

**Flávio Villela de Oliveira
Gustavo Picoli Lopes**

**Modelagem e Simulação de Controle de um Reator Contínuo de
Poliestireno**

**São Paulo
2014**

**Flávio Villela de Oliveira
Gustavo Picoli Lopes**

**Modelagem e Simulação de Controle de um Reator Contínuo de
Poliestireno**

**Trabalho de Conclusão de Curso
Apresentado à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para
obtenção de título de Engenheiro
Químico**

**Área de Concentração:
Engenharia Química**

**Orientador:
Prof. Dr. Darci Odloak**

**São Paulo
2014**

Flávio Villela de Oliveira

*“Dedico este trabalho a Deus, meus pais, irmã, amigos
E professores que durante todo o período de
De graduação me apoiaram fielmente
Nesta caminhada”*

Gustavo Picoli Lopes

*“Dedico este trabalho à minha família por
Todo o amor, carinho e compreensão
Em todos os momentos nestes
5 anos de graduação”*

AGRADECIMENTOS

Flávio Villela de Oliveira

Primeiramente, agradeço a Deus, pela força, saúde e coragem para a realização deste trabalho.

Agradeço a nosso orientador, prof. Dr Darci Odloak, por toda atenção e suporte prestados, e a Luz Adriana, que também nos auxiliou durante os estudos.

Agradeço a meus pais e a minha irmã, por toda a paciência e compreensão durante este período.

Por fim, agradeço a todos os amigos que estiveram comigo durante a graduação, pelas alegrias e momentos difíceis vividos no curso, em especial a Gustavo Picoli, co-autor deste trabalho, cuja dedicação, empenho e competência foram indispensáveis para o desfecho do presente estudo.

Gustavo Picoli Lopes

Agradeço à minha mãe e meus avós pelo apoio e incentivo em toda minha vida, principalmente nos últimos anos de faculdade.

Agradeço à minha namorada por todo o carinho que tive desde a época do cursinho pré-vestibular até agora.

Agradeço ao Prof. Dr. Darci Odloak e Luz Adriana pelas orientações durante o desenvolvimento deste estudo, sem as quais este não seria possível.

Agradeço, por fim, a todos os colegas de turma com os quais tive o prazer de compartilhar bons e marcantes momentos, principalmente a Flávio Villela, cuja amizade foi indispensável não somente na construção deste trabalho, mas na superação dos diversos desafios encontrados na graduação.

RESUMO

Este trabalho tem por objetivo estudar a metodologia do modelo controle de um reator teórico de poliestireno perfeitamente agitado a partir da linearização da cinética de polimerização.

O trabalho é composto por: introdução e contextualização da relevância do estudo para a indústria química, revisão bibliográfica de linearização e simplificação de equações diferenciais não-lineares por polinômios de Taylor de primeira ordem, revisão bibliográfica da metodologia de implementação do MPC (Model Predictive Control), linearização das equações diferenciais do modelo cinético de polimerização, implementação do modelo no software Matlab[®], testes da resposta do sistema em malha aberta, implementação do controle preditivo no modelo com testes em malha fechada e, por fim, comparação e discussão dos resultados obtidos com resultados empíricos da literatura.

Para efeitos de demonstração de resultados comparativos, duas variáveis importantes de processo foram escolhidas para serem as variáveis manipuladas do modelo: a vazão de iniciador que entra no reator perfeitamente agitado e a vazão de água de resfriamento que troca calor com o reator. Através destas, teve-se como objetivo controlar a temperatura do reator T e a viscosidade intrínseca do polímero η , que é função do peso molecular médio do polímero.

Em malha aberta, foram obtidas funções de transferência para quatro estados estacionários e estas foram comparadas com as obtidas empiricamente. Para a comparação da resposta do sistema em malha fechada, foi utilizada a mesma sintonia do modelo empírico.

Palavras-chave: Controle de processos, MPC, Poliestireno, Polimerização, Modelagem de controle de processo.

ABSTRACT

This work has the object of studying the control model of a theoretical perfectly agitated polystyrene reactor by linearizing the kinetic equations of polymerization.

It is divided by: introduction and contextualization of the study for Chemical industries, bibliographic review of non-linear differential equations' linearization by Taylor method, implementation of MPC (Model Predictive Control), linearization of differential equations of the model, model implementation in Matlab[®], tests in open loop system, implementation of predictive control, comparison and discussion of obtained results with empirical results in literature.

Two important process variables were chosen to be manipulated in the model: initiator flow rate at input stream and refrigeration water flow rate which exchanges heat with the reactor during polymerization. By varying these, the reactor temperature T and polymer intrinsic viscosity η , which is function of the average molecular weight of the polymer, were controlled.

In open loop, transfer functions were obtained for four different steady states and compared with the ones obtained empirically. For the comparison in closed loop system, the used tuning parameters were the same as the empirical study.

Keywords: Process Control, MPC, Polystyrene, Polymerization, Process Control modeling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Modelo do reator contínuo de polimerização.	17
Figura 2 – Exemplo de Diagrama de blocos – Malha Aberta	19
Figura 3 – Exemplo de Diagrama de blocos – Malha Fechada	20
Figura 5 – Estrutura do MPC	21
Figura 6 – Resposta de η para degrau unitário em Q_i em PE1 – Malha Aberta	31
Figura 7 – Resposta de η para degrau unitário em Q_c em PE1 – Malha Aberta	31
Figura 8 – Resposta de T para degrau unitário em Q_i em PE1 – Malha Aberta	32
Figura 9 – Resposta de T para degrau unitário em Q_c em PE1 – Malha Aberta	32
Figura 10 – Resposta de η para degrau unitário em Q_i em PE2 – Malha Aberta	34
Figura 11 – Resposta de η para degrau unitário em Q_c em PE2 – Malha Aberta	34
Figura 12 – Resposta de T para degrau unitário em Q_i em PE2 – Malha Aberta	35
Figura 13 – Resposta de T para degrau unitário em Q_c em PE2 – Malha Aberta	35
Figura 14 – Resposta de η para degrau unitário em Q_i em PE3 – Malha Aberta	37
Figura 15 – Resposta de η para degrau unitário em Q_c em PE3 – Malha Aberta	37
Figura 16 – Resposta de T para degrau unitário em Q_i em PE3 – Malha Aberta	38
Figura 17 – Resposta de T para degrau unitário em Q_c em PE3 – Malha Aberta	38
Figura 18 – Resposta de η para degrau unitário em Q_i em PE4 – Malha Aberta	40
Figura 19 – Resposta de η para degrau unitário em Q_c em PE4 – Malha Aberta	40
Figura 20 – Resposta de T para degrau unitário em Q_i em PE4 – Malha Aberta	41
Figura 21 – Resposta de T para degrau unitário em Q_c em PE4 – Malha Aberta	41
Figura 22 - Resposta da Viscosidade ao set-point $\square = 2,98 \text{ g}^{-1}$ no PE 1 – Malha Fechada	43
Figura 23 - Resposta da Temperatura ao set-point $T = 322,8 \text{ K}$ no PE 1 – Malha Fechada	44
Figura 24 - Evolução de Q_i com o tempo no PE 1 – Malha Fechada	44
Figura 25 - Evolução de Q_c com o tempo no PE 1 – Malha Fechada	45
Figura 26 - Resposta da Viscosidade ao set-point $\square = 2,82 \text{ g}^{-1}$ no PE 2 – Malha Fechada	46
Figura 27 - Resposta da Temperatura ao set-point $T = 324,7 \text{ K}$ no PE 2 – Malha Fechada	46
Figura 28 - Evolução de Q_i com o tempo no PE 2 – Malha Fechada	47

Figura 29 - Evolução de Q_c com o tempo no PE 2 – Malha Fechada.....	47
Figura 30 - Resposta da Viscosidade ao set-point $\square = 2,9 \text{ g}^{-1}$ no PE 3 – Malha Fechada	48
Figura 31- Resposta da Temperatura ao set-point $T = 324,0 \text{ K}$ no PE 3 – Malha Fechada	49
Figura 32 - Evolução de Q_i com o tempo no PE 3 – Malha Fechada.....	49
Figura 33 - Evolução de Q_c com o tempo no PE 3 – Malha Fechada.....	50
Figura 34 - Resposta da Viscosidade ao set-point $\square = 3,17 \text{ g}^{-1}$ no PE 4 – Malha Fechada	51
Figura 35 - Resposta da Temperatura ao set-point $T = 320,8 \text{ K}$ no PE 4 – Malha Fechada	51
Figura 36 - Evolução de Q_i com o tempo no PE 4 – Malha Fechada.....	52
Figura 37 - Evolução de Q_c com o tempo no PE 4 – Malha Fechada.....	52

LISTA DE TABELAS

Tabela 1– Parâmetros do Modelo de Polimerização	18
Tabela 2– Valores e unidades dos parâmetros do modelo	25
Tabela 3– Matrizes A, B, C e D para PE1	30
Tabela 4– Matrizes A, B, C e D para PE2	33
Tabela 5– Matrizes A, B, C e D para PE3	36
Tabela 6 – Matrizes A, B, C e D para PE4	39
Tabela 7 - Parâmetros de sintonia utilizados no MPC.....	42
Tabela 8 - Limitações das variáveis manipuladas.....	42
Tabela 9 - Condições de simulação de malha fechada para o PE1	43
Tabela 10: Condições de simulação em malha fechada para o PE2	45
Tabela 11 - Condições de simulação de malha fechada para o PE3	48
Tabela 12 - Condições de simulação de malha fechada para o PE4	50

LISTA DE SÍMBOLOS

A_d	Fator de frequência da decomposição de iniciador
E_d	Energia de ativação para decomposição do iniciador
A_p	Fator de frequência para a reação de propagação
E_p	Energia de ativação para a reação de propagação
A_t	Fator de frequência a reação de terminação
E_t	Energia de ativação para reação de terminação
f_i	Eficiência do iniciador
$(-\Delta H_r)$	Entalpia de polimerização
hA	Troca térmica entre o reator e a camisa de refrigeração
ρC_p	Capacidade calorífica do fluido no reator
$\rho_c C_{pc}$	Capacidade calorífica do fluido de troca térmica
M_m	Peso molecular do monômero
Q_t	Vazão total de entrada
Q_i	Vazão de iniciador
Q_s	Vazão de solvente
Q_m	Vazão de monômero
Q_c	Vazão do fluido de refrigeração
V	Volume do reator
V_c	Volume da camisa de refrigeração
$[I_f]$	Concentração de iniciador na alimentação
$[M_f]$	Concentração de monômero na alimentação
T_f	Temperatura da corrente de entrada
T_{cf}	Temperatura de entrada do fluido de troca térmica
$[I]$	Concentração de iniciador no reator
$[M]$	Concentração de monômero no reator
T	Temperatura do reator
T_c	Temperatura da camisa de refrigeração
D_0	Concentração molar das cadeias poliméricas não radicalares
D_1	Concentração mássica das cadeias poliméricas não radicalares

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	12
1. REVISÃO DA LITERATURA.....	13
1.1. Linearização de equações não-lineares	13
1.2. Modelagem da Reação de Polimerização do Estireno	15
1.3. Funções de Transferência e Diagrama de Blocos	19
1.4. Model Predictive Control (MPC)	21
2. METODOLOGIA	24
2.1. Linearização das equações do modelo cinético	24
2.2. Obtenção da matriz de transferência e testes do sistema em malha aberta	24
2.3. Simulação do sistema em malha fechada e sintonia do controlador MPC	27
3. RESULTADOS.....	28
3.1. Equações Linearizadas	28
3.2. Comparativo da Resposta do Sistema em Malha Aberta	29
3.3. Comparativo do sistema em Malha Fechada.....	42
4. DISCUSSÃO.....	53
4.1. Equações linearizadas.....	53
4.2. Funções de transferência e testes em malha aberta	53
4.3. Implantação do sistema de controle MPC e testes em malha fechada	54
5. CONCLUSÃO	56
REFERÊNCIAS.....	57
APÊNDICE A – ROTINA DESENVOLVIDA PARA O ESTUDO.....	58
APÊNDICE B – ROTINA PARA CÁLCULO DO MODELO QMDC.....	62

INTRODUÇÃO

No atual contexto da indústria global, há a presença cada vez maior de investimentos em processos e equipamentos que visem a redução contínua das perdas nas unidades de produção, sejam elas materiais, de matérias-primas e produtos, temporais, ligadas a equipamentos e trabalho da mão-de-obra, ou energéticas. Assim, faz-se necessária a existência de um controle de processo que vise a máxima redução dos custos a fim de auxiliar as indústrias a criarem ou manterem sua vantagem competitiva no mercado.

Para a indústria de *commodities*, tal controle se faz ainda mais necessário devido ao elevado volume de produção, ao baixo valor agregado do produto e à natureza competitiva do mercado, no qual a empresa em questão não tem poder para determinar o preço.

O composto cujo controle de processo será estudado neste trabalho é o Poliestireno (PS). No mercado, este polímero termoplástico é vendido em três formas: *crystal ou standard*, *poliestireno expandido (EPS)* e *poliestireno de alto impacto (HIPS)*. Cada tipo possui uma aplicação específica, que pode variar desde a confecção de embalagens de copos descartáveis, no caso do tipo *standard* à confecção de materiais de isolamento térmica, no caso do EPS^[1].

A demanda global do composto está em crescimento, tendo como previsão uma expansão de 5,6% até 2020 em comparação com o ano de 2010^[2]. Tal crescimento é justificado pelo desenvolvimento da indústria nos países emergentes, em especial China, Índia e Brasil. A aplicação de maior destaque no Brasil é o setor de embalagens, onde o Poliestireno é consumido tanto na forma *crystal* quanto como EPS, tendo como maiores produtores a Dow Chemical e a BASF, The Chemical Company^[1].

O presente trabalho utiliza uma modelagem de um reator do tipo CSTR (Tanque de mistura perfeita em regime permanente) de polimerização. Para este modelo, são conhecidas as equações cinéticas e, a partir da linearização destas, é desenvolvido um modelo de controle avançado MPC, onde as variáveis manipuladas são a vazão de iniciador e vazão de água de refrigeração, enquanto que as variáveis controladas são a temperatura de operação do reator e a viscosidade intrínseca do polímero, uma medida indireta da massa molecular média das cadeias poliméricas. Ao final do trabalho, os dados simulados são comparados com os da literatura.

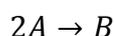
1. REVISÃO DA LITERATURA

1.1. Linearização de equações não-lineares

Seja um sistema representado pela variável de saída $y(t)$ em função de uma variável de entrada genérica, $x(t)$. Este sistema pode ser representado pela seguinte equação:

$$y(t) = f(x(t)) \quad (1.1)$$

Genericamente, a função representada pela equação (1.1) pode ser linear, isto é, existe uma constante de proporcionalidade entre a variação da variável de saída $y(t)$ e a variável de entrada $x(t)$, ou não-linear, onde tal fenômeno não ocorre. Para reações químicas, os casos mais comuns de modelagem matemática de reação envolvem pelo menos uma equação não-linear. Seja o exemplo uma reação de síntese elementar:



Neste caso, a reação é representada por uma cinética de segunda ordem, onde a taxa de reação é proporcional ao quadrado da concentração do reagente A:

$$r(t) = k * [A(t)]^2$$

Onde:

$r(t)$ é a taxa de reação em função do tempo;

k é a velocidade da reação;

$A(t)$ é a concentração do reagente em função do tempo.

Reações químicas podem ser das mais variadas naturezas e, por este motivo, em muitos exemplos reais, a cinética de uma reação pode possuir alta complexidade e envolver diversas equações não-lineares. A grande dificuldade de envolver modelagem não linear ocorre na resolução de sistemas de equações diferenciais.

Desta forma, uma técnica clássica para linearização de equações não-lineares é através da aproximação pelo polinômio de Taylor de primeira ordem. O polinômio de Taylor de ordem n é dado pela equação:

$$y(x) = f(x) \cong f(\hat{x}) + \frac{df}{dx}(x - \hat{x}) + \frac{1}{2!} \frac{df^2}{d^2x}(x - \hat{x})^2 + \dots + \frac{1}{n!} \frac{df^n}{d^n x}(x - \hat{x})^n$$

Onde:

\hat{x} é o ponto do qual é conhecido o valor da função $f(x)$.

O polinômio de Taylor de primeira ordem consiste em tomar o polinômio de Taylor em $n = 1$. Desta forma, a função $y(x)$ é aproximada da seguinte maneira:

$$y(x) \cong f(\hat{x}) + \frac{df}{dx}(x - \hat{x}) = f(\hat{x}) + K(x - \hat{x}) \quad (1.2)$$

$$K = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=\hat{x}} \quad (1.3)$$

Conclui-se, portanto, que a partir das equações (1.2) e (1.3), é possível encontrar uma aproximação linear para a função genérica (1.1):

$$y(t) - f(\hat{x}(t)) = K(x(t) - \hat{x}(t)) \quad (1.4)$$

É possível expandir a equação (1.4) para casos onde a variável de saída $y(t)$ depende de mais de uma variável de entrada. No caso genérico, para n variáveis de entrada, a aproximação por polinômio de Taylor de primeira ordem é dada pela equação:

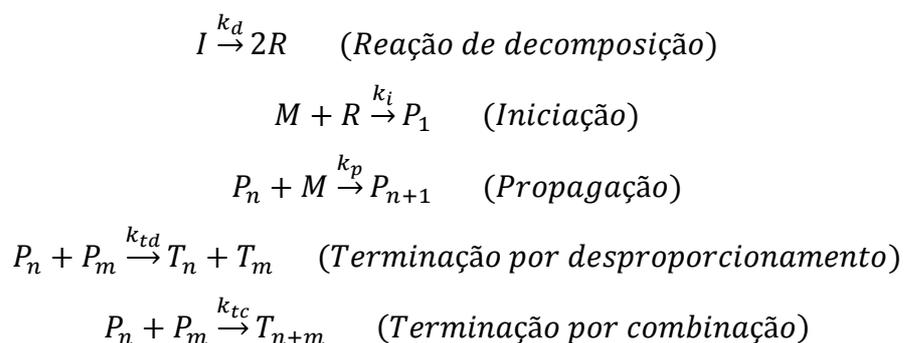
$$\begin{aligned} y(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) - f(\hat{x}_1(t), \hat{x}_2(t), \dots, \hat{x}_n(t)) \\ = K_1(x_1(t) - \hat{x}_1(t)) + K_2(x_2(t) - \hat{x}_2(t)) + \dots \\ + K_n(x_n(t) - \hat{x}_n(t)) \quad (1.5) \end{aligned}$$

Esta aproximação é a base de cálculo do estudo realizado neste trabalho.

1.2. Modelagem da Reação de Polimerização do Estireno

A reação de polimerização difere das demais reações químicas conhecidas pelo fato de gerar compostos de alto peso molecular e envolver cinética de reação complexa. Como resultado da polimerização, têm-se o aumento da viscosidade do produto e aumento da temperatura do sistema pelas reações exotérmicas envolvidas. O produto de reação consiste em uma mistura de compostos com diferentes tamanhos de cadeia molecular, sendo a distribuição tamanhos dada por uma curva Gaussiana.

