na vizinhança do ótimo, onde $\frac{dy}{dp}$ assume valores bastante pequenos. O custo computacional associado ao método é da ordem de $2n_p$ (duas vezes o número de parâmetros do sistema original).

Integração das Equações de Sensibilidade: Neste procedimento os coeficientes de sensibilidade são obtidos por diferenciação das equações do modelo. Para ilustrar esta metodologia, o seguinte sistema de equações algébrico-diferenciais (EAD) é considerado:

$$F(t, y, y', p) = 0, \quad y(0) = y_0 \quad (\text{A.2})$$

As equações de sensibilidade são obtidas diferenciando Equação (A.2) em relação aos n_p parâmetros do modelo, ou seja:

$$\frac{\partial F}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial p} + \frac{\partial F}{\partial y'} \frac{\partial y'}{\partial p} + \frac{\partial F}{\partial p} = 0 \quad (\text{A.3})$$

Definindo-se:

$$s_i \equiv \frac{\partial y}{\partial p} \quad (\text{A.4})$$

Pode-se mostrar que:

$$\frac{\partial y'}{\partial p} = s'_i \quad (\text{A.5})$$

Logo, a Equação (A.3) pode ser reinterpretada como:

$$\frac{\partial F}{\partial y} s_i + \frac{\partial F}{\partial y'} s'_i + \frac{\partial F}{\partial p} = 0, \quad i=1, \dots, n_p \quad (\text{A.6})$$

Este procedimento produz um sistema de equações adicionais, Equação (A.6), de dimensão $n_s = n * n_p$.

As derivadas encontradas na Equação (A.6) ($\partial F/\partial y$, $\partial F/\partial y'$, $\partial F/\partial p$), podem ser obtidas por dois métodos. O primeiro método é a determinação das derivadas por *perturbação numérica* via diferenças finitas (central ou retroativa), que é a base do código DASSLSO (MALY e PETZOLD, 1996). No segundo método as matrizes $\partial F/\partial y$, $\partial F/\partial y'$ e $\partial F/\partial p$ são determinadas através de diferenciação automática/simbólica. As variáveis s_i são consideradas como novas variáveis de estado do sistema, sendo suas equações de definição integradas em conjunto com as equações do sistema original. Nas duas abordagens, o custo computacional associado é proporcional à dimensão do sistema aumentado (de dimensão igual a $n+n_s$).

Segundo BARD (1974) o esforço computacional para os dois métodos é praticamente o mesmo, mas a exatidão obtida pela integração das equações de sensibilidade é muito maior e o erro obtido nas estimativas dos parâmetros é mais facilmente controlado. O autor ressalta a grande dificuldade em construir o sistema aumentado, mas convém destacar que estas conclusões foram obtidas em 1974, antes da consolidação das técnicas de diferenciação computacional, também chamada de diferenciação automática.

Neste capítulo, as duas abordagens para a geração das equações de sensibilidade são comparadas. Na primeira, utilizou-se a técnica perturbação numérica já anexada ao código ESTIMA (NORONHA *et al.*, 1993). Para segunda abordagem, são aplicadas as técnicas de diferenciação simbólica na construção das equações de sensibilidade. As

matrizes $\partial F/\partial y$, $\partial F/\partial y'$ e $\partial F/\partial p$ são geradas por computação simbólica no *software* Maple® (Versão 5) e anexadas ao modelo de estimação de parâmetros.

2 Avaliação das Equações de Sensibilidade no Procedimento de Estimação de Parâmetros

Os procedimentos citados para geração das equações de sensibilidade são incorporados ao código de estimação de parâmetros ESTIMA (NORONHA *et al.*, 1993). Dois exemplos de estimação, um sistema de EDOs (craqueamento gás-óleo) e um sistema de EADs (reator CSTR de craqueamento) apresentados abaixo, são utilizados na avaliação da técnica proposta.

2.1 Craqueamento do Gás-Óleo

O modelo de craqueamento gás-óleo (MALY e PETZOLD, 1996) é expresso matematicamente por um sistema de EDOs, representado pelas Equações (A.7) e (A.8).

$$\frac{dx_1}{dt} = -(p_1 + p_3)x_1^2 \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{dx_2}{dt} = p_1 x_1^2 - p_2 x_2 \quad (\text{A.8})$$

cujas condições iniciais são: $x_1(0) = 1$ e $x_2(0) = 0$.

O problema apresenta duas equações ($n = 2$) e três parâmetros ($n_p = 3$). O novo sistema, que será resolvido numericamente, deverá apresentar $n(n_p + 1) = 8$ equações. Analiticamente, o sistema é apresentado da seguinte forma:

$$s'_1 = -2s_1(p_1 + p_3)x_1 + x_1^2 \quad (\text{A.9})$$

$$s'_2 = 2s_1p_1x_1 - s_2p_2 + x_1^2 \quad (\text{A.10})$$

$$s'_3 = -2s_3(p_1 + p_3)x_1 \quad (\text{A.11})$$

$$s'_4 = 2s_3p_1x_1 - s_4p_2 - x_2 \quad (\text{A.12})$$

$$s'_5 = -2s_5(p_1 + p_3)x_1 - x_1^2 \quad (\text{A.13})$$

$$s'_6 = 2s_5p_1x_1 - p_2s_6 \quad (\text{A.14})$$

com $s_i(0) = 0$ para $i = 1 \dots 6$.

Neste exemplo, os dados pseudo-experimentais para estimação dos parâmetros foram gerados com a simulação do modelo original. Os valores dos parâmetros para a solução foram: $p_1 = 0.9875$, $p_2 = 0.2566$ e $p_3 = 0.3323$. O sistema foi integrado de $t_0 = 0.0$ a $t_f = 1.0$.

Os valores adotados para os chutes iniciais dos parâmetros foram os mesmos nas duas abordagens e iguais a 1.0. No método de perturbação numérica, devemos fornecer, porém, os valores para as perturbação dos parâmetros, que neste caso foram todas iguais a 10^{-4} . Para avaliar o rumo das estimativas, as derivadas obtidas com a utilização das equações de sensibilidade foram comparadas com as derivadas numéricas obtidas pelo código ESTIMA (NORONHA *et al.*, 1993).

Como pode ser observado na Figura A.1a o valor das estimativas iniciais para os parâmetros são iguais a menos do erro de integração (e derivação numérica). Na Figura A.2b, são apresentados os resultados obtidos na última estimativa. Novamente, os valores são muito próximos. Os resultados finais obtidos da estimação são apresentados na Tabela A.1.

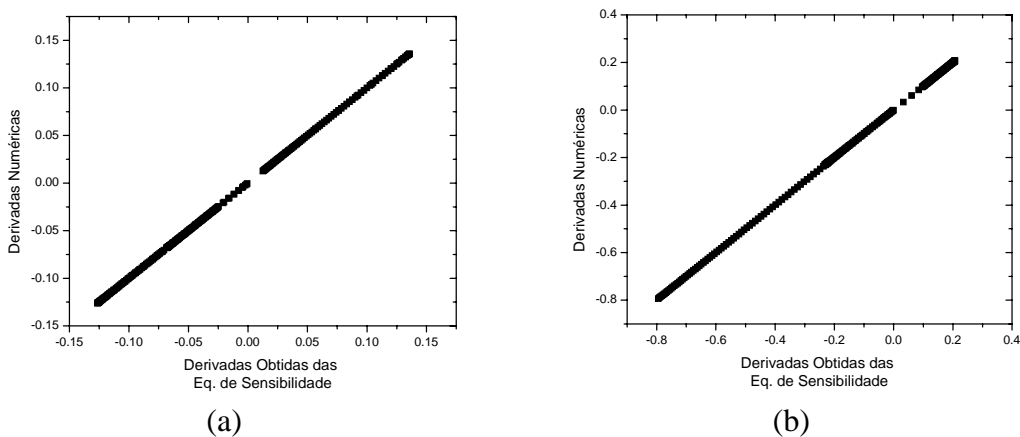


Figura A.1 – Comparação entre as derivadas obtidas numericamente (ESTIMA) e pelas Equações de Sensibilidade – (a) primeira iteração; (b) última iteração.

Tabela A.1: Resultados das Estimativas Finais dos Parâmetros p_1 , p_2 e p_3 .

		<i>Eq. Originais</i>	<i>Eq. Originais e de Sensibilidade</i>
<i>Parâmetros</i>	p_1	0.987486E+00	0.987486E+00
	p_2	0.256604E+00	0.256604E+00
	p_3	0.332279E+00	0.332279E+00
<i>Desvio Padrão</i>	p_1	0.739244E-05	0.741145E-05
	p_2	0.384691E-05	0.385444E-05
	p_3	0.145677E-04	0.145528E-04

Como pode ser observado na Tabela A.1, os valores obtidos dos parâmetros utilizando as equações originais são iguais aos valores obtidos utilizando as equações de sensibilidade, a menos do chute inicial para as perturbações nos parâmetros (necessário quando se utiliza a derivação numérica). Para este exemplo, os tempos computacionais foram essencialmente equivalentes.

2.2 Craqueamento Catalítico do Gás-Óleo

O modelo matemático do reator CSTR para unidade de craqueamento (VIEIRA *et al.*, 2004) é constituído pelas Equações (A.15) a (A.24), que correspondem aos balanços de massa e molar dos diferentes pseudo-componentes na fase gasosa do reator, na partícula de catalisador e no coletor além das equações auxiliares:

$$\frac{d}{dt}(N_i) = F_0 \rho_0(t) a_{0i}(t) - F \rho(T) a_i + (\varepsilon V) R_i(t), \quad i=1, \dots, 6 \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{dS_i}{dt} = (\varepsilon V) \rho \left(\sum_{j=1}^6 K_{C_{6+i,j}} PM_j a_j + \sum_{j=1}^2 K_{C_{6+i,6+j}} S_j \right), \quad i=1, 2 \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{d\eta_i}{dt} = F \rho a_i, \quad i=1, \dots, 7 \quad (\text{A.17})$$

A Equação (A.18) mostra a relação entre a concentração a_i e o número de moles N_i .

$$a_i = \frac{N_i}{\sum_{j=1}^7 N_j \text{PM}_j} \quad (\text{A.18})$$

Como P e T são constantes durante o experimento, a taxa molar de saída pode ser calculada de acordo com a Equação (A.19).

$$\frac{P}{RT} (F_0 - F) + (\epsilon V) \sum_{i=1}^6 R_i = 0 \quad (\text{A.19})$$

As seguintes equações auxiliares são necessárias para complementar o modelo matemático.

$$R_i(t) = \rho \left(\sum_{j=1}^6 (K_{T_{i,j}} + M_{\text{cat}} K_{C_{i,j}}) \frac{\text{PM}_j}{\text{PM}_i} a_j + \sum_{j=1}^2 (K_{T_{i,6+j}} + M_{\text{cat}} K_{C_{i,6+j}}) S_j \right) \quad (\text{A.20})$$

$$N_I = N_{\text{tot}} - \sum_{j=1}^6 N_j \quad (\text{A.21})$$

$$\text{PM}_m = \frac{1}{\sum_{j=1}^7 a_j} \quad (\text{A.22})$$

$$\rho = \frac{P}{RT} \frac{1}{\sum_{j=1}^7 a_j} \quad (\text{A.23})$$

A composição de alimentação da fase gasosa, representada por uma função descontínua, é dada na forma:

$$a_0(t) = \begin{cases} a_i & t < 0 \\ a_c & 0 \leq t < \text{TOS} \\ a_i & \text{TOS} \leq t < \text{TOS} + \text{TSCAT} \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

onde TOS , representa o tempo de corrida e TSCAT , o tempo de retificação do catalisador.

A Figura A.2 apresenta a relação entre as constantes de reação, $K_{i,j}$ presentes nas Equações (A.16) e (A.20) e os parâmetros (k) considerando somente a influência do craqueamento catalítico.

$$K = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_7 & 0 \\ 0 & 0 & k_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -k_4 & k_3 & 0 & 0 & k_8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -k_3 & k_2 & 0 & k_9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -k_2 - k_6 & k_1 & k_{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -k_1 - k_5 & k_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & k_6 & k_5 & -k_7 - k_8 \dots - k_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_7 & 0 \end{bmatrix}$$

Figura A.2 – Relação entre os parâmetros k e as constantes $K_{i,j}$.

Na inicialização do sistema de EADs foi considerado, inicialmente, que o reator está preenchido com gás inerte, o catalisador está frio e o coletor, vazio. Matematicamente, estas condições consistentes são representadas por: $\mathbf{S} = \mathbf{0}$, $\mathbf{N} = \mathbf{0}$, $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ e $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{0}$. Na Tabela A.2 são apresentados os valores para ρ , ε , V , M_{cat} , P , R , TOS, TSCAT e PM_j necessários para a estimação dos parâmetros (k_1, \dots, k_{11}).

