



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

MATHEUS DE CALDAS BARRETO

**CONTROLE PREDITIVO MULTIVARIÁVEL APLICADO A PROCESSOS QUÍMICOS
NÃO LINEARES**

**João Pessoa - PB
Outubro de 2018**

MATHEUS DE CALDAS BARRETO

**CONTROLE PREDITIVO MULTIVARIÁVEL APLICADO A PROCESSOS QUÍMICOS
NÃO LINEARES**

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

Orientador: Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior

João Pessoa - PB

Outubro de 2018

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

B273c Barreto, Matheus de Caldas.

Controle preditivo multivariável aplicado a processos
químicos não lineares / Matheus de Caldas Barreto. -
João Pessoa, 2018.
68 f. : il.

Orientação: Arioston Araújo de Moraes Júnior.
Monografia (Graduação) - UFPB/CT.

1. controle preditivo. 2. controle avançado. 3.
processos não lineares. I. Moraes Júnior, Arioston
Araújo de. II. Título.

UFPB/BC

MATHEUS DE CALDAS BARRETO

**CONTROLE PREDITIVO MULTIVARIÁVEL APLICADO A PROCESSOS QUÍMICOS
NÃO LINEARES**

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

Aprovado em 01 de novembro de 2018

BANCA EXAMINADORA

Arioston Araújo de Moraes Júnior

Prof. Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior
(Orientador - UFPB)

Sebastião Ribeiro Ferreira

Prof. Dr. Sebastião Ribeiro Ferreira

(Avaliador – UFRN)

Leopoldo Alcázar

Prof. Dr. Leopoldo Oswaldo Alcázar Rojas

(Avaliador - UFPB)

Paulo Romero de Araújo Mariz

Paulo Romero de Araújo Mariz

(Avaliador - UFPB)

Dedico esse trabalho a família e amigos que me acompanharam e me deram suporte por todos esses anos.

AGRADECIMENTOS

Seria impossível citar todas as pessoas que me foram importantes nessa jornada, mas seria um crime não falar das seguintes:

Agradeço primeiramente a minhas mães Edna Elba de Caldas Barreto e Edna Telma Braga de Caldas por todo o amor e carinho que puseram em minha criação e também ao meu pai Saulo Barreto. Agradeço especialmente a meus irmãos Saulo Filho e Thiago Barreto, a meus primos Adairton de Caldas e Sarah Sophia e ao resto de minha família por todos os momentos que compartilhamos.

Agradeço aos meus amigos Marcelo Pedro, Aline dos Santos e Évila Araruna, por terem aguentado dividir o teto comigo em bons e maus momentos, assim como pelos momentos de descontração.

As minhas amigas Andressa Aziz, Ana Cláudia, Nayara Barbosa e Séfora Pereira pela companhia e pelos desafios e conversas divididas em dias de trabalho e de lazer.

A Carolina Morgante, Kennedy Santos e Henrique Haetinger pela amizade, pelas experiências divididas longe de casa e pelas longas discussões sobre Star Wars.

Agradeço ao Prof. Wallace Fragoso por acreditar em mim no começo do curso e por me guiar pela maior parte de minha vida acadêmica, sendo não apenas meu orientador, mas também meu amigo. Também o agradeço por me apresentar Sandman e Deep Space 9.

Agradeço a Prof.^a Vivian Stumpf, ao Prof. Genaro Clericuzi e ao Prof. Arioston de Moraes pela orientação e ensinamentos nos últimos anos do meu curso, assim como aos membros do LEQA e do LACAM, que me acompanharam por longos experimentos.

A Payam Zarin e Kevin Ming por me aceitarem em sua empresa e por me darem uma chance de crescer como profissional.

Aos professores e colegas da Universidade Federal da Paraíba e da University of Toronto, assim como ao povo de João Pessoa e de Toronto por terem me recebido e me tratado tão bem.

A todos aqueles que contribuíram para a realização desse trabalho e a conclusão desse curso, eu deixo os meus sinceros agradecimentos e os desejo uma vida cheia de realizações.

A ciência não pode prever o que vai acontecer. Só pode calcular a probabilidade de alguma coisa acontecer.

César Lattes

All Science is necessarily prophetic, so truly so, that the power of prophecy is the test, the infallible criterion, by which any presumed Science is ascertained to be actually & verily science. The Ptolemaic Astronomy was barely able to prognosticate a lunar eclipse; with Kepler and Newton came Science and Prophecy.

Samuel Taylor Coleridge

Lisa, get in here!... In this house we obey the laws of thermodynamics!!!

Homer Simpson

RESUMO

Nesse trabalho foi desenvolvido e testado em ambiente computacional um controlador preditivo baseado em modelo não linear (NMPC) com uso do MATLAB-Simulink®. O controlador foi projetado para operar tanto controlando quanto manipulando múltiplas variáveis em sistemas não lineares, podendo aplicar pesos específicos para definir a importância de cada variável assim como ser programado para considerar restrições operacionais tanto rígidas quanto flexíveis. O controlador foi testado no controle simulado de um CSTR encamisado no qual estava sendo realizada a síntese de etilenoglicol a partir da oxidação do óxido de propileno. Nesse modelo simulado, diversas condições operacionais e distúrbios foram aplicados ao sistema para fim de testes de performance do NMPC, com o mesmo sendo comparado com um controlador PID convencional, testes esses incluindo variações nas vazões de reagentes, mudanças nas temperaturas de entrada do reator (incluindo situações que levavam o sistema a regiões de instabilidade), mudanças de *setpoint*, entre outros. O NMPC demonstrou ser eficiente nesses testes, tendo desempenho melhor ou similar ao PID de acordo com os critérios de avaliação usados (erros integrados ISE, IAE e ITSE), se destacando em situações que se afastavam mais das regiões lineares do sistema, onde o desempenho do NMPC foi consideravelmente melhor. O controlador também se mostrou flexível, podendo ser facilmente programado para reagir a mudanças pré-definidas no sistema, assim como se adaptar a diferentes condições operacionais e a respeitar limites de segurança estabelecidos.

ABSTRACT

In this work, a predictive controller based on non-linear models (NMPC) was developed and tested in a computational environment using MathWorks'® MATLAB-Simulink®. The controller was designed to operate both controlling and manipulating multiple variables in non-linear systems, and it can also apply specific weights to define the importance of each variable as well as being programmed to consider both rigid and soft operational constraints. The controller was tested on the simulated control of a jacketed CSTR in which ethylene glycol synthesis was being carried out from the oxidation of the propylene oxide. In this simulated model, several operating conditions and disturbances were applied to the NMPC performance testing system, with it being compared to a conventional PID controller. Those tests included changes in reagent flow rates, changes in reactor inlet temperatures (including situations that led the system to regions of instability), setpoint changes, among others. The NMPC proved to be efficient in these tests, outperforming or being equivalent to the PID according to the evaluation criteria used (ISE, IAE and ITSE), standing out in situations that moved further away from the linear regions of the system, where NMPC performance was considerably better. The controller has also proved to be flexible, with simple alterations in its programming allowing it to react to pre-defined changes in the system, as well as adapt to different operating conditions, like forcing the controller to comply with established safety limits.

LISTA DE IMAGENS

Figura 1 - Esquematização de um reator CSTR com camisa de refrigeração.	17
Figura 2 – Múltiplos estados estacionários encontrados pela interseção de $G(T)$ (y) com $R(T)$ (a,b,c,d,e,f). Cada $R(T)$ se utiliza de um valor diferente da temperatura de entrada no reator.	22
Figura 3 - Comparação de diferentes ações do controlador PID.	24
Figura 4 - Controlador PID representado como um diagrama de blocos.	25
Figura 5 - Comparação de um controlador MPC não linear com um PID, com o sistema passando de uma região relativamente linear para uma não linear.	26
Figura 6 - Comparação da estrutura de um sistema de múltiplas variáveis controladas por controladores PID e MPC.....	28
Figura 7 - Representação de como determinar o tempo de amostragem adequado para uso no MPC.....	30
Figura 8 - Representação gráfica do horizonte de predição.	31
Figura 9 - Representação gráfica do horizonte de controle.	32
Figura 10 - Esquematização de um controlador MPC.....	34
Figura 11 - Esquematização dos valores preditos de uma variável $y(t+k t)$ dado uma sequência de sinais de controle $u(t+k)$	35
Figura 12 - Erros previstos pelo modelo interno do MPC.....	36
Figura 13 - Esquematização da estrutura interna de um controlador MPC genérico.	36
Figura 14 - Esquematização do CSTR utilizado na síntese de etilenoglicol.	39
Figura 15 - Gráficos de $G(T)$ e $R(T)$ variando os valores T_0 e da vazão mássica de água para a camisa do reator.....	42
Figura 16 – Fluxograma representado o diagrama de blocos usado no Simulink para sintonia do controlador PID.	44
Figura 17 – Representação do diagrama de blocos usado no Simulink mostrando a estrutura externa do NMPC	46
Figura 18 – Representação do bloco principal do NMPC usado no Simulink.....	46
Figura 19 - Fluxograma do algoritmo do NMPC	49
Figura 20 - Pirâmide de controle.	54
Figura 21 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema sem distúrbios.	55

Figura 22 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com distúrbios em F_{A0} ...	56
Figura 23 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com distúrbios em T_0	57
Figura 24 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com um distúrbio levando o sistema a uma região de instabilidade ao alterar o valor de T_0 de 75 °F para 65 °F.	59
Figura 25 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com o setpoint mudando de 0,04 lbmol/ft ³ para 0,06 lbmol/ft ³	60
Figura 26- C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com o setpoint mudando de 0,04 lbmol/ft ³ para 0,01 lbmol/ft ³	61
Figura 27- Gráficos de C_A e T em um sistema com C_A sendo controlada com o uso de NMPC com o setpoint mudando de 0,04 lbmol/ft ³ para 0,01 lbmol/ft ³ . Essa versão do controlador não utiliza de restrições flexíveis para evitar que a temperatura passe de 165 °F.	63
Figura 28 - Gráficos de C_A e T em um sistema com C_A sendo controlada com o uso de NMPC e PID com o setpoint mudando de 0,04 lbmol/ft ³ para 0,01 lbmol/ft ³ . Um limite de segurança foi imposto em T no valor de 165 °F com o uso de restrições flexíveis.....	64

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Parâmetros e condições de operação do CSTR para síntese de propilenoglicol.	42
Tabela 2 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema sem distúrbios.	55
Tabela 3 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0} . Os erros marcados com A foram integrados durante a simulação inteira, os erros marcados com B foram integrados a partir de 7,5 horas de simulação.	56
Tabela 4 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0}	58
Tabela 5 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0}	59
Tabela 6 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0}	61
Tabela 7 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0}	62

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	14
1.1	Objetivos.....	15
2.	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	16
2.1	Processos químicos não lineares e multivariáveis	16
2.2	Modelagem em um CSTR não-isotérmico	16
2.2.1	<i>Balanço de Massa.....</i>	<i>17</i>
2.2.2	<i>Balanço Geral de Energia</i>	<i>18</i>
2.2.3	<i>Balanço de Energia no Trocador de Calor</i>	<i>21</i>
2.2.4	<i>Estabilidade de um Reator CSTR</i>	<i>21</i>
2.3	Controle de processos não lineares.....	22
2.3.1	<i>Controlador Proporcional-Integral-Derivativo (PID).....</i>	<i>23</i>
2.3.2	<i>Controle Preditivo Linear e Não linear-MPC E NMPC</i>	<i>27</i>
3.	METODOLOGIA	39
3.1	Estudo de caso	39
3.1.1	<i>CSTR para produção de etilenoglicol</i>	<i>39</i>
3.1.2	<i>Modelo</i>	<i>40</i>
3.1.3	<i>Estabilidade</i>	<i>42</i>
3.2	PID.....	43
3.3	NMPC	45
3.3.1	<i>Algoritmo</i>	<i>46</i>
3.3.2	<i>Restrições</i>	<i>50</i>
3.4	Testes realizados	50
3.5	Condições do controlador	51
3.6	Critérios de avaliação	53
4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	55
4.1	Comparação dos controladores com o uso de distúrbios	55
4.1.1	<i>Processo sem distúrbios</i>	<i>55</i>
4.1.2	<i>Processo com distúrbios em Fa_0</i>	<i>56</i>
4.1.3	<i>Processo com distúrbios em T_0.....</i>	<i>57</i>

4.2	Comparação dos controladores com distúrbio gerando instabilidade	58
4.3	Comportamento com mudança de setpoint.....	60
4.4	Resultados com o uso de restrições flexíveis.....	62
5.	CONCLUSÕES	65
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	67

CONTROLE PREDITIVO MULTIVARIÁVEL APLICADO A PROCESSOS QUÍMICOS NÃO LINEARES

1. INTRODUÇÃO

Quando se trata de sistemas químicos e bioquímicos, comportamentos não lineares tornam-se mais regra do que exceção. Pode-se dizer que praticamente todos os sistemas naturais possuem esse tipo de comportamento, mesmo que em diferentes níveis de não linearidades (SAGUÉS & EPSTEIN, 2003).

Apesar dessa realidade, é comum a simplificação desse tipo de comportamento em sistemas lineares ao redor de regiões definidas, o que permite a cientistas e engenheiros a utilizar sistemas lineares para representar esses sistemas complexos, assim como desenvolver métodos lineares de sistemas de controle sintonizados para controlar sistemas não lineares em uma região estreita ao redor do ponto de operação (HENSON & SEBORG, 1997). No entanto, muitas vezes essa simplificação não é o bastante, uma vez que sistemas lineares de controle podem se tornar inefetivos em situações com comportamentos instáveis, não simétricos, oscilatórios e não lineares como um todo (ATHERTON & MAJHI, 1999).

É nesse contexto que o uso de controladores não lineares baseados em modelo se destacam, haja vista que eles podem lidar com o comportamento dessas funções, ganhando eficácia ao custo do aumento de complexidade do controlador. Entre os controladores baseados em modelo, controladores preditivos se destacam devido a considerarem não apenas o comportamento atual do sistema, mas também a projeção do mesmo no futuro, podendo evitar que o controlador force o sistema em regiões instáveis e também podendo agir antecipando comportamentos não condizentes; assim como reagindo a mudanças programadas antes que elas aconteçam, ao receber informação *feed-forward* (CAMACHO, 1998).

1.1 Objetivos

1.1.1. Objetivo Geral

Desenvolver uma metodologia para construção de um controlador preditivo não linear baseado em modelo (NMPC), implementá-lo em ambiente computacional e aplicá-lo em um processo químico não linear.

1.1.2. Objetivos Específicos

- ❖ Aplicar a metodologia de construção do NMPC para o controle de um reator contínuo de tanque agitado (CSTR) não isotérmico, empregado à síntese de etilenoglicol através da hidrólise do óxido de propileno;
- ❖ Comparar a performance do NMPC com um controlador PID tradicional, para tal objetivo será empregado os critérios integrais do erro;
- ❖ Flexibilizar o uso do NMPC para controlar múltiplas variáveis em diversas condições de operação e potencializá-lo para aceitar restrições lineares e não lineares, nova formulação de sua função custo.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Processos químicos não lineares e multivariáveis

Uma das características mais comuns de processos químicos como um todo é a não linearidade inerente a maior parte dos processos, incluindo comportamentos não lineares dinâmicos; o que pode causar diversos obstáculos a um controle efetivo desses processos, tais como interações com múltiplas variáveis entre as variáveis manipuladas e controladas, relações não simétricas, processos oscilatórios, entre outros (BEQUETTE, 1991). Muitos entre os processos químicos mais importantes para a indústria são conhecidos por possuir comportamento altamente não linear, alguns exemplos sendo destilação de alta pureza, reações químicas altamente exotérmicas, neutralização de pH e sistemas operando em batelada (HENSON & SEBORG, 1997).

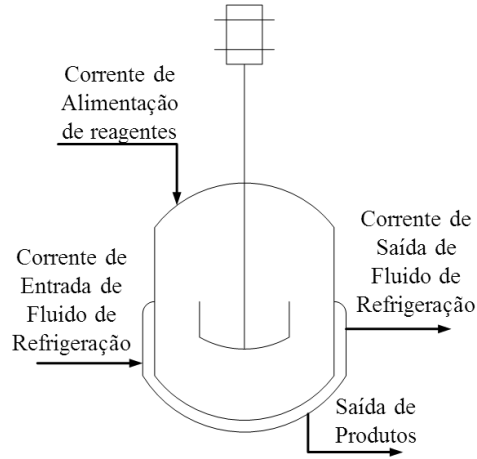
Praticamente todos os sistemas existentes na natureza, incluindo os biológicos, possuem comportamento altamente não linear e mesmo que próximo ao estado de equilíbrio eles possam ser aproximados por sistemas lineares sem muita perda, esses são incapazes de representar adequadamente a fenomenologia dos sistemas reais. Por exemplo, em processos químicos envolvendo reação, não linearidades surgem das próprias leis cinéticas que regem a velocidade de reação, uma vez que envolvendo duas ou mais moléculas já ocorre a criação de termos quadráticos nas derivadas de concentração (SAGUÉS & EPSTEIN, 2003). Devido a própria natureza desses processos, o controle de determinadas variáveis em toda a gama de condições nas quais ele pode operar por controladores lineares pode se tornar complicado.