Este trabalho consiste no estudo de uma homopolimerização radicalar por adição^[3], tendo como reagente o monômero de estireno, iniciador o 2,2'-azoisobutironitrila dissolvido em benzeno puro. O mecanismo cinético genérico pode ser descrito pelas seguintes etapas^[4]:



O mecanismo pode ser interpretado da seguinte forma: as moléculas de iniciador decompõem-se, formando dois radicais livres cada. Neste meio, o radical reage com a molécula de monômero, transformando-se em outro radical livre, cuja base é o monômero de estireno. Tal radical, reage com outra molécula de monômero e forma um dímero radicalar. A reação continua, formando-se longas cadeias poliméricas. Estas cadeias continuam a aumentar até ocorrer uma das seguintes situações: há a passagem de elétrons de um radical para o outro, sem haver junção das cadeias (desproporcionamento) ou as cadeias poliméricas se unem, eliminando a possibilidade de propagação (combinação).

É necessário citar também que a natureza exotérmica da reação de polimerização de estireno produz efeitos que não podem ser desprezados no controle do sistema.

Assim, o reator deve possuir uma camisa de refrigeração, pela qual o escoamento de um fluido refrigerante, no caso a água, promoverá a troca de calor desse fluido com o reator, permitindo a manutenção da temperatura em seu interior apesar do efeito exotérmico da reação de polimerização.

Para o caso de estudo deste trabalho, um reator contínuo de mistura perfeita de polimerização de estireno, o modelo fenomenológico foi estudado, e a partir dos balanços de massa dos componentes presentes na reação e do balanço de energia envolvendo o reator e a camisa de refrigeração, foram obtidas as equações diferenciais para quatro variáveis (ou estados), como se vê a seguir^[5]:

$$\frac{d[I]}{dt} = \frac{(Q_i[I_f] - Q_t[I])}{V} - k_d[I] \quad (1.6)$$

$$\frac{d[M]}{dt} = \frac{(Q_m[M_f] - Q_t[M])}{V} - k_p[M][P] \quad (1.7)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_t(T_f - T)}{V} + \frac{(-\Delta H_r)}{\rho C_p} k_p[M][P] - \frac{hA}{\rho C_p V} (T - T_c) \quad (1.8)$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{Q_c(T_{cf} - T_c)}{V} + \frac{hA}{\rho_c C_{pc} V_c} (T - T_c) \quad (1.9)$$

Além disso, foram definidas as seguintes relações:

$$[P] = \left[\frac{2f_i k_d [I]}{k_t} \right]^{0,5} \quad (1.10)$$

$$k_j = A_j \exp\left(\frac{-E_j}{T}\right), j = d, p, t \quad (1.11)$$

$$Q_t = Q_i + Q_s + Q_m \quad (1.12)$$

É possível utilizar, ainda, expandir o modelo para encontrar o peso molecular médio \bar{M}_w através duas equações de momento da reação de polimerização^[6]:

$$\frac{dD_0}{dt} = 0,5k_t[P]^2 - \frac{Q_t D_0}{V} \quad (1.13)$$

$$\frac{dD_1}{dt} = M_m k_p [M][P] - \frac{Q_t D_1}{V} \quad (1.14)$$

$$\bar{M}_w = \frac{D_1}{D_0} \quad (1.15)$$

Com relação ao poliestireno sintetizado, as variáveis ideais para a determinação de suas especificações são a Temperatura na saída do reator (T) e o peso molecular na saída do reator (\bar{M}_w).

Entretanto, devido à dificuldade de se medir \bar{M}_w , optou-se por utilizar neste trabalho medidas simuladas de viscosidade intrínseca η dadas pela expressão^[7]:

$$\eta = 0,0012(\bar{M}_w)^{0,71} \quad (1.16)$$

Define-se também:

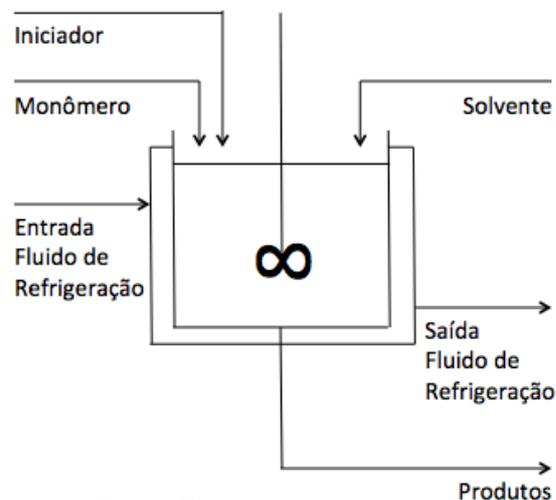
$$\bar{Q}_m = \frac{\bar{Q}_m}{\bar{Q}_i} Q_i \quad (1.17)$$

$$Q_s = 1,5 \cdot Q_m - Q_i \quad (1.18)$$

É perceptível, portanto, que trata-se de um modelo complexo com diversos parâmetros e variáveis de operação.

Para uma melhor compreensão do sistema, a Figura 1 abaixo exhibe o diagrama de processo do reator de polimerização CSTR:

Figura 1 – Modelo do reator contínuo de polimerização.



Fonte: Elaborada pelos autores.

A Tabela 1 a seguir resume a natureza de cada parâmetro do modelo:

Tabela 1– Parâmetros do Modelo de Polimerização

Parâmetro	Descrição
A_d	Fator de frequência da decomposição de iniciador
E_d	Energia de ativação para decomposição do iniciador
A_p	Fator de frequência para a reação de propagação
E_p	Energia de ativação para a reação de propagação
A_t	Fator de frequência a reação de terminação
E_t	Energia de ativação para reação de terminação
f_i	Eficiência do iniciador
$(-\Delta H_r)$	Entalpia de polimerização
hA	Troca térmica entre o reator e a camisa de refrigeração
ρC_p	Capacidade calorífica do fluido no reator
$\rho_c C_{pc}$	Capacidade calorífica do fluido de troca térmica
M_m	Peso molecular do monômero
Q_t	Vazão total de entrada
Q_i	Vazão de iniciador
Q_s	Vazão de solvente
Q_m	Vazão de monômero
Q_c	Vazão do fluido de refrigeração
V	Volume do reator
V_c	Volume da camisa de refrigeração
$[I_f]$	Concentração de iniciador na alimentação
$[M_f]$	Concentração de monômero na alimentação
T_f	Temperatura da corrente de entrada
T_{cf}	Temperatura de entrada do fluido de troca térmica
$[I]$	Concentração de iniciador no reator
$[M]$	Concentração de monômero no reator
T	Temperatura do reator
T_c	Temperatura da camisa de refrigeração
D_0	Concentração molar das cadeias poliméricas não radicalares
D_1	Concentração mássica das cadeias poliméricas não radicalares

Os valores dos parâmetros apresentadas na Tabela 1 usadas neste estudo são exibidos no tópico 2. Metodologia.

1.3. Funções de Transferência e Diagrama de Blocos

O controle de processos na indústria química é vital para diversos aspectos da produção, tais como: redução de custos, otimização de processo, segurança e, principalmente, padronização do processo para a garantia de um produto final dentro das especificações.

Tal controle se dá através de um sistema automático de *sensores*, que são responsáveis por obter uma medição de uma variável controlada (CV) , e *controladores*, que interpretando a diferença entre o valor medido e o valor especificado, alteram uma variável manipulada (MV) com o intuito de levar o sistema à condição de operação desejada.

A Figura 2 mostra um diagrama de blocos, ferramenta utilizada para descrever sistemas de controle:

Figura 2 – Exemplo de Diagrama de blocos – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

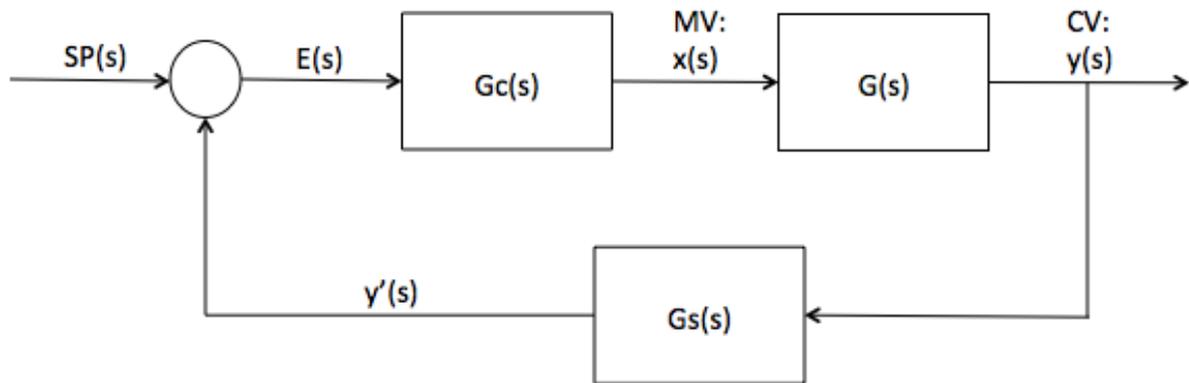
Neste caso, $G(s)$ é uma função de transferência, responsável por estabelecer uma relação matemática linear entre a MV e a CV. O parâmetro s corresponde à extrapolação do domínio do tempo t através da Transformada de Laplace, usada principalmente para auxiliar a resolução de equações diferenciais. A função de transferência é representada pela seguinte equação:

$$\frac{CV(s)}{MV(s)} = G(s) \quad (1.19)$$

No exemplo dado acima, porém, diz-se que o sistema está em malha aberta porque não há atuação do controlador. Ou seja, o sistema apenas responde a

variações em $x(t)$ de acordo com a função de transferência $G(s)$. Na Figura 3, há um exemplo de sistema em malha fechada:

Figura 3 – Exemplo de Diagrama de blocos – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

Observando o exemplo acima, o sensor, cuja função de transferência é representada por $G_s(s)$, recebe um sinal elétrico com o valor da CV e gera um sinal para ser comparado com o Setpoint, ou seja, o valor desejado de y . A diferença entre estes dois valores, no caso o erro $E(s)$, é interpretada pelo controlador, representado no diagrama pela função de transferência $G_c(s)$ que, por sua vez, envia um sinal para provocar fisicamente a alteração do valor da MV por meio de um atuador (por exemplo, abrindo ou fechando uma válvula).

A função de transferência do sistema em malha fechada é facilmente demonstrável e é dada então por^[8]:

$$\frac{CV(s)}{MV(s)} = \frac{G(s)}{1 + G_s(s)G_c(s)G(s)} \quad (1.20)$$

Os primeiros controladores desenvolvidos na indústria foram os controladores P (Puro), PI (Integrativo) e PID (Derivativo). A equação que descreve um controlador PID é apresentada pela equação a seguir:

$$G_c(s) = K_c \left(1 + \frac{1}{T_i s} + T_d s \right) \quad (1.21)$$

Onde:

K_c , T_i e T_d são os parâmetros de sintonia do controlador.

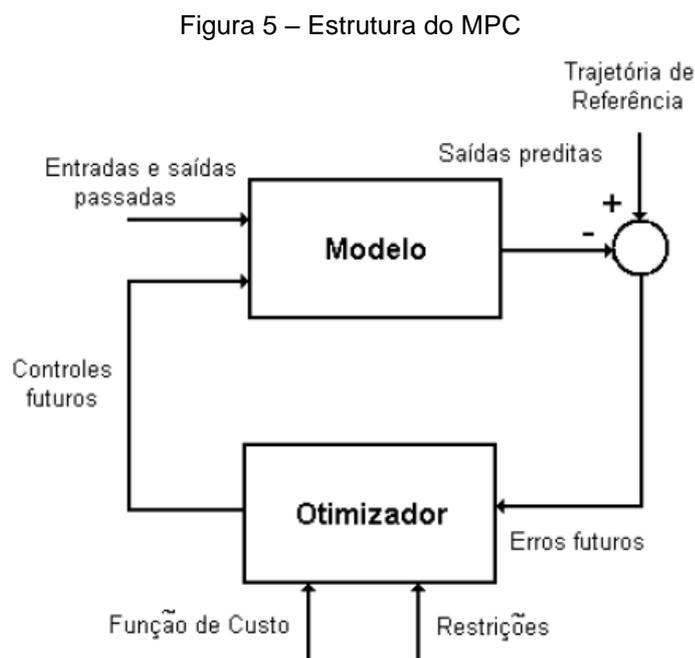
A sintonia do controlador corresponde à escolha de parâmetros de modo que o controlador seja capaz de responder a variações do sistema de forma eficiente, sem que haja instabilidade da malha de controle.

Estes, porém, são mais adequados em sistemas monovariáveis, ou seja, que possuem apenas uma variável controlada. Neste estudo, adotaram-se duas variáveis controladas e duas variáveis manipuladas. Sendo assim, é necessária a utilização de um modelo de controle mais adequado para o sistema multivariável.

1.4. Model Predictive Control (MPC)

MPC é o nome dado ao conjunto de técnicas de controle preditivo que foram desenvolvidas e estão atualmente consolidadas na indústria. Uma das principais vantagens do uso deste tipo de controlador é sua aplicação tanto em sistemas SISO (Single Input Single Output) quanto MIMO (Multiple Input Multiple Output). No método de cálculo, são levadas em considerações tanto os valores futuros (previsto) das variáveis controladas quanto o valor atual das mesmas. Desta forma, o sistema é capaz de responder melhor às variações das CVs reduzindo, por exemplo, a possibilidade de gerar variações muito abruptas nas MVs para atingir a função objetivo do controlador^[9].

A Figura 5 mostra o diagrama de blocos de um controlador MPC:



Fonte: Bravo & Normey-Rico (2009).

A estrutura dos algoritmos de predição é dada por:

- a) Leitura das entradas e saídas do sistema;
- b) Atualização da trajetória prevista com medida e última ação de controle;
- c) Cálculo de sequência de ações de controle futuras que minimizem o erro das funções objetivos da saída prevista;
- d) Implementação no processo apenas da primeira ação de controle.

Neste trabalho, o modelo MPC utilizado será o QDMC (Quadratic Dynamic Matrix Control) e, para este controlador, são utilizados os seguintes parâmetros de sintonia:

- a) m – horizonte de controle;
- b) p – horizonte de otimização;
- c) q – vetor de pesos das CVs;
- d) r – vetor de fatores de restrição das MVs.

Neste caso, o algoritmo aplicará o cálculo da seguinte forma: através de um horizonte de controle m , o controlador observa a estabilização do sistema até um determinado instante. Assim, para calcular as variações das MVs necessárias para atingir a função objetivo, o parâmetro p corresponde à dinâmica do controlador para variar as MVs de modo que haja o controle no horizonte previsto. Os parâmetros q_i , por sua vez, são responsáveis por ponderar as MVs dentro da dinâmica do sistema. Há a possibilidade do sistema possuir CVs com dinâmicas muito distintas e, desta forma, o controle deve ser otimizado levando-se em conta este fator. Por fim, as restrições r_i correspondem a uma limitação imposta às MVs de modo que estas não possam variar livremente ao longo do tempo, sendo uma vantagem significativa para controlar possíveis instabilidades na malha de controle.

O algoritmo do MPC, a partir das informações da resposta das CV's para um pulso ou um degrau nas MV's, estabelece a seguinte relação entre vetores^[10]:

$$Y^c = S. \Delta u + Y^k + P \quad (1.22)$$

Onde Y^c é o vetor das predições corrigidas para as saídas, S é a matriz dinâmica, Δu é o vetor de ações de controle calculadas para o momento k , Y^k é o vetor das saídas no momento k e P é o vetor de predições decorrentes das ações passadas.

O controlador QDMC, utilizado neste trabalho, usa como predição, a partir do vetor de erros entre valores previstos e desejados (e) e do vetor de erros sem em malha aberta (e'):

$$e = -S \cdot \Delta u + e' \quad (1.23)$$

Tendo como função objetivo:

$$J = \frac{1}{2} e^T Q^T Q e + \frac{1}{2} \Delta u^T R \Delta u \quad (1.24)$$

E chega ao seguinte problema de otimização do Δu que minimiza a função:

$$J = \frac{1}{2} \Delta u^T (S^T Q^T Q S + R) \Delta u - (e^T Q^T Q S) \Delta u \quad (1.25)$$

Que é sujeita a algumas restrições de mínimo e máximo definidas pelo problema em questão.

2. METODOLOGIA

Conforme mencionado na Introdução, o objetivo principal deste estudo é comparar a resposta do sistema de controle de um reator contínuo de mistura perfeita de poliestireno em duas vertentes: a primeira, realizada neste estudo, se dá através da linearização das equações do modelo cinético e a segunda, um estudo realizado por Alvares & Odloak^[11], no qual as funções de transferência do sistema foram obtidas empiricamente.

Sendo assim, a metodologia foi realizada em três etapas: linearização do modelo cinético, comparação da dinâmica do processo em malha aberta e implementação do controlador MPC, com comparações entre os resultados obtidos pelos dois métodos.

2.1. Linearização das equações do modelo cinético

Para esta etapa, foram utilizadas as equações (1.5) e (1.3) descritas na Revisão da Literatura para as equações (1.6) à (1.18). Desta forma, obtiveram-se equações cinéticas linearizadas e dependentes apenas das MVs Q_i e Q_c e dos estados $[M]$, $[I]$, T_c , T , D_0 e D_1 (cada qual correspondente a uma equação diferencial do modelo cinético). As equações linearizadas são apresentadas na seção 3. Resultados.

2.2. Obtenção da matriz de transferência e testes do sistema em malha aberta

Uma vez obtidas as equações cinéticas, o próximo passo corresponde à dedução da Matriz de transferência, formada pelas funções de transferência de cada uma das variáveis controladas (y_1 e y_2) em função das variáveis manipuladas (u_1 e u_2).

O sistema de equações obtido pode ser escrito da seguinte forma:

$$Y(t) = AX(t) + BU(t) \quad (2.1)$$

$$\dot{X}(t) = CX(t) + DU(t) \quad (2.2)$$

Onde:

$Y(t)$ é o vetor das CV's, no caso, T e η ;

A, B, C, D são as matrizes de elementos correspondentes às constantes nas equações linearizadas;

$X(t)$ é o vetor com os estados do sistema;

$\dot{X}(t)$ é o vetor das derivadas dos estados do sistema em relação ao tempo;

$U(t)$ é o vetor das MV's, no caso, Q_i e Q_c .