Tabela A.2: Valores Utilizados para as Constantes
(Reator CSTR de Craqueamento)

<i>Variável</i>	<i>Valor</i>
ρ	860.0 Kg/m ³
ε	0.8953 adm.
V	1.0E-4 m ³
M_{cat}	9.0E-3 Kg
P	1.013E5 Pa
R	8.310
T_p	823.0 K
PM_1	2
PM_2	28
PM_3	56
PM_4	112
PM_5	196
PM_6	224
PM_7	28
TOS + TSCAT	150.0 seg.

O sistema composto pelas Equações (A.15) a (A.24) possui, com base na Figura A.2, 11 parâmetros a serem estimados. A estratégia utilizada por VIEIRA *et al.* (2004) foi estimar os parâmetros individualmente, adotando para a estimação do parâmetro seguinte o valor ótimo do parâmetro estimado anteriormente. Aqui, somente os cinco parâmetros iniciais são estimados, devido estes apresentarem uma maior relevância no processo de craqueamento. O tempo de corrida adotado para os experimentos variou entre 50 a 150 s.

Neste exemplo foi utilizada a computação simbólica na geração do sistema aumentado, devido o grande número de parâmetros e equações. Convém ressaltar que o sistema original de equações que descrevem o retificador foi apresentado na forma algébrico-diferencial. Desta forma, com a geração do sistema aumentado, surgiu a necessidade de inicialização das novas equações. Os resultados do confronto entre as derivadas numéricas e as obtidas pelas equações de sensibilidade são apresentadas nas Figuras A.3a e A.3b. O valor do chute inicial para todos os parâmetros foi de 1.0, adotou-se ainda o valor de 10^{-4} para as perturbações. Na Tabela A.3 são apresentados os resultados das estimativas para as duas abordagens e o custo computacional associado.

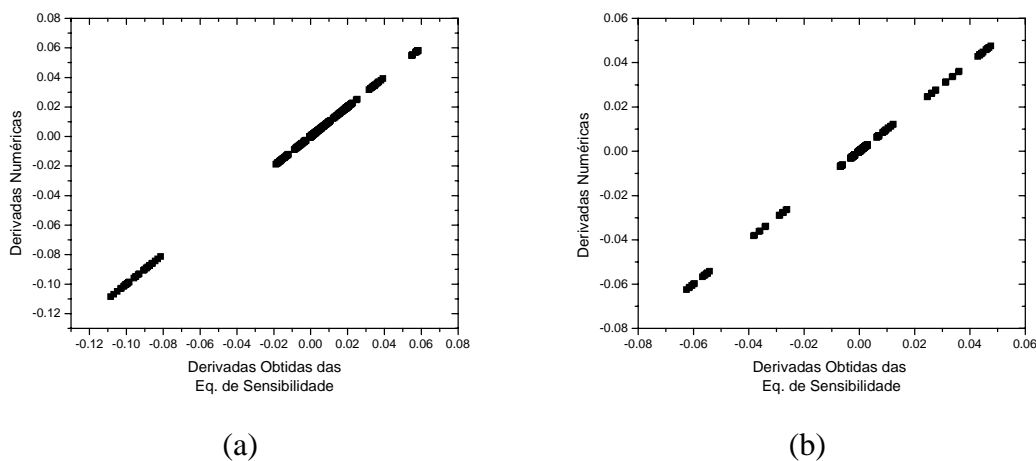


Figura A.3 – Comparação entre as derivadas obtidas numericamente (ESTIMA) e pelas Equações de Sensibilidade – (a) primeira iteração; (b) última iteração.

Tabela A.3: Resultados das Estimativas Finais dos Parâmetros k_1 , k_2 , k_3 , k_4 e k_5 .

		<i>Eq. Originais</i>	<i>Eq. Originais e de Sensibilidade</i>
<i>Parâmetros</i>	k_1	0.203129E+02	0.203130E+02
	k_2	0.148305E+02	0.148305E+02
	k_3	0.206381E+01	0.206382E+01
	k_4	0.103680E+01	0.103681E+01
	k_5	0.174400E+02	0.174399E+02
<i>Desvio Padrão</i>	k_1	0.150806E+01	0.150806E+01
	k_2	0.706159E+00	0.706157E+00
	k_3	0.104087E+00	0.104087E+00
	k_4	0.159365E+00	0.159365E+00
	k_5	0.163806E+01	0.163806E+01
<i>Tempo Computacional</i>	t_c	143.69 seg	315.16 seg

Os resultados apresentados na Tabela A.3 não ressaltam grandes diferenças entre os dois métodos de estimação. Para esse teste, o conjunto de chutes iniciais adotados contribuiu para que a técnica de geração das equações de sensibilidade via perturbação numérica fosse mais rápida se comparado a técnica de geração das equações de sensibilidade via diferenciação simbólica.

Um segundo teste foi executado no intuito de avaliar a influência dos chutes iniciais dos parâmetros sobre as duas abordagens. Para este teste, adotou-se o valor de 10^{-1} para todos os parâmetros, mantendo-se o valor de 10^{-4} para as perturbações.

Com os valores adotados para os chutes iniciais e para as perturbações nos parâmetros não foi possível alcançar uma convergência utilizando a abordagem de geração das equações por perturbação numérica. Uma segunda tentativa foi realizada, desta vez, os valores para as perturbações foram reduzidos até um valor tal que o procedimento de perturbação numérica atinja a convergência, neste caso o valor final foi de 10^{-8} . No entanto, o parâmetro k_4 apresentou um desvio padrão na mesma ordem de grandeza do valor da estimativa, ou seja, sem nenhum significado estatístico, o que aponta para uma “falsa” estimativa do parâmetro, como pode ser observado na Tabela A.4.

Tabela A.4: Resultados das Estimativas Finais dos Parâmetros k_1 , k_2 , k_3 , k_4 e k_5 .

		<i>Eq. Originais</i>	<i>Eq. Originais e de Sensibilidade</i>
<i>Parâmetros</i>	k_1	0.177287E+02	0.203130E+02
	k_2	0.128750E+02	0.148305E+02
	k_3	0.160640E+01	0.206382E+01
	k_4	0.383905E-05	0.103681E+01
	k_5	0.164204E+01	0.174399E+02
<i>Desvio Padrão</i>	k_1	0.155097E+01	0.150806E+01
	k_2	0.669572E+00	0.706157E+00
	k_3	0.885725E-01	0.104087E+00
	k_4	0.742457E-05	0.159365E+00
	k_5	0.175005E+01	0.163806E+01

Os resultados apresentados na Tabela A.4 indicam que os chutes iniciais para a perturbação nos parâmetros podem levar a “falsas” estimativas. Todavia, nos três testes apresentados, a metodologia proposta de utilização das equações de sensibilidade foi bem sucedida.

3 Conclusões

Diante dos resultados obtidos nos dois exemplos, pode-se concluir que a metodologia proposta de utilização das equações de sensibilidade foi bem sucedida. A etapa primordial e mais enfadonha (BARD, 1974) na geração das equações de sensibilidade foi ultrapassada com a utilização de ferramentas de diferenciação automática (neste caso, a diferenciação simbólica). Cabe ainda destacar que a utilização do sistema aumentado ao código de estimação ESTIMA (NORONHA *et al.*, 1993) permitiu a não utilização de chutes iniciais para a perturbação nos parâmetros, que pode levar a não convergência nas etapas iniciais da estimação, e um maior controle nos valores das derivadas dos parâmetros.

APÊNDICE B

Artigos Publicados

(Periódicos e Simpósios)

Neste apêndice são apresentadas as publicações obtidas com o presente trabalho de tese. Os textos são apresentados na seguinte ordem:

- (i) Robust Simulation of Counter-Flow Moving Bed Dryers (Drying Technology);
- (ii) Strategies for Numerical Integration of Discontinuous DAE Models (Escape 15);
- (iii) Floating Index of Inequality Constrained DAE Systems (Escape 16);

Robust Simulation of Counter-Flow Moving Bed Dryers

D. F. S. Souza¹, R. C. Vieira¹, M. L. Passos² and E. C. Biscaia Jr.^{1*}

1. Programa de Engenharia Química, PEQ/COPPE/UFRJ

P.O. Box 68502, 21945-970- Rio de Janeiro, RJ, Brazil

E-mail: evaristo@peq.coppe.ufrj.br

2. Chemical Engineering Department, Federal University of São Carlos

DEQ/UFSCar

P.O. Box 676, 13565-905, São Carlos, SP – Brazil

E-mail: merilau@microplanet.com.br

Keys words: counter-flow drying, differential-algebraic system, false transient approach.

ABSTRACT

In this work, a robust and accurate strategy for simulating counter-flow moving bed dryers is presented. A complete pseudo-transient phenomenological model for the process has been developed and the variable time is used as a continuation parameter. The desired solution is the final steady-state reached by the model. The code DASSL is used to perform the integration of the differential algebraic equation system and consistent initialization is achieved via a direct technique. The computational effort is surprisingly small comparing to those reported in the literature. Reasonable concordance between simulated and experimental results has been observed even though the mathematical model contains no adjustable parameters. Convergence problems have not been observed for all tested operating conditions, including those pointed by other authors as particularly difficult. The mathematical tool built is capable of making accurate predictions about the behavior of the equipment in affordable computing time and hence this constitutes an invaluable tool to study counter-flow moving bed drying.

INTRODUCTION

The mathematical modeling of moving bed dryers [1, 2] and in special of counter-flow moving bed dryers is still a challenging area of research mainly for two reasons. Firstly, some unexpected behaviors have been identified experimentally, such

as the depreciation of air and solid temperatures in relation to their entrance values and the inversion of energy flow inside the equipment. Figure 1 illustrates the so-called crossover effect: the gas temperature is higher than the solid temperature near the gas entrance, but smaller in the region of the dryer closer to the gas exit. In this region, energy is transferred from the solid to the gas phase. Such behavior is undesired since it reduces the efficiency of the dryer, and its prediction is of paramount importance in the design and operation of commercial dryers.

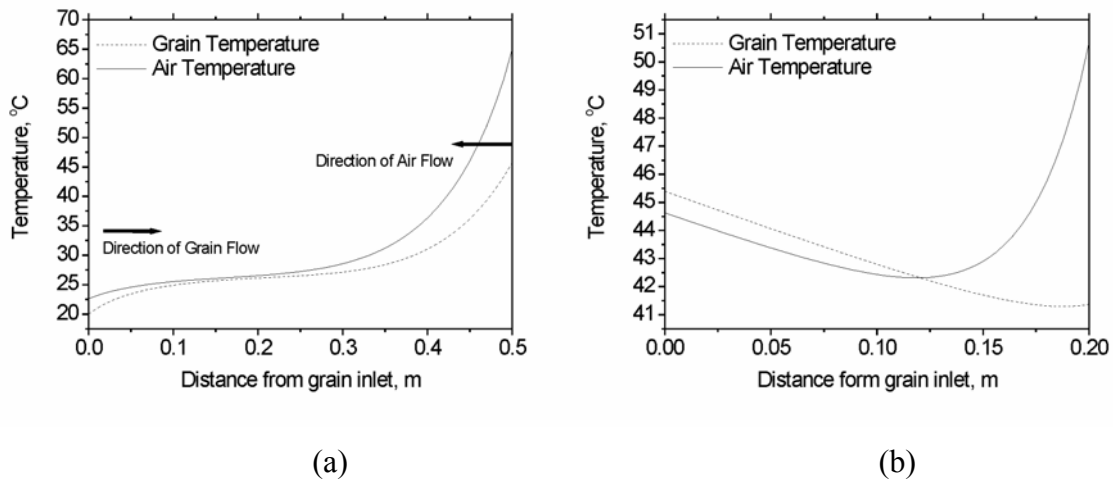


Figure 1 - Illustration of crossover effect: (a) expected behavior; (b) crossover effect.

Secondly, the stationary model for the equipment corresponds to a 2-point boundary value problem (BVPs), since the variables known are the gas and solid inlet conditions, each at a different extremity of the dryer. The most popular numerical procedure for BVPs resolution is the shooting method, which solves the BVP via an iterative procedure, in which each iteration comprises the resolution of an initial value problem (IVP). The initial conditions for the resolution of the associated IVPs are corrected by a search method at each iteration until convergence. There are several drawbacks of this method. First, as the path from the starting point to the final solution is artificial, it is possible that non-feasible regions of the solution space are investigated. As most constitutive equations have limited domain, it may compromise the accuracy of the model or even make it impossible to proceed with the resolution. Second, the computational effort can be quite high, as each iteration requires the resolution of an IVP problem. Third, convergence is even harder to achieve when asymptotic behavior in spatial direction is observed (occurring typically in long dryers). Hence, the

numerical resolution of BVPs strongly depends on the provided starting point, and convergence of the numerical procedure cannot be guaranteed for all experimental conditions.