2.2 Modelagem em um CSTR não-isotérmico

O reator contínuo de tanque agitado (CSTR), esquematizado na Fig. 1, é uma das categorias de reator mais utilizadas na indústria química, sendo comumente aplicado em processos em fase líquida que demandam agitação constante para garantir a homogeneidade do meio reacional.

Na modelagem do CSTR em estado transiente é necessária a construção de seus balanços de massa para todos os componentes e de energia, o que será abordado nos tópicos a seguir.

Figura 1 - Esquematização de um reator CSTR com camisa de refrigeração.



Fonte: Autor.

2.2.1 Balanço de Massa

Em um reator CSTR, ao se realizar o balanço de massa, é necessário primeiro definir as fronteiras do sistema, nesse caso o volume do reator e, então, pode-se desenvolver a equação global em regime transiente (FROMENT et al., 2000; FOGLER, 2009).

A estrutura geral da função de acúmulo diz que o acúmulo é igual ao que entra no sistema, menos o que sai somado a geração do componente dentro do volume de controle, portanto o balanço de massa para cada componente se dá pela Eq. (2.1):

$$\frac{dN_i}{dt} = F_{i0} - F_i + G_i \quad (2.1)$$

O termo de geração G_i pode ser definido como a integral da taxa de reação no volume de controle, o que para um CSTR (devido a consideração de mistura perfeita) assume a forma da Eq. (2.2):

$$G_i = \int r_i dV = r_i V \quad (2.2)$$

Portanto, o balanço de massa parcial, para um reator de volume constante, assume a forma da Eq. (2.3):

$$\frac{dN_i}{dt} = F_{i0} - F_i + r_i V \quad (2.3)$$

Dividindo ambos os lados da equação (2.3) pelo volume do reator, tem-se a Eq. (2.4):

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{v_0(C_{i0}-C_i)}{V} + r_i \quad (2.4)$$

Onde: v_0 , C_{i0} e C_i são, respectivamente, a vazões volumétrica e as concentrações de alimentação e de produto no reator.

2.2.2 Balanço Geral de Energia

Para o balanço de energia em um reator, a primeira coisa a se considerar é a primeira lei da termodinâmica aplicada para um sistema aberto (HAYES e MmBAGA, 2012; COKER, 2001; FOGLER, 2009).

Para um sistema fechado, temos que o balanço de energia pode ser representado pela Eq. (2.5):

$$d\hat{E} = \delta Q - \delta W \quad (2.5)$$

Entretanto, os reatores CSTR em estudo são sistemas abertos com escoamento contínuo, nos quais tanto energia quanto massa podem ser trocados nas fronteiras do sistema, dessa forma a primeira lei da termodinâmica aplicada ao CSTR pode ser representada pela Eq. (2.6):

$$\frac{dE_{Sistema}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^n F_i E_i|_{entrada} - \sum_{i=1}^n F_i E_i|_{saída} \quad (2.6)$$

Onde Q representa o calor trocado nas paredes do sistema; $\dot{W}$ é a taxa de trabalho feito pelo sistema nas vizinhanças; F_i é a vazão molar ou mássica do componente i ; e E_i é a Energia molar ou mássica do componente i .

O termo de trabalho, Eq. (2.6), pode ser separado em trabalho de escoamento e trabalho de eixo, como mostrado na Eq. (2.7):

$$\dot{W} = \sum_{i=1}^n F_i P \bar{V}_i|_{saída} - \sum_{i=1}^n F_i P \bar{V}_i|_{entrada} + \dot{W}_s \quad (2.7)$$

Assim, a Eq. (2.6) pode ser rearranjada na forma da Eq. (2.8):

$$\frac{dE_{Sistema}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_i (E_i + P \bar{V}_i)|_{entrada} - \sum_{i=1}^n F_i (E_i + P \bar{V}_i)|_{saída} \quad (2.8)$$

Temos que a energia interna E_i é a somatória das energias da espécie i , como a energia interna U_i , a cinética, potencial gravitacional, entre outras, no entanto, em quase todas as situações envolvendo reatores químicos os termos relacionados a energia interna são, consideravelmente, maiores que os outros somados, podendo-se fazer a aproximação mostrada na Eq. (2.9):

$$E_i \cong U_i \quad (2.9)$$

A entalpia de um sistema pode ser definida como o produto da soma da energia interna do mesmo com o valor do produto $P\bar{V}_i$ (pressão x volume específico). Logo:

$$H_i = U_i + P\bar{V}_i \quad (2.10)$$

Simplificadamente, o balanço de energia assume a forma da Eq. (2.11):

$$\frac{d\hat{E}_{Sistema}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W}_s + \sum_{i=1}^n F_i H_i|_{entrada} - \sum_{i=1}^n F_i H_i|_{saida} \quad (2.11)$$

A energia do sistema por sua vez, pode ser definida como a somatória de todas as energias de seus componentes, e fazendo a mesma aproximação com a energia interna que foi feita anteriormente, chegamos na Eq. (2.12) e (2.13):

$$\hat{E}_S = \sum_{i=1}^n N_i E_i = \sum_{i=1}^n N_i U_i = \sum_{i=1}^n N_i (H_i - P\bar{V}_i) = \sum_{i=1}^n N_i H_i - P \sum_{i=1}^n N_i \bar{V}_i \quad (2.12)$$

$$\hat{E}_{Sistema} = \sum_{i=1}^n N_i H_i - P\bar{V}_i \quad (2.13)$$

Nos casos que $P\bar{V}_i$ não é variante com o tempo, a Eq. (2.13) pode ser diferenciada no tempo, assumindo a forma da Eq. (2.14):

$$\frac{d\hat{E}_{Sistema}}{dt} = \sum_{i=1}^n N_i \frac{dH_i}{dt} + \sum_{i=1}^n H_i \frac{dN_i}{dt} \quad (2.14)$$

Sabemos que a entalpia de um componente pode ser calculada a partir da soma da entalpia em uma temperatura de referência com a integral de Cp_i em função da temperatura partindo da referência até a temperatura real; dessa forma, a derivada da entalpia em função do tempo pode ser descrita através da Eq. (2.15):

$$\frac{dH_i}{dt} = Cp_i \frac{dT}{dt} \quad (2.15)$$

Substituindo a Eq. (2.15) na Eq. (2.14), tem-se a Eq. (2.16):

$$\frac{d\hat{E}_{Sistema}}{dt} = \frac{dT}{dt} \sum_{i=1}^n N_i C p_i + \sum_{i=1}^n H_i \frac{dN_i}{dt} \quad (2.16)$$

Através do balanço de massa parcial dos componentes, Eq. (2.3), considerando todas as taxas de reação como função da taxa de consumo de um reagente “A” e com v_i representando o coeficiente estequiométrico do componente em questão, sabe-se que:

$$\frac{dN_i}{dt} = r_i V + F_{i0} - F_i = -v_i r_A V + F_{i0} - F_i \quad (2.17)$$

Portanto:

$$\sum_{i=1}^n H_i \frac{dN_i}{dt} = -r_A V \sum_{i=1}^n v_i H_i + \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i \quad (2.18)$$

Onde podemos considerar:

$$\sum_{i=1}^n v_i H_i = \Delta H_{Rx} \quad (2.19)$$

Substituindo as Eqs. (2.17), (2.18) e (2.19) em (2.16), a equação não estará mais em função de E_i , e ao isolar a derivada da temperatura do meio reacional em relação ao tempo, pode-se obter a seguinte relação:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - W_s - \sum_{i=1}^n \dot{F}_{i0} (H_i - H_{i0}) + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{\sum_{i=1}^n N_i C p_i} \quad (2.20)$$

No caso de não haver mudança de fase, a equação pode ser simplificada para:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - W_s - \sum_{i=1}^n \dot{F}_{i0} C p_i (T - T_{i0}) + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{\sum_{i=1}^n N_i C p_i} \quad (2.21)$$

No caso de reações em fase líquida, o termo $\sum_{i=1}^n \dot{F}_{i0} C p_i (T - T_{i0})$ pode ser simplificado para ser expressado em termos da vazão de um reagente A da seguinte maneira:

$$\sum_{i=1}^n N_i C p_i \cong N_{i0} C p_i = N_{A0} \sum \theta_i C p_i = N_{A0} C p_s \quad (2.22)$$

$$\sum \dot{F}_{i0} C p_i = F_{A0} C p_s \quad (2.23)$$

Lembrando que θ_i é relacionado com a proporção das vazões molares dos componentes comparados com a vazão molar de A.

Substituindo no balanço de energia, temos a seguinte relação simplificada para a derivada da temperatura do meio reacional em função do tempo:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0}Cp_s(T - T_0) + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{\sum_{i=1}^n N_i Cp_i} \quad (2.24)$$

2.2.3 Balanço de Energia no Trocador de Calor

Em um trocador de calor, o calor trocado entre o lado quente e o frio pode ser definido através da seguinte relação (no caso do CSTR, a temperatura é homogênea dentro do reator) (HAYES e MMBAGA, 2012; COKER, 2001; FOGLER, 2009).

$$\dot{Q} = UA\Delta T_{ln} = \frac{UA((T - T_{a2}) - (T - T_{a1}))}{\ln[(T - T_{a1})/(T - T_{a2})]} = \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln[(T - T_{a1})/(T - T_{a2})]} \quad (2.25)$$

Realizando o balanço de energia para a camisa do reator, considerando que o fluido refrigerante não muda de fase e desprezando o termo de acúmulo, pode-se obter a relação mostrada na Eq. (2.26):

$$0 = \dot{m}_c Cp_c(T_{a1} - T_R) - \dot{m}_c Cp_c(T_{a2} - T_R) - \dot{Q} \quad (2.26)$$

Simplificando, temos:

$$\dot{Q} = \dot{m}_c Cp_c(T_{a1} - T_{a2}) = \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln[(T - T_{a1})/(T - T_{a2})]} \quad (2.27)$$

Resolvendo para a temperatura de saída do fluido refrigerante (T_{a2}) temos:

$$T_{a2} = T - (T - T_{a1}) \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c Cp_c}\right) \quad (2.28)$$

Substituindo a Eq. (2.28) na Eq. (2.27), temos a Eq. (2.29):

$$\dot{Q} = \dot{m}_c Cp_c \left[(T_{a1} - T) \left[1 - \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c Cp_c}\right) \right] \right] \quad (2.29)$$

2.2.4 Estabilidade de um Reator CSTR

Existem certos casos nos quais um reator CSTR pode assumir mais de um resultado possível para a resolução do sistema de equações de balanço, ou seja, mais de um valor possível para o estado estacionário (múltiplos estados estacionários). Para estudar essas condições, podemos utilizar o balanço de energia no estado estacionário (Eq. 2.24) e dividi-lo em duas partes, da seguinte forma (considerando $\dot{W}_s$ como negligenciável):

$$\dot{Q} - F_{A0}Cp_s(T - T_0) = (\Delta H_{Rx})(-r_A V) \quad (2.30)$$

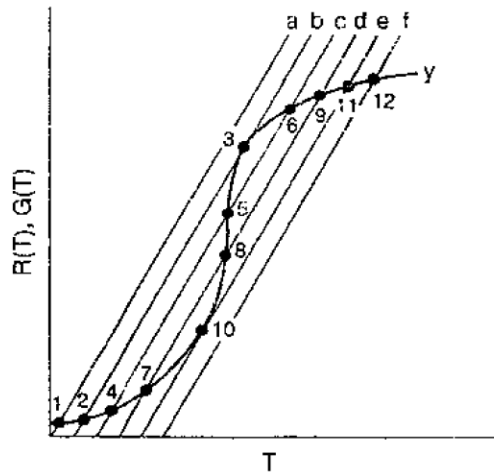
O termo da direita e da esquerda da Eq. (2.30) representam, respectivamente, o calor gerado pela reação e o removido do reator, tanto pelo trocador de calor quanto pelo transporte de escoamento. Se colocarmos essas funções como função da temperatura, teremos as Eqs. (2.31) e (2.32):

$$G(T) = (\Delta H_{Rx})(-r_A V) \quad (2.31)$$

$$R(T) = \dot{Q} - F_{A0} C_{p_s} (T - T_0) \quad (2.32)$$

A interseção entre essas duas curvas dará os estados estacionários possíveis para o sistema, de acordo com o gráfico da Fig. 2. Perceba que ao redor da reta “e” o estado estacionário pode variar bruscamente com uma pequena variação no valor de T_0 . Outras variáveis também possibilitam variações na posição da curva R.

Figura 2 – Múltiplos estados estacionários encontrados pela interseção de $G(T)$ (y) com $R(T)$ (a,b,c,d,e,f). Cada $R(T)$ se utiliza de um valor diferente da temperatura de entrada no reator.



Fonte: Adaptada de FOGLER (2009).

2.3 Controle de processos não lineares

Quando se trata de processos químicos e bioquímicos, a não linearidade de sistemas é uma realidade inevitável, portanto na indústria a presença de processos com comportamento não linear não é incomum, isso é, a relação entre as variáveis de entrada e as controladas varia dependendo das condições de operação do processo (HENSON & SEBORG, 1997). Normalmente, quando essas não linearidades não são severas, o sistema de controle pode ser

projetado tendo em mente uma versão linearizada do processo ao redor do estado estacionário. No entanto, ao operar em condições mais distantes desses pontos, ou em processos muito não lineares ou oscilatórios, esses sistemas lineares de controle tem uma tendência a possuir baixa performance (HENSON & SEBORG, 1997) (ATHERTON & MAJHI, 1999) (SEBORG, 2016).

Na indústria química, existem diversos processos que não apenas são altamente não lineares, como também operam em distintas condições operacionais. Devido a isso, quando são empregados controladores PID convencionais, normalmente esses são ajustados com parâmetros conservadores, que apresentam desempenho sacrificado e mesmo assim, em alguns casos, apresentam resultados inadequados. Haja vista tais limitações, o uso de controladores alimentação “*feed-forward*”, que se utilizam de modelos não lineares do sistema, ganharam certo destaque para controle de processos, já que esses podem se adaptar a diversas condições de operação e levam em conta a não linearidade dos sistemas em questão (CAMACHO, 1998).

Nesse trabalho serão utilizadas duas estratégias para o controle de um sistema não linear, um controlador PID convencional e um NMPC, as vantagens e desvantagens de cada abordagem serão discutidas nas próximas seções.

2.3.1 Controlador Proporcional-Integral-Derivativo (PID)

O controlador proporcional-integral-derivativo (PID) é um dos algoritmos de controle mais utilizados para controle industrial devido a sua simplicidade e robustez. Essa classe de controladores tem seu funcionamento baseado em feedback, onde o controlador receberá um sinal que estará representando a diferença entre o valor de uma das variáveis de processo e seu setpoint e com isso calculará o sinal a ser enviado a um atuador para alterar o valor de uma variável manipulada e assim reduzir esse erro (SMITH & CORRIPIO, 2005).

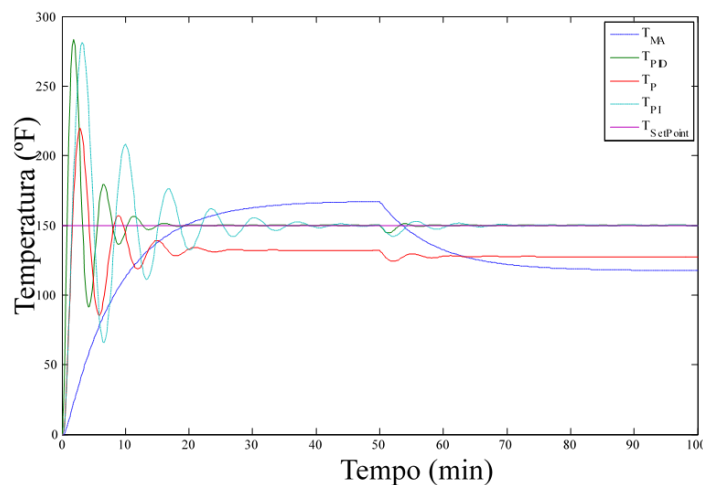
O controlador PID pode ser visto como a combinação da ação de 3 tipos de respostas ao erro, uma resposta proporcional, a integral e a derivativa. A resposta proporcional é composta pelo valor de uma constante multiplicada pelo sinal do erro, com essa constante K_c representando a proporção da intensidade do sinal de resposta na saída do controlador para a intensidade do sinal do erro recebido. Um dos problemas em se usar apenas essa resposta no controlador, é a existência de erros em estado estacionário. Na operação desse tipo de controlador, quando o erro vai se aproximando do valor do *setpoint*, seu valor se torna pequeno o bastante para que a

resposta do controlador não seja o suficiente para reduzir o erro total para zero, assim o sistema em malha fechada acaba encontrando um equilíbrio fora do *setpoint*. Esse problema pode ser corrigido com a adição de um controlador integral. Já a resposta integral, integra o sinal do erro em um determinado período de tempo e o multiplica por uma constante, o que acaba resultando na eliminação de erros constantes como os que aconteciam em um controlador puramente proporcional, haja vista que mesmo erros pequenos aumentam a resposta integral ao serem acumulados ao longo do tempo. Pode-se dizer que a resposta integral é afetada não apenas pela intensidade do erro, como também pela duração do mesmo.