Para efeitos comparativos, optou-se por utilizar os mesmos valores das constantes descritas na Tabela 1 do trabalho de Alvarez & Odloak^[11]. Assim, a Tabela 2 resume os valores e unidades utilizados na modelagem do sistema de controle:

Tabela 2– Valores e unidades dos parâmetros do modelo

Parâmetro	Valor	Unidades
A_d	$2,142 \times 10^{17}$	h^{-1}
E_d	14897	K
A_p	$3,816 \times 10^{10}$	$L \cdot mol^{-1} \cdot h^{-1}$
E_p	3557	K
A_t	$4,50 \times 10^{12}$	$L \cdot mol^{-1} \cdot h^{-1}$
E_t	843	K
f_i	0,6	-
$(-\Delta H_r)$	16700	$cal \cdot mol^{-1}$
hA	$2,52 \times 10^5$	$cal \cdot K^{-1} \cdot h^{-1}$
ρC_p	360	$cal \cdot K^{-1} \cdot L^{-1}$
$\rho_c C_{pc}$	966,3	$cal \cdot K^{-1} \cdot L^{-1}$
M_m	104,14	$g \cdot mol^{-1}$
Q_i	108	$L \cdot h^{-1}$
Q_s	459	$L \cdot h^{-1}$
Q_m	378	$L \cdot h^{-1}$
Q_c	471,6	$L \cdot h^{-1}$
V	3000	L

V_c	3312,4	L
$[I_f]$	0,5888	mol.L ⁻¹
$[M_f]$	8,6981	mol.L ⁻¹
T_f	330	K
T_{cf}	295	K
$[I]$	6,6832x10 ⁻²	mol.L ⁻¹
$[M]$	3,3245	mol.L ⁻¹
T	323,56	K
T_c	305,17	K
D_0	2,7547x10 ⁻⁴	mol.L ⁻¹
D_1	16,110	g.L ⁻¹

Desta forma, as funções de transferência foram obtidas através de uma rotina no software Matlab[®] baseada na função SS2F.

Esta função recebe as matrizes A, B, C e D descritas nas equações (2.1) e (2.2) e devolve as funções de transferência envolvendo as CV's y_i e as MV's u_i .

Utilizando os valores da Tabela 2, o primeiro ponto de operação foi obtido e, com ele, a respectiva matriz de funções de transferência, correlacionando as duas CV's com as duas MV's em questão. Como o estudo de Alvarez & Odloak^[11] calculava as funções de transferência em outros três pontos de operação para definição de um controlador multicamada de RTO, optou-se por verificar a consistência das linearizações dos modelos cinéticos nestes três pontos. Denominados de M1, M2 e M3, estes são calculados da seguinte forma:

$$M1: 0,9.\overline{Q}_i; 1,05.\overline{Q}_c \quad (2.3)$$

$$M2: 1,1.\overline{Q}_i; 0,95.\overline{Q}_c \quad (2.4)$$

$$M3: 0,75.\overline{Q}_i; 1,15.\overline{Q}_c \quad (2.5)$$

Onde:

\overline{Q}_i e \overline{Q}_c são os valores encontrados na Tabela 2.

A partir das funções de transferência fornecidas pela rotina do software Matlab[®], foram realizados testes em malha aberta, a fim de se comparar a dinâmica e o ganho de cada par (u_i, y_i) em cada um dos quatro pontos de equilíbrio.

Os testes foram realizados utilizando-se o degrau unitário, tanto para o modelo empírico^[11] quanto para o modelo linearizado, objetivo de estudo deste trabalho.

O degrau unitário foi escolhido como função de excitação do sistema devido à sua simplicidade para implementação e interpretação.

O tratamento dos dados também é beneficiado por tal escolha, uma vez que o algoritmo utilizado na etapa seguinte do trabalho utiliza as respostas do sistema ao degrau.

As simulações obtidas encontram-se na seção 3 – Resultados.

2.3. Simulação do sistema em malha fechada e sintonia do controlador MPC

Após a obtenção das funções de transferência, foi iniciada a etapa de implementação do sistema de controle avançado MPC.

Para tal, foi utilizada a rotina `qdmc_06`, que a partir dos parâmetros das funções de transferência e da sintonia definida pelo usuário, realiza os cálculos referentes à previsão do sistema, às variações das MV's pelo controlador e as saídas obtidas nas CV's.

Tal rotina foi fornecida por nosso orientador durante a disciplina PQI-2510 - Controle Avançado de Processos.

As simulações foram realizadas para cada um dos quatro pontos de equilíbrio, a partir da escolha de um set-point contemplando y_1 e y_2 .

A sintonia utilizada para o processo foi escolhida levando-se em consideração os ganhos de cada par (u_i, y_i) , a dinâmica das funções de transferência além da realização de tentativas buscando-se o controle mais eficaz em termos de rapidez e estabilidade das respostas.

Os valores máximos para as MV's durante as simulações foram obtidos no estudo realizado por Alvarez e Odloak^[11].

As simulações obtidas encontram-se na seção 3 – Resultados.

3. RESULTADOS

Conforme descrito, na seção anterior 2. Metodologia, os resultados apresentados serão divididos em três seções: Equações Linearizadas, Comparativo da Resposta do Sistema em Malha Aberta e Comparativo da Resposta do Sistema em Malha Fechada. A discussão fenomenológica dos resultados é exibida na próxima seção deste trabalho.

3.1. Equações Linearizadas

A linearização dos estados das MV's, que correspondem às equações (1.6), (1.7), (1.8), (1.9), (1.13) e (1.14) são descritas abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{dI^*}{dt} = & - \left(\frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m}{V} + A_d \exp\left(\frac{-E_d}{\bar{T}}\right) \right) [I]^*(t) - \left([\bar{I}] \left(\frac{E_d}{\bar{T}^2}\right) A_d \exp\left(\frac{-E_d}{\bar{T}}\right) \right) T^*(t) \\ & + \left(\frac{[I_f]}{V} - \frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m [\bar{I}]}{V \cdot \bar{Q}_i} \right) Q_i^*(t) \quad (3.1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dM^*}{dt} = & - [\bar{M}] A_p \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right) \left[\frac{f_i A_d \exp\left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}}\right)}{2 [\bar{I}] A_t} \right]^{\frac{1}{2}} [I]^*(t) - \left(\frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m}{V} + [\bar{P}] A_p \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right) \right) [M]^*(t) \\ & + [\bar{M}] A_p \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right) \left\{ [\bar{I}] \left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}^2}\right) \left[\frac{f_i A_d \exp\left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}}\right)}{2 [\bar{I}] A_t} \right]^{\frac{1}{2}} - [\bar{P}] \left(\frac{E_p}{\bar{T}^2}\right) \right\} T^*(t) \\ & + \left(\frac{\bar{Q}_m}{\bar{Q}_i V} \right) ([M_f] - 2,5 [\bar{M}]) Q_i^*(t) \quad (3.2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dT^*}{dt} = & \frac{(-\Delta h_r) [\bar{M}] A_p \cdot \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right) \left[\frac{f_i A_d \exp\left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}}\right)}{2 [\bar{I}] A_t} \right]^{1/2}}{\rho C_p} [I]^*(t) + \frac{(-\Delta h_r) [\bar{P}] A_p \cdot \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right)}{\rho C_p} [M]^*(t) \\ & + \left\{ \frac{(-\Delta h_r) [\bar{M}] A_p \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right)}{\rho C_p} \left[[\bar{P}] \left(\frac{E_p}{\bar{T}^2}\right) - [\bar{I}] \left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}^2}\right) \left[\frac{f_i A_d \exp\left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}}\right)}{2 [\bar{I}] A_t} \right]^{1/2} \right] \right\} - \frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m}{V} \\ & - \frac{hA}{\rho C_p V} \left\{ T^*(t) + \left(\frac{hA}{\rho C_p V} \right) T_c^*(t) + \left(\frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m}{\bar{Q}_i V} \right) (T_f - \bar{T}) Q_i^*(t) \right\} \quad (3.3) \end{aligned}$$

$$\frac{dT_c^*}{dt} = + \frac{hA}{\rho_c C_{pc} V_c} T^*(t) - \left(\frac{\bar{Q}_c + \frac{hA}{\rho_c C_{pc}}}{V_c} \right) T_c^*(t) + \frac{(T_{cf} - \bar{T}_c)}{V_c} Q_c^*(t) \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{dD_0^*}{dt} = & + [\bar{P}] A_t \exp\left(\frac{-E_t}{\bar{T}}\right) \left[\frac{f_i A_d \exp\left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}}\right)}{2[\bar{I}] A_t} \right]^{1/2} [I]^*(t) \\ & + [\bar{P}] A_t \exp\left(\frac{-E_t}{\bar{T}}\right) \left\{ \frac{[\bar{P}]}{2} \left(\frac{E_t}{\bar{T}^2}\right) - [\bar{I}] \left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}^2}\right) \left[\frac{f_i A_d \exp\left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}}\right)}{2[\bar{I}] A_t} \right]^{1/2} \right\} T^*(t) \\ & - \left(\frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m}{V}\right) D_0^*(t) - \left(\frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m}{\bar{Q}_i V}\right) \bar{D}_0 \cdot Q_i^*(t) \quad (3.5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dD_1^*}{dt} = & M_m [\bar{M}] A_p \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right) \left[\frac{f_i A_d \exp\left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}}\right)}{2[\bar{I}] A_t} \right]^{1/2} [I]^*(t) + \left(M_m [\bar{P}] A_p \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right) \right) [M]^*(t) \\ & + M_m [\bar{M}] A_p \exp\left(\frac{-E_p}{\bar{T}}\right) \left\{ [\bar{P}] \left(\frac{E_p}{\bar{T}^2}\right) - [\bar{I}] \left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}^2}\right) \left[\frac{f_i A_d \exp\left(\frac{E_t - E_d}{\bar{T}}\right)}{2[\bar{I}] A_t} \right]^{1/2} \right\} T^*(t) \\ & - \left(\frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m}{V}\right) D_1^*(t) - \left(\frac{2,5 \cdot \bar{Q}_m}{\bar{Q}_i V}\right) \bar{D}_1 \cdot Q_i^*(t) \quad (3.6) \end{aligned}$$

A linearização da CV η , que corresponde à equação (1.16) é dada por:

$$\eta^*(t) = \frac{8,52 \cdot 10^{-4}}{\bar{M}_w^{0,29}} \left(\frac{1}{\bar{D}_0} D_1^*(t) - \frac{\bar{D}_1}{\bar{D}_0^2} D_0^*(t) \right) \quad (3.7)$$

Por fim, a CV T é um dos estados.

3.2. Comparativo da Resposta do Sistema em Malha Aberta

Para este comparativo, primeiramente, foram obtidas as matrizes A, B, C e D das equações (2.1) e (2.2) através do cálculo dos valores numéricos das Equações Linearizadas com o uso das constantes da Tabela 2. Este procedimento foi realizado em cada um dos quatro pontes estacionários, sendo o primeiro descrito pelos parâmetros Q_i e Q_c da própria Tabela 2 e o segundo, terceiro e quarto pelas equações (2.3), (2.4) e (2.5), respectivamente.

3.2.1. Primeiro Ponto Estacionário (PE1)

As matrizes A, B, C e D são exibidas na Tabela 3 a seguir. No caso da matriz B, o índice 1 corresponde à MV Q_i e 2 à MV Q_c e, no caso da matriz C, o índice 1 corresponde à CV η e 2 à CV T .

Tabela 3– Matrizes A, B, C e D para PE1

Coeficientes						
A	-3,17E-01	0	-2,06E-05	0	0	0
	-3,65E-01	-3,30E-01	1,62E-03	0	0	0
	1,69E+01	6,80E-01	-3,20E-01	2,33E-01	0	0
	0	0	7,87E-02	-2,21E-01	0	0
	1,30E-03	0	1,24E-05	0	-3,15E-01	0
	3,80E+01	1,53E+00	5,13E-01	0	0	-3,15E-01
B₁	1,34E-06	4,51E-04	1,88E-02	0	-8,03E-07	-4,70E-02
B₂	0	0	0	-3,07E-03	0	0
C₁	0	0	0	0	-7,50E+03	1,28E-01
C₂	0	0	1,00E+00	0	0	0
D	0	0	0	0	0	0

As próximas quatro figuras exibem as respostas do sistema em Malha Aberta para cada combinação possível de CV e MV. A Figura 6 é o comparativo Linearizado x Empírico para a combinação $\eta \times Q_i$, a Figura 7 para a combinação $\eta \times Q_c$, a Figura 8 para a combinação $T \times Q_i$ e a Figura 9 para a combinação $T \times Q_c$. As funções de transferência obtidas pelo modelo linearizado são dadas abaixo:

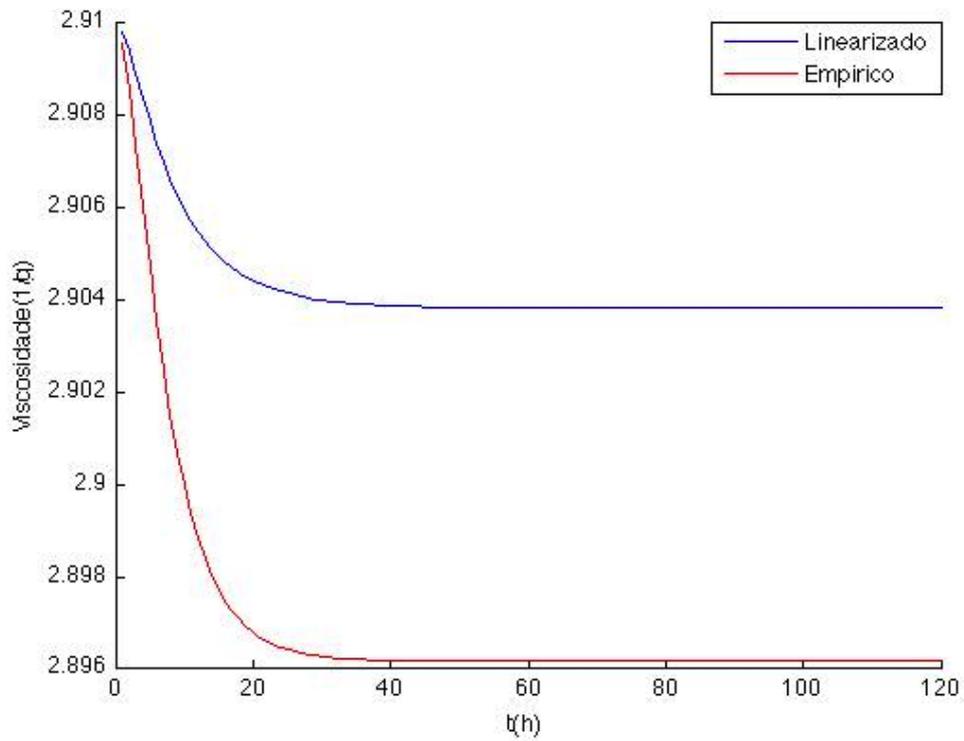
$$G_{11}(s) = \frac{-3,16 * 10^{-6}s^5 - 4,34 * 10^{-4}s^4 - 5,12 * 10^{-4}s^3 - 2,28 * 10^{-4}s^2 - 4,49 * 10^{-5}s - 3,32 * 10^{-6}}{s^6 + 1,82s^5 + 1,35s^4 + 0,527s^3 + 0,112s^2 + 0,0123s + 5,54 * 10^{-4}}$$

$$G_{12}(s) = \frac{-1,33 * 10^{-15}s^5 - 1,55 * 10^{-15}s^4 + 1,95 * 10^{-5}s^3 + 1,84 * 10^{-5}s^2 + 5,81 * 10^{-6}s + 6,11 * 10^{-7}}{s^6 + 1,82s^5 + 1,35s^4 + 0,527s^3 + 0,112s^2 + 0,0123s + 5,54 * 10^{-4}}$$

$$G_{21}(s) = \frac{1,88 * 10^{-2}s^5 + 2,85 * 10^{-2}s^4 + 1,72 * 10^{-2}s^3 + 5,15 * 10^{-3}s^2 + 7,68 * 10^{-4}s + 4,54 * 10^{-5}}{s^6 + 1,82s^5 + 1,35s^4 + 0,527s^3 + 0,112s^2 + 0,0123s + 5,54 * 10^{-4}}$$

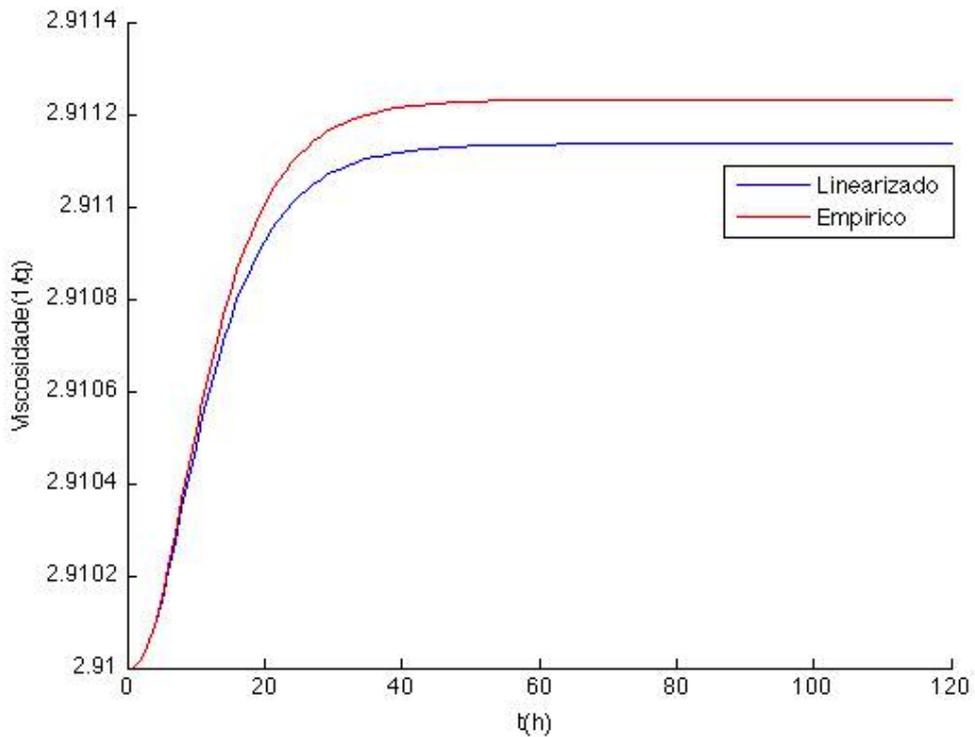
$$G_{22}(s) = \frac{2,22 * 10^{-16}s^5 - 7,16 * 10^{-4}s^4 - 9,15 * 10^{-4}s^3 - 4,38 * 10^{-4}s^2 - 9,32 * 10^{-5}s - 7,43 * 10^{-6}}{s^6 + 1,82s^5 + 1,35s^4 + 0,527s^3 + 0,112s^2 + 0,0123s + 5,54 * 10^{-4}}$$