Bruce and Giner [3] developed a steady-state mathematical model for this process, but the simulation of operating conditions, in which the inversion of flows inside the equipment occurred, was cumbersome. Barrozo et al. [4] used a stationary model and a search algorithm, but their algorithm was not able to simulate experimental conditions where the ratio of pipe diameter to particle diameter was small. Souza [5] used the Particle Swarm Optimization algorithm [6] in the search for boundary conditions, which permitted the simulation of the dryer with initial value algorithms. The strategy was successful but at a high computational cost.

To avoid iterative procedures, a “false-transient” methodology [7] was adopted. The original form of this method was restricted to BVP involving parabolic equations. The hyperbolic nature of the equations, as in the model of the dryer, did not compromise the performance of the proposed methodology. Note that the final steady state solution of the transient partial differential system of equations (PDE-IVP) model corresponds to the solution of the stationary ordinary differential system of equations (ODE-BVP) model. The mathematical model of the transient operation of the dryer generates a differential-algebraic (DAE) system. An advantage of this approach is to provide consistent initial values for simulation; therefore there is no need of an outer convergence loop for determining temperature and humidity profiles. Massarani and Valença [8] have developed a transient model for this drying process, but the numerical resolution scheme adopted lacked generality.

In this work, a more robust strategy is presented for the study of this process. The operation of the equipment is simulated from its start up, pointing out that all the variables are known until the steady state that corresponds to the sought solution. The independent variable time can be interpreted as a continuation parameter, and the problem of determining starting values for the BVP is eliminated. The system of equations is solved directly in its differential-algebraic form, what imparts a larger flexibility to the developed computational tool, since constitutive equations for the drying kinetics and sorption isotherms can be easily replaced. The proposed approach is compared with alternative techniques presented in the literature: the shooting method [3, 4] and a direct optimization method [5].

MATHEMATICAL MODEL AND NUMERICAL RESOLUTION

The system of equations that describes the transient operation of counter-flow bed dryers is presented in the following form:

Mass balance for solid and gas phases

$$(1-\varepsilon)\rho_s \frac{\partial y_s}{\partial t} + G_s \frac{\partial y_s}{\partial z} = -f(T_s, y_s, y_g) \quad (1)$$

$$\varepsilon\rho_g \frac{\partial y_g}{\partial t} - G_g \frac{\partial y_g}{\partial z} = f(T_s, y_s, y_g) \quad (2)$$

Energy balance for solid and gas phases

$$(1-\varepsilon)\rho_s \frac{\partial H_{sl}}{\partial t} + G_s \frac{\partial H_{sl}}{\partial z} = ha(T_g - T_s) - f(T_s, y_s, y_g) (\overline{c_{pv}}(T_g - T_r) + \lambda_{Tr}) \quad (3)$$

$$\varepsilon\rho_g \frac{\partial H_{gv}}{\partial t} - G_g \frac{\partial H_{gv}}{\partial z} = -ha(T_g - T_s) + f(T_s, y_s, y_g) (\overline{c_{pv}}(T_g - T_r) + \lambda_{Tr}) \quad (4)$$

where: $f(T_s, y_s, y_g)$ represents the drying kinetic rate per unit of bed volume and given by: $f(T_s, y_s, y_g) = k_s a(y_s - y_{se})$.

In the particular case that all time derivatives are null, the presented model is reduced to the stationary model, found in the literature. The specific enthalpy of the solid phase and the one of gas phase are given respectively by:

$$H_{sl} = H_s + y_s H_1 = \overline{c_{ps}}(T_s - T_r) + y_s \overline{c_{pl}}(T_s - T_r) \quad (5)$$

$$H_{gv} = H_g + y_g H_v = \overline{c_{pg}}(T_g - T_r) + y_g \overline{c_{pv}}(T_g - T_r) \quad (6)$$

The partial differential system of equations (PDE) is converted in a differential algebraic equation system (DAE) via the Method of Lines. The system of equations is discretized in the space variable z using implicit Euler and generating a system of DAEs in each discretization cell. The height of the dryer is divided in n "mixture" cells, so that, each increment is given by:

$$\Delta z = \frac{L}{n} \quad (7)$$

and the derivatives of state variables in the axial direction are replaced by the algebraic expressions that follow:

$$\left(\frac{\partial y_s}{\partial z} \right)_i = \frac{y_{si} - y_{si-1}}{\Delta z} \quad (8)$$

$$\left(\frac{\partial H_{sl}}{\partial z}\right)_i = \frac{H_{sli} - H_{sli-1}}{\Delta z} \quad (9)$$

$$\left(\frac{\partial y_g}{\partial z}\right)_i = \frac{y_{gi+1} - y_{gi}}{\Delta z} \quad (10)$$

$$\left(\frac{\partial H_{gv}}{\partial z}\right)_i = \frac{H_{gvi+1} - H_{gvi}}{\Delta z} \quad (11)$$

Consistent initialization for the resultant DAE system is achieved via a direct method of initialization [9]. At the start-up time, the dryer has been assumed to be filled with cold humid grains and air is supposed to be in equilibrium with these grains. The gas inlet properties (temperature and humidity) are perturbed using the exponential regularization function, given by:

$$\eta(t) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (12)$$

The gas conditions at the gas feed point are calculated by:

$$T_{g\text{ feed}} = T_{s0} + \eta(t)(T_{g0} - T_{s0}) \quad (13)$$

$$y_{g\text{ feed}} = y_{g\text{ eq}} + \eta(t)(y_{g0} - y_{g\text{ eq}}) \quad (14)$$

being $y_{g\text{ feed}}$ the humidity of the gas in equilibrium with the grains at temperature T_{s0} and moisture content y_{s0} . This set of initial conditions is always consistent.

Code DASSL [10] has been used for the numerical integration of the system. The time, t , is viewed as continuation parameter, and the integrator moves forward in time until a steady state is reached. Humidity and temperature profiles at the end of the simulation are the desired BVP solutions.

Numerical tests have been performed to select the number of discretization points. Based on these simulations, the value of 50 has been always adopted as default. Besides being a conservative value, 50 discretization points can assure a safe convergence of the profiles for a wide variety of values of physical parameters. Numerical tests have been also performed to verify the influence of the parameter τ on the convergence of the proposed method, values of τ from 10^{-4} to 1.0 have been adopted and no remarkable influence is verified. Convergence time and final values of the profiles are essentially the same in all these simulations. Otherwise, if the main interest of the researcher is the study of the behavior of the process during start-up, small values of τ ($\tau < 10^{-3}$) should be used in order to simulate properly this stage of the process.

It must be emphasized that no iterative procedure whatsoever is required to reach the desired solution. A single IVP simulation is capable to provide the researcher with the desired stationary profiles. As the algorithm only generates solutions inside the feasible region of the solution space, there is no risk of using constitutive equations outside their validity range, what makes this strategy even more robust.

NUMERICAL EXAMPLES

Two different data sets have been used to validate the proposed approach. The first one corresponds to experimental results of corn drying reported by Massarani and Valena [8]. The second data set comprises experiments of wheat drying reported by Bruce and Giner [3]. Numerical values for all parameters involved and the constitutive equations used in both systems are presented in Tables 1 and 2.

Table 1: Numerical Values for Parameters [3,8,11].

Properties	Corn	Wheat
$\overline{c_{ps}}$ (kJ/kg K)	1.120	1.300
$\overline{c_{pl}}$ (kJ/kg K)	4.187	4.187
$\overline{c_{pg}}$ (kJ/kg K)	1.005	1.005
$\overline{c_{pv}}$ (kJ/kg K)	1.883	1.883
ρ_s (kg/m ³)	1070	643
d_p (m)	7.60×10^{-3}	3.92×10^{-3}
ε (m ³ /m ³)	0.40	0.41
ϕ (-)	0.76	0.91

Table 2: Constitutive Equations used in the Model [3,8,11].

Variable	Correlations for corn	Correlations for wheat
y_{se} dry basis	$y_{se} = \frac{\left(\frac{\ln(1-UR)}{-3.18 \times 10^{-5}(1.8T_s - 410)} \right)^{1/2}}{100}$	$y_{se} = 0.11304 - 0.07949 \ln(1-UR) - 0.01577 \ln(T_g - T_r)$
$k_s a$ kg/(m ³ s)	$k_s a = (7.302 - 1.77 \times 10^{-2} T_g) y_s - (2.202 - 6.18 \times 10^{-3} T_g)$	$k_s a = a \left(139.6 \exp\left(\frac{-4426.0}{T_g}\right) \right)$
ha kJ/(m ³ s K)	$ha = 1.19 \text{Re}^{0.60} \text{Pr}^{1/3}$	$ha = 7.144 \times 10^2 \left(\frac{G_g T_g}{P_t} \right)^{0.6011}$
λ_{Tr} sorption heat kJ/kg	$\lambda_{Tr} = 2500.8$	$\lambda_{Tr} = 2500.8 + 23 \exp(-40y_s)$

The first data set contains corn drying data. The proposed transient approach is compared with the stationary shooting technique implemented by Souza [5] and simulated results for both strategies and experimental data are plotted in Figure 3. The operating conditions simulated are detailed in the appendix. These results show that the stationary profiles in Experiment I and II obtained through the direct resolution of the correspondent boundary value problem and through the proposed *false transient* approach are essentially the same, the verified differences are meaningless and caused only by round off errors. However, the computational effort for the stationary approach was several times higher than the effort of the transient approach, as the cost of each iteration in the stationary approach is equivalent to the cost of the transient one. Hence, the cost/benefit ratio seems to favor the transient approach. It must also be pointed out that this data set is extremely well behaved, as no flux inversion or asymptotic behavior is observed.

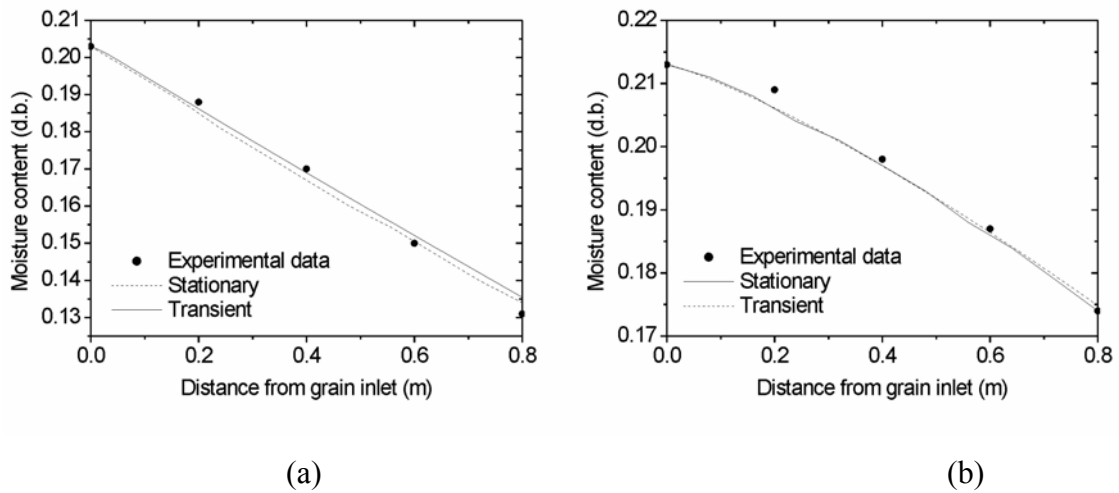


Figure 3 - Comparison between experimental and simulation results for moisture content of corn: (a) experimental condition I; (b) experimental condition II.

To illustrate the asymptotic behavior of the profiles, a new set of data from Massarani and Valença [8] was considered. A typical result is shown in Figure 4, and it must be emphasized that this kind of problem could not be solved by any BVP method. This behavior appears due to the fact that all the profiles were essentially constant near the grain inlet, so any BVP method became frozen and the integration method cannot advance. If a discretization has been applied to the spatial variable, the differential equations are transformed into algebraic ones. In this case, the resulting algebraic system presents a singular Jacobian matrix and its numerical solution does not converge.

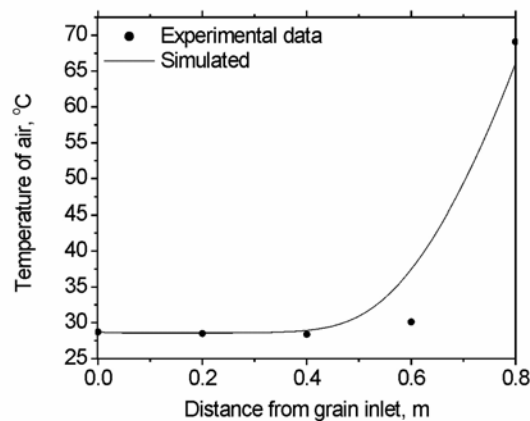


Figure 4 - Comparison between experimental and simulation results for air temperature, experimental condition III.

The third data set contains wheat drying data. Bruce and Giner [3] have reported grain temperature at both extremities of the dryer and the gas temperature in several points inside the dryer. The crossover effect is characterized by the fact that the gas temperature at the gas outlet is lower than the grain temperature at the same point.