A resposta derivativa não considera o erro em si, mas sim a sua taxa de variação multiplicada por uma constante. O seu papel é a suavização do sinal de resposta do controlador, uma vez que a derivada só irá alcançar valor zero quando o erro estiver constante. O efeito prático disso é a redução de sobre-elevações “*overshoots*” e oscilações da resposta do processo, em comparação com o uso de um controlador P ou PI (SMITH, CARLOS A. & CORRIPIO, 2005) (ÅSTRÖM & HÄGGLUND, 2006) (COUGHANOWR, D; & KOPPEL, 2009)

O efeito de cada um dos controladores internos pode ser visto com clareza na Fig. 3, que compara as diferentes combinações desses controladores em uma malha de temperatura ($SP=150^{\circ}F$), T_P , T_{PI} e T_{PID} , com a condição de malha aberta, T_{MA} , (sem controle).

Figura 3 - Comparação de diferente ações do controlador PID.



Fonte: MORAIS JR (2018)

De acordo com o gráfico da Fig. 3 o controlador sem ação integrativa, T_P , tem a possibilidade da formação de um erro em estado estacionário, e que controladores com um

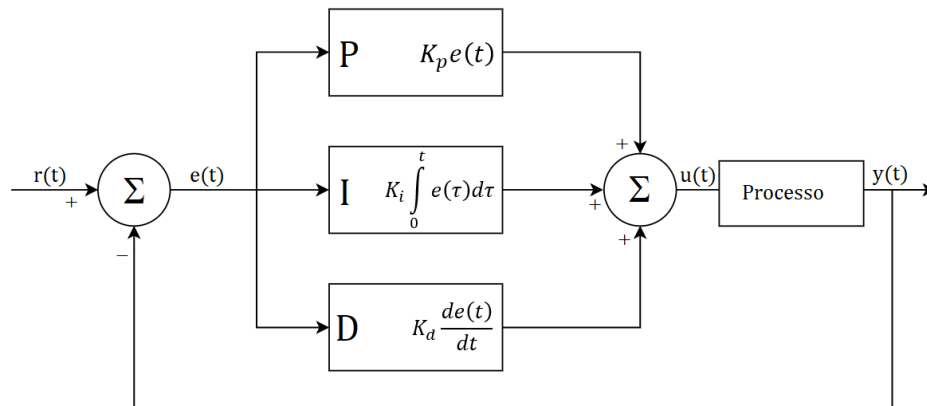
componente derivativo, T_{PID} , tendem a alcançar o estado estacionário mais rápido, com o controle PID combinando as vantagens dos demais. Com a somatória dos três componentes, o sinal de saída de um controlador PID assume a forma da Eq. (2.33):

$$u(t) = u(0) + K_p e(t) + K_i \int_0^t e(\tau) d\tau + K_d \frac{de(t)}{dt} \quad (2.33)$$

Onde K_p é o ganho proporcional; K_i é o ganho integral, descrito por alguns fabricantes como $K_i = K_p/\tau_i$, sendo τ_i a constante de tempo integrativa; K_d é o ganho derivativo, descrito por alguns fabricantes como $K_i = K_p \cdot \tau_D$, sendo τ_D a constante de tempo derivativa; $e(t)$ é o erro em um determinado tempo; e $u(0)$ e $u(t)$ são, respectivamente, o bias e o sinal do controlador em um determinado tempo.

A representação da Eq. (2.33) em diagrama de blocos é apresentada na Fig. 4.

Figura 4 - Controlador PID representado como um diagrama de blocos.



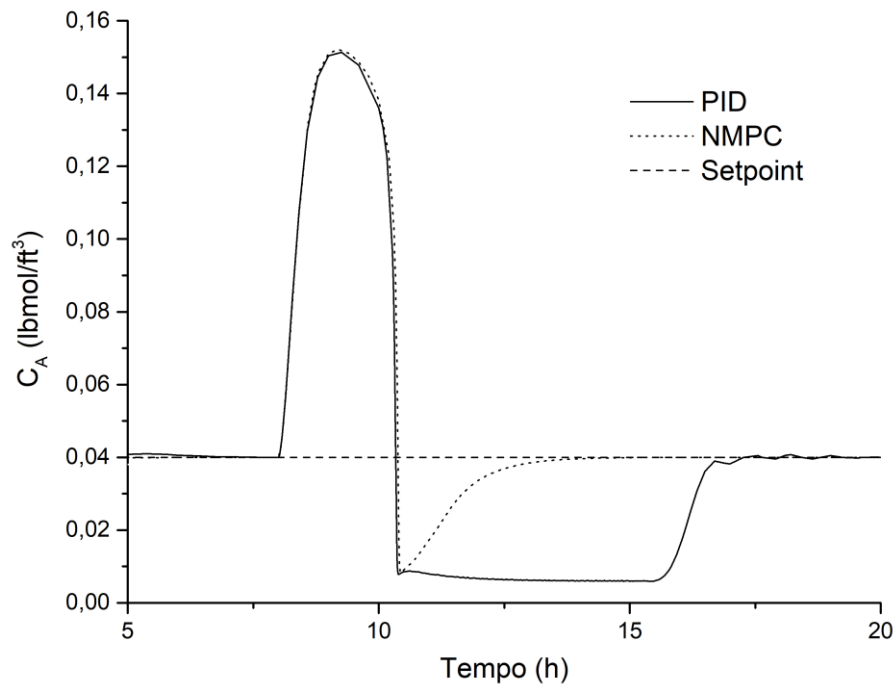
Fonte: Autor

Para que o controlador PID seja efetivo, é necessário que seja feita a sintonia dos ganhos de cada um dos controladores internos. De maneira geral, o aumento de K_p diminui o tempo de ascensão, mas aumenta o *overshoot* e a oscilação da variável controlada, o aumento de K_i tem o mesmo efeito, somado com o aumento do tempo necessário para o sinal estabilizar, o aumento de K_d diminui o *overshoot*, mas aumenta o tempo necessário para o sinal estabilizar. Para sintonia desses parâmetros alguns métodos são empregados em malha aberta e fechada (BHAGWAN et al, 2016).

Apesar de controladores PID serem robustos e flexíveis para diferentes aplicações, eles possuem algumas limitações. Dentre as quais, a possibilidade de não obter respostas não ótimas em sistemas não lineares, cujas variáveis saiam da região viável a qual o controlador foi sintonizado. Devido a linearidade do controlador, seu desempenho pode ser afetado na presença de sistemas com processos ressonantes, instáveis ou com processos integrativos (ATHERTON & MAJHI, 1999). Outro problema comum é o efeito de ruído no sinal de erro, o que pode afetar o componente derivativo do controlador.

Na Fig. 5 é possível ver o que pode acontecer com a resposta de um PID quando o sistema sofre um distúrbio que o força a sair da zona linear na qual ele foi sintonizado:

Figura 5 - Comparação de um controlador MPC não linear com um PID, com o sistema passando de uma região relativamente linear para uma não linear.



Fonte: Autor.

Existem diferentes maneiras de compensar alguns desses problemas, como usar sistemas de ganho agendado (do inglês *gain-scheduled*), onde os ganhos do controlador mudam de acordo

com a região que as variáveis do processo se encontram, usar diferentes malhas formadas por combinações de controles PI e PD para sistemas ressonantes e o uso de filtros para redução do ruído no sinal (ATHERTON & MAJHI, 1999).

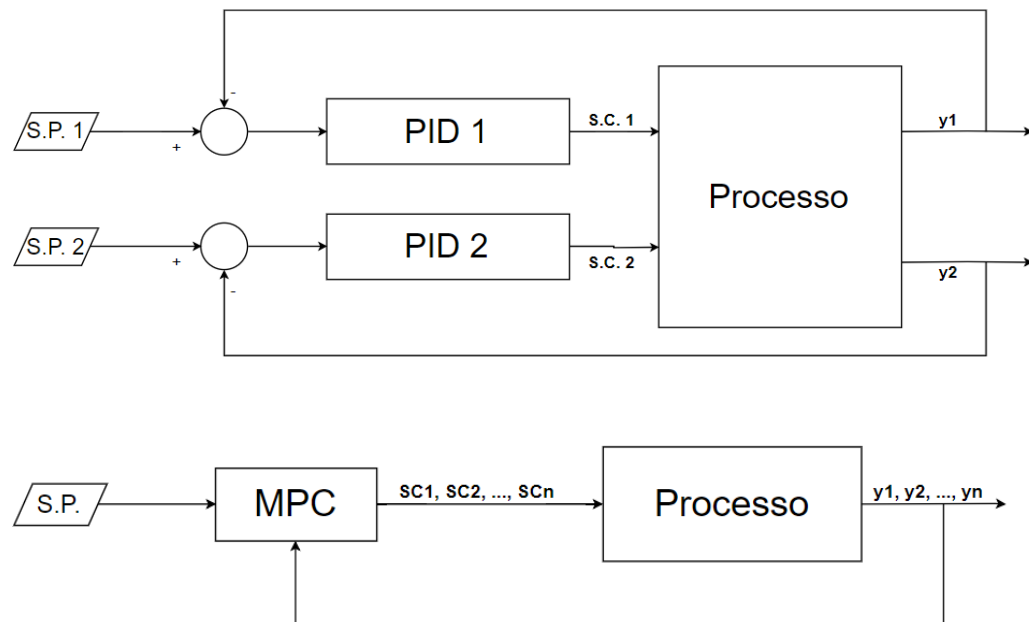
2.3.2 Controle Preditivo Linear e Não linear-MPC E NMPC

O modelo de controle preditivo (do original em inglês *Model Predictive Control* ou MPC), é um método avançado de controle que utiliza um modelo interno da planta sendo controlada para prever o efeito de uma mudança nos sinais de controle e usar essa informação para escolher uma sequência de sinais de controle, minimizando a diferença das variáveis do sistema de seus respectivos *setpoints* ao decorrer do tempo.

As bases para a criação e uso do MPC possui dezenas de métodos e com diferentes algoritmos para cumprir o mesmo objetivo. O ponto comum entre os métodos é o uso de um modelo para prever as saídas do processo no futuro em um dado instante de tempo, o cálculo de uma sequência de controle para minimizar a função de custo do sistema e o uso de um horizonte de controle recendente, com o primeiro sinal da sequência sendo aplicado e o sistema progredindo no tempo a cada tempo de amostragem e repetindo o processo (CAMACHO, 1998).

O uso de um MPC para o controle de um processo tem várias vantagens quando comparado com o uso de controladores PID, já que é possível construir e sintonizar o controlador com poucas informações relacionadas ao processo, já que seus conceitos são bem intuitivos, casos MIMO podem ser controlados com mais eficiência, já que o controlador levará em conta a interação entre diferentes sinais de controle no sistema, introduz controle *feedforward* de maneira intrínseca para compensar mudanças medíveis, pode trabalhar com restrições que podem ser mudadas *on-the-fly* sem afetar a sintonia do controlador, com a própria sintonia podendo ser adaptada para diferentes condições e tempos de operação (WANG, 2009).

Figura 6 - Comparação da estrutura de um sistema de múltiplas variáveis controladas por controladores PID e MPC.



Fonte: Autor.

A principal diferença entre os métodos de aplicação do MPC é a maneira pela qual o modelo do processo é representado, os algoritmos para sua implementação são:

- *Model Algorithmic Control*: MPC Usando um modelo de resposta-impulso;
- *Dynamic Matrix Control*: MPC usando um modelo de resposta-passo;
- *Generalized Predictive Control*: MPC usando um modelo CARIMA com funções de transferência;
- *Real-Time System Identification*: MPC Adaptativo, com a linearização ocorrendo ao redor do estado atual da planta;
- Com tratamento de incertezas: MPC Robusto, MPC Estocástico;
- Com otimização paramétrica: MPC Explícito;
- MPC Não Linear (NMPC).

Uma das principais desvantagens da maioria dos MPCs é a necessidade de obtenção dos estados do sistema e a medição de distúrbios para melhorar a performance do controlador. Em muitos casos esses valores simplesmente não podem ser medidos diretamente, fazendo necessário o uso de estimadores de estado. A estrutura do modelo interno também pode ser editada para mitigar essa necessidade, com o uso de redes neurais, logica fuzzy ou filtros de kalman internos (CAMACHO, 1998).

2.3.2.1 Definições

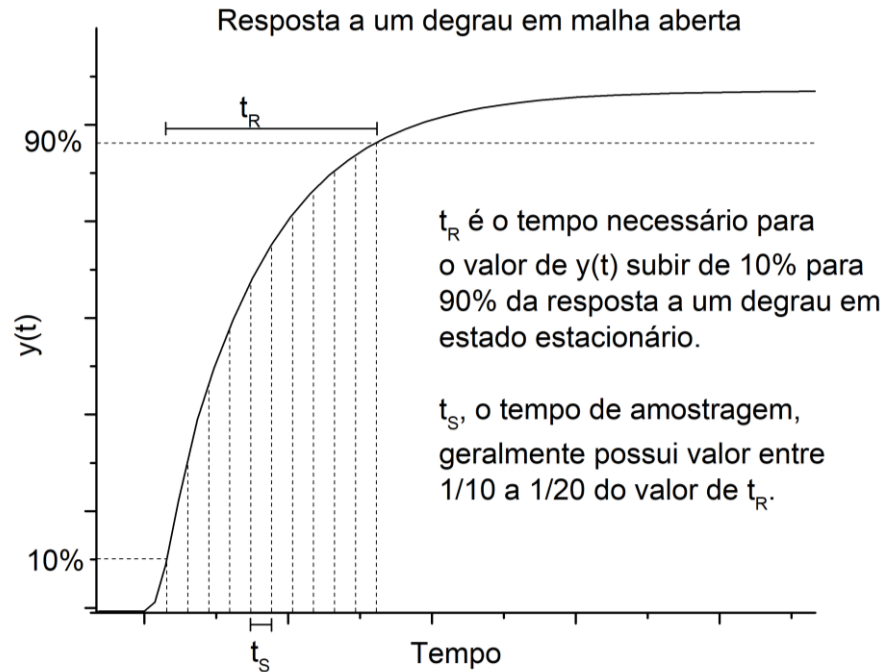
2.3.2.1.1 Tempo de amostragem

O MPC é baseado em modelos discretizados do sistema que ele está controlando. Uma vez que cada ciclo do MPC é necessário realizar uma rotina de modelagem e otimização, o que toma tempo, é necessário que cada ciclo ocorra dentro de um determinado tempo de amostragem fixo.

Tempos de amostragem curtos tendem a controlar melhor o sistema, mas podem aumentar consideravelmente o tempo de cálculo, o que em um sistema real seria um problema considerável, uma vez que em cada tempo de amostragem o controlador deve ser capaz de efetuar toda a rotina de modelagem e otimização além de outras tarefas necessárias ao funcionamento efetivo do controlador.

Uma prática padrão na indústria para a determinação do tempo de amostragem ideal é considerar o tempo de amostragem como entre 1/10 e 1/20 vezes o tempo de ascensão do sistema em um loop aberto (tempo entre as variáveis irem de 10% a 90% da resposta em estado estacionário) com a aplicação de um distúrbio tipo degrau. No entanto, em muitos casos o tempo de amostragem pode ser escolhido de forma diferente para atender necessidades específicas do modelo utilizado.

Figura 7 - Representação de como determinar o tempo de amostragem adequado para uso no MPC.

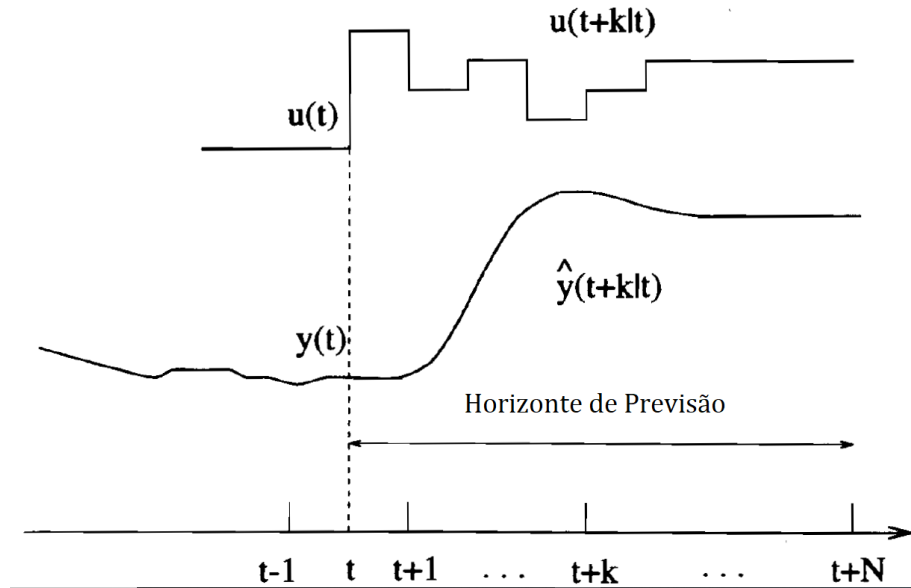


Fonte: Autor.