Figura 6 – Resposta de η para degrau unitário em Q_i em PE1 – Malha Aberta



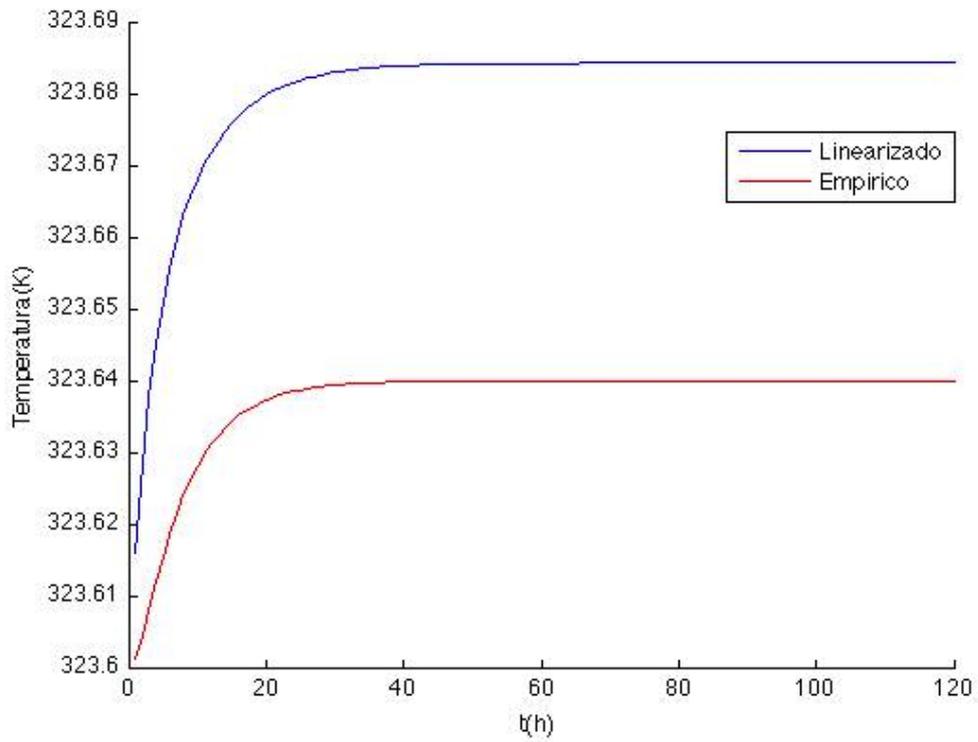
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 7 – Resposta de η para degrau unitário em Q_c em PE1 – Malha Aberta



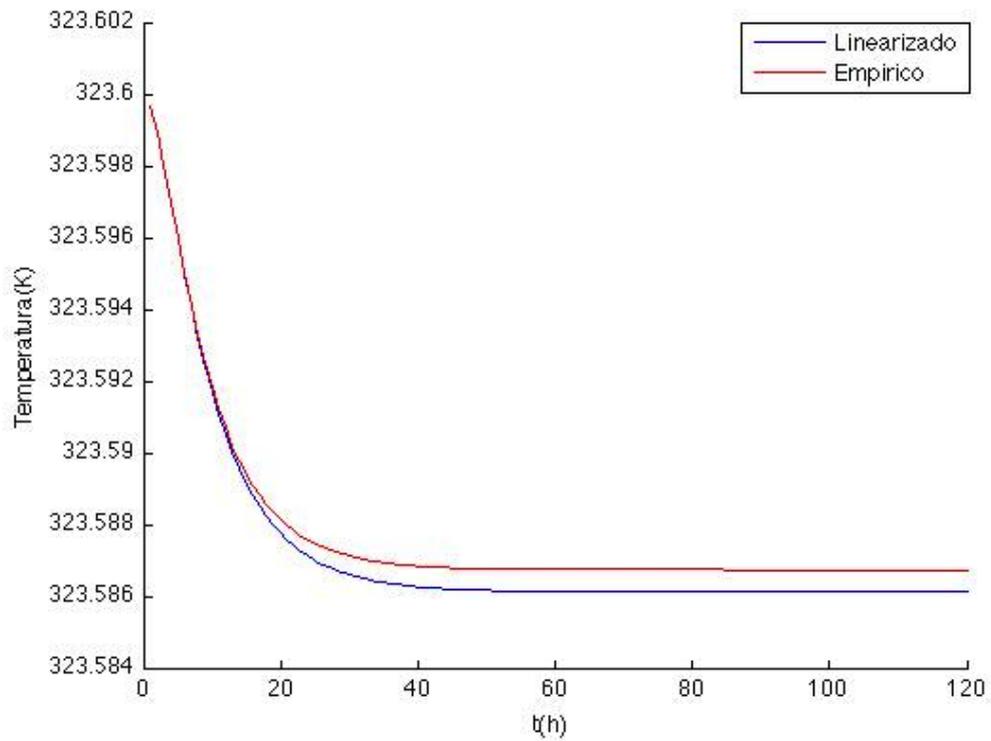
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 8 – Resposta de T para degrau unitário em Q_i em PE1 – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 9 – Resposta de T para degrau unitário em Q_c em PE1 – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

3.2.2. Segundo Ponto Estacionário (PE2)

As matrizes A, B, C e D são exibidas na Tabela 4 a seguir. No caso da matriz B, o índice 1 corresponde à MV Q_i e 2 à MV Q_c e, no caso da matriz C, o índice 1 corresponde à CV η e 2 à CV T .

Tabela 4– Matrizes A, B, C e D para PE2

Coeficientes						
A	-2,85E-01	0	-1,74E-05	0	0	0
	-3,22E-01	-2,96E-01	1,44E-03	0	0	0
	1,49E+01	5,99E-01	-3,14E-01	2,33E-01	0	0
	0	0	7,87E-02	-2,28E-01	0	0
	1,09E-03	0	1,04E-05	0	-2,84E-01	0
	3,36E+01	1,35E+00	4,57E-01	0	0	-2,84E-01
B₁	1,25E-06	4,42E-04	2,24E-02	0	-7,48E-07	-4,62E-02
B₂	0	0	0	-2,84E-03	0	0
C₁	0	0	0	0	-8,38E+03	1,36E-01
C₂	0	0	1,00E+00	0	0	0
D	0					

As próximas quatro figuras exibem as respostas do sistema em Malha Aberta para cada combinação possível de CV e MV. A Figura 10 é o comparativo Linearizado x Empírico para a combinação $\eta \times Q_i$, a Figura 11 para a combinação $\eta \times Q_c$, a Figura 12 para a combinação $T \times Q_i$ e a Figura 13 para a combinação $T \times Q_c$. As funções de transferência obtidas pelo modelo linear são dadas abaixo:

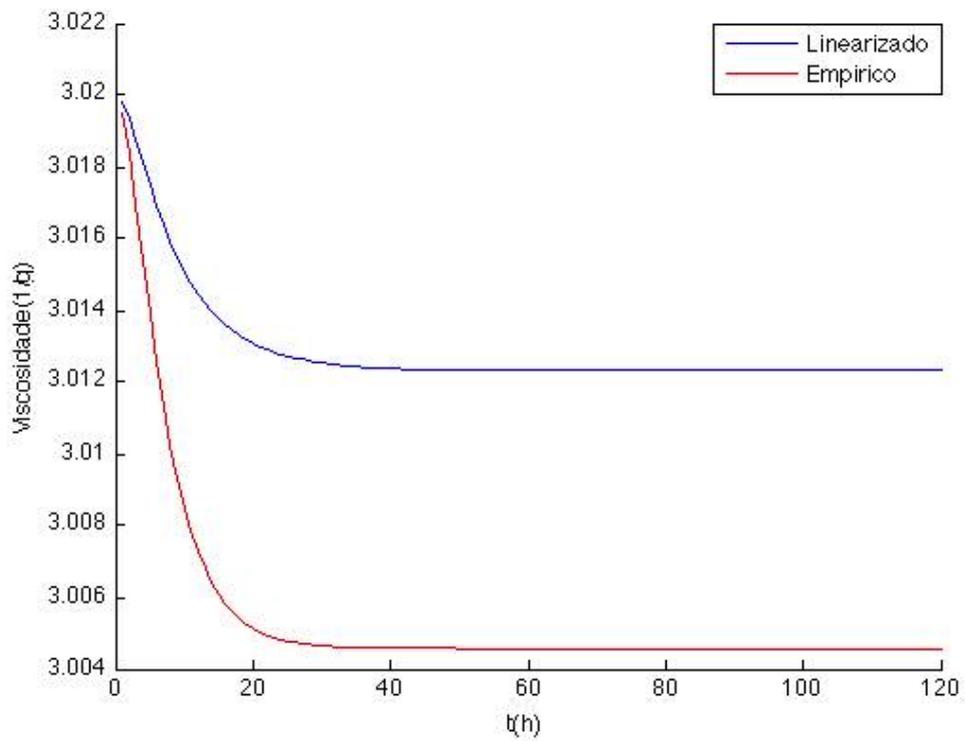
$$G_{11}(s) = \frac{3,03 * 10^{-6}s^5 - 4,86 * 10^{-4}s^4 - 5,32 * 10^{-4}s^3 - 2,18 * 10^{-4}s^2 - 4,00 * 10^{-5}s - 2,75 * 10^{-6}}{s^6 + 1,69s^5 + 1,17s^4 + 0,423s^3 + 0,084s^2 + 0,0087s + 3,58 * 10^{-4}}$$

$$G_{12}(s) = \frac{-2,22 * 10^{-16}s^4 + 1,68 * 10^{-5}s^3 + 1,42 * 10^{-5}s^2 + 4,05 * 10^{-6}s - 3,83 * 10^{-7}}{s^6 + 1,69s^5 + 1,17s^4 + 0,423s^3 + 0,084s^2 + 0,0087s + 3,58 * 10^{-4}}$$

$$G_{21}(s) = \frac{2,24 * 10^{-2}s^5 + 3,11 * 10^{-2}s^4 + 1,17 * 10^{-2}s^3 + 4,77 * 10^{-3}s^2 + 6,59 * 10^{-4}s + 3,62 * 10^{-5}}{s^6 + 1,69s^5 + 1,17s^4 + 0,423s^3 + 0,084s^2 + 0,0087s + 3,58 * 10^{-4}}$$

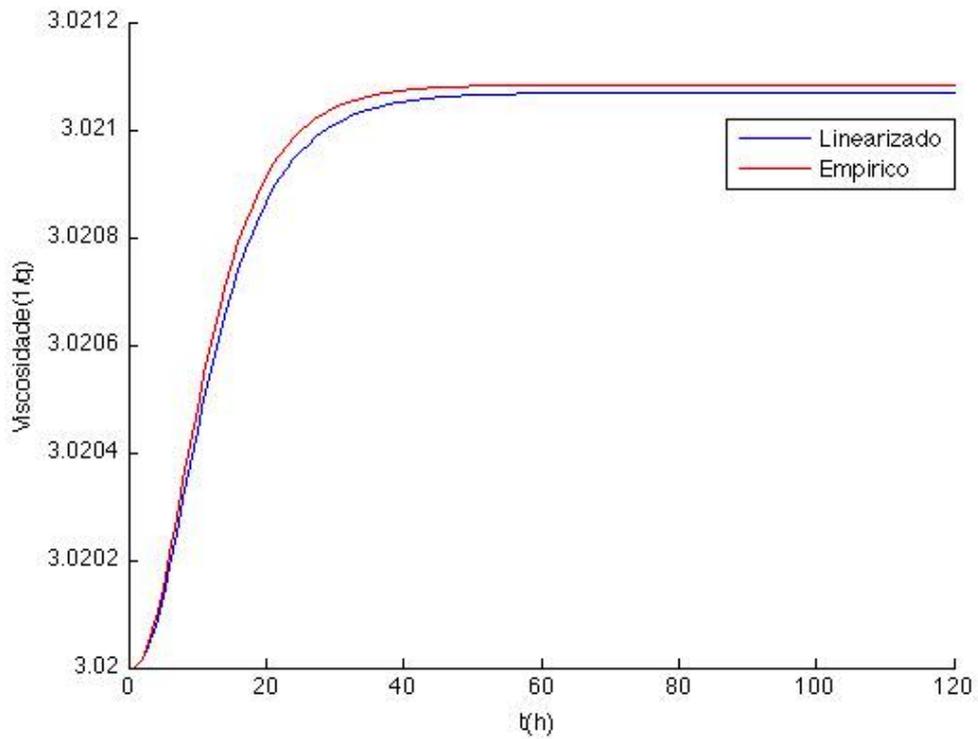
$$G_{22}(s) = \frac{-6,64 * 10^{-4}s^4 - 7,62 * 10^{-4}s^3 - 3,28 * 10^{-4}s^2 - 6,28 * 10^{-5}s - 4,51 * 10^{-6}}{s^6 + 1,69s^5 + 1,17s^4 + 0,423s^3 + 0,084s^2 + 0,0087s + 3,58 * 10^{-4}}$$

Figura 10 – Resposta de η para degrau unitário em Q_i em PE2 – Malha Aberta



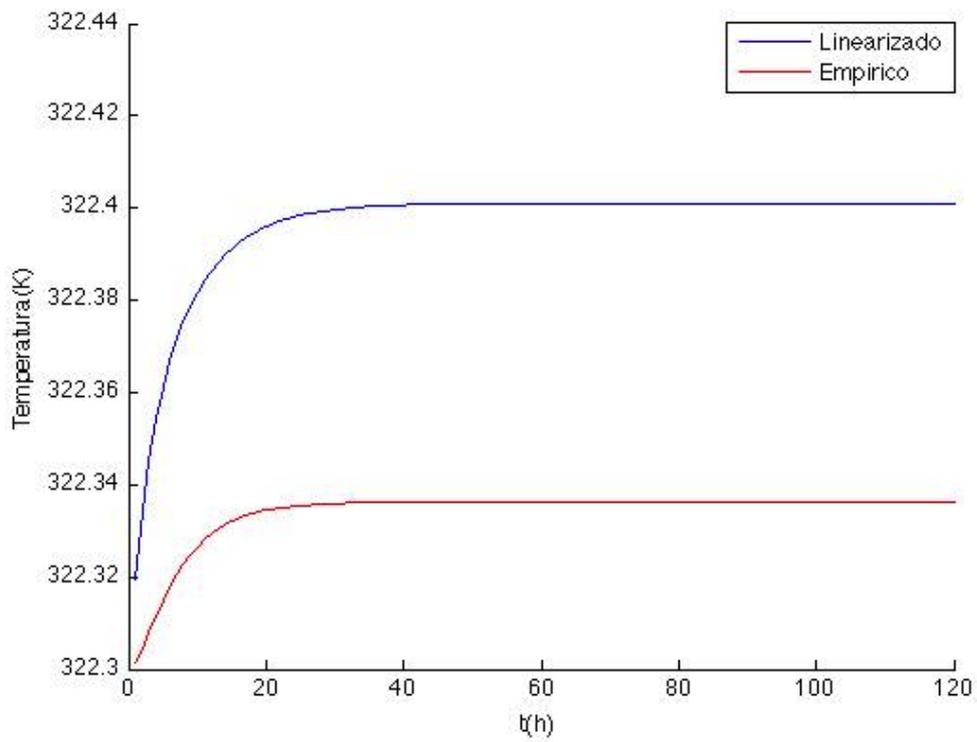
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 11 – Resposta de η para degrau unitário em Q_c em PE2 – Malha Aberta



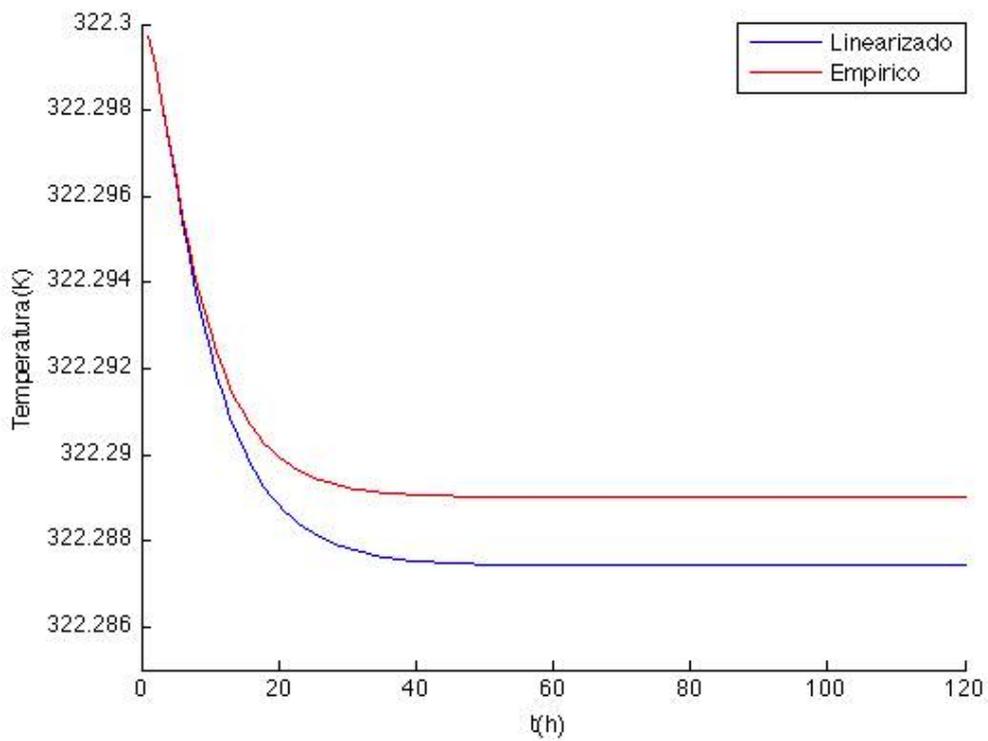
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 12 – Resposta de T para degrau unitário em Q_i em PE2 – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 13 – Resposta de T para degrau unitário em Q_c em PE2 – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

3.2.3. Terceiro Ponto Estacionário (PE3)

As matrizes A, B, C e D são exibidas na Tabela 5 a seguir. No caso da matriz B, o índice 1 corresponde à MV Q_i e 2 à MV Q_c e, no caso da matriz C, o índice 1 corresponde à CV η e 2 à CV T .