As shown in Figure 5, the simulation via the proposed approach is able to predict the crossover phenomena for these specified operating conditions. The agreement between experimental and simulated results is considered good if it is taken into account that the model has no adjustable parameters. The computational cost of the simulation is very small, and no iterative procedure has been required.

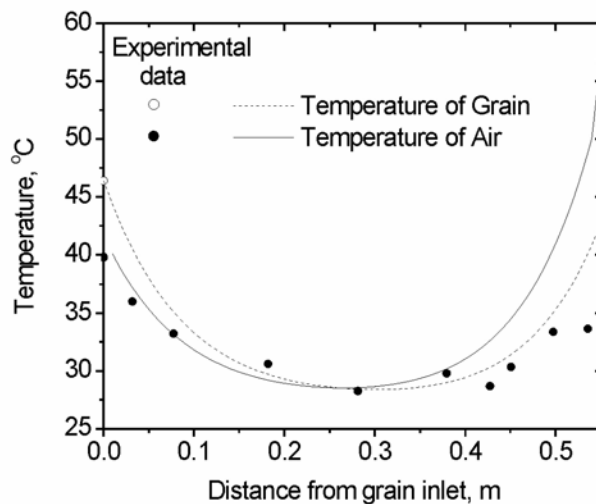


Figure 5 - Simulated vs. Experimental results for drying wheat, experimental condition IV.

Bruce and Giner [3], using a stationary model and a Newton-Raphson search algorithm, were able to determine temperature profiles very similar to those obtained in the present work. However, the determination of starting conditions for their algorithm that would lead to convergence was a cumbersome task according to the authors, and the computational cost could be unaffordable for some operating conditions. The stationary strategy implemented by Souza [3] did not achieve convergence at all.

CONCLUSION

By means of the proposed technique, it was possible to simulate the behavior of counter-flow moving bed dryers for several operating conditions at affordable computing time. The approach was successful even for experimental conditions reported as particularly difficult to simulate. Three experimental data sets previously reported in the literature were used. In all cases, the results can be considered good qualitative and quantitatively, as the model has no adjustable parameters. Moreover, the computational tool developed is able to determine whether the asymptotic or the cross-flow phenomena should occur, and hence it can contribute to the design and operation of commercial dryers.

The ease of implementation of the methodology should be particularly stressed. No search algorithms (as Newton-Raphson or Particle Swarm Optimization) are required, consistent initial conditions for the DAE system are readily obtained via a direct approach and robust IVP solvers (as DASSL code) can be used. The computational cost is another remarkable advantage of the proposed methodology. The complete simulation of the transient model has computational cost comparable to only one iteration of the stationary approach.

The transient methodology has guaranteed convergence provided there exist a single solution for the associated stationary BVP. However, both transient and stationary methodologies may show convergence problems for systems with multiple steady-states.

The proposed methodology can also be used to simulate mixed flow dryers, where the hot gas is fed in the central region of the dryer and both counter-flow and parallel flow regions are observed inside the equipment.

The mathematical tool built is capable of making accurate predictions about the behavior of the equipment in affordable computing time, and hence constitutes an invaluable tool to study counter-flow moving bed drying.

APPENDIX: EXPERIMENTAL CONDITIONS USED IN DATA SIMULATIONS

Experimental Condition I [8]

Grain: flow rate = $0.170 \text{ kg/m}^2\text{s}$; inlet temperature = 25.2°C ; inlet moisture content = 0.203 (dry basis = d.b.). Air: flow rate = $1.160 \text{ kg/m}^2\text{s}$; inlet temperature = 80.8°C ; inlet air humidity = 0.0113 (d.b.).

Experimental Condition II [8]

Grain: flow rate = 0.200 kg/m²s; inlet temperature = 27.1°C; inlet moisture content = 0.213 (d.b.). Air: flow rate = 1.080 kg/m²s; inlet temperature = 57.6°C; inlet air humidity = 0.0136 (d.b.). Bed length = 0.80 m.

Experimental Condition III [8]

Grain: flow rate = 0.170 kg/m²s; inlet temperature = 28.7°C; inlet moisture content = 0.232 (d.b.). Air: flow rate = 0.610 kg/m²min; inlet temperature = 69.1°C; inlet air humidity = 0.0137 (d.b.).

Experimental Condition IV [3]

Grain: flow rate = 8.63 kg/m²min; inlet temperature = 46.4°C; inlet moisture content = 0.199 (d.b.). Air: flow rate = 20.0 kg/m²min; inlet temperature = 56.9°C; inlet air humidity = 0.0126 (d.b.).

NOTATION

a	effective air-particle contact area per unit bed volume	m ⁻¹
$\overline{c_p}$	mean specific heat at constant pressure	kJ/(kg K)
G	dry mass flow rate per unit of sectional area	kg/(m ² s)
H	specific enthalpy	kJ/kg
ha	heat transfer coefficient per unit of bed volume	kJ/(Km ³ s)
k_{sa}	mass transfer coefficient per unit of bed volume	kg/(m ³ s)
P_t	absolute pressure	Pa
T	Temperature	K or °C
t	Time	s
UR	relative gas humidity	-
y	water mass content in dry basis	-
z	axial direction	m
<i>Greek Symbols</i>		
ε	bed porosity	m ³ /m ³
λ	latent heat of water vaporization	kJ/kg
ρ	Density	kg/m ³

τ regularization parameter

s

Subscripts

cal	calculated	r	reference
feed	gas feed condition	s	solid
g	Air	se	solid in equilibrium
gv	air and water vapor	sl	solid and liquid
l	liquid	v	water vapor
L	at grain exit point	0	at grain inlet point

REFERENCES

1. Tórrez, N., M. Gustafsson, A. Schreil and J. Martínez. 1988. Modeling and simulation of a crossflow moving bed grain dryers. *Drying Technology* 16(9/10): 1999-2015.
2. Felipe, C. A. S. and M. A. S. Barrozo. 2003. Drying of soybean seeds in a concurrent moving bed: heat and mass transfer and quality analysis. *Drying Technology* 21(3): 439-456.
3. Bruce, D. M. and S. A. Giner. 1993. Mathematical modeling of grain drying in counter-flow beds: investigation of crossover of air and grain temperatures. *J. Agric. Engng. Res.* 55:143-161.
4. Barrozo, M. A. S., V. V. Murata and S. M. Costa. 1998. Drying of soybean seeds in countercurrent and concurrent moving bed dryers. *Drying Technology* 16 (9/10): 2033-2047.
5. Souza, D. F. S. 2002. Unification of modeling and simulating of dryers of solids. M.Sc. diss., Federal University of Rio de Janeiro – COPPE, Rio de Janeiro, 200p (in Portuguese).
6. Kennedy, J. and R. Eberhard. 2001. *Swarm Intelligence*, San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers.
7. Kubíček, M. and V. Hlaváček. 1983. *Numerical Solution of Nonlinear Boundary Value Problems with Applications*, Englewood Cliffs: Prentice-Hall Inc., New Jersey.

8. Massarani, G. and G.C. Valença. 2000. Grain drying in countercurrent and concurrent gas flow-modelling, simulation and experimental results. *Drying Technology* 18 (1/2): 447- 455.
9. Vieira, R. C. and E. C. Biscaia Jr. 2000. Direct methods for consistent initialization of DAE systems. *Computers and Chemical Engineering* 25:1299-1311.
10. Petzold, L. R. 1989. *DASSL: A Differential-Algebraic System Solver*. Livermore: Computer and Mathematical Research Division, Lawrence Livermore National Laboratory.
11. Brooker, D. B., F. W. Bakker-Arkema and C. Hall. 1974. *Drying Cereal Grains*, Westport: AVI Publishing Company, Inc. Connecticut.

Strategies for Numerical Integration of Discontinuous DAE Models

Domingos Fabiano de S. Souza, Roberta C. Vieira and Evaristo C. Biscaia Jr*
Programa de Engenharia Química, PEQ/COPPE/UFRJ, Universidade Federal do
Rio de Janeiro, CP 68.502, CEP 21.945-970, Rio de Janeiro, Brasil

* corresponding author, evaristo@peq.coppe.ufrj.br

Abstract

In this work, it is presented a novel strategy to solve discontinuous DAEs of fixed index type and floating index. The switching between DAE models of different indexes and structures and the reinitialization of the system are performed automatically by the code. The direct integration of the high index DAE model is aided by the software. The equation actually fed to the numerical integrator is a weighted sum of the different model equations. The weights are either 0 or 1 inside integration intervals, depending on whether the corresponding equation is active or not during the time interval in consideration. Across model discontinuities, the numerical values of the weights are taken from 0 to 1 (or vice-versa) via a smooth regularization function, which is a continuous representation of a step function. Several functions are suitable to perform such task, and the authors suggest two families of functions which are simple and differentiable up to the order needed. As examples, the optimal control of a fedbatch fermentation (production of ethanol by *S. cerevisiae*) and drying of solids in a fixed bed dryer (aluminum) are presented.

Keywords: dynamic optimization, simulation, floating index DAEs, fedbatch reactors, fixed bed dryer.

1. Introduction

In many dynamic optimization and simulation problems, the differential index or structure of the DAE model changes in time, as a consequence of the activation of problem-specific constraints. This behavior is known as *events* and can happen implicitly during the numerical resolution. A consequence of *events* is a possibility of the index floating at a point in time. This class of systems has been addressed as Floating Index DAE Problems. The index of a DAE is the number of times that all or a

part of a DAE must be differentiated with respect to time in order to convert it into an explicit set of first order ordinary differential equations (ODEs). Index 1 systems may be solved with modified ODE methods, while higher index systems (systems with index 2 or greater) require specific methods. Generally, higher index systems are rewritten by means of an index 1 formulation and solved with standard integration codes. Whichever the strategy adopted, reinitialization is required in order to restart integration after the model discontinuity. Singular optimal control problems, as in the fedbatch operation of chemical reactors, are typical problems of floating index. At the start of the operation, the problem consists of a typical optimal control optimization problem, and the control variable is to be set at one of its extreme values. The resulting DAE model presents index 1. When the singular arc is reached, the singular control constraint becomes active, and the index of the DAE model shifts to 3. The singular interval finishes when a physical constraint of the system is reached (typically the maximum volume of the reactor). From that time on, the optimal control problem is represented by an index 1 DAE. Frequently, discontinuities in the state variables are observed at the model switching point. Hence, the final state of the previous model can not be used as initial condition to start the simulation of the subsequent model, and a reinitialization procedure of some sort must be carried out.

In the second class of problems, the index not changes at the long of the simulation. On these problems, after detect the activation of the discontinuity, the structure of the mathematical model suffer modifications. This events are common in models of processes that involve thermodynamic equilibrium (multiphases) and in separation processes. In these models, a new phase will can arise, solely if determined equilibrium condition was reached during the dynamic simulation. A similar phenomenon occurs on the drying of solids in a fixed bed dryer, where the flow type and contact between the phases, solid and gas, it can occasion the emergence of a third phase, denominated of phase condensed. The origin of the phase condensed during the drying if must to the contact between the steam saturated and the surface not heat of the solid, and the internal layer of the bed. This way, it leaves of the steam of water condenses on the surface of the solid. The following steps are needed for the numerical resolution of index one systems with model discontinuities: (i) detection of activation/deactivation of constraints (model discontinuities); (ii) model switching; and (iii) determination of consistent initial conditions to restart integration (Majer et al., 1995, Park and Barton, 1996, Wu and White, 2001). For higher index systems, index

determination (and frequently index reduction) are further required (Feehery and Barton, 1998). Several algorithms to perform those tasks have been reported (Vassiliadis *et al.*, 1994a e 1994b; Feehery and Barton, 1996, 1998; Asher and Petzold, 1998), and the high computational effort typically associated with each of these steps motivated the present work, which aims the reduction of the effort associated with the numerical resolution of floating index DAEs and the manipulation of implicit discontinuities.

2. Resolution of Floating Index DAEs

Consider the general DAE system consisting of Eq.1 and Eq.2a when the constraint is inactive and Eq.1 and Eq.2b when the constraint is active. This system has been addressed by Feehery and Barton (1998) as a disjunctive system, based on the fact Eq. 2a and 2b can not be active at the same time.

$$f(\dot{x}, x, y, u) = 0 \quad (1)$$

$$u - u^c = 0 \quad (2a)$$

$$g(x, y) = 0 \quad (2b)$$

In the present work, a novel methodology for its numerical resolution is presented. The disjunctive part of the system (Eq. 2a and 2b) is replaced by a single algebraic equation, which represents the weighted sum of the excluding equations.

$$\eta(u - u^c) + (1 - \eta) \cdot g(x, y) = 0 \quad (3)$$

The weight η is set to 1 when the constraint is inactive, to 0 when it is active and to an intermediate value in the interval $[0,1]$ during the switching period. Due to this smooth transition from one system to the other, the state variables are continuous along the model switching and no reinitialization algorithm is required to continue integration.