2.3.2.1.2 Horizonte de predição

Em um controlador MPC, o Horizonte de predição indica o quão longe no futuro em termos do tempo de amostragem o modelo interno do controlador deve prever. A definição desse parâmetro é de extrema importância para garantir a que o controlador possa reagir a eventos futuros em tempo hábil afim de evitar erros. Em uma analogia, considerando que um carro autônomo esteja sendo controlado por um MPC e o tempo necessário para uma parada completa seja de 5 segundos. Para que o carro seja capaz de parar em um cruzamento, o horizonte de predição deve alcançar pelo menos 5 segundos no futuro, se um tempo de amostragem de 0,1 segundos for considerado, o Horizonte de Predição será de pelo menos 50.

Figura 8 - Representação gráfica do horizonte de previsão.

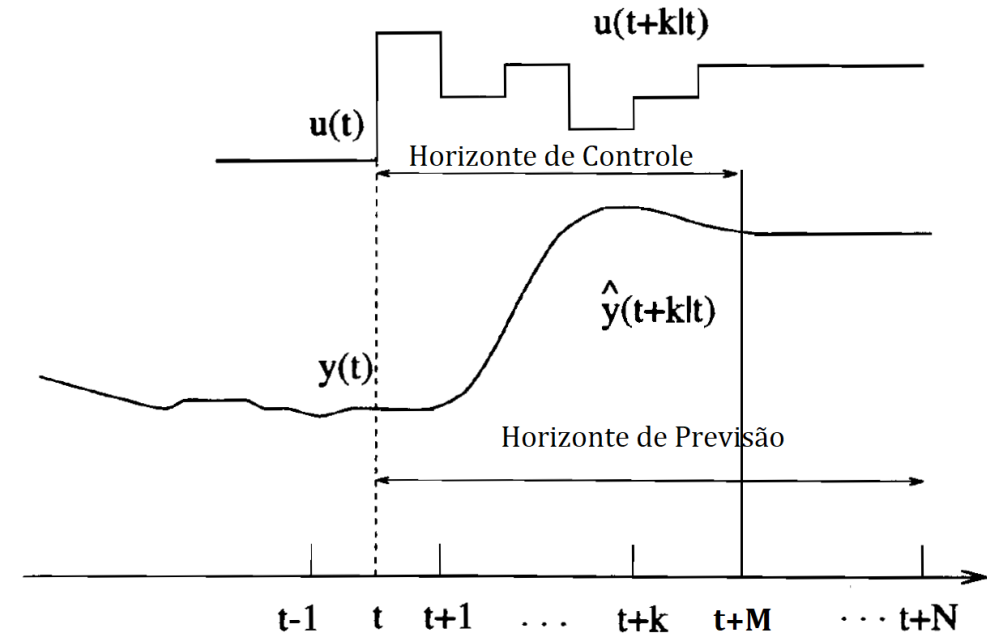


Fonte: Adaptado de Model Predictive Control, CAMACHO (1998).

2.3.2.1.3 Horizonte de controle

O algoritmo de otimização do MPC minimiza a somatória quadrática do erro do sistema até o horizonte de previsão ao mudar a sequência de sinais de controle no modelo. Esse processo de otimização muitas vezes pode ser consideravelmente pesado computacionalmente dependendo no número de sinais de controle e do tipo de modelo. Para reduzir o tempo de cálculo, o algoritmo pode otimizar os sinais de controle até um certo ponto no tempo, chamado Horizonte de Controle e manter todos os sinais de controle iguais ao último sinal de controle antes do horizonte. Isso permite ao algoritmo rodar muito mais rapidamente e sem grandes perdas em eficiência, já que os primeiros sinais tendem a ser os que são mais responsáveis pela variação do sistema.

Figura 9 - Representação gráfica do horizonte de controle.



Fonte: Adaptado de Model Predictive Control, CAMACHO (1998).

2.3.2.1.4 Restrições

Considerando a aplicação do MPC em casos reais, deve-se considerar os limites das variáveis dos processos ao se decidir como o processo se comportará no futuro e quais são as limitações das suas variáveis manipuladas. Por exemplo, ao se controlar uma válvula é impossível obter uma abertura menor que 0% ou maior que 100%. Quando se quer controlar um processo, também deve-se levar em conta os limites de segurança da planta, por exemplo os de pressão e temperatura, mesmo que essas variáveis não estejam sendo controladas diretamente, é necessário o uso de restrições para que elas se mantenham dentro de faixas aceitáveis. Além dessas, variáveis como o nível de água em tanques, limites físicos de sensores e até mesmo situações nas quais o custo econômico seja inadequado também são situações nas quais se torna interessante restringir os limites de operação de um processo.

Para os casos em que existam limitações físicas, pode-se aplicar no sistema as chamadas restrições rígidas (do inglês *hard constraints*), nas quais o algoritmo de otimização apenas pode encontrar soluções ótimas em regiões que atendam essas restrições. No caso de existirem regiões no espaço multivariável que sejam indesejáveis, mas que o sistema possa existir na vida real, pode-se aplicar no sistema restrições flexíveis (do inglês *soft constraints*), nas quais o algoritmo de otimização tentará ao máximo obter um resultado factível dentro das restrições, mas caso as variáveis do sistema saiam da região estabelecida, mesmo com a saturação do sinal de controle, o algoritmo não irá apresentar um erro como no caso das restrições rígidas, mas irá encontrar sequências de controle que irão tentar forçar o sistema a voltar as regiões determinadas assim que possível.

Para garantir que essas limitações do processo sejam atendidas, o algoritmo de otimização pode ser programado para operar dentro de limites pré-definidos ou até mesmo que possam ser mudados *on-the-fly* no controlador, com os mais comuns sendo o uso de faixas permitidas para os sinais de controle, variações nos sinais de controle e valores absolutos das variáveis controladas e demais estados do sistema, como mostrado na Eq. (2.34):

$$\begin{aligned} u_{min} &\leq u(t) \leq u_{max} \quad \forall t \\ du_{min} &\leq u(t) - u(t-1) \leq du_{max} \quad \forall t \\ y_{min} &\leq y(t) \leq y_{max} \quad \forall t \\ x_{min} &\leq x(t) \leq x_{max} \quad \forall t \end{aligned} \quad (2.34)$$

No entanto, existem certos sistemas cujas restrições se dão pela combinação de múltiplas variáveis e pela interação delas, podendo gerar restrições não lineares. Nesses casos, os algoritmos de otimização deverão ser não lineares, mesmo que o sistema o seja.

O uso de restrições não lineares no NMPC é onde o controlador mostra a sua imensa flexibilidade, com a sua função de custo podendo ser moldada com facilidade (desde que o algoritmo de otimização se mostre capaz de achar o mínimo global) permitindo ao sistema, por exemplo, evitar erros negativos ou *overshoots*, variar a importância de se controlar diferentes variáveis em diferentes situações, usar restrições variantes no tempo, etc.

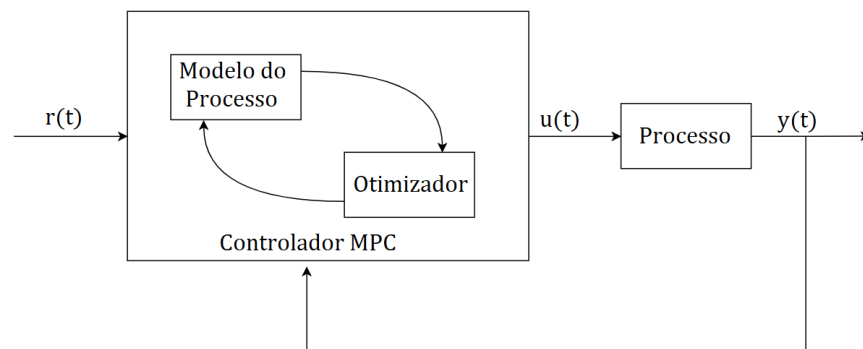
2.3.2.1.5 Setpoints

Em todo controlador de processos é necessário alimentar o mesmo com os valores desejados para as variáveis controladas em um determinado instante de tempo e no MPC isso não é diferente. Dito isso, o MPC também pode trabalhar recebendo não um único valor de *setpoint* para o tempo atual, mas recebendo um vetor de *setpoints* do mesmo tamanho do horizonte de previsão, o que aumenta a sua eficácia, já que ele poderá agir antes mesmo da mudança do *setpoint* para reduzir o erro total. Em uma analogia com um carro autônomo, o *setpoint* seria uma linha imaginária passando pelo centro da faixa na estrada, mas caso o carro precise fazer uma ultrapassagem, essa linha sairá da faixa durante a ultrapassagem e voltará a faixa depois. No tocante ao controlador, saber quando essa mudança ocorrerá permite ao mesmo poder seguir a trajetória definida com uma série de movimentos otimizada para reduzir o erro total no percurso, não apenas o erro atual.

2.3.2.2 Algoritmo Genérico do MPC

Apesar das diferentes maneiras de se calcular a resposta do sistema no futuro, o que a maior parte dos algoritmos do MPC possuem em comum é a sua estrutura e a relação entre modelagem e otimização.

Figura 10 - Esquemática de um controlador MPC.

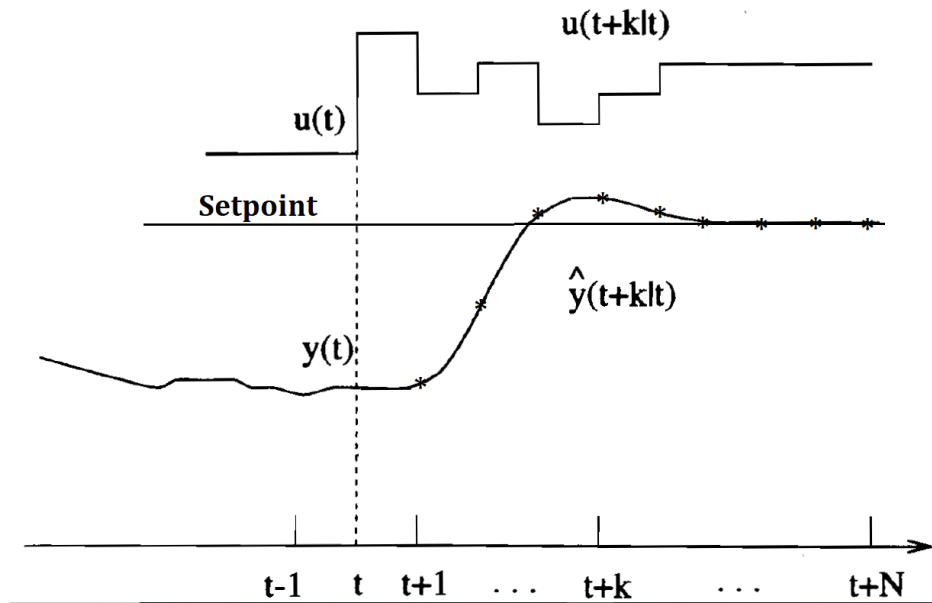


Fonte: Autor.

A base do funcionamento do MPC é a utilização de um modelo interno para determinar o comportamento do sistema em resposta a uma sequência definida de sinais de controle. Uma vez que o controlador recebe os dados do sistema, ele utiliza o modelo para definir os valores preditos das saídas do sistema (CAMACHO, 1998), ou seja $y(t+k|t)$ para $k=1...N$ baseado em $u(t+k|t)$ para

$k=1\dots N$. Isso significa o y em diferentes tempos múltiplos do tempo de amostragem a partir de t , calculados no tempo t , como mostrado na Fig. 11.

Figura 11 - Esquematização dos valores preditos de uma variável $y(t+k|t)$ dado uma sequência de sinais de controle $u(t+k)$.



Fonte: Adaptado de CAMACHO (1998).

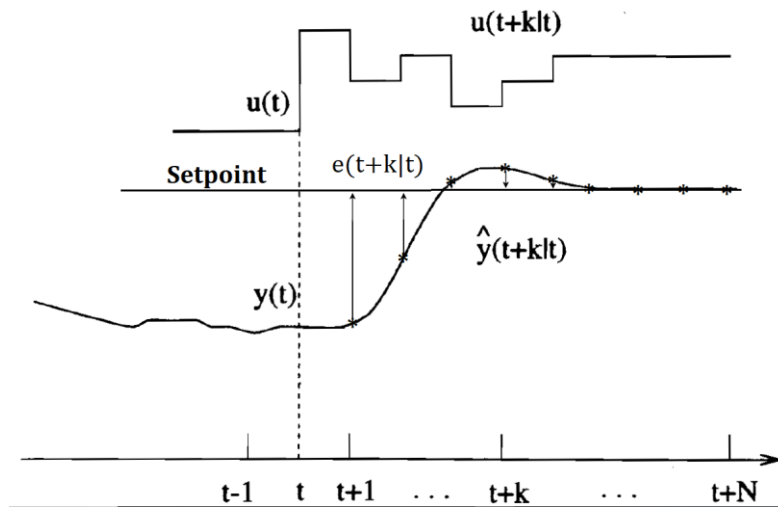
Tendo o comportamento do sistema dado uma sequência de sinais de controle e o valor do *setpoint* para cada instante no tempo, o controlador pode calcular a função custo, que é geralmente definida como a Eq. (2.35):

$$J = \sum_{i=1}^P Q_e e_{k+i}^2 + \sum_{i=0}^{P-1} R_{\Delta u} \Delta u_{k+i}^2 \quad (2.35)$$

A função de custo pode ser dividida em duas partes principais, o custo devido ao erro quadrático e o custo da mudança no sinal de controle, com ambas as partes realizando funções distintas. O custo devido ao erro quadrático é simplesmente a somatória do erro quadrático da variável controlada (e_{k+i}^2) comparada com o *setpoint*, multiplicada pela matriz de penalidade do erro Q_e . O custo relacionado a mudança no sinal de controle tem a mesma estrutura, com as diferenças quadráticas dos sinais de controle entre os passos (Δu_{k+i}^2) sendo multiplicadas pelo

peso da mudança de sinal R_u . O primeiro representa o erro total, que deve ser minimizado para controlar o sistema, o segundo representa a variação no sinal de controle, que deve ser minimizada para garantir mudanças mais suaves no sinal de controle. O peso que cada um desses fatores terá na função custo, ou seja, qual deles será mais ou menos priorizado na otimização é definido pela sintonia dos valores de Q_e e R_u .

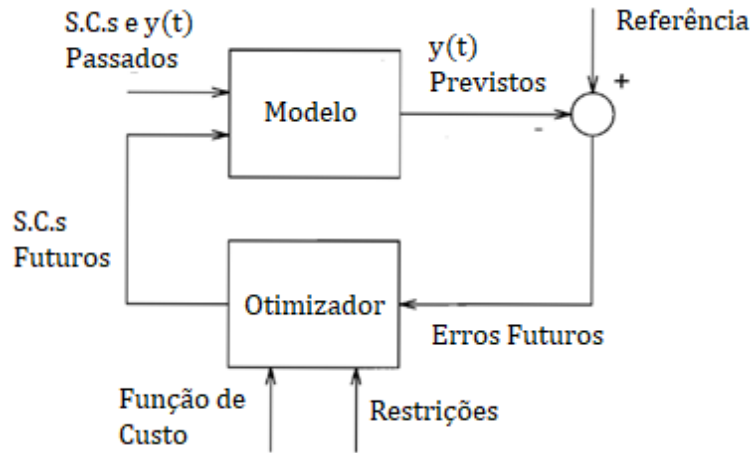
Figura 12 - Erros previstos pelo modelo interno do MPC.



Fonte: Adaptado de CAMACHO (1998).

Uma vez tendo o valor da função de custo dado uma certa sequência de sinais de controle, o otimizador sugere uma nova sequência de sinais que reduza o valor da mesma e envia essa sequência para o modelo, fechando o ciclo. Esse processo iterativo se dá até uma das condições de convergência do otimizador serem atendidas, onde apenas o primeiro sinal da sequência de sinais é enviado para a planta. Isso é necessário para aumentar a robustez do controlador, uma vez que o modelo interno do controlador normalmente não tem acesso a distúrbios não medidos, tendo que reajustar a sequência de controle ideal a cada ciclo (CAMACHO, 1998).

Figura 13 - Esquematização da estrutura interna de um controlador MPC genérico.



Fonte: Adaptado de CAMACHO (1998).

2.3.2.3 Otimização através de Programação Sequencial Quadrática (SQP)

Programação Sequencial Quadrática, ou SQP, é um método de otimização de sistemas não lineares com uso de restrições. O algoritmo principal gera uma sequência de subproblemas que otimiza um modelo quadrático da função principal sujeita a linearização local das restrições.