Tabela 5– Matrizes A, B, C e D para PE3

Coeficientes						
A	-3,49E-01	0	-2,39E-05	0	0	0
	-4,07E-01	-3,63E-01	1,79E-03	0	0	0
	1,89E+01	7,60E-01	-3,26E-01	2,33E-01	0	0
	0	0	7,87E-02	-2,14E-01	0	0
	1,52E-03	0	1,43E-05	0	-3,47E-01	0
	4,55E+01	1,71E+00	5,71E-01	0	0	-3,47E-01
B₁	1,42E-06	4,58E-04	1,56E-02	0	-8,54E-07	-4,78E-02
B₂	0	0	0	-3,30E-03	0	0
C₁	0	0	0	0	-6,84E+03	1,22E-01
C₂	0	0	1,00E+00	0	0	0
D	0					

As próximas quatro figuras exibem as respostas do sistema em Malha Aberta para cada combinação possível de CV e MV. A Figura 14 é o comparativo Linearizado x Empírico para a combinação $\eta \times Q_i$, a Figura 15 para a combinação $\eta \times Q_c$, a Figura 16 para a combinação $T \times Q_i$ e a Figura 17 para a combinação $T \times Q_c$. As funções de transferência obtidas pelo modelo linear são dadas abaixo:

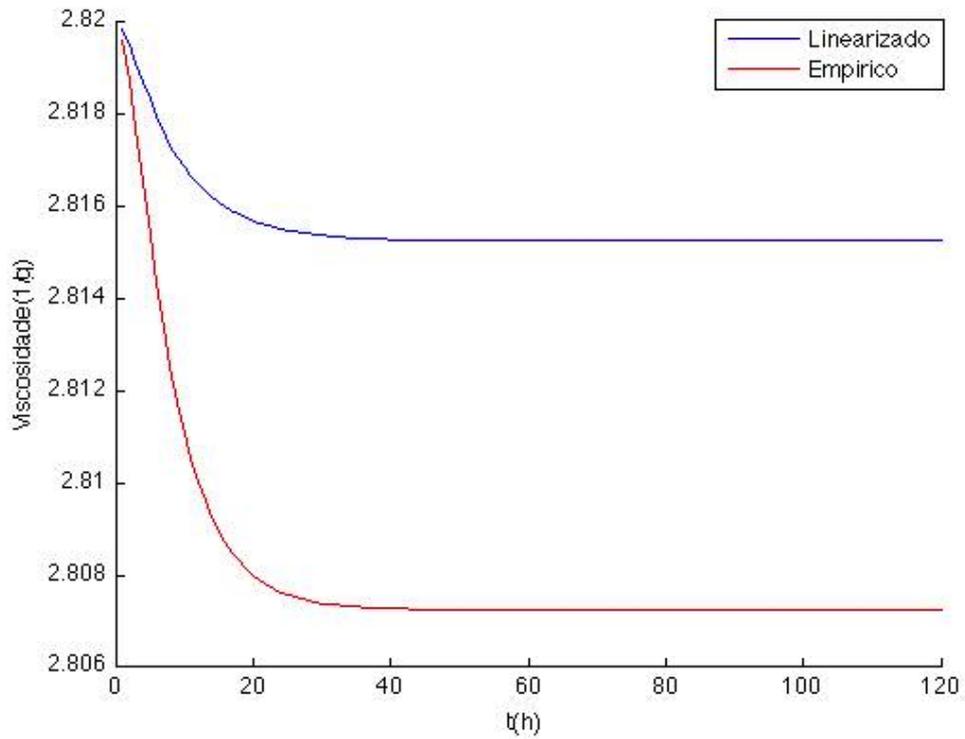
$$G_{11}(s) = \frac{-1,29 * 10^{-6}s^5 - 3,56 * 10^{-4}s^4 - 5,58 * 10^{-4}s^3 - 2,20 * 10^{-4}s^2 - 4,66 * 10^{-5}s - 3,69 * 10^{-6}}{s^6 + 1,95s^5 + 1,55s^4 + 0,644s^3 + 0,146s^2 + 0,0170s + 7,74 * 10^{-4}}$$

$$G_{12}(s) = \frac{1,33 * 10^{-15}s^5 + 1,78 * 10^{-15}s^4 + 2,18 * 10^{-5}s^3 + 2,27 * 10^{-5}s^2 + 7,88 * 10^{-6}s + 9,11 * 10^{-7}}{s^6 + 1,95s^5 + 1,55s^4 + 0,644s^3 + 0,146s^2 + 0,0170s + 7,74 * 10^{-4}}$$

$$G_{21}(s) = \frac{1,56 * 10^{-2}s^5 + 2,56 * 10^{-2}s^4 + 1,67 * 10^{-2}s^3 + 5,59 * 10^{-3}s^2 + 8,60 * 10^{-4}s + 5,41 * 10^{-5}}{s^6 + 1,95s^5 + 1,55s^4 + 0,644s^3 + 0,146s^2 + 0,0170s + 7,74 * 10^{-4}}$$

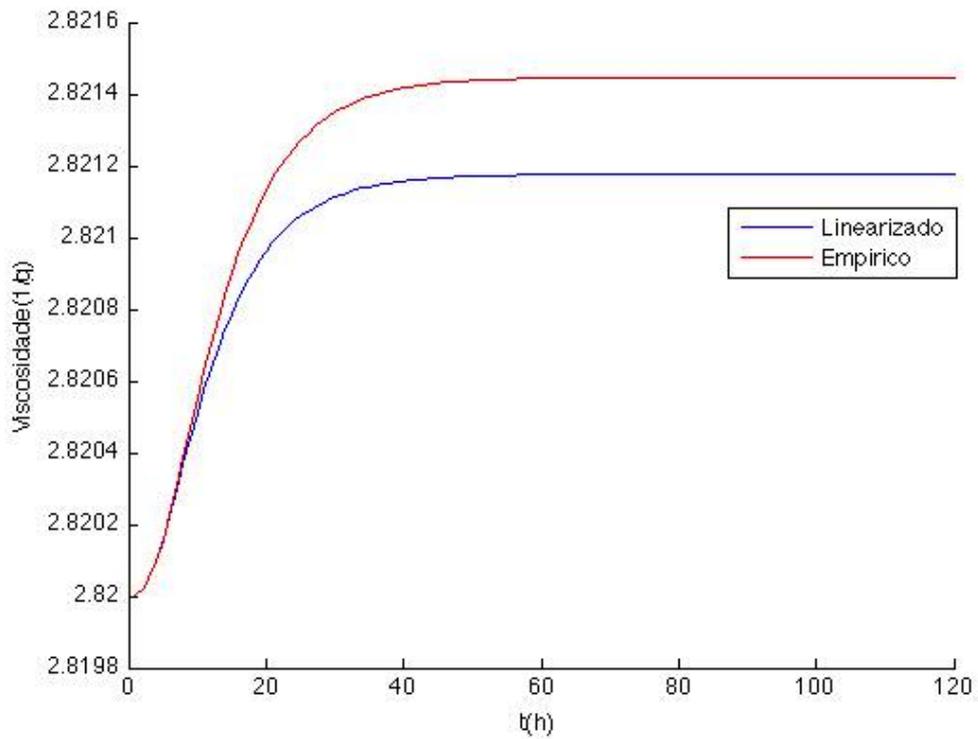
$$G_{22}(s) = \frac{-8,88 * 10^{-16}s^5 - 7,69 * 10^{-4}s^4 - 1,08 * 10^{-3}s^3 - 5,69 * 10^{-4}s^2 - 1,33 * 10^{-4}s - 1,17 * 10^{-5}}{s^6 + 1,95s^5 + 1,55s^4 + 0,644s^3 + 0,146s^2 + 0,0170s + 7,74 * 10^{-4}}$$

Figura 14 – Resposta de η para degrau unitário em Q_i em PE3 – Malha Aberta



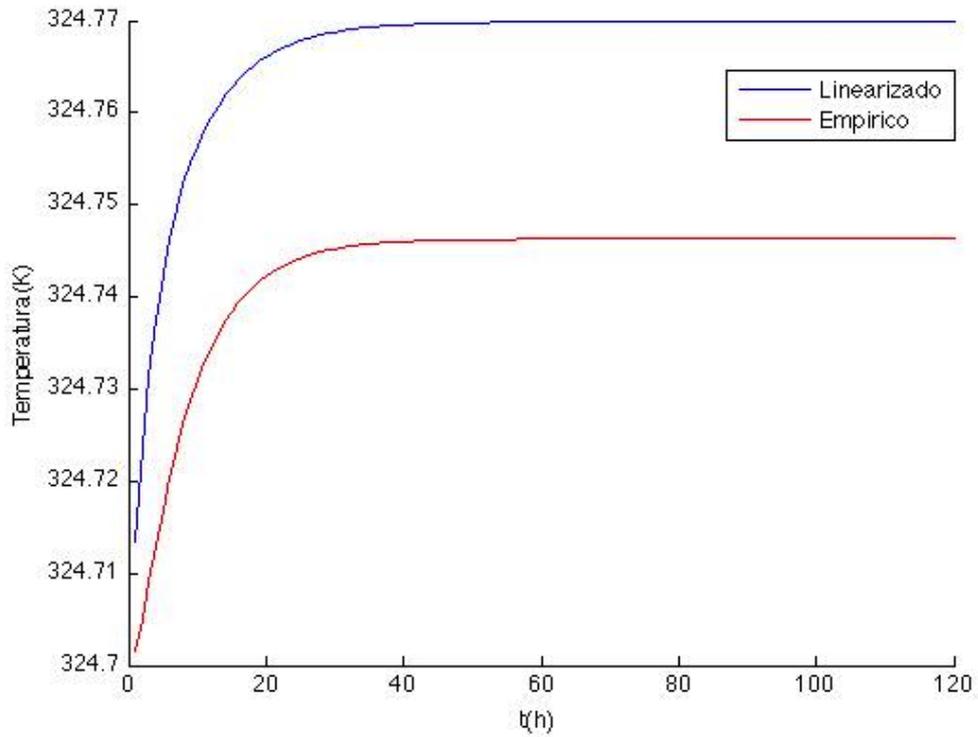
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 15 – Resposta de η para degrau unitário em Q_c em PE3 – Malha Aberta



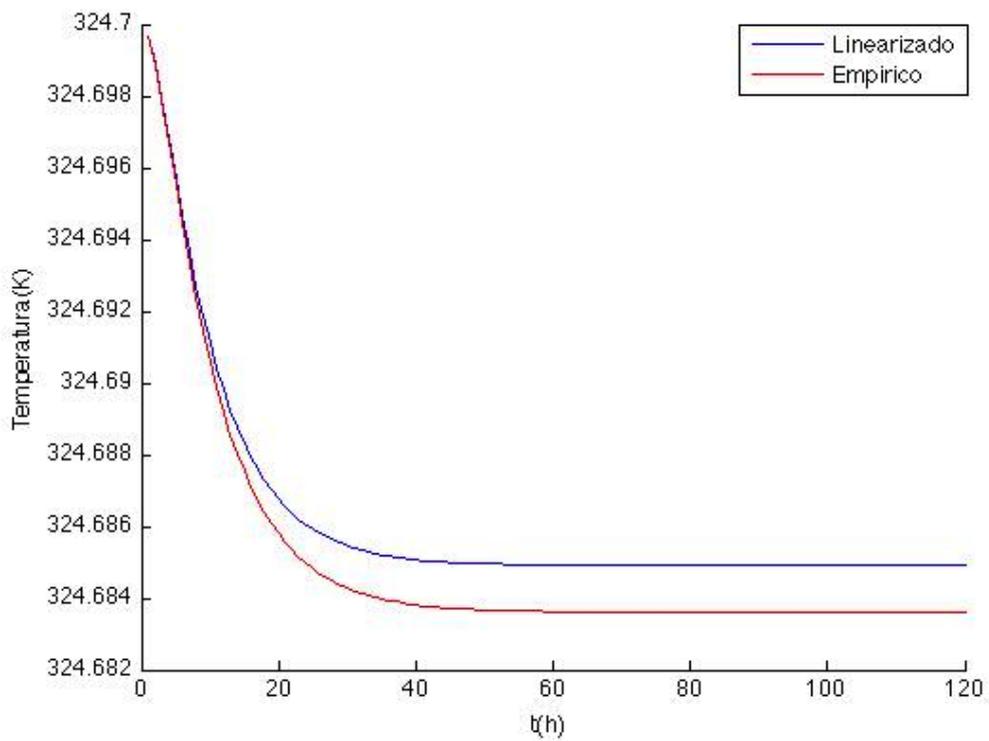
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 16 – Resposta de T para degrau unitário em Q_i em PE3 – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 17 – Resposta de T para degrau unitário em Q_c em PE3 – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

3.2.4. Quarto Ponto Estacionário (PE4)

As matrizes A, B, C e D são exibidas na Tabela 6 a seguir. No caso da matriz B, o índice 1 corresponde à MV Q_i e 2 à MV Q_c e, no caso da matriz C, o índice 1 corresponde à CV η e 2 à CV T .

Tabela 6 – Matrizes A, B, C e D para PE4

Coeficientes						
A	-2,38E-01	0	-1,26E-05	0	0	0
	-2,54E-01	-2,46E-01	1,15E-03	0	0	0
	1,18E+01	4,73E-01	-3,06E-01	2,33E-01	0	0
	0	0	7,87E-02	-2,42E-01	0	0
	7,79E-04	0	7,58E-06	0	-2,36E-01	0
	2,65E+01	1,07E+00	3,67E-01	0	0	-2,36E-01
B₁	1,07E-06	4,20E-04	2,92E-02	0	-6,44E-07	-4,39E-02
B₂	0	0	0	-2,45E-03	0	0
C₁	0	0	0	0	-1,04E+04	1,53E-01
C₂	0	0	1,00E+00	0	0	0
D	0					

As próximas quatro figuras exibem as respostas do sistema em Malha Aberta para cada combinação possível de CV e MV. A Figura 18 é o comparativo Linearizado x Empírico para a combinação $\eta \times Q_i$, a Figura 19 para a combinação $\eta \times Q_c$, a Figura 20 para a combinação $T \times Q_i$ e a Figura 21 para a combinação $T \times Q_c$. As funções de transferência obtidas pelo modelo linear são dadas abaixo:

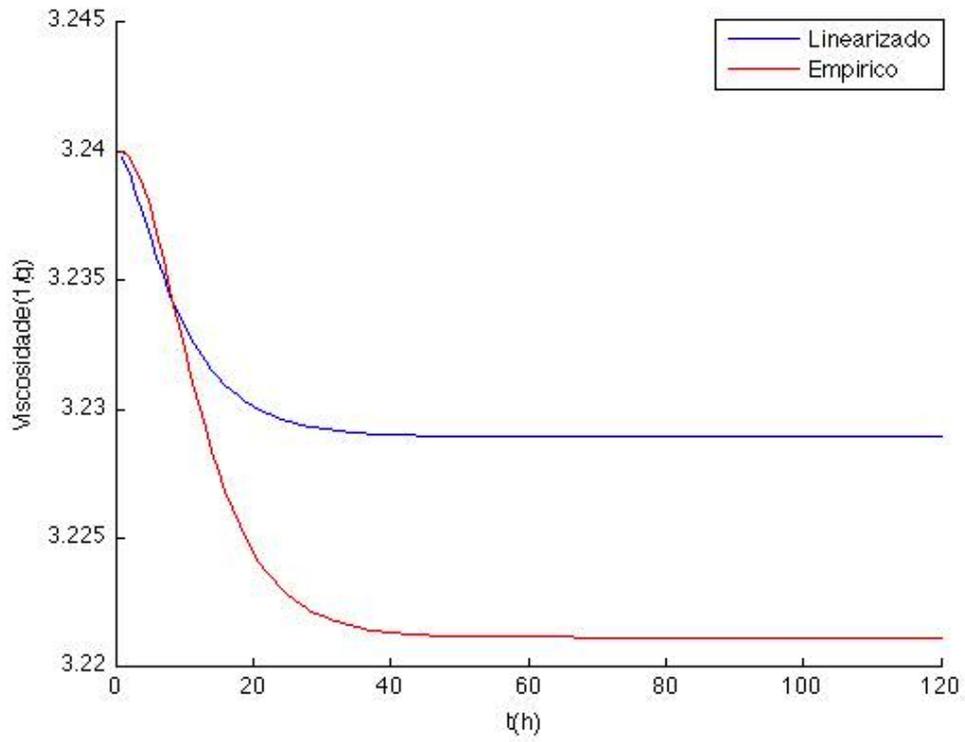
$$G_{11}(s) = \frac{6,65 * 10^{-7}s^5 - 6,09 * 10^{-4}s^4 - 5,75 * 10^{-4}s^3 - 2,07 * 10^{-4}s^2 - 3,32 * 10^{-5}s - 2,01 * 10^{-6}}{s^6 + 1,51s^5 + 0,93s^4 + 0,296s^3 + 0,053s^2 + 0,0048s + 1,81 * 10^{-4}}$$

$$G_{12}(s) = \frac{-6,66 * 10^{-16}s^5 - 5,55 * 10^{-16}s^4 + 1,31 * 10^{-5}s^3 + 9,31 * 10^{-6}s^2 + 2,20 * 10^{-6}s + 1,74 * 10^{-7}}{s^6 + 1,51s^5 + 0,93s^4 + 0,296s^3 + 0,053s^2 + 0,0048s + 1,81 * 10^{-4}}$$

$$G_{21}(s) = \frac{2,91 * 10^{-2}s^5 + 3,52 * 10^{-2}s^4 + 1,70 * 10^{-2}s^3 + 4,01 * 10^{-3}s^2 + 4,93 * 10^{-4}s + 2,38 * 10^{-5}}{s^6 + 1,51s^5 + 0,93s^4 + 0,296s^3 + 0,053s^2 + 0,0048s + 1,81 * 10^{-4}}$$

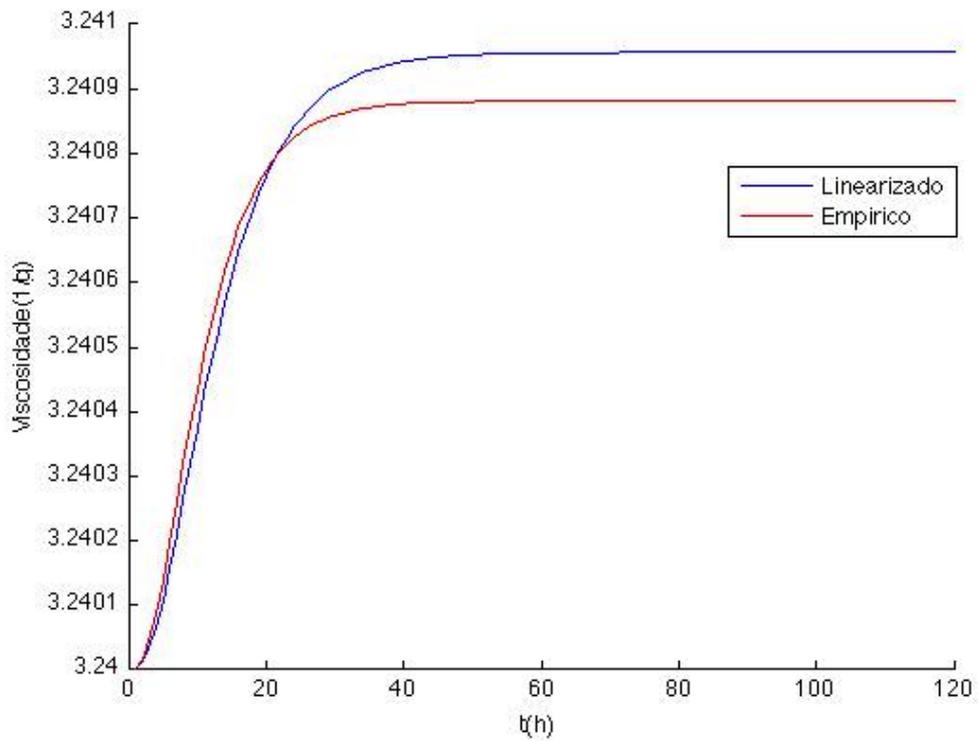
$$G_{22}(s) = \frac{-4,44 * 10^{-16}s^5 - 5,72 * 10^{-4}s^4 - 5,47 * 10^{-4}s^3 - 1,96 * 10^{-4}s^2 - 3,13 * 10^{-5}s - 1,87 * 10^{-6}}{s^6 + 1,51s^5 + 0,93s^4 + 0,296s^3 + 0,053s^2 + 0,0048s + 1,81 * 10^{-4}}$$