The utilization of regularization functions to circumvent initialization problems has been studied by Vieira and Biscaia Jr. (2000). The authors have established some criteria to guide the selection of a regularization function and its parameters. The function chosen for the present work is shown in Eq. 4, where Δt represents the time elapsed since the model switching. Parameters τ and n are to be set by the user. The regularization function is differentiable up to order $(n-1)$, and it approaches a true step function as the τ parameter gets smaller. Figure 1 shows the impact of both parameters on the regularization function selected.

$$\eta(\Delta t, n, \tau) = \begin{cases} 0 & \Delta t < 0 \\ 1 - \exp\left(-n \frac{\Delta t}{\tau}\right) \cdot \sum_{j=0}^{n-1} \frac{1}{j!} \left(n \frac{\Delta t}{\tau}\right)^j & \Delta t \geq 0 \end{cases} \quad (4)$$

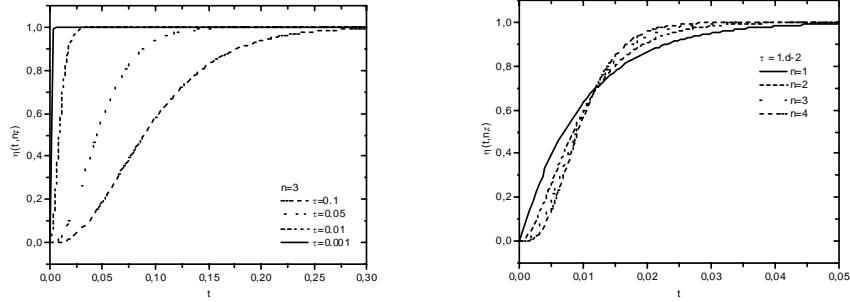


Figure 1 – Impact of parameters on the regularization function selected.

The code PSIDE (Lioen *et al.*, 1998) is used to perform the numerical integration of the DAEs. The code can deal with fully implicit DAE systems of index up to 3, and its selection eliminates the need of index reduction.

3. Resolution of Implicit Discontinuities

Consider now a DAE system consisting of Eq.5 and Eq.6:

$$\dot{x} = f(x, y, z) \quad (5)$$

$$h(x, y, z) = 0 \quad (6)$$

In this system the variable \mathbf{y} represent a constraint and your valor can change during simulation of mathematical model to depend if the constraint to be active or no. The activation can occur when a determined expression become valid during the simulation, then the model receive a new information, that is to say:

$$y = \begin{cases} g(x, y) & \text{to } f(x, y, z) \geq 0 \\ 0 & \text{to } f(x, y, z) < 0 \end{cases} \quad (7)$$

In the present work, this system disjunctive is represented by a single algebraic equation:

$$y = g_{\text{reg}}(x, y) = \phi g(x, y) \quad (8)$$

the regularization function chosen for the present work, ϕ , is shown in Eq. 9, where ξ is adjustment parameter.

$$\phi(x, \xi) = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{\left(\frac{f(x, z)}{\xi} \right)}{\sqrt{\left(\frac{f(x, z)}{\xi} \right)^2}} \right) \quad (9)$$

The regularization function is add to the model to identify, during the time of operation of the equipment, if the condition of equilibrium will be reached in some point along the equipment. A graphic representation is presented in the Figure 2.

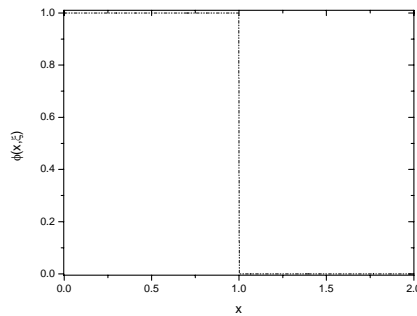


Figure 2 – Impact of variable on the regularization function selected.

The code PSIDE (Lioen *et al.*, 1998) is used to perform the numerical integration of the DAEs.

3. Numerical Examples

3.1. Bioreactor

In order to show the potentiality of the proposed approach, the problem of maximization of ethanol production presented by Hong (1986) is revisited. The DAE system is comprised by Eq. 10 to 12:

$$\frac{dx_1}{dt} = \mu x_1 \quad (10)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \varepsilon x_1 \quad (11)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = u \quad (12)$$

where x_1 , x_2 and x_3 represent the mass of cells, the mass of product (ethanol) and the volume of the system, respectively. The substrate addition rate u is the manipulated variable, and the goal is to maximize the amount of ethanol at the end of the batch ($t = t_f$).

The growth rate, μ , and the specific production, ε , are functions of S (substrate concentration) and P (product concentration), where $S = S_f + (c - x_1)/(0.1 x_3)$ and $P = x_2/x_3$.

$$\mu(S, P) = \frac{\mu_0 S}{\left(1 + \frac{P}{K_{1p}}\right)(K_{1s} + S)} \quad (13)$$

$$\varepsilon(S, P) = \frac{\varepsilon_0 S}{\left(1 + \frac{P}{K_{2p}}\right)(K_{2s} + S)} \quad (14)$$

The optimal control policy can be determined via the Pontryagin Maximum Principle (Pontryagin *et al.*, 1963), being the Hamiltonian H represented as follows:

$$H = H_0 + \phi u = (\lambda_1 \mu + \lambda_2 \varepsilon)x_1 + \lambda_3 u \quad (15)$$

The singular arc condition, $\phi = 0$, leads to the elimination of the adjoint variable λ_3 of the system. When the singular arc constraint is active, the control action u that leads to the optimal trajectory is the one that maximizes the Hamiltonian. For this problem, it leads to:

$$\lambda_1 \mu + \lambda_2 \varepsilon = 0 \quad (16)$$

As $\phi(t)$ and all its derivatives are linear functions on λ , the differentiation of Eq. 16 generates:

$$\lambda_1 \frac{\partial \mu}{\partial x_3} + \lambda_2 \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} = 0 \quad (17)$$

Rewriting Eq. 16 and 17 in matricial form, and realizing that the trivial solution $\lambda=0$ can not satisfy the problem, it follows that the determinant of the system must be null. That condition is expressed as:

$$\mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} - \varepsilon \frac{\partial \mu}{\partial x_3} = 0 \quad (18)$$

Outside the singular arc, the control variable u is at one of its extreme values, denoted here as u^c . At the start of the integration, $u^c = 0$. Hence, the DAE system presents index 1. The numerical integration continues until the solution trajectory intersects the singular trajectory. This intersection is detected when the left hand side of Eq. 18 vanishes. From that time on, the solution trajectory is coincident with the singular arc, and the constraint represented by Eq. 18 must be enforced. The resulting

DAE system presents index 3. When the maximum volume of the reactor is reached, no further addition of substrate is possible, and again u is set as a constant value ($u^c = 0$). The DAE system presents index 1 again. The complete model, consequently, is a DAE of floating index type.

Equation 19 represents the weighted sum of all disjunctive equations, and the DAE system integrated consists of Eq. 10 to 12 and 18, with state vector $y=[x_1 \ x_2 \ x_3 \ u]^T$. The initial conditions at $t=0$ and all parameters needed are reproduced at Table 1.

$$\eta(t)(u - u^c) + (1 - \eta(t)) \cdot \left(\mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_3} - \varepsilon \frac{\partial \mu}{\partial x_3} \right) = 0 \quad (19)$$

Table 1. Initial conditions and parameters used.

$x_0 = 1.0 \text{ g/L}$	$K_{1p} = 16 \text{ g/L}$	$u_{max}=10.0 \text{ L/h}$	$\mu_0=0.408 \text{ h}^{-1}$
$S_0 = 150.0 \text{ g/L}$	$K_{2p} = 71.5 \text{ g/L}$	$u_{min}=0.0 \text{ L/h}$	$g_0=1.0 \text{ h}^{-1}$
$P_0 = 10^{-5} \text{ g/L}$	$K_{1s} = 0.22 \text{ g/L}$	$V_{max}=200.0 \text{ L}$	$c=10 \text{ g}$
$V_0 = 10.0 \text{ L}$	$K_{2s} = 0.44 \text{ g/L}$	$S_f=150 \text{ g/L}$	$t_f=62 \text{ h}$

Figure 3 shows simulation results for the volume of the reactor and the substrate feed rate u . The control action is initially null, and presents a sudden variation at the beginning of the singular arc when the constraint (Eq. 18) becomes active. It can be noticed a small disturbance in the profile of this variable during the model switching interval, probably due to lack of precision of the integration code when the index is changing. The singular arc is followed until the maximum volume is reached. The control variable is again set to 0. It must be emphasized that no reinitialization algorithm was used. The jump observed in the discontinuous variable u was obtained automatically by the integration code.

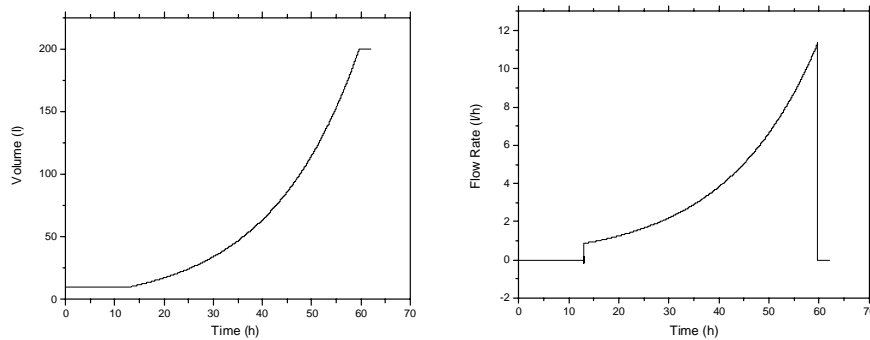


Figure 3 – Simulation results: reactor volume and substrate feed flowrate.

Figure 4 presents the simulation results for mass of cells and of product. It can be noticed that the oscillations in the substrate feed rate have no effect in the simulated results for the other variables, confirming the adequacy of the approach.

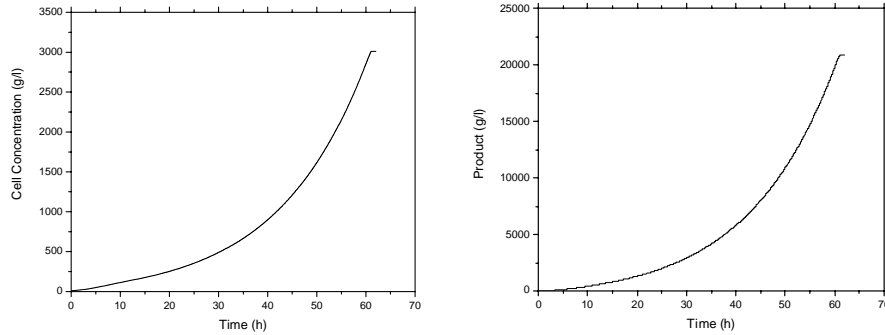


Figure 4 – Simulation results: biomass and ethanol concentration.