Algoritmos SQP permitem a minimização de funções não lineares com restrições de maneira similar ao que o método de Newton faz em sistemas sem restrições. Em cada iteração, uma aproximação da matriz hessiana da função Lagrangiana é feita usando um método quase-Newton, que então é usada para gerar um subproblema quadrático cuja solução p_e usada para direcionar a procura pelo mínimo global (BIGGS, 1975).

Dado um problema na Eq. (2.36):

$$\min_x f(x) \text{ Sujeito a } \begin{cases} G_i(x) = 0 & i = 1, \dots, m_e \\ G_i(x) \leq 0 & i = m_e + 1, \dots, m \end{cases} \quad (2.36)$$

Um subproblema quadrático pode ser gerado baseado em uma aproximação da função Lagrangiana, como mostrado na Eq. (2.37):

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \cdot g_i(x) \quad (2.37)$$

Ao linearizar as restrições não lineares, o seguinte subproblema quadrático mostrado nas Eqs. (2.38) e (2.39) pode ser obtido:

$$\min_{d \in R^n} \frac{1}{2} d^T H_k d + \nabla f(x_k)^T d \quad (2.38)$$

$$\begin{cases} \nabla g_i(x_k)^T d + g_i(x_k) = 0 & i = 1, \dots, m_e \\ \nabla g_i(x_k)^T d + g_i(x_k) \leq 0 & i = m_e + 1, \dots, m \end{cases} \quad (2.39)$$

O que pode ser solucionado com qualquer método de otimização quadrática, gerando um novo valor para o vetor de x:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \quad (2.40)$$

Onde d é o vetor da direção na qual o x irá se deslocar e α é o comprimento do deslocamento, sendo determinado por um procedimento de pesquisa em linha para minimizar o valor de uma determinada função de mérito definida pelo algoritmo.

3. METODOLOGIA

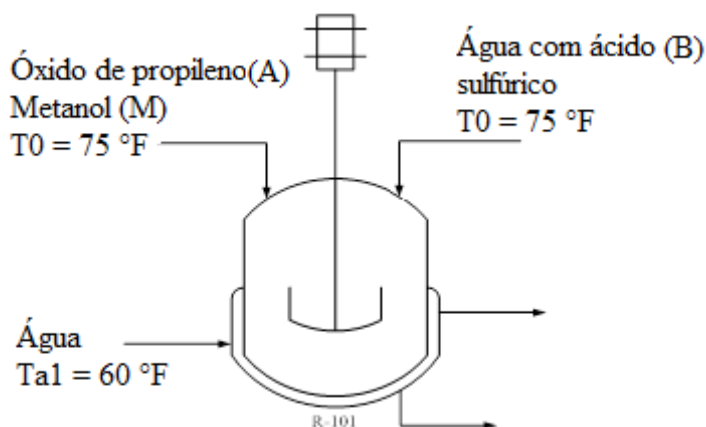
3.1 Estudo de caso

3.1.1 CSTR para produção de etilenoglicol

Propilenoglicol, também conhecido como propano-1,2-diol, é uma substância muito utilizada no segmento alimentício, tanto como solvente quanto como umectante e anticongelante (GARDEN QUÍMICA, 2014).

O processo escolhido para o estudo de caso foi o uso de um CSTR para síntese de etilenoglicol através da hidrólise do óxido de propileno (solubilizado em metanol) catalisada por ácido sulfúrico.

Figura 14 - Esquemática do CSTR utilizado na síntese de etilenoglicol.



Fonte: PEDRO et al. (2017).

A síntese do etilenoglicol através desse processo se dá seguindo a seguinte equação química:



Nesse trabalho será utilizado o seguinte padrão para nomear os reagentes por motivos de simplificação:

- A – Óxido de Propileno;
- B – Água

- C – Propilenoglicol
- M – Metanol (inerte na reação)

Portanto, a equação química se apresentará como a Eq. (3.2):



Dado que essa reação segue uma cinética de 1ª ordem (FOGLER, 2009), a lei de velocidade da reação pode ser expressada como a Eq. (3.3):

$$-r_A = kC_A \quad (3.3)$$

Ao aplicar a equação de Arrhenius, a Eq. (3.3) se transforma na Eq. (3.4):

$$-r_A = k_0 C_A e^{\frac{E_A}{RT}} \quad (3.4)$$

3.1.2 Modelo

Com essas informações em mãos, é possível começar a montar o modelo contínuo do sistema através dos balanços de massa e energia discutidos anteriormente.

Primeiramente, foram criados os balanços de massa para cada componente usando a Eq. (2.4), gerando as o set de equações mostradas na Eq. (3.5):

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{A0} - C_A}{V} \right) v_0 \\ \frac{dC_B}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{B0} - C_B}{V} \right) v_0 \\ \frac{dC_C}{dt} = -r_A + \left(\frac{-C_C}{V} \right) v_0 \\ \frac{dC_M}{dt} = \left(\frac{C_{M0} - C_M}{V} \right) v_0 \end{cases} \quad \text{com} \quad -r_A = k_0 C_A e^{\frac{E_A}{RT}} \quad (3.5)$$

Onde C_{i0} são as concentrações de entrada e C_i são as concentrações de saída do componente i , r_A é a taxa de consumo do óxido de propileno, V é o volume do reator e v_0 é a vazão de alimentação do reator.

O balanço de energia pode ser calculado usando a Eq. (2.24):

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0} C_{p_s} (T - T_0) + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{\sum_{i=1}^n N_i C_{p_i}} \quad (2.24)$$

Considerando:

$$\begin{cases} \dot{Q} = \dot{m}_c C_{p_c} \left[(T_{a1} - T) \left[1 - \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{p_c}}\right) \right] \right] \\ \dot{W}_s \cong 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

Temos, portanto, 5 estados considerando a concentração de óxido de propileno C_A , a concentração de água C_B , a concentração de propilenoglicol C_C , a concentração de metanol C_M e a temperatura do meio reacional T , e suas respectivas derivadas em relação ao tempo, listadas na Eq. (3.7).

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{A0} - C_A}{V} \right) v_0 \\ \frac{dC_B}{dt} = r_A + \left(\frac{C_{B0} - C_B}{V} \right) v_0 \\ \frac{dC_C}{dt} = -r_A + \left(\frac{-C_C}{V} \right) v_0 \\ \frac{dC_M}{dt} = \left(\frac{C_{M0} - C_M}{V} \right) v_0 \\ \frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}_s - F_{A0} C_{p_s} (T - T_0) + (-\Delta H_{Rx})(-r_A V)}{\sum_{i=1}^n N_i C_{p_i}} \end{cases} \quad (3.7)$$

Para a simulação do processo, foi criado um script para calcular as derivadas dos estados no MATLAB e esse script foi alimentado no Simulink para modelar o comportamento do sistema. A modelagem foi realizada utilizando a função ode45, que é uma função do MATLAB que utiliza uma versão do método de Range-Kutta de 4ª ordem com passo variável.

A variável escolhida para ser manipulada foi a vazão de água para a camisa do reator, que será controlada através de uma válvula linear que receberá o sinal do controlador. A vazão de água para a camisa, portanto, seguirá a equação (3.8):

$$f_{\text{água}}(t) = S.C.* C_{v,m\acute{a}x} \sqrt{\frac{\Delta P}{G_f}} \quad (3.8)$$

A válvula foi dimensionada para vazão de água a uma vazão nominal de 35,948 gpm, com queda de pressão de 1 psi, com as constantes sendo equivalentes a de uma válvula da marca Masoneilan (SMITH & CORRIPIO, 1997). A variável controlada no reator será a concentração de óxido de propileno, o reagente limitante do sistema.

Os parâmetros e condições iniciais do processo, empregados nas simulações, encontram-se na Tab. 1.

Tabela 1 - Parâmetros e condições de operação do CSTR para síntese de propilenoglicol.

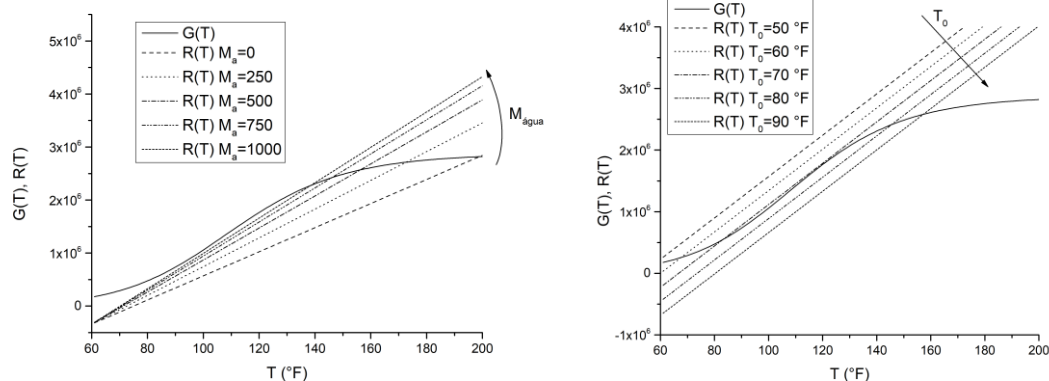
Parâmetros e condições de operação	Valores e unidades
V	66,8092 [ft ³]
UA	16000 [Btu/h.°F]
T _{a1}	60 [° F]
T ₀	75 [° F]
F _{A0}	80 [lbmol/h]
M água (camisa)	1000 [lbmol/h]
ΔH	-36000 [Btu/lbmol]
C _p _s	284,375 [Btu/lbmol.°F]
R	1,987 [Btu/lbmol.°R]
v ₀	441,4640 [ft ³ /h]
τ	0,1514 [h ⁻¹]
C _{A0}	0,1812 [lbmol/ft ³]
C _{B0}	2,2652 [lbmol/ft ³]
C _{M0}	0,2265 [lbmol/ft ³]
C _{pA}	35 [Btu/lbmol.°F]
C _{pB}	18 [Btu/lbmol.°F]
C _{pC}	46 [Btu/lbmol.°F]
C _{pM}	19,5 [Btu/lbmol.°F]
C _A inicial	0 [lbmol/ft ³]
C _B inicial	3,45 [lbmol/ft ³]
C _C inicial	0 [lbmol/ft ³]
C _M inicial	0 [lbmol/ft ³]
T inicial	75 [° F]

Fonte: PEDRO, Marcelo (2017)

3.1.3 Estabilidade

Os gráficos de G(T) e R(T) no estado estacionário foram plotados para diferentes valores de T₀ e M_{água}, com os resultados podendo ser vistos na Fig. 15:

Figura 15 - Gráficos de G(T) e R(T) variando os valores T₀ e da vazão mássica de água para a camisa do reator.



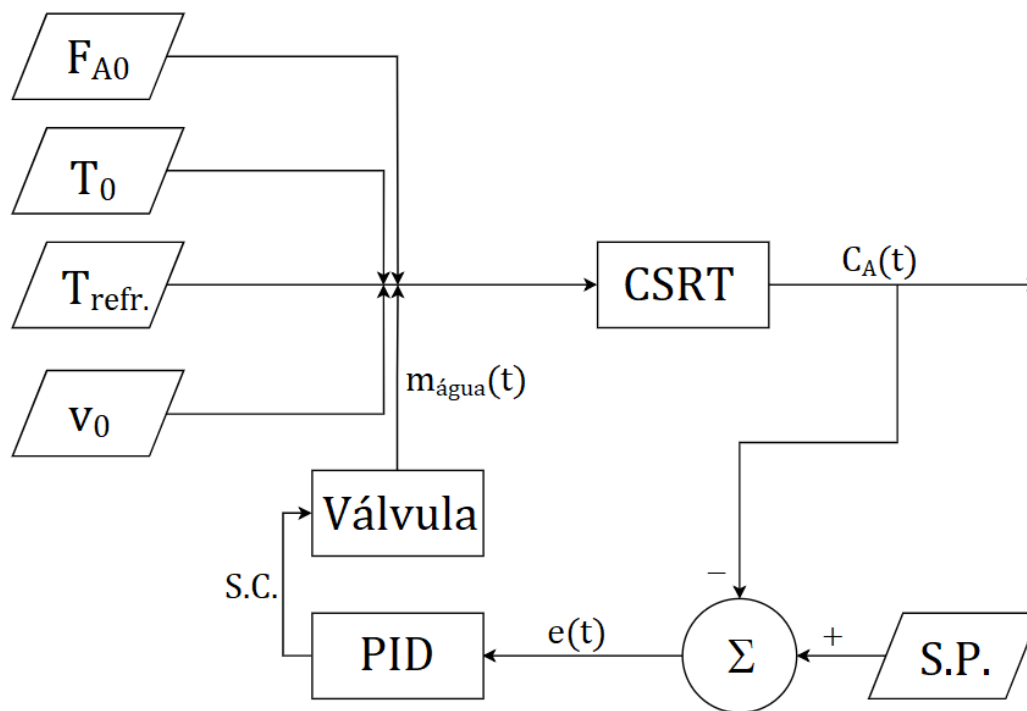
Fonte: Autor.

Como pode-se perceber, mudanças na temperatura de entrada dos reagentes no reator transladam a curva $R(T)$, enquanto mudanças na vazão mássica de água para o trocador de calor mudam a inclinação da curva, portanto mudanças na temperatura de entrada ao redor de 70 °F podem ocasionar em mudanças consideráveis na temperatura de estado estacionário. Tanto o salto de temperatura quanto a mudança de concentração dos reagentes devido a essa mudança são comportamentos altamente não lineares, portanto, é esperado que controladores lineares tradicionais tenham mais dificuldade em trazer o sistema de volta a situação de controle.

3.2 PID

Para sintonizar o controlador PID, foi criado um sistema em malha fechada usando o Simulink no MATLAB R2015a com um modelo não linear do reator (já sendo iniciado próximo ao estado estacionário) e um bloco padrão de um PID recebendo o erro entre o sinal da concentração de óxido de propileno e o setpoint, e enviando o sinal de controle para uma válvula linear que controla o valor da vazão de água para a camisa do reator.

Figura 16 – Fluxograma representado o diagrama de blocos usado no Simulink para sintonia do controlador PID.



Fonte: Autor

Para realizar a sintonia do PID, foi utilizada a ferramenta de sintonia de PID (PID Tuning Tool) do *Simulink Control Design*, que retornou os valores otimizados para os ganhos do controlador.

No exemplo em questão, os seguintes valores foram obtidos:

- $K_p = 1648,12$
- $K_i = 2738,79$
- $K_d = 78,45$

Os valores dos ganhos obtidos foram então transportados para a simulação completa, onde os diversos testes foram realizados.

3.3 NMPC

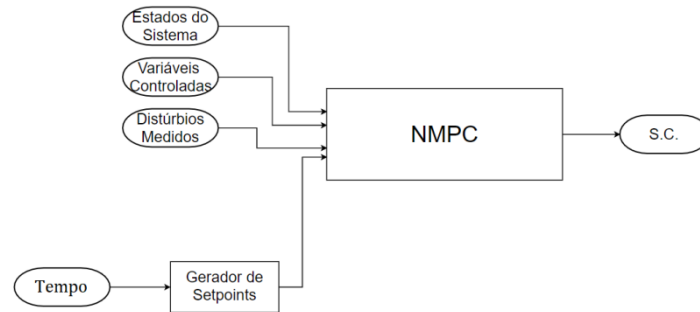
Para o NMPC, um subsistema foi criado no Simulink que receberia os distúrbios medidos do sistema, os estados do sistema e o valor das variáveis controladas e retorna o sinal de controle. O controlador foi colocado sob uma máscara na qual o usuário poderia determinar os parâmetros listados a seguir:

- Horizonte de predição;
- Horizonte de controle;
- Tempo de amostragem;
- Limites máximos e mínimos dos sinais de controle;
- Configurações para uma mudança degrau no valor *setpoint*;
- Matrizes de custo padrão para os erros e para a mudança no sinal de controle;
- Número de pontos na integração numérica realizada no modelo com o uso de Range-Kutta de 4ª Ordem;
- Número máximo de iterações no otimizador não linear;
- Tolerâncias no valor da função, das restrições e da mudança no sinal de controle entre as iterações no otimizador;

Demais parâmetros então demandariam alteração nos scripts internos do controlador, como o caso das restrições flexíveis.

Dentro desse subsistema dois blocos principais foram criados, um deles para gerar o vetor de setpoints projetado no tempo, que é basicamente o um vetor com os *setpoints* em cada tempo de amostragem dentro do horizonte de predição, e outro bloco contendo o algoritmo principal do NMPC.