Figura 18 – Resposta de η para degrau unitário em Q_i em PE4 – Malha Aberta



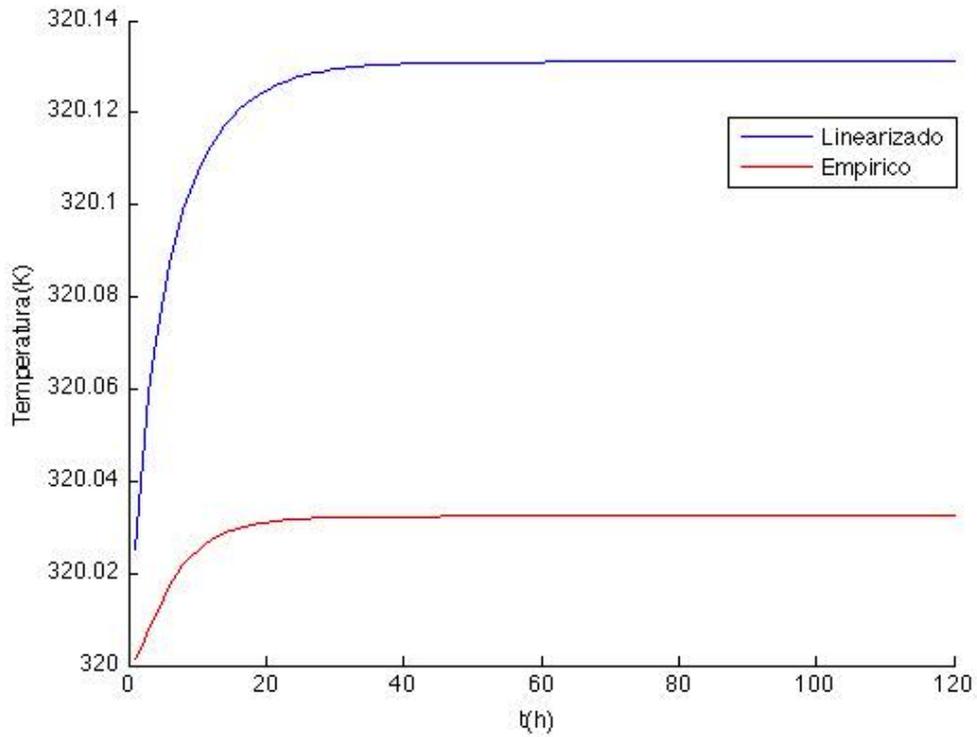
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 19 – Resposta de η para degrau unitário em Q_c em PE4 – Malha Aberta



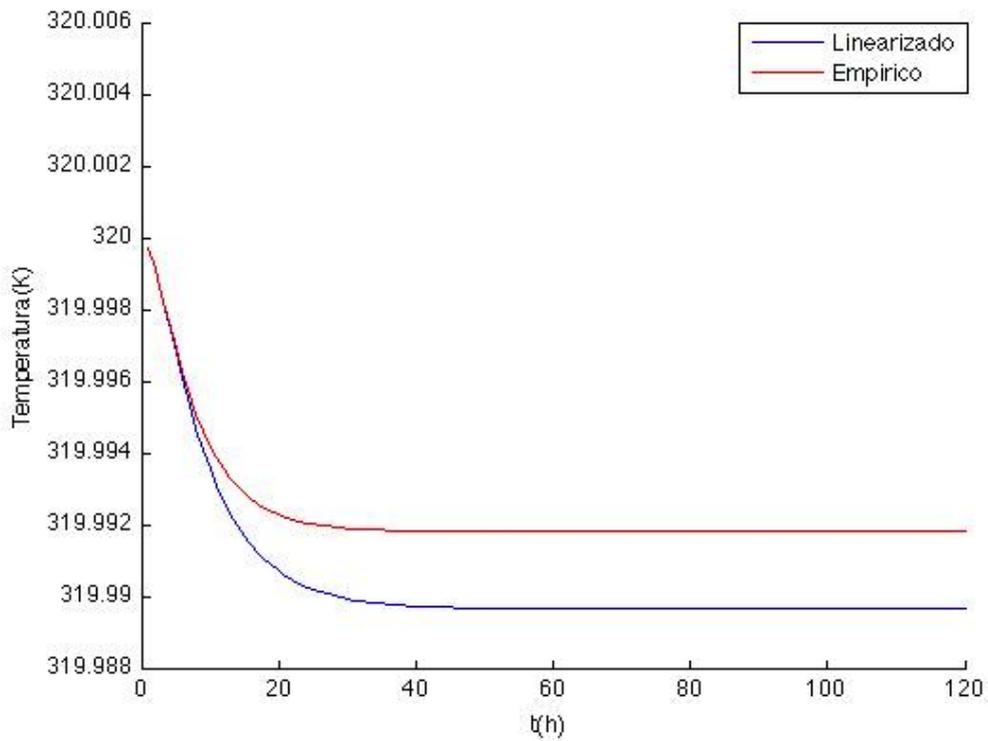
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 20 – Resposta de T para degrau unitário em Q_i em PE4 – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 21 – Resposta de T para degrau unitário em Q_c em PE4 – Malha Aberta



Fonte: Elaborada pelos autores.

3.3. Comparativo do sistema em Malha Fechada

Nesta seção, encontram-se os resultados das simulações realizadas com a implementação do sistema de controle avançado MPC.

Nos 4 pontos foi utilizada a sintonia expressa na tabela 7:

Tabela 7 - Parâmetros de sintonia utilizados no MPC

Parâmetro	Valor
n	120
p	60
m	5
q	[50 0,5]
r	[0,001 0,0001]

E as limitações a cada variável manipulada segundo a tabela 8:

Tabela 8 - Limitações das variáveis manipuladas

Parâmetro	Valor
u_{max}	[216 900] ^t
u_{max}	[54 288] ^t
du_{max}	[30 30] ^t

A resposta ao degrau obtida na seção anterior para cada estado estacionário também foi utilizada pelo algoritmo, através do vetor criado na primeira parte do código do programa.

A seguir, são descritas as simulações realizadas para cada estado estacionário, com as informações sobre as variáveis manipuladas e controladas no início e fim de cada simulação, além dos gráficos indicando a evolução dessas quatro variáveis em função do tempo.

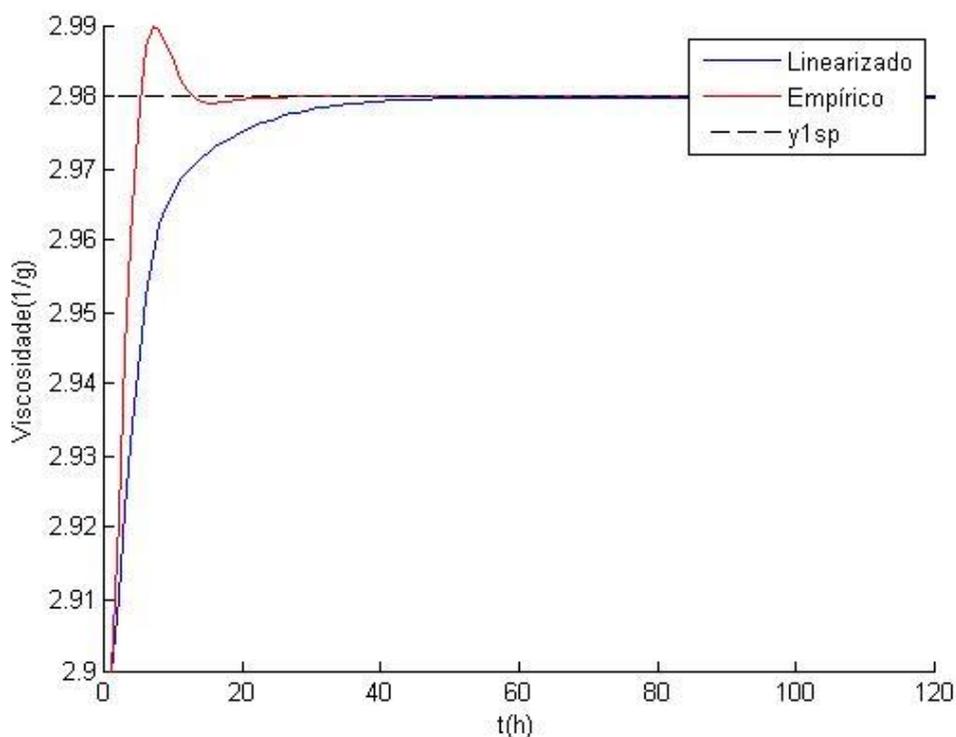
3.3.1. Primeiro Ponto Estacionário (PE1)

Para o primeiro ponto estacionário, foi escolhido um set-point próximo do ponto de equilíbrio, região na qual as funções de transferência linearizadas e empíricas são melhores aproximações do modelo. As condições da simulação realizada são descritas na tabela 9, e a evolução das variáveis η , T, Q_i e Q_c com o tempo nas figuras 22 a 25, respectivamente.

Tabela 9 - Condições de simulação de malha fechada para o PE1

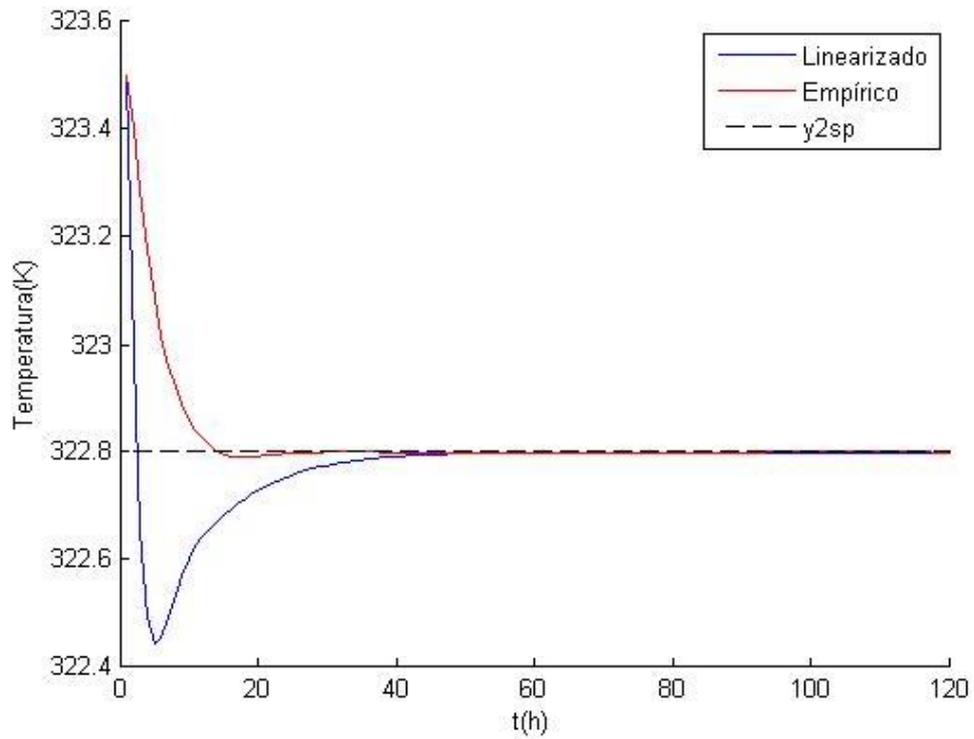
Variável	h	T	Q_i	Q_c
Unidade	1/g	K	L/h	L/h
Valor Inicial	2,9	323,5	108,0	471,6
Set-point	2,98	322,8	-	-
Valor final linear	2,98	322,8	137,1	700,2
Valor final empírico	2,98	322,8	106,5	520,1

Figura 22 - Resposta da Viscosidade ao set-point $\eta = 2,98 \text{ g}^{-1}$ no PE 1 – Malha Fechada



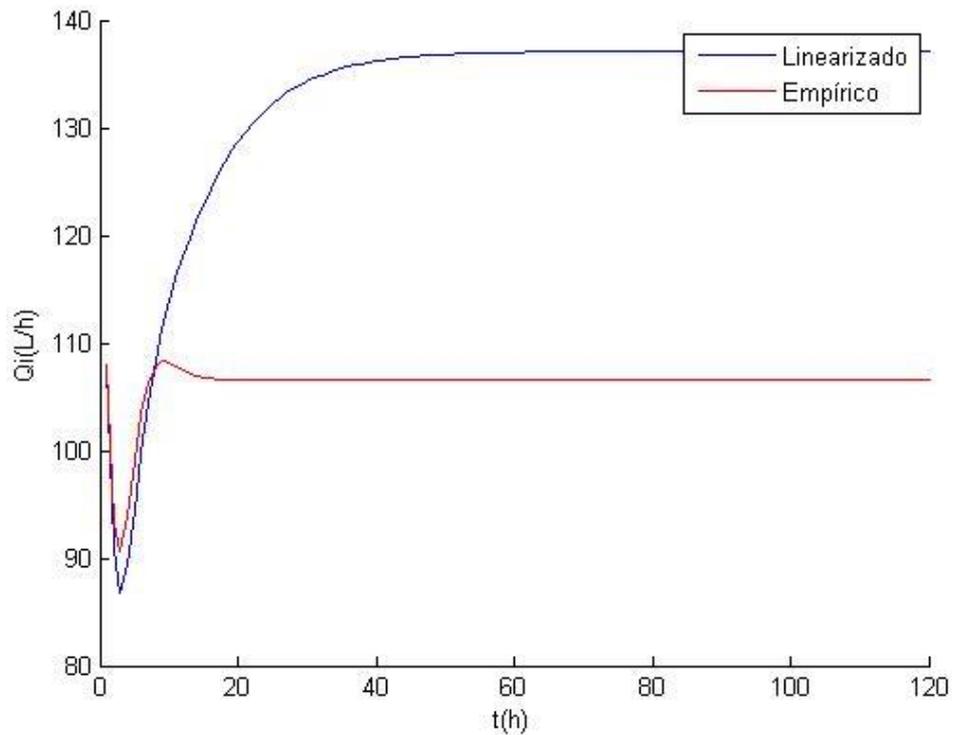
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 23 - Resposta da Temperatura ao set-point $T = 322,8$ K no PE 1 – Malha Fechada



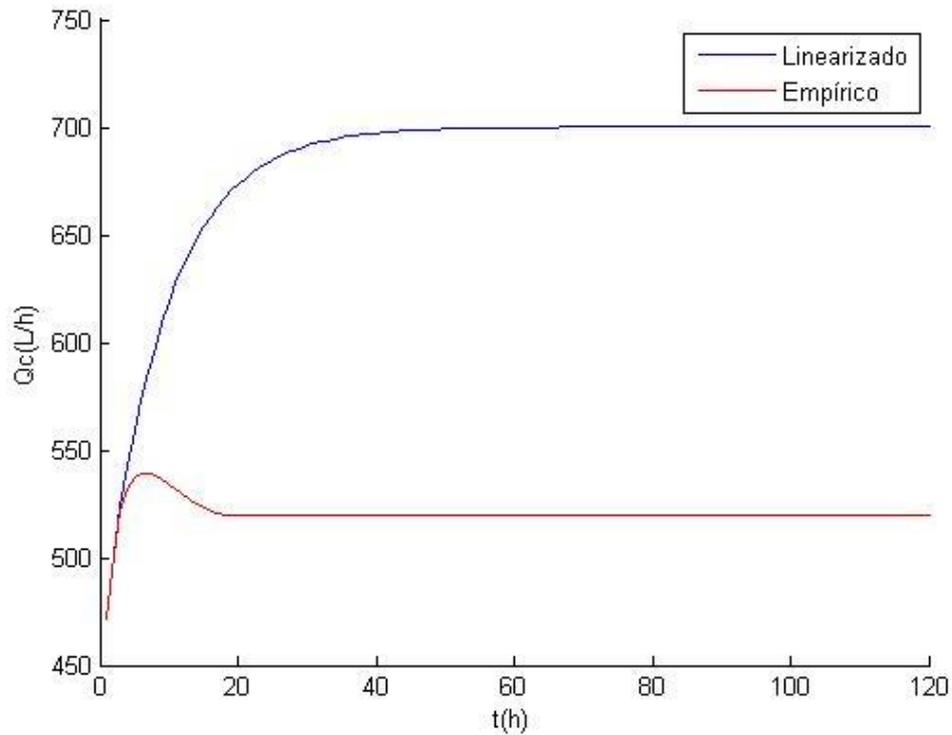
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 24 - Evolução de Q_i com o tempo no PE 1 – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 25 - Evolução de Q_c com o tempo no PE 1 – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

3.3.2. Segundo Ponto Estacionário (PE2)

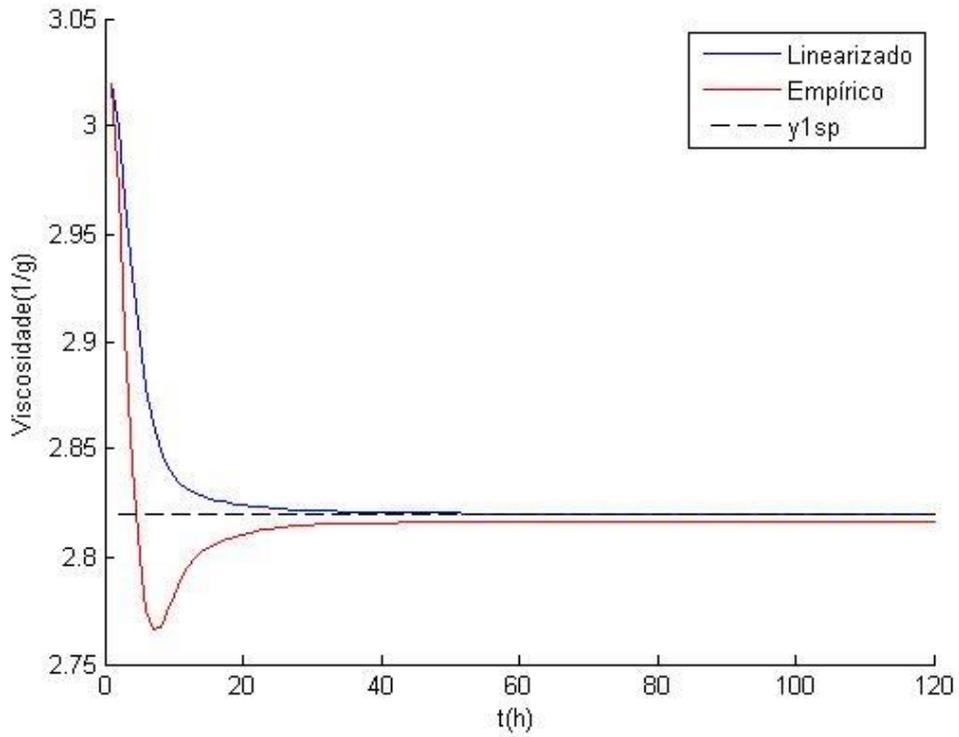
Para o segundo ponto estacionário, foi escolhido um set-point um pouco mais distante do ponto de equilíbrio, região na qual as funções de transferência linearizadas e empíricas não são aproximações tão precisas, a fim de se observar o comportamento das variáveis. Foram escolhidos os valores das CV's no PE 3 como valores de set-point.