3.2. Fixed Bed Dryer

The mathematical model that describe the fixed bed dryer follow the same proposed suppositions by Brooker *et al.* (1974). The model is presented in the form differential-algebraic and composed by:

Mass Balance for Solid and Gaseous Phases

$$(1-\varepsilon) \cdot \rho_s \cdot \frac{\partial y_s}{\partial t} = -f(T_s, y_s, y_g) \quad (20)$$

$$\varepsilon \cdot \rho_g \cdot \frac{\partial y_g}{\partial t} + G_g \cdot \frac{\partial y_g}{\partial z} = f(T_s, y_s, y_g) \quad (21)$$

Energy Balance for Solids and Gaseous Phases

$$(1-\varepsilon) \cdot \rho_s \cdot \frac{\partial H_{sl}}{\partial t} = ha \cdot (T_g - T_s) - f(T_s, y_s, y_g) \cdot \langle H \rangle \quad (22)$$

$$\varepsilon \cdot \rho_g \cdot \frac{\partial H_{gv}}{\partial t} + G_g \cdot \frac{\partial H_{gv}}{\partial z} = -ha \cdot (T_g - T_s) + f(T_s, y_s, y_g) \cdot \langle H \rangle \quad (23)$$

where $f(T_s, y_s, y_g)$ represents the drying kinetics given by: $f(T_s, y_s, y_g) = k_s a \cdot (y_s - y_{se})$

The thermodynamics relations what represented the specific enthalpy of the gas and solid phases and the specific energy what leave the solid phase are given respectively by:

$$H_{sl} = H_s + y_s \cdot H_l = \overline{c_{ps}} \cdot (T_s - T_r) + y_s \cdot \overline{c_{pl}} \cdot (T_s - T_r) \quad (24)$$

$$H_{gv} = H_g + y_g \cdot H_v = \overline{c_{pg}} \cdot (T_g - T_r) + y_g \cdot \overline{c_{pv}} \cdot (T_g - T_r) + y_g \cdot \lambda_{Tr} \quad (25)$$

$$\langle H \rangle = \overline{c_{pv}} \cdot (T_g - T_r) + \lambda_{Tr} \quad (26)$$

During the operation of the drying of solids in a fixed bed dryer, the flow type and contact between the phases, solid and gas, it can occasion the emergence of a third phase, denominated of phase condensed. The existent works in the literature which accosts the phenomenon of condensation of the steam of water on the drying utilize constitutive equations of the conditional type, for the incorporation of this third phase. Sun *et al.* (1995) divided the equations of the balance of mass of the gaseous phase in two term distinct no additive, Eq. 33, which represent the saturation condition and of not saturation of the drying air. However, as discussed by Sun *et al.* (1995), these conditional equations can result in a discontinuity asymmetrical when incorporate to the model, disabling the numeric resolution.

$$y_{gl} = \begin{cases} y_g - y_{gv} & \text{to } RH \geq 1 \\ 0 & \text{to } RH < 1 \end{cases} \quad (33)$$

For to avoid the use of conditional equations, the present work proposes a new form of approach for the phenomenon of condensation of the steam of water, using, for this, the regularization function, which establishes the existence or not of the condensed phase, Eq. 34, that is to say:

$$RH_{reg} = RH \cdot f_{reg}(RH) + (1 - f_{reg}(RH)) \quad (34)$$

The form of the regularization function to specific problem is given by:

$$f_{reg}(UR) = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{\left(\frac{RH-1}{\xi} \right)}{\sqrt{1 + \left(\frac{RH-1}{\xi} \right)^2}} \right) \quad (35)$$

where RH is the relative humidity and ξ is parameter of adjust of the function. With the use of this continuous function, Eq. (34), the balance of mass and of energy of the gaseous phase can be reformulated in function of the steam of water contained in the air and in the condensed, when to exist.

The gas humidity in the saturation is obtained by the following psychometric relation:

$$y_{gv} = \frac{0,622 \cdot RH_{reg} \cdot P_{sat}(T_g)}{(P_t - RH_{reg} \cdot P_{sat}(T_g))} \quad (36)$$

The mass of the steam condensed is defined by the algebraic equation:

$$y_{gl} = y_g - y_{gv} \quad (37)$$

In the formulation reported by Sun *et al.* (1995), the energy balance not did go modified with the occurrence of the condensation phenomenon. The strategies adopted in this work consist in to rewrite the energy balance including the part of the energy loses during the condensed of the gas, so:

$$\begin{aligned} H_{gv} = H_g + y_{gv} \cdot H_v + y_{gl} \cdot H_l = \overline{c_{pg}} \cdot (T_g - T_r) \\ + y_{gv} \cdot \overline{c_{pv}} \cdot (T_g - T_r) + y_{gv} \cdot \lambda_{Tr} + y_{gl} \cdot \overline{c_{pl}} \cdot (T_g - T_r) \end{aligned} \quad (38)$$

where the part condensed is valid only when the relative humidity calculated by the global balance exceed 1.

The constitutive equations to kinetics coefficient of dying, $k_s a$, convective coefficient of heat transfer (by area of the bed), h_a and sorption isotherm are presented in the Table 2. The Table 3 contains the values of all parameters and initial conditions used in the simulation.

Table 2. Constitutive Equations used in the Model.

Aluminun
$y_{se} = \frac{0.12 \cdot UR}{(1 - 0.54 \cdot UR) \cdot (1 - 0.54 \cdot UR)}$
$k_s a = -5.522 \cdot G_g + 0.00073 \cdot (T_g + T_r) + 0.0185 \cdot G_g \cdot (T_g + T_r)$
$h_a = 4286.5 \cdot \left[\frac{G_g \cdot (T_g + T_r)}{P_t} \right]^{0.6011}$
$\lambda_{Tr} = 2500.8$

Table 3 Initial conditions and parameters used.

$y_{s0}=0.61$ Kg/Kg	$L=0.4m$	$c_{ps}=2.50$ KJ/Kg	$T_r=273.15$ K
$T_{s0}=22.0$ °C	$d_p=0.0043$ m	$c_{pl}= 4.186$ KJ/Kg	$G_{g0}=0.90$ Kg/m ² s
$y_{g0}=0.017$ Kg/Kg	$\varepsilon=0.40$ m ³ /m ³	$c_{pv}= 1.890$ KJ/Kg	$P_t= 101325.03$ Pa
$T_{g0}=57.7$ °C	$\rho_s=1690$ Kg/m ³	$c_{pg}= 1.020$ KJ/Kg	$t_f=5$ h

To numerical resolution of model, the partial differential system of equations (PDE) is converted in a differential-algebraic equations system (DAE) via the Method of Lines. The system of equations is discretized in the space variable z using implicit

Euler and generating a system of DAE in each discretization cell. The height of the dryer is divided in n “mixture” cell, so that, each increment is given by:

$$\Delta z = \frac{L}{n} \quad (39)$$

and the derivatives of state variables in the axial direction are replaced by the algebraic expressions that follow.

$$\left(\frac{\partial y_g}{\partial z} \right)_i = \frac{y_{gi} - y_{gi-1}}{\Delta z} \quad (40)$$

$$\left(\frac{\partial H_{gv}}{\partial z} \right)_i = \frac{H_{gvi} - H_{gvi-1}}{\Delta z} \quad (41)$$

Consistent initialization for the resultant DAE system is achieved via a direct method of initialization (Vieira and Biscaia Jr., 2001). At the start-up time, the dryer was assumed to be filled with cold humid grains and air in equilibrium with this grain. The gas inlet properties (temperature and humidity) were perturbed using the exponential regularization function reproduced below.

$$\eta(t) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (42)$$

where τ is equal the 10^{-4} .

The gas conditions at the gas feed point are calculated by:

$$T_{g_{feed}} = T_{s0} + \eta(t) \cdot (T_{g0} - T_{s0}) \quad (43)$$

$$y_{g_{feed}} = y_{g_{eq}} + \eta(t) \cdot (y_{g0} - y_{g_{eq}}) \quad (44)$$

In the Figure 5, can be observed the effect of the regularization function about the curve of humidity of the gas. The humidity of the gas not regularized exceed the saturation curve indicating what part of the steam condensed. The same effect not was observed with the curve of humidity of gas regularized. In the Figure 6 is observed the profile of the humidity of the gas condensed for different height of the bed. This observation is possible divide the sorption isotherm not to show mathematical inconsistency after the relative humidity to exceed 1.

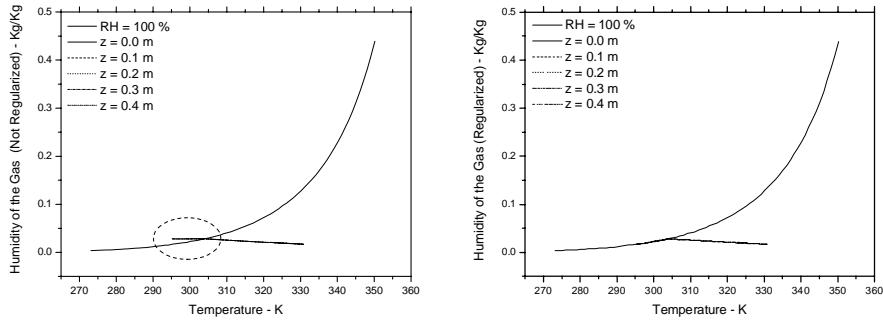


Figure 5 - Simulation results: humidity of the gas not regularized and regularized.

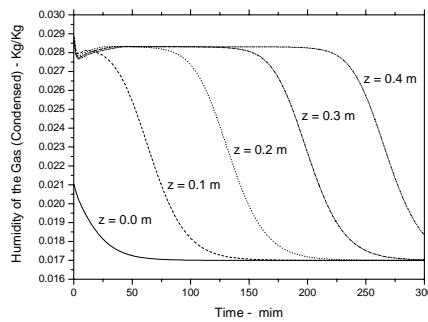


Figure 6 - Simulation results: humidity of the gas condensed for different height of the bed.

The results also indicate that the energy balance does not suffer great variations with the inclusion of the humidity condensed, in part due to the quantity which condensed being small compared to the humidity in the form of steam.

5. Conclusions

In this paper a novel strategy for resolution of floating index DAE and implicit discontinuities systems is presented. The smooth switching of models via a regularization function has been effective and adequate for all examples studied. The main advantages of the technique are:

- reduces algebraic manipulation for index reduction;
- no reinitialization strategy needed;
- ease of computational implementation;
- low computational effort.

The first example presented in this contribution, despite being simple, illustrates the application of the ideas discussed to a floating index DAE, demonstrating the robustness

and simplicity of the approach. Additional examples have been studied by the authors and the results obtained have always been encouraging.

The second example presented to applies the methodology for systems with model discontinuities which do not imply in index variation. The numerical simulation of fixed bed dryers (when the phenomena of the condensation can be observed) are typical examples.

The authors are presently investigating the application of the technique to optimal control systems with multivariable control, with emphasis on strategies for the detection of activation and deactivation of constraints.

References

- AsCher, U. M., Petzold, L., 1998, Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations, Classics in Applied Mathematics Series, SIAM.
- BROOKER, D. B., BAKKER-ARKEMA, F. W., HALL, C., 1974, Drying Cereal Grains, Westport, Connecticut, The AVI Publishing Company Inc..
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1996, "Dynamic Simulation and Optimization with Inequality Path Constraints", Computers and Chemical Engineering, v. 20, Suppl., pp.707-712.
- FEEHERY, W. F., BARTON, P. I., 1998, "Dynamic Optimization With State Variable Path Constraints", Computers and Chemical Engineering, v. 22, 9, pp.1241-1256.
- HONG, J., 1986, "Optimal Substrate Feeding Policy for a Fed Batch Fermentation with Substrate and Product Inhibition Kinetics", Biotechnology and Bioengineering, v. 28, pp. 1421-1431.
- LIOEN, W. M., DE SWART, J. J. B., VAN DER VEEN, W. A., 1998, "PSIDE users guide", Report MAS-R9834, CWI, Amsterdam, Holanda. URL: <http://www.cwi.nl/cwi/projects/PSIDE>.
- MAJER, C., MARQUARDT, W., GILLES, E. D., 1995, "Reinitialization of DAE's After Discontinuities", Computers and Chemical Engineering, v. 19, Suppl., pp.507-512.

- PARK, T., BARTON, P. I., 1996, "State Event Location in Differential-Algebraic Models", *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, v. 6, no 2, pp. 137-165.
- PONTRYAGIN, L. S., BOLTYANSKII, V. G., GAMKRELIDZE, R. V., MISCHENSKO, Y.F., 1963, *The Mathematical Theory of Optimal Processes*, 1st ed, Interscience, 1963.
- SUN, Y., PANTELIDES, C. C., CHALABI, Z. S., 1995, "Mathematical Modelling and Simulation of Near-Ambient Grain Drying", *Computers and Electronics in Agriculture*, v. 13, pp. 243-271.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994a, "Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems. 1. Problems without Path Constraints", *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, pp. 2111-2122.
- VASSILIADIS, V. S., SARGENT, R. W. H., PANTELIDES, C. C., 1994b, "Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems 2. Problems with Path Constraints", *Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, pp. 2123-2133.
- VIEIRA, R. C., BISCAIA Jr., E. C., 2000, "Direct Methods for Consistent Inicialization of DAE Systems", *Computers and Chemical Engineering*, v. 25, pp. 1299-1311.
- WU, B., WHITE, R. E., 2001, "An Initialization Subroutine for DAEs Solvers: DAEIS", *Computers and Chemical Engineering*, v. 25, pp. 301-311.

Floating Index of Inequality Constrained DAE Systems

Domingos Fabiano de S. Souza,^a Roberta C. Vieira,^b Evaristo C. Biscaia Jr.^a

^a*Programa de Engenharia Química, PEQ/COPPE/UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CP 68.502, CEP 21.945-970, Rio de Janeiro, Brazil*

^b*PETROBRAS Petróleo Brasileiro S.A, Av. República do Chile 65 room 802 CEP 20.035-900, Rio de Janeiro, Brazil.*

Abstract

Problems of dynamic optimisation with inequality path constraints are common in industrial plants. These constraints describe conditions of the process when it operates with extreme values of the variables, based on safety and/or economics restraints. Normally, during the optimal trajectory some of the inequality constraints are activated, and those remain active during a certain period of time. This behaviour can produce a change in the differential index of the DAE system, leading to the so-called floating index phenomena (Feehery and Barton, 1998). This contribution is motivated by the high computational costs typically associated with each of the steps for resolution of the floating index problem. The proposed new method allies the advantages of special regularisation functions with numerical codes which integrate higher index DAE systems, avoiding the reinitialisation and index reduction steps. All the inequality constraints are described by appropriate continuous functions and the resulting DAE system can be numerically integrated directly using numerical code such as PSIDE (Lioen et al., 1998). This new procedure has been applied to typical example: optimal control problem with a state variable inequality constraint (Jacobson and Lele, 1969). The main advantage of the new method is that the DAE system can be integrated continuously, preventing the restart of the numerical integration every time an inequality constraint is violated. The obtained results are identical with those obtained elsewhere encouraging new developments and extensions.