Figura 17 – Representação do diagrama de blocos usado no Simulink mostrando a estrutura externa do NMPC

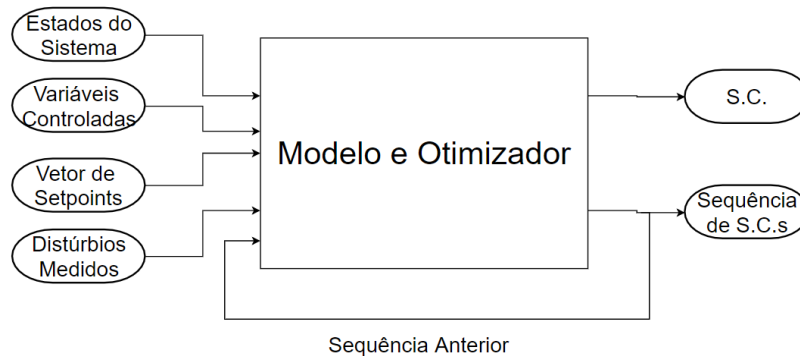


Fonte: Autor

Essa separação em subsistemas distintos se deu necessária devido ao bloco principal do NMPC precisar ser uma unidade atômica, com seu próprio tempo de amostragem definido, enquanto que a mudança no *setpoint* deva ocorrer independente da amostragem do controlador.

Por fim, o algoritmo principal do NMPC é executado em um script do MATLAB operando em um bloco próprio contendo tanto o modelo quanto o otimizador, como pode ser visto na Fig. 18:

Figura 18 – Representação do bloco principal do NMPC usado no Simulink



Fonte: Autor

3.3.1 Algoritmo

Nesse trabalho, foi utilizado uma versão do MPC chamada de NMPC, ou MPC Não linear, na qual um modelo não linear é utilizado para prever o comportamento do sistema com uma certa sequência de sinais de controle.

Para prever o comportamento do sistema, dois scripts principais foram criados, um contínuo, calculando as derivadas em função do tempo de todos os estados do sistema e o outro realizando a discretização do sistema com o uso de Runge-Kutta de 4ª ordem (RK4). O contínuo é um script que recebe os estados do sistema, os distúrbios medidos e o sinal de controle esperado em um certo tempo, retornando as derivadas de cada um dos estados do sistema, o que inclui a variável controlada. O discretizador alimenta os dados para o modelo contínuo e usa as derivadas geradas para realizar uma integração numérica usando Runge-Kutta de 4ª ordem até uma unidade do tempo de amostragem no futuro. Para tal, o tempo de amostragem (t_s) foi dividido em um número determinado de partes (N) e o RK4 foi usado para integrar entre essas partes de acordo com as equações (3.9) e (3.10):

$$h = \frac{t_s}{N} \quad (3.9)$$

$$\begin{cases} k_1 = h * modeloCT(x_i, u, DM) \\ k_2 = h * modeloCT\left(x_i + \frac{k_1}{2}, u, DM\right) \\ k_3 = h * modeloCT\left(x_i + \frac{k_2}{2}, u, DM\right) \\ k_4 = h * modeloCT(x_i + k_3, u, DM) \\ x_{i+1} = x_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6 \end{cases} \quad (3.10)$$

Para aumentar a robustez do modelo, no fim de cada um desses pontos da integração numérica foi aplicada uma restrição de não-negatividade afim de evitar resultados incondizentes com a realidade, como concentrações negativas por exemplo. Essa restrição pode ser vista na Eq. (3.11):

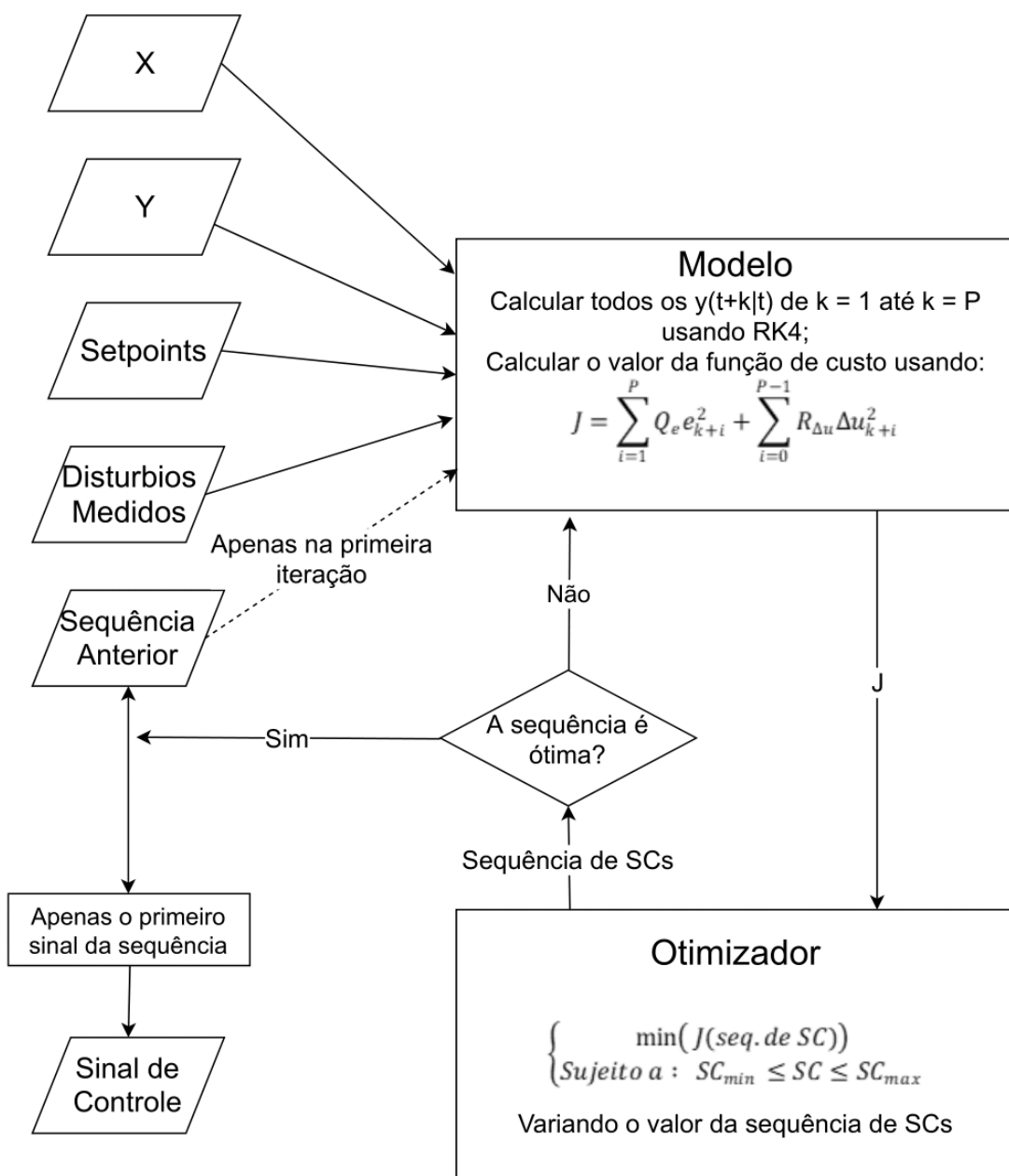
$$\{se \ x(i) < 0, definir \ x(i) = 0\} \quad (3.11)$$

No tempo zero de cada ciclo do controlador, esses dois scripts são usados com os estados do sistema atuais e os sinais de controle para prever os estados um tempo de amostragem no futuro, esses novos estados passam pelo mesmo processo e assim consecutivamente até que o número de repetições seja igual ao horizonte de previsão. Após a previsão estar completa, os valores dos vetores de y e Δu são utilizados para calcular o valor da função de custo, como mostrado na Eq. (3.12).

$$J = \sum_{i=1}^P Q_e e_{k+i}^2 + \sum_{i=0}^{P-1} R_{\Delta u} \Delta u_{k+i}^2 \quad (3.12)$$

Essa função de custo é a única variável de saída do modelo interno do MPC, e a script que calcula seu valor é chamado como função dentro da função do MATLAB® *fmincon*, usando o algoritmo de programação quadrática sequencial para encontrar a sequência de sinais de controle que minimize o valor total da função de custo atendendo as restrições impostas ao sistema. Após a obtenção da sequência ótima de controle, apenas o primeiro valor é enviado para a planta como o sinal de controle. O vetor contendo a sequência ótima de controle é então armazenado para ser utilizado como chute inicial do próximo ciclo de funcionamento do controlador. O fluxograma completo do algoritmo do NMPC pode ser visto na Fig. 19.

Figura 19 - Fluxograma do algoritmo do NMPC



Fonte: Autor

3.3.2 Restrições

Para os dados obtidos nesse relatório, foram utilizados dois sets de restrições para duas ocasiões distintas.

Para o exemplo que o controlador estava monitorando apenas a concentração de óxido de propileno, as únicas restrições utilizadas foram os limites físicos da válvula de controle da água de refrigeração, ou seja, uma restrição rígida indicando que a abertura da válvula deveria ficar forçosamente entre 0 e 100%.

No exemplo que a temperatura estava sendo monitorada, mas não necessariamente controlada, foram utilizadas restrições flexíveis nos valores da temperatura do meio reacional (além das restrições da válvula). A maneira escolhida para aplicar essas restrições foi o uso de um peso variável para o erro da temperatura na função de custo do MPC. Como visto anteriormente, parte da função de custo consiste em uma matriz de pesos Q_e multiplicada pelo erro quadrático das variáveis, dessa forma, se o peso de uma variável é zero, a variável não está afetando a decisão da sequência de controle e de acordo com o aumento do peso essa variável afeta mais a decisão. Para que a temperatura não afetasse o controle da concentração do óxido de propileno, o peso relacionado a temperatura assumiu valor zero quando dentro da região de estabilidade. No entanto, ao se aproximar da região de instabilidade, o controlador muda o valor do peso relacionado a temperatura (saltando, por exemplo, de 0 para 1000), selecionando uma sequência de controle que traga seu valor de volta a região de estabilidade. Nesse caso específico, a região de instabilidade considerada foi a região na qual os reagentes começariam a entrar em ebulição. No reator estudado a temperatura limite seria 183 °F, mas nesse trabalho iremos limitar a temperatura da reação abaixo de 165 °F no teste utilizando restrições flexíveis devido a necessidade de se criar uma faixa de segurança já que é desejável que a temperatura nem se aproxime de 183 °F, com 18°F (10 °C) de diferença sendo uma distância adequada.

3.4 Testes realizados

Para testar a eficácia do controlador NMPC em comparação com o PID, foram realizados os seguintes testes controlando o valor de C_A (concentração de óxido de propileno):

- Controle do processo sem distúrbios;

- Controle do processo com distúrbios sequenciais positivos e negativos no valor de F_{A0} ;
- Controle do processo com distúrbios suaves em T_0 (tanto positivos quanto negativos);
- Controle do processo com distúrbio forte no valor de T_0 (forçando instabilidade);
- Controle do processo com mudança positiva no *Setpoint*;
- Controle do processo com mudança negativa no *Setpoint*;
- Controle do processo com mudança negativa no *Setpoint* com o uso de restrições flexíveis na temperatura;

3.5 Condições do controlador

O controlador NMPC foi usado em 3 diferentes de sintonias para esse trabalho:

- Sintonia 1 (Usado no teste sem distúrbios, nos testes variando o setpoint e no de estabilidade)
 - Horizonte de previsão: 10;
 - Horizonte de controle: 5;
 - Tempo de amostragem: 0,2 horas;
 - Peso do erro: 1;
 - Peso da mudança do S.C.: 0;
- Sintonia 2 (Usado nos testes com distúrbios leves de F_{A0} e T_0)
 - Horizonte de previsão: 20;
 - Horizonte de controle: 5;
 - Tempo de amostragem: 0,1 horas;
 - Peso do erro: 1;

- Peso da mudança do S.C.: 0;
- Sintonia 3 (Usada no teste com uso de restrições flexíveis para o valor da temperatura)
 - Horizonte de previsão: 10;
 - Horizonte de controle: 5;
 - Tempo de amostragem: 0,2 horas;
 - Peso do erro ($T < 170$): 1 para o erro de C_A e 0 para o erro da temperatura;
 - Peso do erro ($T > 170$): 1 para o erro de C_A e 1000 para o erro da temperatura;
 - Peso da mudança do S.C.: 0;

A sintonia 1 foi ajustada para uso geral, ela tem uma fração considerável do horizonte de predição dentro do horizonte de controle, o que garante flexibilidade em sistemas que os ganhos de controladores tradicionais teriam que mudar bruscamente, operando com eficiência em regiões altamente não lineares. No entanto, essa sintonia não é otimizada para performance em distúrbios pequenos, mas ela pode ser ajustada levando o horizonte de previsão para 20, o de controle para 10 e o tempo de amostragem para 0,1 horas, resultando em um aumento considerável do tempo de amostragem. Em uso industrial isso não seria um problema, pois o tempo de cálculo de cada ciclo ainda ficaria abaixo de 0,1 horas, no entanto em um ambiente computacional levaria um tempo considerável para rodar uma única simulação inteira.

A sintonia 2 foi ajustada para possuir alta performance com distúrbios pequenos e médios, com um tempo de amostragem menor, o controlador é capaz de fornecer uma resposta rápida e adaptável para controlar o processo, no entanto a menor fração do horizonte de predição sob o horizonte de controle reduz a performance do controlador em distúrbios que levem o sistema a regiões altamente não lineares, uma vez que o último ponto de controle na sequência interna fica a apenas 25% do comprimento do horizonte de previsão, o que pode fazer o controlador escolher uma sequência não-ótima nesses casos. O controlador ainda é capaz de lidar com essas situações, no entanto com uma eficiência menor que a da Sintonia 1.

A sintonia 3 é apenas uma versão adaptada da sintonia 1 para controlar a concentração do óxido de propileno e a temperatura de maneiras diferentes em condições diferentes. Quando a temperatura do sistema (e a temperatura projetada no modelo interno) se encontra abaixo de 170 °F, o controlador se comporta exatamente como o da Sintonia 1, com C_A sendo controlado e a temperatura não. Quando a temperatura passa de 170 °F, o *setpoint* da temperatura é fixado como 170 °F e o peso do erro da temperatura passa de 0 para 1000 vezes o peso do erro de C_A , forçando o controlador a preferir manter a temperatura dentro da faixa estabelecida do que forçar C_A para a concentração definida.

3.6 Critérios de avaliação

Para determinar o desempenho dos controladores, diversos critérios para avaliação do erro serão utilizados, entre eles os critérios ISE, IAE e ITAE, com cada um desses critérios avaliando aspectos diferentes do sinal de erro.

O critério ISE dá grande peso para erros grandes e pequeno peso para erros pequenos devido a sua natureza quadrática. Devido a essa característica, o critério ISE é bom para avaliar a velocidade de diminuição de erros iniciais, que tendem a ser maiores, mas não tanto para avaliar a persistência de erros menores de maior duração, ou erros oscilatórios de baixa intensidade (ALT & LAGES, 2003). A equação para o critério ISE pode ser vista na Eq. (3.13):

$$ISE = \int e^2 dt \quad (3.13)$$

O critério IAE avalia o valor absoluto do erro, portanto a importância do valor do erro tem uma relação linear com a sua intensidade. A avaliação desse critério dá uma noção do erro total avaliado, no entanto esse é um critério bem generalista e pouco seletiva, uma vez que ele por si só não permite identificar que tipo de erro é o mais presente em um determinado sistema (ALT & LAGES, 2003). A equação para o critério IAE pode ser vista na Eq. (3.14):

$$IAE = \int |e| dt \quad (3.14)$$

O critério ITAE é basicamente o critério IAE multiplicado pelo tempo dentro da integral, de forma que erros que acontecem no início da perturbação são ponderados com um peso baixo no valor total, uma vez que o tempo é menor, e erros que ocorrem mais tarde vão crescendo de peso com o aumento de t (ALT & LAGES, 2003). Devido a isso, esse critério é ideal para

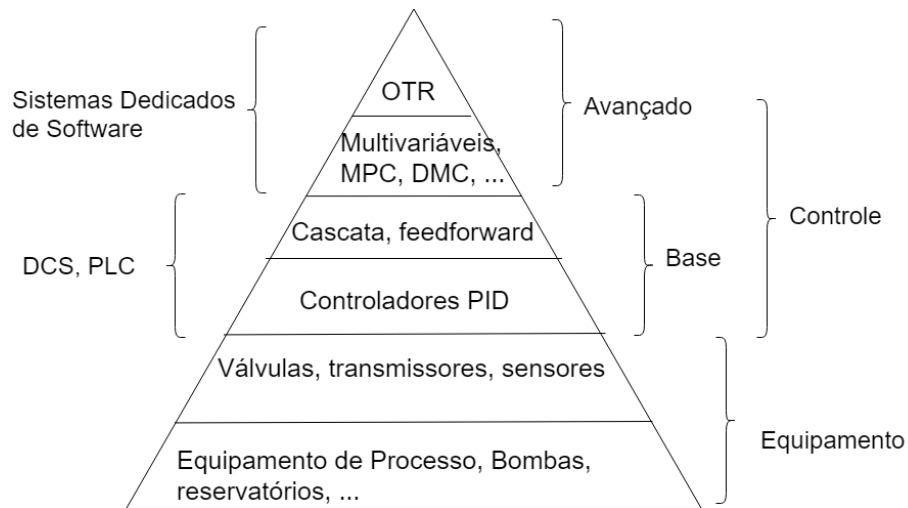
analisar erros oscilatórios de longa duração, mesmo com baixa intensidade, uma vez que com o aumento de t o peso desse erro cresce linearmente. A equação para o cálculo do critério ITAE pode ser vista na Eq. (3.15):

$$ITAE = \int t|e|dt \quad (3.15)$$

Nos resultados aparecerão duas versões de cada um desses parâmetros, um deles para o erro integrado durante a simulação inteira (A) e outro para os erros integrados a partir de 7,5 horas de simulação (B), ponto no qual todos os sistemas testados já haviam se estabilizado, portanto, o erro será apenas relacionado aos distúrbios ou a mudança de setpoint. Esses erros integrados podem ser encontrados nas Tabelas 2, 3, 4, 5, 6 e 7.