As condições da simulação realizada são descritas na tabela n, e a evolução das variáveis η , T, Q_i e Q_c com o tempo nas figuras 26 a 29, respectivamente.

Tabela 10: Condições de simulação em malha fechada para o PE2

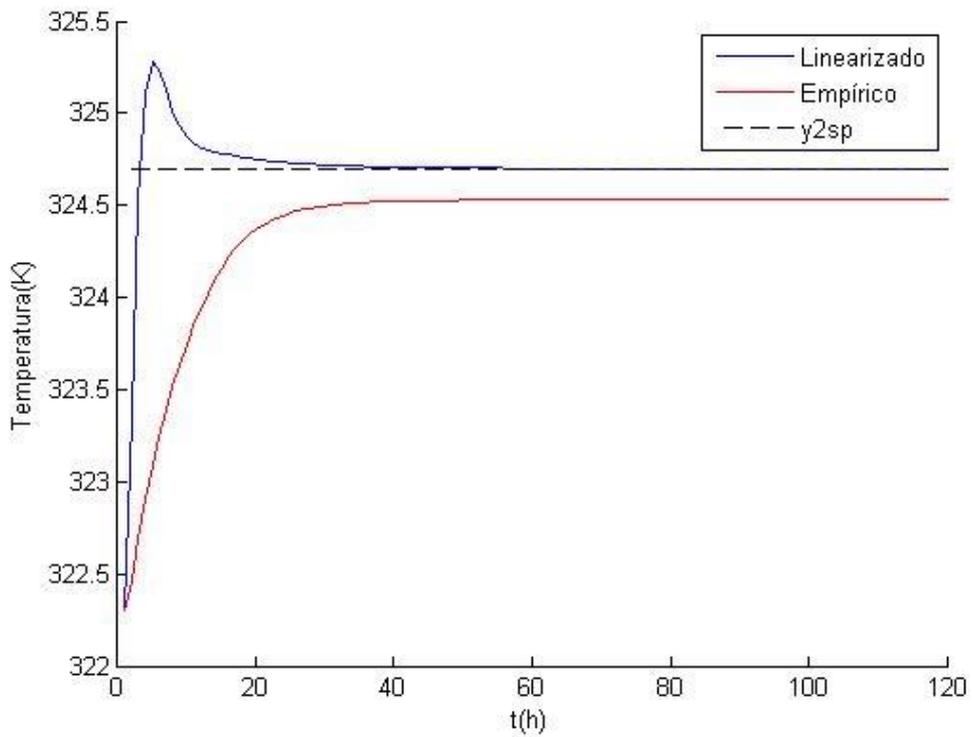
Variável	η	T	Q_i	Q_c
Unidade	1/g	K	L/h	L/h
Valor Inicial	3,020	322,30	97,2	495,2
Set-point	2,820	324,70	-	-
Valor final linear	2,820	324,70	101,4	338,5
Valor final empírico	2,816	324,53	95,9	288,0

Figura 26 - Resposta da Viscosidade ao set-point $\eta = 2,82 \text{ g}^{-1}$ no PE 2 – Malha Fechada



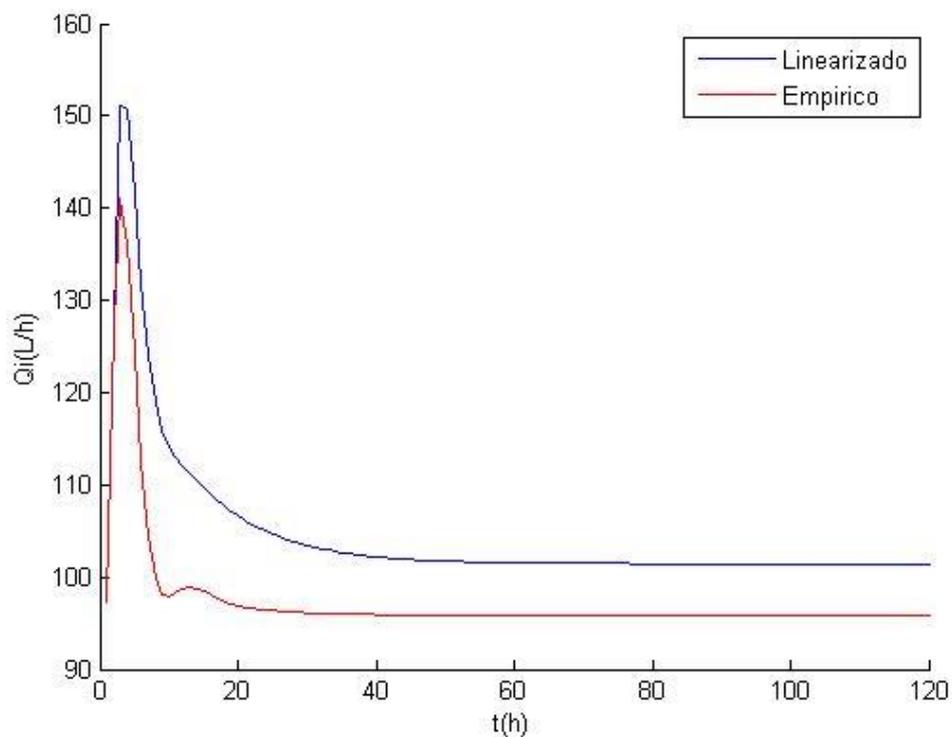
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 27 - Resposta da Temperatura ao set-point $T = 324,7 \text{ K}$ no PE 2 – Malha Fechada



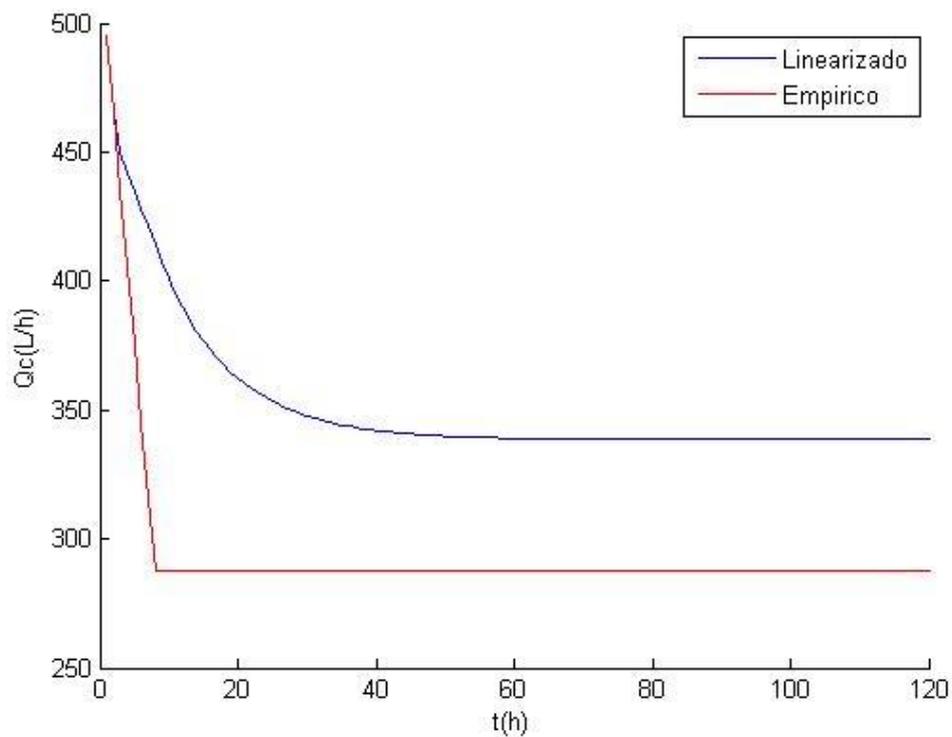
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 28 - Evolução de Q_i com o tempo no PE 2 – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 29 - Evolução de Q_c com o tempo no PE 2 – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

3.3.3. Terceiro Ponto Estacionário (PE3)

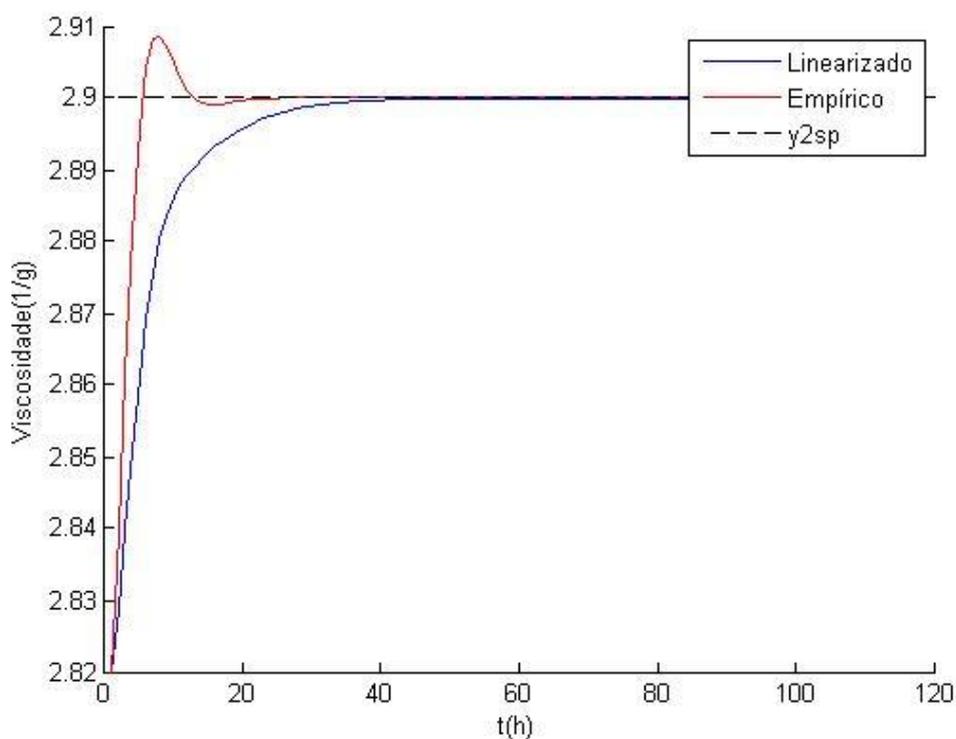
Para o terceiro ponto estacionário, como no PE 1, foi escolhido um set-point próximo do ponto de equilíbrio, região na qual as funções de transferência linearizadas e empíricas são melhores aproximações do modelo.

As condições da simulação realizada são descritas na tabela 11, e a evolução das variáveis η , T, Q_i e Q_c com o tempo nas figuras 30 a 33, respectivamente.

Tabela 11 - Condições de simulação de malha fechada para o PE3

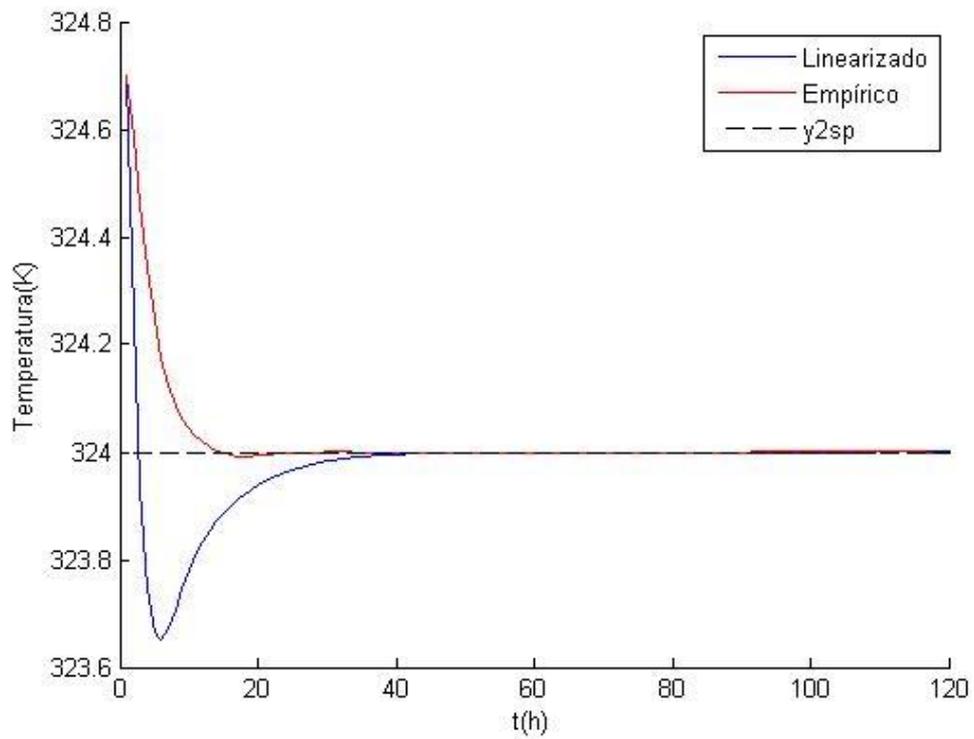
Variável	η	T	Q_i	Q_c
Unidade	1/g	K	L/h	L/h
Valor Inicial	2,820	324,7	118,8	448,0
Set-point	2,900	324,0	-	-
Valor final linear	2,900	324,0	155,2	663,1
Valor final empírico	2,900	324,0	116,7	484,8

Figura 30 - Resposta da Viscosidade ao set-point $\eta = 2,9 \text{ g}^{-1}$ no PE 3 – Malha Fechada



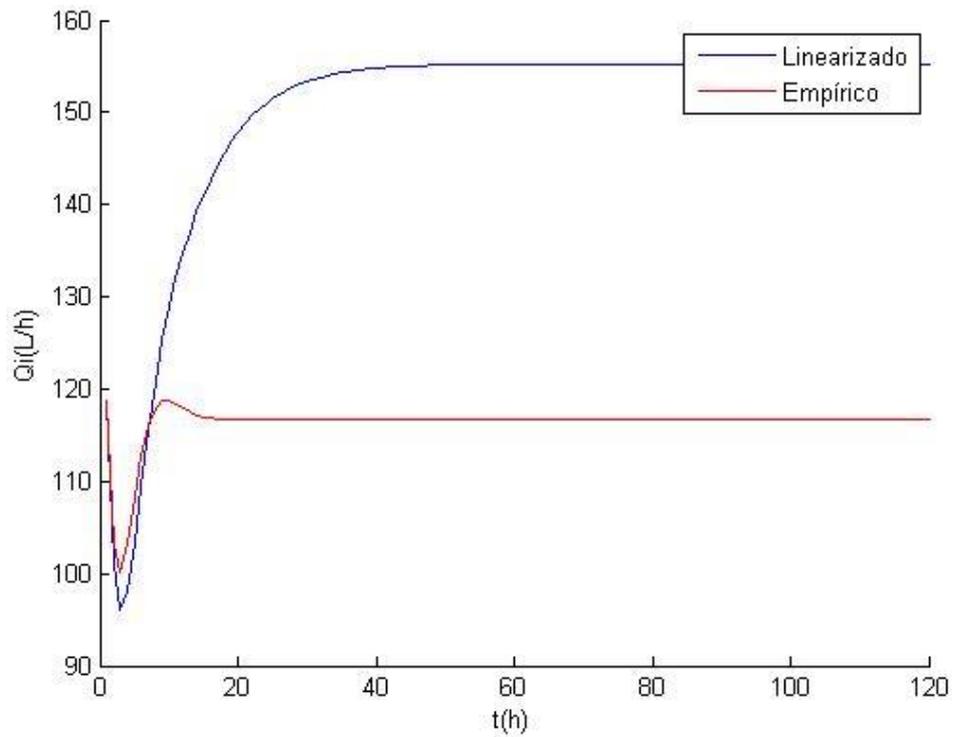
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 31- Resposta da Temperatura ao set-point $T = 324,0$ K no PE 3 – Malha Fechada



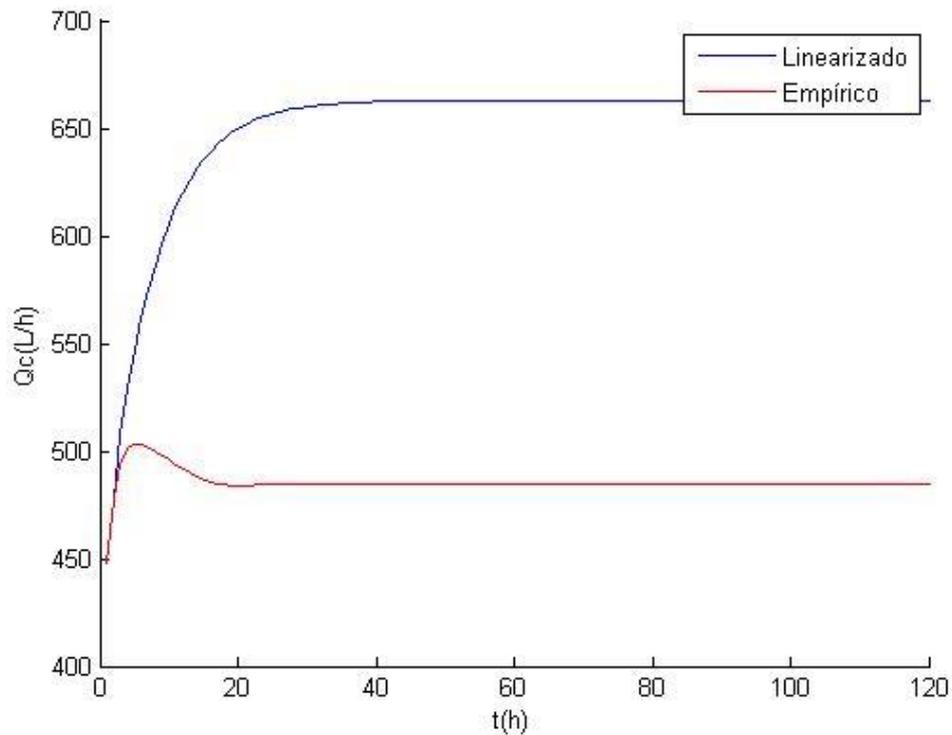
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 32 - Evolução de Q_i com o tempo no PE 3 – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 33 - Evolução de Q_c com o tempo no PE 3 – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

3.3.4. Quarto Ponto Estacionário (PE4)

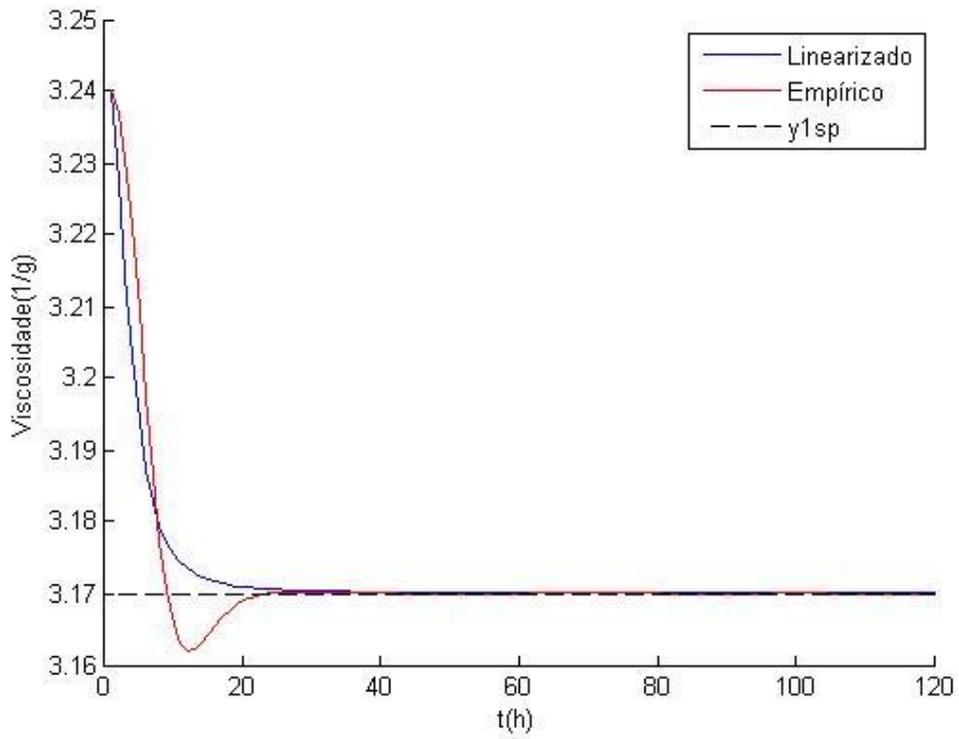
Para o quarto ponto estacionário, foi escolhido novamente um set-point próximo do ponto de equilíbrio, região na qual as funções de transferência linearizadas e empíricas são melhores aproximações do modelo.