Keywords: dynamic optimisation, regularisation functions, floating index DAEs.

1. Introduction

Chemical processes models are limited by constraints that represent safety conditions, chemical or physical equilibrium or economical constraints. These constraints are generally represented by inequality equations and can be applied to control or state variables. During the dynamic simulation, the exact time in which an inequality restriction is activated is normally unknown. After the constraint is activated, a new equation (or information) must be included into the mathematical model, and this equation must be satisfied until the constraint is no longer active. A possible consequence of this fact is that the differential index of the differential-algebraic equation (DAE) system representing the mathematical model of the process can change during the dynamic simulation. This behaviour characterizes the so-called floating index DAE system.

Methods of resolution of dynamic optimisation problems with inequality constraints (in the state variables) can be classified in two groups, according to the level of adopted discretisation: total discretisation (or simultaneous approach) and partial discretisation (or sequential approach). In the first group, the dynamic system is totally discretised resulting in an algebraic system which, along with the equality and inequality constraints, is annexed to the code of non-linear programming (NLP). An advantage of this approach is the ease of manipulation of the inequality restrictions (Cuthrell and Biegler, 1987 and Longsdon and Biegler, 1989). However, its spectrum of application limited to a family of particularly simple and relatively small problems. For the second group, only the control variable is discretised. The resulting system of equations can be solved by techniques of dynamic programming or with non-linear programming (NLP) strategies. The main characteristic of this technique is that at each iteration of the NLP code a numerical integration of the dynamic system must be performed. Within the sequential approach, there are two different ways to handle the inequality constraints.

- (a) approximate methods.

In this context, the inequalities constraints are evaluated in the neighbourhood of the feasible region by:

- (i) introduction of square slack variable, converting inequality constraint to equality (Jacobson and Lele, 1969, Bryson and Ho, 1975);

- (ii) measuring the degree of violation of the constraint over entire trajectory by max operator or square max operator (Vassiliadis et al. 1994);

(iii) dislocating the limit of the constraint inside of an error defined previously - smooth approximation (Goh And Teo, 1988);

(iv) discretising the inequality constraints on a finite number of points and satisfying at the end of the segments (Chen and Vassiliadis, 2004).

(b) direct methods.

A second context consists of manipulating directly the inequalities and identifying the events (Park and Barton, 1994 and Guyou and Petzold, 2002) of activation and deactivation of the restriction. In this approach, the following steps are needed for the numerical resolution: (i) detection of activation/deactivation of constraints; (ii) index determination (and frequently index reduction); (iii) model switching; and (iv) determination of consistent initial conditions to restart integration (Feehery and Barton, 1998).

In both methods, every time an inequality constraint is reached, a new DAE system must be built, a new set of consistent initial conditions must be determined and an index reduction method must be applied in order to restart the numerical integration (Majer et al., 1995, Park and Barton, 1996, Guiyou and Petzold, 2002). The result of the activation and deactivation of the restrictions can be the change in the differential index of the system during the optimisation process and integration. The numerical effort associated to each of those steps increases the computational cost.

In this work, all the inequality constraints are described by appropriate continuous functions and the resulting DAE system can be integrated continuously. The new method allies the advantages of special regularisation functions with numerical codes that integrate higher index DAE systems, avoiding the reinitialisation and index reduction steps every time one inequality constraint is violated,. This new procedure has been applied to typical example with inequality state constrained. The code PSIDE (Lioen et al., 1998) has been used for numerical integration. The obtained results are identical with obtained elsewhere encouraging new developments and extensions.

2. Numerical Example

Two examples are presented to illustrate the proposed methodology: (i) an optimal control problem with a state variable inequality constraint (Jacobson and Lele, 1969); and (ii) state constrained Van der Pol oscillator (Vassiliadis et al. 1994).

Example 1 - Optimal Control Problem with a State Variable Inequality Constraint

This problem was originally presented by Jacobson and Lele (1969) and consists in minimize the state variable y_3 at final time ($t_{\text{final}}=1$) through manipulation of control variable $u(t)$, restricted between lower and upper bounds of -3.0 and 15, respectively. The dynamic system equations are presented in Table 1.

Table 1 – Set of Equations of Illustrative Example 1.

$\frac{dy_1}{dt} = y_2, \text{ with } y_1(0)=0$	(1)
$\frac{dy_2}{dt} = -y_2 + u, \text{ with } y_2(0)=-1$	(2)
$\frac{dy_3}{dt} = y_1^2 + y_2^2 + 0.005u^2, \text{ with } y_3(0)=0$	(3)
$y_2(t) - 8(t - 0.5)^2 + 0.5 \leq 0$	(4)

The main idea of the proposed methodology is to smooth, during the numerical resolution, the transition between the constrained condition to the unconstrained condition. This procedure needs both: (a) the selection of the regularization function and (b) determination of the conditions that describe the feasible and unfeasible region.

The use of regularization functions in the automatic initialisation of algebraic-differential systems has been proposed by Vieira and Biscaia Jr. (2000). The authors have established some criteria to guide the selection of those functions and their parameters. The chosen function for the present work is shown in Equation (5), where ξ is a parameter defined by the user (usually $0 < \xi \ll 1$).

$$\lambda(g, \xi) = \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{\left(\frac{g(y, t)}{\xi} \right)}{\sqrt{1 + \left(\frac{g(y, t)}{\xi} \right)^2}} \right) \quad (5)$$

The determination of the set equations that describe the feasible and unfeasible region is guided by an analysis of the behaviour of the inequality constraint before and after activation. In the illustrative example, the inequality is converted into a new algebraic equation with a new algebraic variable y^* , which is equal to the state variable y_2 when the inequality constraint is inactive and by $8(t - 0.5)^2 - 0.5$ when the inequality constraint is active. In the present example, the sum of the conditions that characterize the feasible region and unfeasible is represented by equation:

$$y^* = \lambda[g(y, t), \xi] \cdot y_2 + [1 - \lambda[g(y, t), \xi]] \cdot [8(t - 0.5)^2 - 0.5] \quad (6)$$

where $g(y, t)$ is inequality constraint and $\lambda[g(y, t), \xi]$ is the regularization function that presents the following property:

$$\lambda(\arg, \xi) \cong \begin{cases} 1 & \text{para } \arg < 0 \\ 0 & \text{para } \arg \geq 0 \end{cases} \quad (7)$$

The state variable y_2 is replaced by the new state variable y^* in Equations (1) and (3). Then, the new dynamic model system is rebuilt with the Equations (1) to (3) and Equation (6). It should be pointed out that the computer code PSIDE (Lioen *et al.*, 1998) has been used to perform the numerical integration of the correspondent DAE system. This code can deal with fully implicit DAE systems of index up to 3, and its selection eliminates the need of index reduction. In this example, the index of the system is equal to 2 during the activation of the inequality constraint. The profile obtained for objective function and state variable constrained and unconstrained are presented in Figure 2.

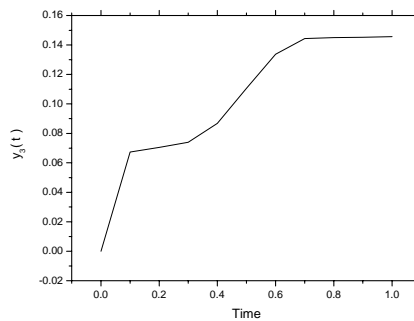


Figure 1 – Objective function profile for example 1.

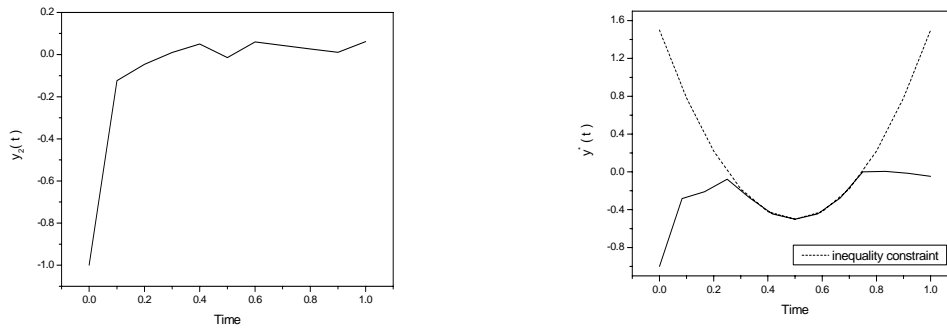


Figure 2 - State variable unconstrained and constrained profiles in example 1.

Example 2 - State Constrained Van der Pol Oscillator

This problem was presented by Vassiliadis et al. (1994) and consists of minimizing the state variable y_3 at final time ($t_{\text{final}}=5$) through manipulation of control variable $u(t)$, restricted between its lower and upper bounds of -0.3 and 1.0 , respectively.

Table2 – Set of Equations of Illustrative Example 2.

$$\frac{dy_1}{dt} = (1 - y_2^2) \cdot y_1 - y_2 + u, \quad y_1(0)=0 \quad (8)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = y_1, \quad y_2(0)=1 \quad (9)$$

$$\frac{dy_3}{dt} = y_1^2 + y_2^2 + u^2, \quad y_3(0)=0 \quad (10)$$

$$y_1(t) \geq -0.4 \quad (11)$$

In this example, the feasible region is limited by Equation (11). When this constraint is active, the time derivative of the variable y_1 (represented by the right hand side of Equation 8) must be null, what leads to an additional constraint for the control variable. Hence, two new algebraic equations are added to the original system in order to represent the restrictions on the state variable,

$$y^* = \lambda[g(y, t), \xi] \cdot y_1 + [1 - \lambda[g(y, t), \xi]] \cdot (-0.4) \quad (12)$$

and on the control variable.

$$\mathbf{u}^* = \lambda[\mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{t}), \xi] \cdot \mathbf{u} + [1 - \lambda[\mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{t}), \xi]] \cdot [\mathbf{y}_2 + 0.4 \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{y}_2^2)] \quad (13)$$

The results obtained for state variables are presented in the Figure 3.

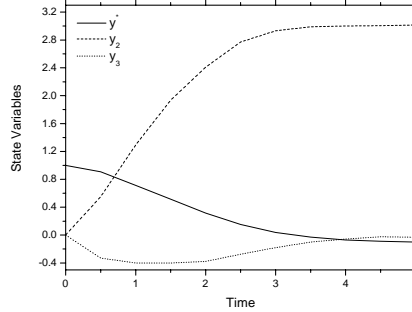


Figure 3 - States variables profiles in example 2.

3. Conclusions

In this contribution, a novel strategy for resolution of floating index DAE has been presented. In the two examples presented, the index of the DAE systems changed when the constraints became active, characterizing the floating index behaviour. The smooth switch between models via a regularisation function has been effective and suitable. Numerical results previously presented for those systems have been reproduced and the simulation effort has been greatly reduced, since the steps of reinitialization and index reduction have been completely eliminated of the simulation.

The regularization function used to change the value of the weight λ from 0 to 1 (or vice-versa) is continuous up to the first derivative. If a higher degree of continuity is required, alternative formulations have been tested by the authors. The reported function, Equation (5), has been considered the most suitable after a cost benefit analysis.

Additional examples have been studied by the authors, and the results obtained have always been encouraging. Unfortunately, due to space limitations, it has not been possible to present additional numerical results, or even to extend the discussion concerning the examples presented.

The methodology proposed in this work for handling the inequality constraints depends on the particular model being solved. However, this “taylor-made” characteristic does not compromise its utilization, due to the lack of extensive algebraic

manipulation (such as differentiations) and to the simplicity of final formulation of the problem.

References

- A. E. Bryson, Y-C. Ho, 1975, Applied Optimal Control, Hemisphere Publishing Corporation, Washington D. C.
- C. J. Goh, K. L. Teo, 1988, Control Parameterization: A Unified Approach to Optimal Control Problems with General Constraints, Automatica, v. 24, pp. 3-18.
- C. Majer, W. Marquardt, E. D. Gilles, 1995, Reinitialization of DAE's After Discontinuities, Computers and Chemical Engineering, v. 19, Suppl., pp. 507-512.
- D. H. Jacobson, M. M. A. Lele, 1969, Transformation Technique for Optimal Control Problems with a State Variable Inequality Constraint, IEEE Trans. Autom. Control, v. 14, 5, pp.457-464.
- J. E. Cuthrell, L. T. Biegler, 1987, On the Optimization of Differential-Algebraic Process Systems, AIChE J., v. 8, pp. 1257-1270.
- J. S. Logsdon, L. T. Biegler, 1989, Accurate Solution of Differential-Algebraic Optimization Problems, Ind. Eng. Chem. Res., v. 28, pp. 1628-1639.
- M. Guiyou, L. R. Petzold, 2002, Efficient Integration Over Discontinuities for Differential-Algebraic Systems, Mathematics and Computers in Simulation, v. 43, pp. 65-79.
- R. C. Vieira, E. C. Biscaia Jr., 2000, Direct Methods for Consistent Initialisation of DAE Systems, Computers and Chemical Engineering, v. 25, pp. 1299-1311.
- T. Park, P. I. Barton, 1996, State Event Location in Differential-Algebraic Models, ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation, v. 6, 2, pp. 137-165.
- T. W. C. C. Chen, V. S. Vassiliadis, 2004, Inequality path constraints in optimal control: a finite iteration ε -convergent scheme based on pointwise discretisation, Journal of Process Control, v. 15, pp. 353-362.