Vale a pena lembrar que nesse trabalho foram comparados controladores de categorias diferentes, um controlador avançado (o NMPC), com um controlador na base da pirâmide de controle (o PID), como pode ser visto na Fig. 20. Portanto, o foco da comparação não é a performance em si, e sim o comportamento dos controladores em regiões não lineares.

Figura 20 - Pirâmide de controle.



Fonte: Autor.

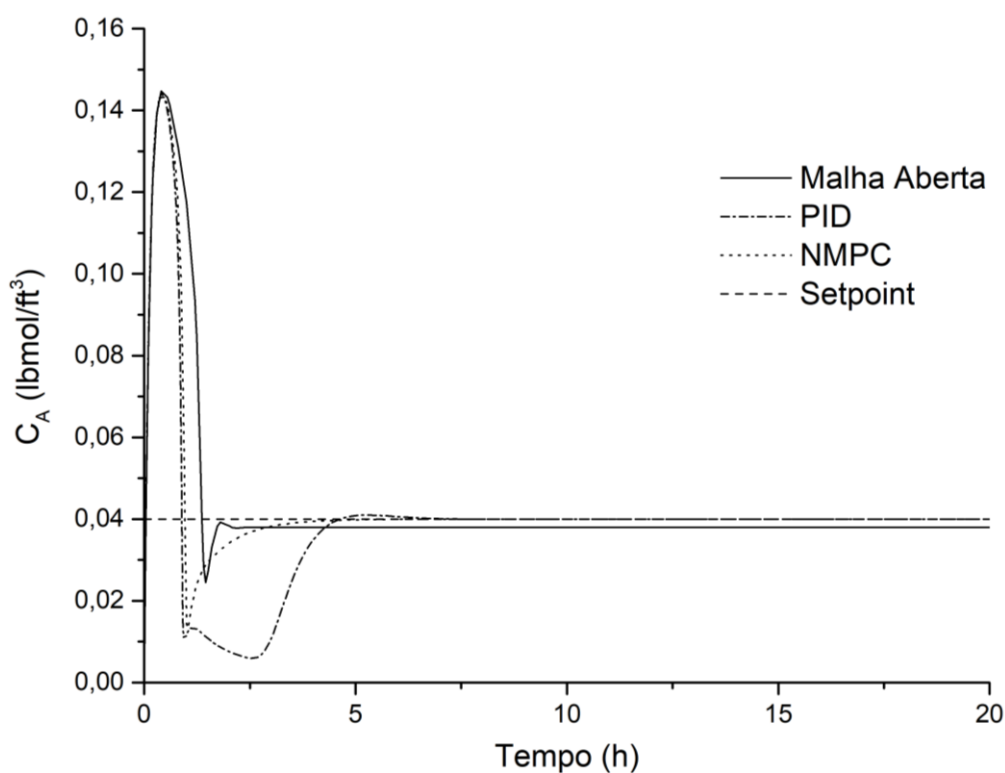
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Comparação dos controladores com o uso de distúrbios

4.1.1 Processo sem distúrbios

Um dos testes realizados foi o uso dos controladores em um sistema sem distúrbios, apenas com a iniciação do reator. Os resultados podem ser vistos na Fig. 21 e os erros integrados podem ser vistos na Tab. 2:

Figura 21 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema sem distúrbios.



Fonte: Autor.

Tabela 2 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema sem distúrbios.

	PID	NMPC
ISE	1.52E-01	9.30E-02
IAE	8.41E-03	6.84E-03
ITAE	2.28E-01	6.99E-02

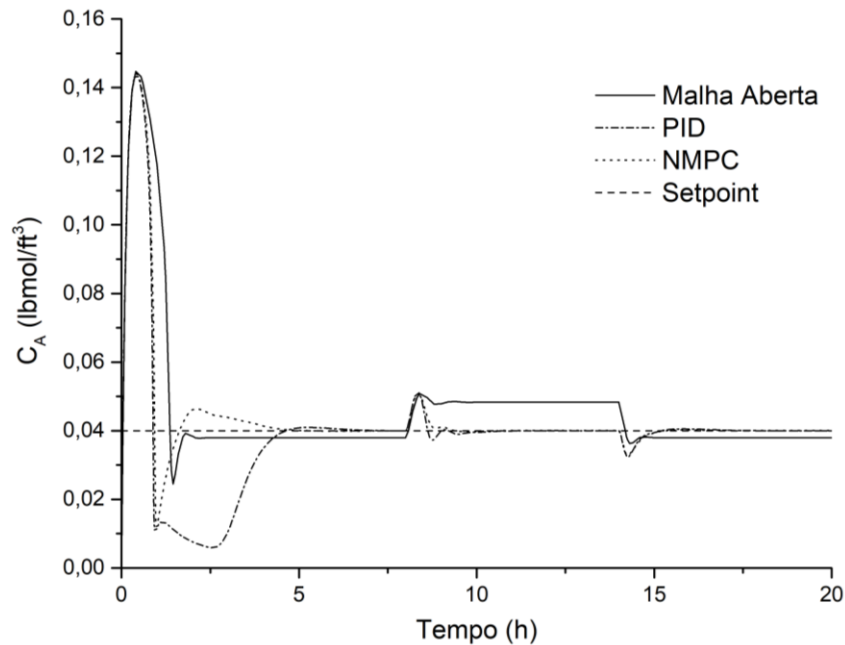
Fonte: Autor.

Como pode-se ver na Fig. 21, o PID tem dificuldade de controlar o processo durante a iniciação do reator, o que era esperado devido a alta não linearidade dessa região das variáveis. O NMPC por outro lado reduziu o erro da concentração mais rapidamente do que o visto no caso da malha aberta, mas manteve um erro de baixa intensidade por um período de tempo maior, o que era esperado já que o NMPC reduz o erro quadrático previsto, o que dá mais peso a erros grandes do que erros pequenos, então para seu algoritmo é preferível reduzir o erro inicial (de maior intensidade).

4.1.2 Processo com distúrbios em F_{A0}

Para comparar a eficiência dos controladores em um sistema com distúrbios na vazão de óxido de propileno, o seguinte teste foi realizado. O valor de F_{A0} começa no valor de 80 lbmol/h e sofre um distúrbio tipo degrau, aumentando seu valor para 84 lbmol/h, em 8 horas de simulação, retornando ao valor original em 14 horas de simulação. Os resultados podem ser vistos na Fig. 22 e os erros integrados podem ser vistos na Tab. 3:

Figura 22 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com distúrbios em F_{A0} .



Fonte: Autor.

Tabela 3 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0} . Os erros marcados com A foram integrados durante a simulação inteira, os erros marcados com B foram integrados a partir de 7,5 horas de simulação.

		PID	NMPC
ISE	A	1.62E-01	1.01E-01
	B	9.60E-03	9.32E-03
IAE	A	8.47E-03	6.70E-03
	B	5.37E-05	5.47E-05
ITAE	A	3.35E-01	1.77E-01
	B	1.08E-01	1.05E-01

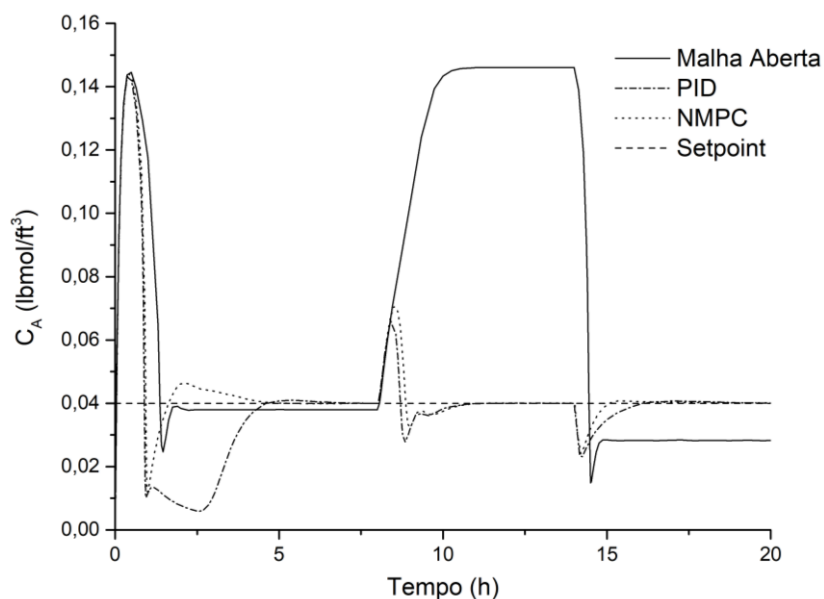
Fonte: Autor.

Como pode-se ver pela Fig. 22 e pela Tab. 3, o NMPC possuiu desempenho similar ou melhor que o NMPC em todos os critérios testados, se destacando na região da iniciação do reator (de comportamento altamente não linear) e sendo de desempenho similar na região dos distúrbios.

4.1.3 Processo com distúrbios em T_0

Para comparar a eficiência dos controladores em um sistema com distúrbios na temperatura de entrada dos reagentes, o seguinte teste foi realizado. O valor de T_0 começa no valor de 75 °F e sofre um distúrbio tipo degrau, reduzindo seu valor para 70 °F, em 8 horas de simulação, e outro aumentando seu valor para 80 °F em 14 horas de simulação. Os resultados podem ser vistos na Fig. 23 e os erros integrados podem ser vistos na Tab. 4:

Figura 23 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com distúrbios em T_0 .



Fonte: Autor.

Tabela 4 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0} .

		PID	NMPC
ISE	A	1.85E-01	1.22E-01
	B	3.22E-02	3.02E-02
IAE	A	8.82E-03	7.14E-03
	B	4.03E-04	4.89E-04
ITAE	A	5.95E-01	3.90E-01
	B	3.68E-01	3.17E-01

Fonte: Autor.

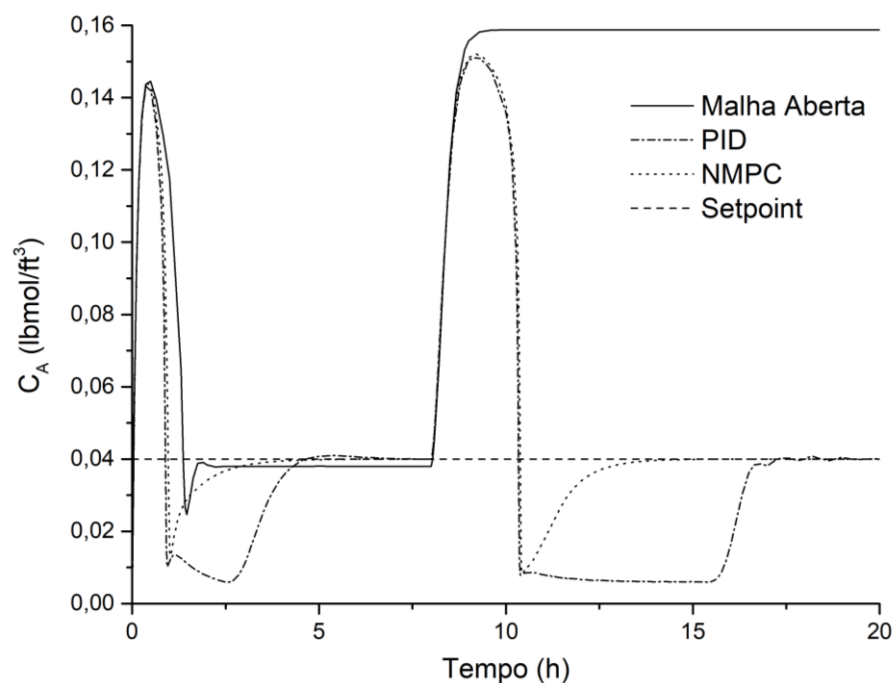
Como pode-se ver pela Fig. 23 e pela Tab. 4, o NMPC possuiu desempenho similar ou melhor que o NMPC considerando os critérios ISE e ITAE, se destacando na região não linear e sendo de desempenho levemente melhor na região linear estudada. O IAE do PID na região dos distúrbios é menor que o do NMPC, o que reflete a maneira que o NMPC reduz o erro total, já que sua função de custo soma o erro quadrático ao invés do erro absoluto, dando preferência a reduzir erros iniciais de maior intensidade do que as oscilações que resultam dessa ação.

4.2 Comparação dos controladores com distúrbio gerando instabilidade

Como pode ser visto na Fig. 15, uma mudança negativa no valor de T_0 nas condições do estado estacionário do sistema utilizado pode alterar consideravelmente o valor do estado estacionário. Esse comportamento possui caráter altamente não linear e pode ser uma boa prova para avaliar a capacidade dos controladores de operar em condições que aproximam o sistema de regiões instáveis.

Para realizar o teste, o valor de T_0 sofreu uma perturbação do tipo degrau as 8 horas de simulação, alterando seu valor de 75° F para 65°F. Os resultados desse teste podem ser vistos na Fig. 24 e na Tab. 5:

Figura 24 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com um distúrbio levando o sistema a uma região de instabilidade ao alterar o valor de T_0 de 75 °F para 65 °F.



Fonte: Autor.

Tabela 5 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0} .

		PID	NMPC
ISE	A	5.50E-01	3.34E-01
	B	3.98E-01	2.42E-01
IAE	A	3.44E-02	2.79E-02
	B	2.60E-02	2.10E-02
ITAE	A	4.71E+00	2.38E+00
	B	4.49E+00	2.31E+00

Fonte: Autor

Como pode-se ver na Fig. 24, apesar do pico inicial no valor de C_A , o NMPC consegue trazer o sistema de volta a uma condição controlada enquanto o PID leva o sistema a um novo estado estacionário com o valor de C_A distante do setpoint por quase 5 horas antes de trazê-lo de volta ao valor do setpoint. Esse é mais um dos indicativos que o NMPC é mais adequado que controladores tradicionais para situações nas quais o sistema pode apresentar comportamento altamente não linear.

4.3 Comportamento com mudança de setpoint

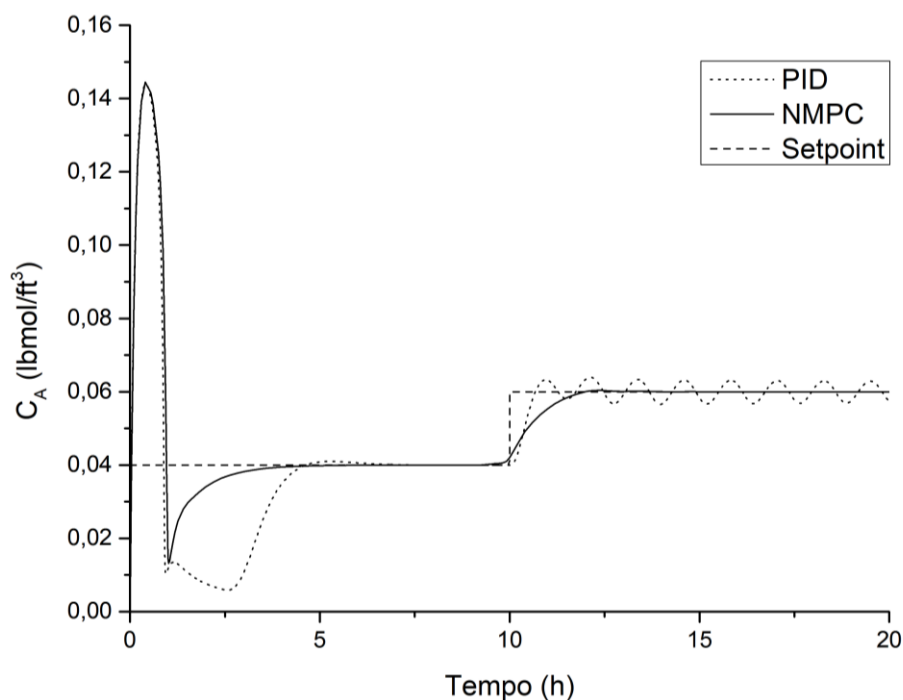
Uma das características de destaque no uso de variantes do MPC é a capacidade do controlador ser alimentado com informações de coisas que ainda não aconteceram, permitindo que o controlador reduza o erro total causado por uma mudança programada, ao invés de simplesmente reagir a uma mudança instantânea (CAMACHO, 1998).