- V. S. Vassiliadis, R. W. H. Sargent, C. C. Pantelides, 1994, Solution of a Class of Multistage Dynamic Optimization Problems. 1. Problems with Path Constraints, Process Design and Control by Ind. Eng. Chem. Res., v. 33, pp. 2123-2133.
- W. F. Feehery, P. I. Barton, 1998, Dynamic Optimization With State Variable Path Constraints, Computers and Chemical Engineering, v. 22, 9, pp.1241-1256.
- W. M. Lioen, J. J. B. De Swart, W. A. Van Der Veen, 1998, PSIDE users guide, Report MAS-R9834, CWI, Amsterdam, Holanda. URL: <http://www.cwi.nl/cwi/projects/PSIDE>.

ESTUDO DAS CONDIÇÕES ÓTIMAS PARA UM PROCESSO SEMIBATELADA DE POLICONDENSAÇÃO EM ESTADO FUNDIDO DO POLI(TEREFTALATO DE ETILENO) (PET).

Jackson A. Oliveira, Domingos Fabiano S. Souza, Roberta C. Vieira, Evaristo C. Biscaia Jr., José Carlos Pinto*

Programa de Engenharia Química / COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro

Cidade Universitária - CP:68502 - Rio de Janeiro - 21945-970 RJ

pinto@peq.coppe.ufrj.br

Abstract

The objective of this work is to perform dynamic optimization for the transesterification and melt polycondensation of poly(ethylene terephthalate) – (PET). The optimal trajectories for operating variables (temperature and pressure) were obtained from a mathematical model built to evaluate the molecular weight distribution (MWD) during a semi batch polymerization process. By using an approach based on finite elements (with linear approximation in each element) and by applying the Particle Swarm Optimization algorithm, an iterative procedure was implemented in order to maximize molecular properties of the polymer as well as to minimize by-products and reaction time.

Introdução

O poli(tereftalato de etileno) (PET) é um polímero que apresenta uma gama significativa de aplicações no segmento de termoplásticos, em função da combinação de suas propriedades mecânicas e reológicas. Tais propriedades podem ser inferidas através da curva de distribuição de pesos moleculares (CDPM), que é uma das principais propriedades dos polímeros. Logo, é de interesse prático monitorar e controlar a CDPM durante o processo de polimerização a fim de obter resinas com propriedades finais ótimas. Como a medida da CDPM em tempo real ainda constitui um desafio tecnológico, a proposição de modelos matemáticos capazes de descrever a variação da CDPM durante a polimerização pode resultar, além do

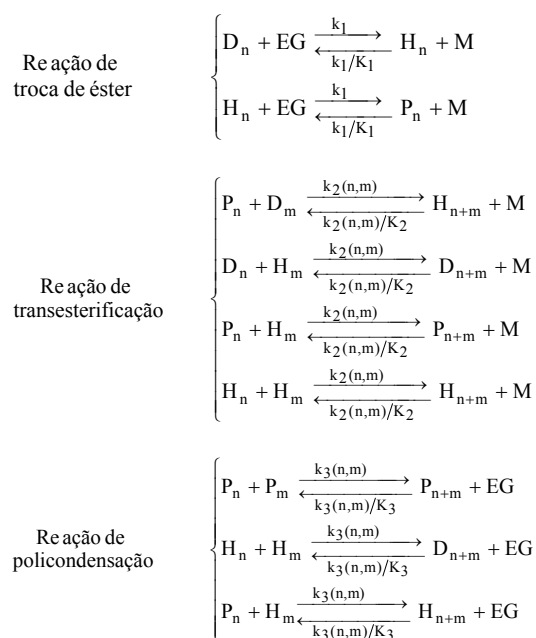
monitoramento e do controle da CDPM, a definição de políticas operacionais ótimas do processo.

É uma característica comum nos sistemas de policondensação o desenvolvimento de modelos cinéticos em termos de grupos funcionais. Em particular, esta abordagem clássica é determinada pela simplicidade com que as espécies poliméricas são tratadas. No entanto, o uso deste tipo de modelagem não permite obter informações a respeito da CDPM. Poucos são os modelos matemáticos que calculam a evolução de todas as espécies poliméricas durante a policondensação do PET e, em geral, encontram-se concentrados no estágio de oligomerização, onde o tamanho da cadeia polimérica é baixo ($i < 10$) e o sistema de equações resultante apresenta dimensão reduzida. No que diz respeito à aplicação de técnicas de otimização dinâmica aos processos de policondensação de PET, o número de trabalhos é também bastante reduzido e fazem uso apenas dos modelos matemáticos com a abordagem por grupos funcionais, sendo limitados quanto à avaliação da CDPM. Ha e Rhee (2002), por exemplo, aplicaram a técnica de programação dinâmica iterativa (PDI) na busca das condições ótimas de operação que minimizassem a formação de subprodutos indesejados no processo de policondensação em estado fundido do PET. O ponto forte desta técnica é a sua relativa simplicidade de implementação, no entanto, para modelos que possuem um maior grau de complexidade e uma dimensão maior em termos do sistema de equações, esta técnica pode ser inviável (Biegler e Grossmann, 2004). Uma outra técnica de otimização dinâmica é a de parametrização da variável de controle, cuja principal vantagem é a convergência num número reduzido de iterações, para métodos tipo gradiente (Ray, 1989). Shin *et al.* (1999) aplicaram esta técnica em busca da minimização do tempo de reação para o estágio de oligomerização de PET.

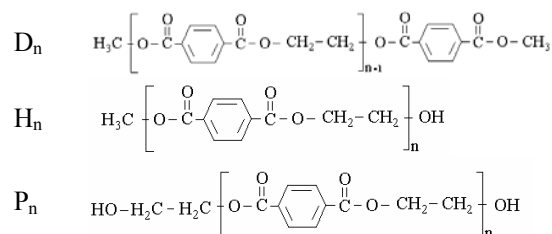
O objetivo deste trabalho é aplicar a técnica de parametrização da variável de controle, como procedimento de otimização, a um modelo matemático desenvolvido para avaliar a evolução de toda a CDPM durante o processo semibatelada de oligomerização e policondensação de PET em estado fundido. O propósito principal é identificar os melhores perfis de condições operacionais (temperatura e pressão) para maximizar as propriedades moleculares e minimizar o tempo de polimerização e a formação de subprodutos.

Considerações da Modelagem e da Otimização

A modelagem matemática da oligomerização e da policondensação do PET em estado fundido admitida neste trabalho está fundamentada nos balanços de massa de todas as espécies químicas presentes em reação (considerando a rota do dimetil tereftalato (DMT) com etileno glicol (EG)), na transferência de massa das espécies voláteis e no equilíbrio termodinâmico do reator e da coluna de separação. O mecanismo cinético está baseado nas reações principais e nas reações laterais de formação de acetaldeído, água, dietileno glicol (livre e ligado à cadeia) e de redistribuição de cadeias. Devido à limitação de espaço, somente as reações principais são apresentadas:



onde:



A abordagem numérica usada para reduzir a dimensão do sistema de equações e resolver o modelo desenvolvido foi a técnica de colocação ortogonal com adaptação da função de referência, apresentada por Oliveira et al. (2004). A extensão do modelo para o problema de otimização dinâmica foi realizada via parametrização das variáveis de controle (temperatura e pressão). A discretização destas variáveis no horizonte do tempo

foi admitida com base em elementos finitos a partir de uma aproximação linear em cada elemento, o que resultou menor esforço e maior robustez do método. A estimativa dos melhores perfis das variáveis de controle foi obtida a partir de um procedimento iterativo utilizando o algoritmo de otimização Particle Swarm Optimization (PSO). A função objetivo foi escrita de modo a maximizar o peso molecular médio (Mw) do polímero e a minimizar o tempo de policondensação e a formação de produtos laterais como acetaldeído, água e dietileno glicol.

Resultados

Conforme observado na Figura 1, o perfil ótimo de temperatura do reator apresenta-se na forma de um degrau crescente, discretizado em 6 elementos finitos com intervalos de tempo previamente estabelecidos. Ainda na Figura 1, é possível acompanhar o andamento das duas etapas (oligomerização e policondensação) a partir das curvas acumuladas de condensado removido. O comportamento da evolução da CDPM para o perfil ótimo obtido (Figura 2) apresenta um reduzido tamanho máximo de cadeia para o polímero no tempo final de reação. Como os resultados deste trabalho são preliminares e dizem respeito apenas à avaliação da abordagem de otimização utilizada, a inclusão dos intervalos de tempo como parâmetros de busca e uma análise de sensibilidade dos parâmetros cinéticos utilizados estão sob investigação. Tais parâmetros foram tirados da literatura e dizem respeito basicamente à etapa de oligomerização. Porém, a utilização dos mesmos para a etapa de policondensação (onde efeitos viscosos apresentam uma grande influência sobre a cinética) pode resultar em diferenças significativas na CDPM final.

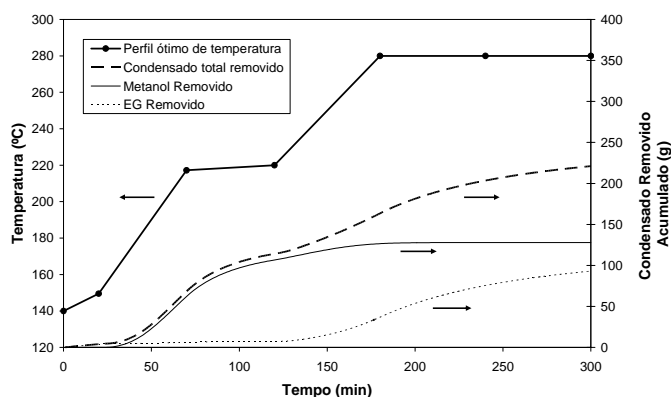


Figura 1 – Perfil ótimo de temperatura ao longo da oligomerização; evolução de condensado removido (total e separado em sua composição de metanol e EG).

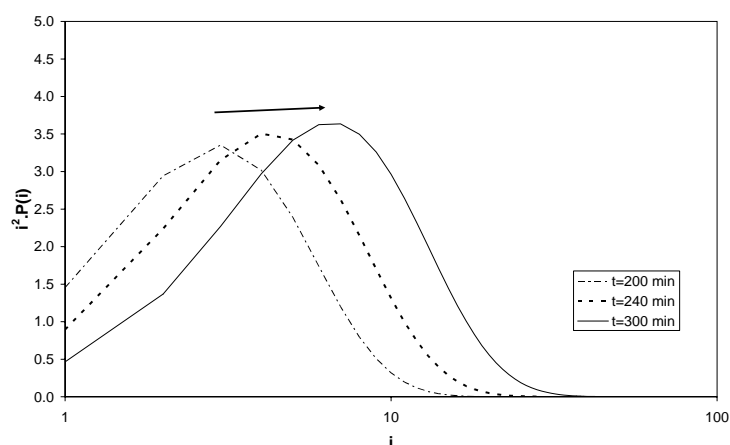


Figura 2 – Evolução da CDPM para a espécie polimérica Pn ao longo da reação.

Conclusões

Os resultados mostram que a estratégia de otimização proposta é hábil na busca dos perfis ótimos das variáveis de controle, considerando as etapas tanto de oligomerização como policondensação em estado fundido na formação do PET e levando em conta o cálculo de toda a curva de distribuição de pesos moleculares.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq pela concessão de bolsas de estudo e à Braskem S.A. pelo apoio técnico.

Referências Bibliográficas

1. L. Biegler; I. E. Grossmann; *Comp. Chem. Eng.*, 2004, 28, 1169.
2. K. Ha; H. Rhee; *J. Appl. Pol. Sc.*, 2002, 86, 993.
3. W. H. Ray, *Advanced Process Control*, Butterworths, Boston, 1989.
4. J. Shin; Y. Lee; S. Park; *Chem. Eng. J.*, 1999, 75, 47.
5. J. A. Oliveira; E.C. Biscaia Jr.; J.C. Pinto; in *Anais do XV Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, Curitiba, 2004.