Para comparar o NMPC com controladores PID tradicionais, dois testes foram realizados variando o valor do setpoint da concentração de óxido de propileno.

O primeiro teste elevou o setpoint de C_A de $0,04 \text{ lbmol/ft}^3$ para $0,06 \text{ lbmol/ft}^3$ as 10 horas de simulação. Os resultados desse teste podem ser vistos na Fig. 25 e na Tab. 6.

O segundo teste reduziu o setpoint de C_A de $0,04 \text{ lbmol/ft}^3$ para $0,01 \text{ lbmol/ft}^3$ as 10 horas de simulação. Os resultados desse teste podem ser vistos na Fig. 26 e na Tab. 7.

Figura 25 - C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com o setpoint mudando de $0,04 \text{ lbmol/ft}^3$ para $0,06 \text{ lbmol/ft}^3$.



Fonte: Autor

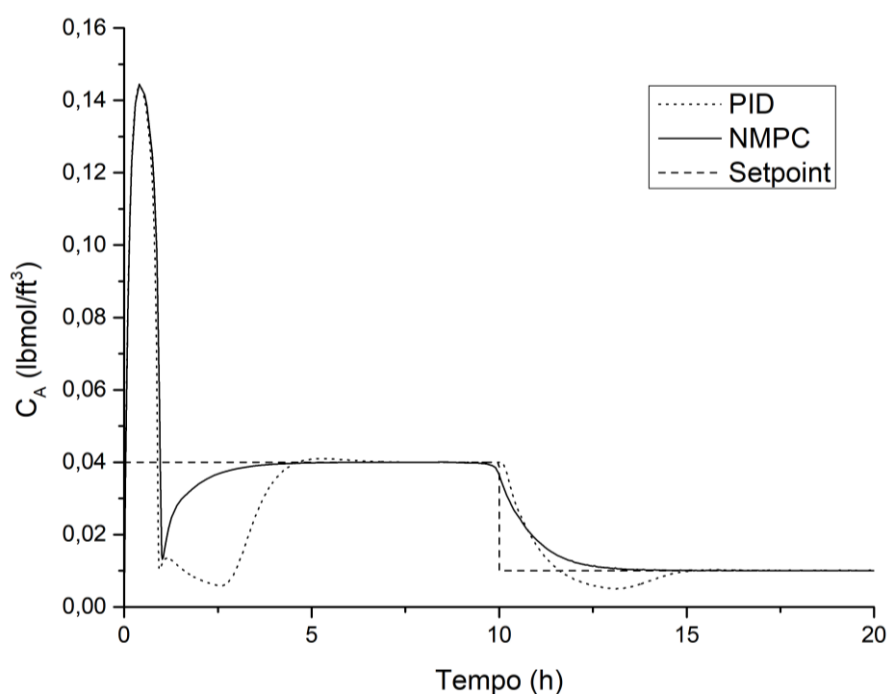
Tabela 6 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0} .

		PID	NMPC
ISE	A	1.86E-01	1.06E-01
	B	3.34E-02	1.30E-02
IAE	A	8.61E-03	6.96E-03
	B	1.93E-04	1.25E-04
ITAE	A	7.03E-01	2.07E-01
	B	4.76E-01	1.38E-01

Fonte: Autor

Como pode-se ver na Fig. 25, o NMPC ajustou o sistema ao novo setpoint sem dificuldade, enquanto a ação do PID acabou levando o sistema a um estado oscilatório ao redor do novo setpoint.

Vale a pena citar que através da Fig. 25 pode-se ver que no sistema controlado pelo NMPC o controlador começa a agir para levar o sistema para o novo setpoint antes mesmo de $t=10h$, o que é devido ao NMPC ser capaz de realizar ações em resposta a mudanças agendadas no sistema, mesmo antes que as elas ocorram, para reduzir o erro total.

Figura 26- C_A controlada com o uso de NMPC e PID em um sistema com o setpoint mudando de $0,04 \text{ lbmol/ft}^3$ para $0,01 \text{ lbmol/ft}^3$.

Fonte: Autor

Tabela 7 - Erros integrados de C_A controlados pelo PID e pelo NMPC no sistema com distúrbios em F_{A0} .

		PID	NMPC
ISE	A	1.83E-01	1.16E-01
	B	3.03E-02	2.30E-02
IAE	A	8.85E-03	7.14E-03
	B	4.30E-04	3.03E-04
ITAE	A	5.73E-01	3.17E-01
	B	3.45E-01	2.48E-01

Fonte: Autor

Como pode-se ver na Fig. 26, o NMPC reagiu a mudança de setpoint de maneira suave, levando a concentração ao novo setpoint, enquanto o sistema controlado pelo PID sofreu um overshoot considerável. De acordo com todos os critérios de erro integrado utilizados nesse trabalho, o NMPC teve desempenho melhor que o PID nessas condições.

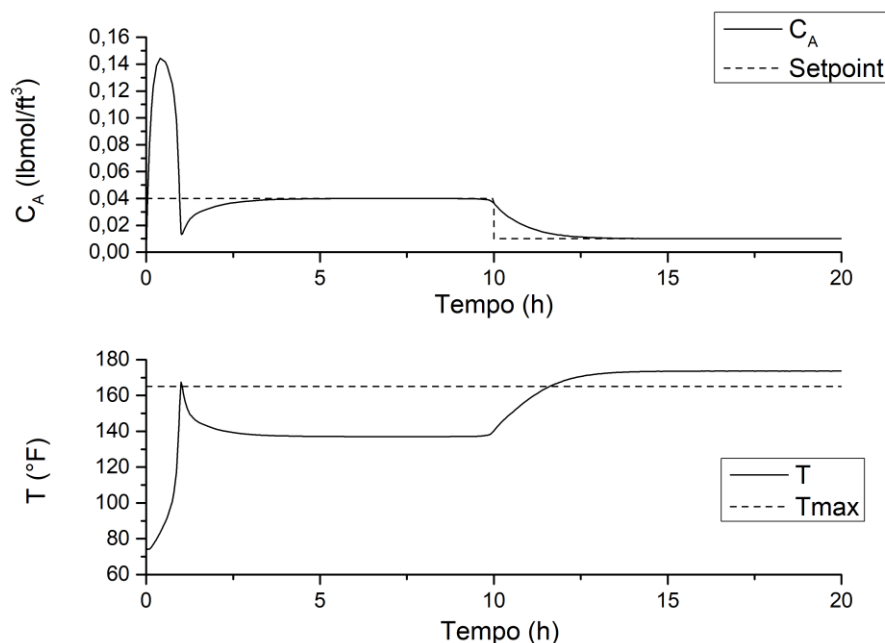
4.4 Resultados com o uso de restrições flexíveis

Uma das grandes vantagens do NMPC em comparação com controladores tradicionais é a sua imensa flexibilidade no controle de múltiplas variáveis, levando em conta a interação entre elas, podendo mudar completamente a maneira na qual o controlador se comporta dependendo das condições do sistema.

Como citado na seção 3.3.2, os reagentes utilizados nesse estudo de caso começam a entrar em ebulição a 183° F, portanto uma versão do NMPC foi criada para monitorar os valores de tanto C_A quanto T , mas controlar apenas C_A quando a temperatura (tanto a real quanto a prevista) for inferior a 165 °F. Quando a temperatura passa desse valor, o controle de temperatura foi programado para se tornar mais importante do que o controle de C_A , mantendo assim o sistema dentro da faixa de operação segura.

A Fig. 27 mostra o comportamento de C_A e T com uma mudança no *setpoint* de C_A de 0,04 lbmol/ft³ para 0,01 lbmol/ft³ as 10 horas de simulação (assim como a seção 4.3) sem a utilização da restrição flexível.

Figura 27- Gráficos de C_A e T em um sistema com C_A sendo controlada com o uso de NMPC com o setpoint mudando de $0,04 \text{ lbmol/ft}^3$ para $0,01 \text{ lbmol/ft}^3$. Essa versão do controlador não utiliza de restrições flexíveis para evitar que a temperatura passe de 165°F .

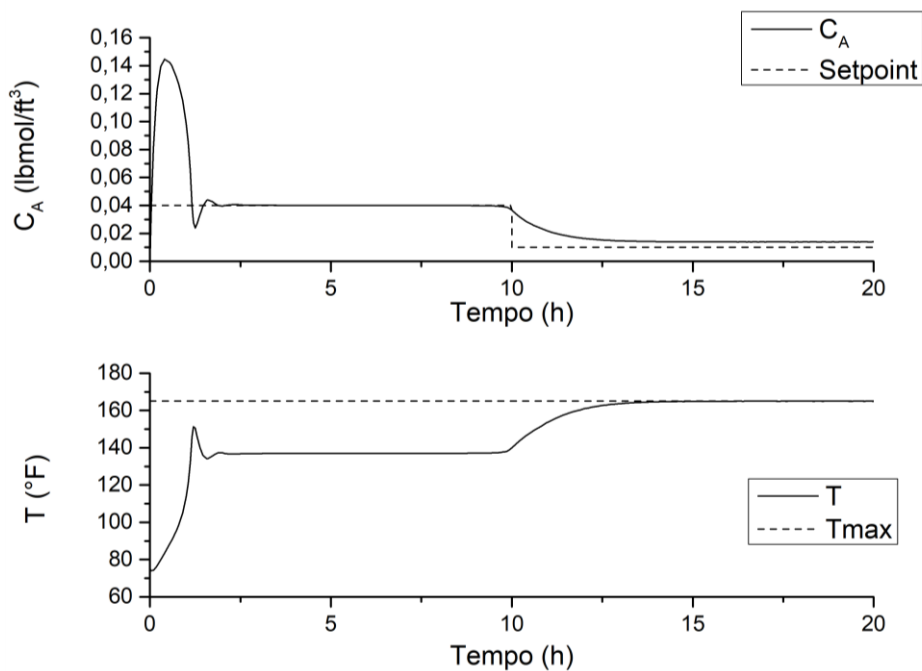


Fonte: Autor

Como pode-se ver na Fig. 27, o NMPC baixou o valor de C_A para o *setpoint* definido sem interferir no aumento de temperatura, que passa de 165°F , se aproximando do valor da temperatura de ebulição dos reagentes.

A Fig. 28 mostra o sistema sofrendo a mesma mudança, mas com um controlador programado para levar em consideração o valor da temperatura e mantê-lo abaixo de 165°F através do uso de restrições flexíveis.

Figura 28 - Gráficos de C_A e T em um sistema com C_A sendo controlada com o uso de NMPC e PID com o setpoint mudando de $0,04 \text{ lbmol/ft}^3$ para $0,01 \text{ lbmol/ft}^3$. Um limite de segurança foi imposto em T no valor de 165°F com o uso de restrições flexíveis.



Fonte: Autor

Como pode-se ver na Fig. 28, o NMPC com restrições flexíveis reduz o Valor de C_A até que a temperatura do meio reacional de aproxima de 165°F , não permitindo que a temperatura saia da faixa segura de operação, mesmo que C_A não esteja no valor do *setpoint*.

5. CONCLUSÕES

Nesse trabalho, foi desenvolvido e implementado em ambiente de simulação um controlador NMPC para o controle de sistemas com múltiplas variáveis e comportamento altamente não linear, com a necessidade de estabelecer regiões limite para certas variáveis chave.

A simulação do CSTR para produção de etilenoglicol com o uso de um NMPC como controlador foi bem sucedida, com a performance do NMPC nos testes que foram realizados sendo superior à de um controlador PID tradicional na grande maioria dos casos, conseguindo controlar o sistema em toda uma gama de situações que levavam o sistema a possuir desde comportamento não linear até regiões de instabilidade, nas quais variações pequenas de certas variáveis de entrada poderiam provocar mudanças enormes nas de saída. Em todos esses os casos o NMPC conseguiu trazer o sistema de volta ao controle com eficiência superior à de um PID, que em casos mais extremos simplesmente perdia o controle do sistema por quantidades de tempo considerável.

O NMPC também se mostrou um controlador flexível, podendo ser moldado para uma infinidade de tarefas, tanto controlando quanto manipulando múltiplas variáveis. A aplicação de restrições tanto rígidas quanto flexíveis pode ser feita de maneira simples e a própria maneira que o controlador opera é bastante intuitiva, o que permite a fácil modificação dos parâmetros de operação do mesmo. A facilidade de se ajustar o controlador para que ele receba a previsão de mudanças agendadas também se mostrou uma grande vantagem, já que o controlador pode reagir a mudança antes mesmo que ela ocorra, resultando em transições mais suaves entre diferentes estados de operação e com menor erro total entre as variáveis controladas e seus *setpoints*.

Uma das desvantagens de seu uso com um modelo fenomenológico é a necessidade de o mesmo ter que receber medições dos estados do sistema, estados esses que nem sempre podem ser medidos diretamente, o que pode demandar a necessidade de estimadores de estado entre a planta e o controlador.

Por fim, o NMPC se mostrou um controlador eficiente e flexível, operando com robustez em uma variedade de situações diferentes, conseguindo operar com eficácia mesmo em situações

de instabilidade e de comportamento não linear, mas para seu uso ter eficiência máxima, é necessário fornecer o máximo de informação o possível sobre o sistema a ser controlado.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALT, G. H., & LAGES, W. F. Controle em Tempo Real de Sistemas Dinâmicos Através de Redes Ip. São Paulo: ISA Show Brasil 2003, Feira Sul-Americana de Automação, Sistemas e Instrumentação, 2003.
- ÅSTRÖM, Karl J; & HÄGGLUND, TORE, Advanced PID Control, Instrument Society of America,. Durham, NC, EUA, 2006.
- ATHERTON, D. P., & MAJHI, S. Limitations of PID Controllers. Proceedings of th American Control Conference, (pp. 3843 - 3847). San Diego, Califórnia, 1999.
- BEQUETTE, B. W. Nonlinear Control of Chemical Processes: A Review. Industrial & Engineering Chemistry Research, 30(7), pp. 1391-1413, 1991.
- BHAGWAN, S., & al, e. A Review on: PID Controller. International Journal on Recent Technologies in Mechanical and Electrical Engineering (IJRMEE), 3(2), pp. 2349-7947. Fevereiro de 2016.
- BIGGS, M.C., “Constrained Minimization Using Recursive Quadratic Programming,” *Towards Global Optimization* (L.C.W. Dixon and G.P. Szergo, eds.), North-Holland, pp 341–349, 1975.
- CAMACHO, E. F. Model Predictive Control. Londres: Springer-Verlag London, 1998.
- COKER, A. KAYODE. Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design. Gulf Professional Publishing, 2001.
- COUGHANOWR, D; & KOPPEL - Process Systems Analysis and Control. McGraw Hill, 2nd, 2009.
- FOGLER, H. S. Elementos de Engenharia das Reações Químicas, 4ª Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.
- FROMENT, GILBERT F.; BISCHOFF, KENNETH B., WILDE, JURAY DE. Chemical Reactor Analysis and Design. Wiley; Ed. 3rd, 2010.
- GARDEN QUÍMICA. (2014). Propilenoglicol - Boletim Técnico. São Paulo. Fonte: <http://gardenquimica.com.br/boletim/Propilenoglicol.pdf>
- HAYES, R. E.; & MMBAGA, J. P. Introduction to Chemical Reactor Analysis. CRC Press, Ed. 2, 2012.
- HENSON, M. A., & SEBORG, D. E. Nonlinear Process Control. Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall PTR, 1997.

- MORAIS JR, A. A. Notas de aula da disciplina Instrumentação e Controle de Processos. Universidade Federal da Paraíba, Centro de Tecnologia, Departamento de Eng. Química, 2018.
- PEDRO, M. P.; BRANDÃO, W. Y. A.; LIRA, J. O. B.; SANTOS, J. L. A. M.; MARIZ, P. R. A.; VIEIRA, E. L.; ROJAS, L. O. A.; MORAIS JR., A. A. Extended Kalman Filter (EKF) and Artificial Neural Networks (ANN) for Estimate of Concentration in a Non Isothermic CSTR of Production of Propylene Glycol. XXXVIII Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, Florianópolis, SC, Brazil, CILAMCE 2017.
- SAGUÉS, F., & EPSTEIN, I. R. Nonlinear Chemical Dynamics. Dalton Trans., Royal Society of Chemistry, pp. 1201 – 1217, 10 de Março de 2003.
- SEBORG, Dale E.; EDGAR, Thomas F.; MELLICHAMP, Duncan A.; DOYLE III, Francis J.; Process Dynamics and Control. 4th Edition, JohnWiley & Sons, Inc., 2016.
- SMITH, Carlos A.; & CORRIPIO, Armando B. Principles and Practices of Automatic Process Control. John Wiley & Sons; Ed. 3rd, 2005.
- WANG, Liuping. Model Predictive Control System Design and Implementation Using MATLAB®. Springer Verlag London, 2009.