As condições da simulação realizada são descritas na tabela 12, e a evolução das variáveis η , T , Q_i e Q_c com o tempo nas figuras 34 a 37, respectivamente.

Tabela 12 - Condições de simulação de malha fechada para o PE4

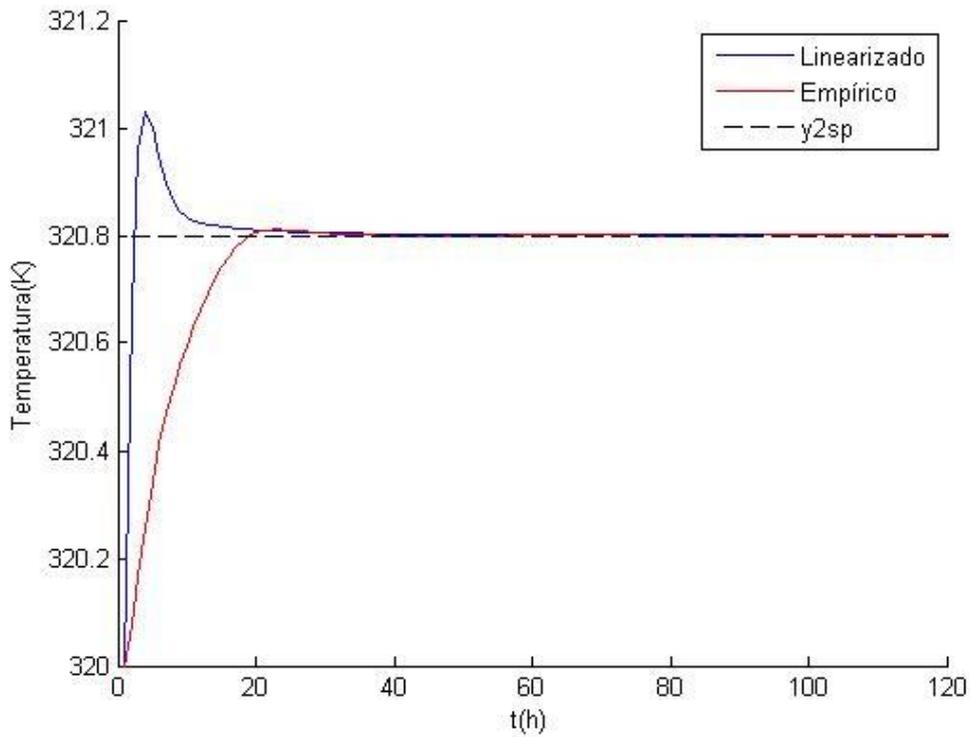
Variável	η	T	Q_i	Q_c
Unidade	1/g	K	L/h	L/h
Valor Inicial	3,240	320,0	81,0	542,3
Set-point	3,17	320,8	-	-
Valor final linear	3,17	320,8	84,9	514,1
Valor final empírico	3,17	320,8	79,9	439,8

Figura 34 - Resposta da Viscosidade ao set-point $\eta = 3,17 \text{ g}^{-1}$ no PE 4 – Malha Fechada



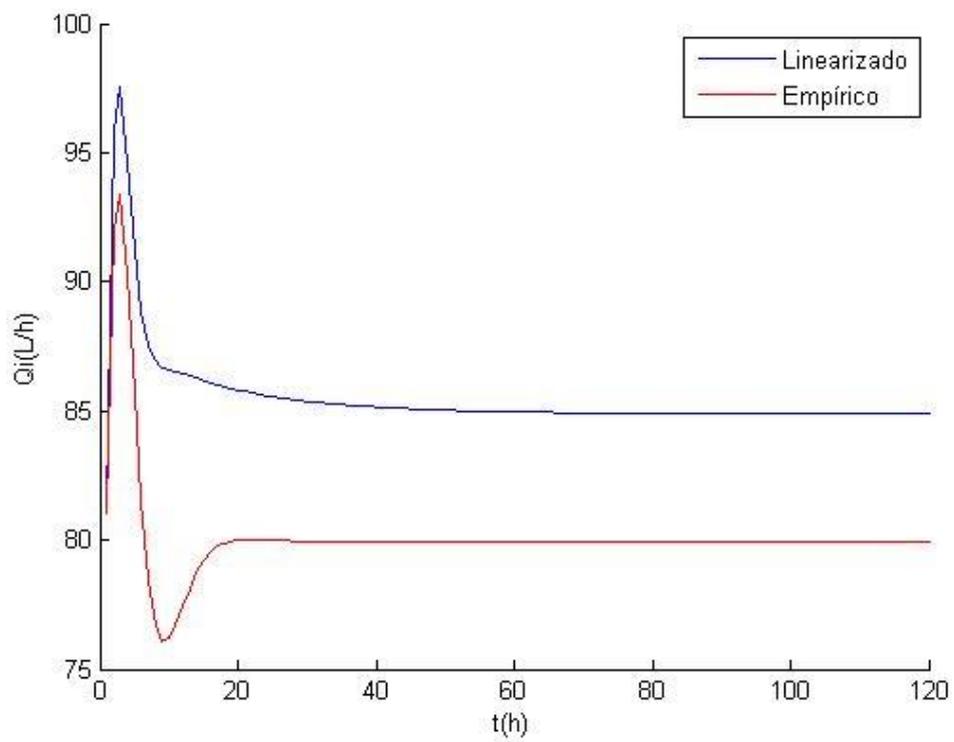
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 35 - Resposta da Temperatura ao set-point $T = 320,8 \text{ K}$ no PE 4 – Malha Fechada



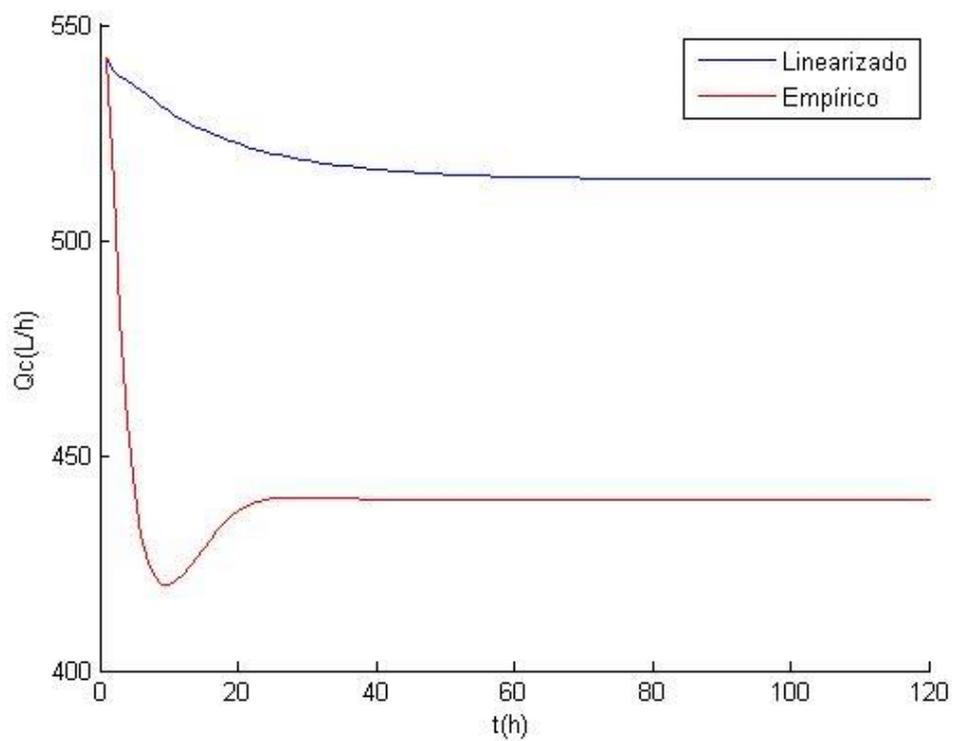
Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 36 - Evolução de Q_i com o tempo no PE 4 – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 37 - Evolução de Q_c com o tempo no PE 4 – Malha Fechada



Fonte: Elaborada pelos autores.

4. DISCUSSÃO

4.1. Equações linearizadas

As equações linearizadas foram obtidas sem grandes dificuldades, apresentando formato razoável, apesar da complexidade algébrica em alguns casos.

Uma análise dimensional de cada termo das equações foi realizada a fim de se confirmar a consistência dos resultados.

Pelo fato de a segunda variável manipulada ser um dos estados, as equações envolvendo a primeira variável tornam-se um pouco mais complexas. Esta complexidade pode vir a gerar uma maior distorção do modelo linearizado frente à realidade.

4.2. Funções de transferência e testes em malha aberta

As funções de transferência foram obtidas igualmente sem grandes dificuldades, constituindo razões de polinômios de quinta ordem por polinômios de sexta ordem.

A dinâmica das respostas dos modelos linearizados e empíricos mostrou-se bem semelhante, como pôde ser observado na seção anterior 3 – Resultados. A estabilização das respostas ocorreu, de um modo geral, entre os instantes $t = 40$ e 60 h.

Os valores de ganho obtidos para o degrau em Q_c foram bem próximos entre os modelos linearizado e empírico, chegando a valores inferiores a 1 % em alguns casos. Já os valores de ganho para o degrau em Q_i , apesar de serem da mesma ordem de grandeza, apresentaram desvios razoáveis entre o modelo linearizado e o modelo empírico.

Uma possível explicação está no fato de Q_i estar envolvida em equações mais complexas do que Q_c . Dessa forma, a linearização distorce mais os efeitos da função aproximada frente à função original, o que pode ter ocasionado tal diferença.

Nota-se também que, em geral, o módulo dos ganhos das respostas da viscosidade ao degrau são maiores para o modelo empírico, enquanto que os das respostas da temperatura são maiores para o modelo linearizado.

4.3. Implantação do sistema de controle MPC e testes em malha fechada

A partir dos resultados apresentados na seção anterior, pode-se afirmar que nos 3 PE's em que o set-point foi escolhido nas regiões próximas aos valores iniciais (PE 1, 3 e 4), o equilíbrio foi atingido por ambos os métodos, tanto o linearizado quanto o empírico.

Nos PE's 1 e 3, o método empírico mostrou uma estabilização mais rápida, por volta de $t = 25$ h, enquanto que o método linearizado obteve uma estabilização por volta de $t = 40$ h. Já no PE 4, ambos os métodos se estabilizaram por volta de $t = 25$ horas.

No PE 2, como foi escolhido um set-point um pouco distante da configuração inicial, eram esperados alguns problemas com relação ao comportamento do sistema, ou mesmo não se pode afirmar com certeza se os dados obtidos são confiáveis, no caso de as propriedades analisadas possuírem grandes mudanças comportamentais no intervalo.

Ao realizar a simulação, porém, as respostas se aproximaram razoavelmente do set-point, sobretudo a correspondente ao modelo linearizado, que se estabilizou no mesmo. Já a resposta do método empírico, apresentou um valor de offset de 7 % na viscosidade e 2 % na temperatura em relação à diferença entre valor inicial e set-point. Quando observados os valores das MV's, vê-se que o modelo linearizado possui desvios em relação a PE 3 (set-point deste caso) de 14 e 19 % (Q_i e Q_c , respectivamente), enquanto que o modelo empírico possui de 24 e 35%, com Q_c no valor mínimo permitido pela simulação. Vê-se, nesse caso, um melhor desempenho do modelo linearizado.

Para todos os PE's, pôde ser notada uma maior agressividade de resposta do método empírico para a viscosidade, enquanto que para a temperatura, o modelo linearizado produziu respostas mais agressivas. Provavelmente, este fato está relacionado a um maior ganho em módulo das funções de transferência da viscosidade para o modelo empírico comparado ao linearizado, enquanto que para a temperatura, o modelo linearizado apresenta maiores ganhos em módulo, conforme já observado no item 4.2.

Analogamente, as diferentes respostas ao degrau dos dois métodos provocaram diferenças perceptíveis no que se refere à evolução das MV's.

Em todos os casos, os valores das MV's no modelo linearizado foram superiores aos do modelo empírico. Dessa forma, para valores de set-point onde são necessárias altas vazões de fluido refrigerante e de iniciador, o limite máximo pode afetar mais o modelo linearizado, ao passo que para vazões de iniciador e de fluido refrigerante menores, o limite mínimo pode afetar mais o modelo empírico durante as simulações.

Tal fato pode elucidar o não atingimento do equilíbrio pelo modelo empírico em PE 2, enquanto que o modelo linearizado foi capaz de alcançá-lo. Nesse caso, baixas vazões foram atingidas, e o limite mínimo de Q_c afetou o modelo empírico.

Paralelamente, é possível que em situações de necessidades de altas vazões o modelo linearizado não atinja o equilíbrio devido ao limite máximo das vazões.

Por fim, o tipo de MPC e de sintonia utilizados apresentaram bons resultados, com baixo nível de oscilação e praticamente todos os set-points atingidos.

5. CONCLUSÃO

Este trabalho consistiu na análise comparativa da modelagem de um sistema de controle obtido através da linearização das equações cinéticas e de equações empíricas para um reator de mistura perfeita de poliestireno. Os resultados obtidos foram as próprias equações linearizadas, a resposta do sistema em malha aberta e a resposta do sistema com a atuação de um controlador preditivo QMDC.

Embora as matrizes de transferência do modelo linearizado e do modelo empírico sejam, à princípio, distintas, o comportamento do sistema em resposta a um degrau unitário mostrou-se semelhante para os dois casos, com dinâmica semelhantes e ganhos comparáveis. Os testes do modelo linearizado em malha fechada mostraram resultados satisfatórios, com o equilíbrio sendo atingido em todas as simulações realizadas, mostrando, inclusive, melhor desempenho em comparação com o modelo empírico para alguns casos, como o PE2, no qual este último não atingiu o equilíbrio.

A possibilidade de obtenção de matrizes de transferência confiáveis a partir da linearização de modelos, sem necessidade de testes empíricos evita o transtorno causado pela parada da planta para a realização de testes, gerando uma economia interessante em termos de recursos materiais e tempo. É válido ressaltar que nem sempre há casos onde dispõe-se de unidades piloto para realizar testes de dinâmica do controlador, sendo, nestes casos, a parada da planta a alternativa. O único contraponto deste método, porém, está na linearização da cinética de reação. Para casos de alta complexidade, a linearização das equações cinéticas torna-se um obstáculo para o avanço deste tipo de estudo.

REFERÊNCIAS

- [1]SERFATY, M., MONTENEGRO, R. Aspectos Gerais do Poliestireno. BNDES Setorial, Rio de Janeiro, n. 16, pg. 123-136. 2002.
- [2]<http://www.plastemart.com/Plastic-TechnicalArticle.asp?LiteratureID=1916&Paper=expandable-polystyrene-eps-market-to-grow-healthy-rate-5.6-percent-from-2010-2020>. Acessado em 02/08/2014.
- [3]ALMEIDA, A. Simulação de Reatores de Polimerização de Estireno: Modelagem Cinética e Termodinâmica. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pg. 27-40. 2004.
- [4]JAISINGHANI, R., RAY, W. On the dynamic behavior of a class of homogeneous continuous stirred tank polymerization reactor. Chem. Eng. Sci. 32, pg. 811-825. 1997.
- [5]HIDALGO, P., BROSILOW C. Nonlinear model predictive control of styrene polymerization at unstable operating points. Comp. Chem. Eng. 14, pp. 481-494. 1990.
- [6]MANER, B., DOYLE III, F., OGUNNAIKE, B., PEARSON, R. Robust Constrained Model Predictive Control using Linear Matrix Inequalities. Automatica 32 (80), pg. 1361-1379. 1996.
- [7]GAZI, E., SEIDER, W., UNGAR, L. Verification of Controllers in the Presence of Uncertainty: Application to Styrene Polymerization. Ind. Eng. Chem. Res. 35, pg. 2277-2287. 1996.
- [8]OGATA, K. Modern Control Engineering. University of Minnesota. Ch 4, pg. 96-103. 1970.
- [9]BRAVO, C., NORMEY-RICO, J. Controle de Plantas Não Lineares utilizando controle preditivo linear baseado em modelos locais. Rev. Cont. & Aut., vol. 20, n. 4, pg. 465-481. 2009.
- [10]Notas de Aula – PQI2530 Controle Avançado na Indústria Química. 2014.
- [11]ALVAREZ, L. A, ODLOAK, D. Robust Operation of a continuous polymerization reactor. Universidade de São Paulo. [s.n.] 2013.

APÊNDICE A – ROTINA DESENVOLVIDA PARA O ESTUDO

% Esta funcao tem como objetivo colocar as equacoes rigorosas na forma:

% $dX/dt = AX+BU$

% $Y = CX+DU$. onde:

% X É o vetor da vari-veis I. M. T. Tc. D0. D1

% Y É o vetor das CV's. ou seja. Viscosidade e Temperatura

% U É o vetor das MV's. ou seja. Qi e Qc

% Na segunda etapa, s,,o realizados os testes em malha aberta, tanto

% para o modelo linerizado quanto para o modelo empìrico.

% O degrau unit-rio É utilizado para esses testes.

% Na terceira parte, s,,o realizados os testes em malha fechada,

% tanto para o modelo linearizado como para o modelo empìrico.

% A funÁ,,o qdmc_06 É utilizada para implementar o MPC.

clear all;

Tfinal=120;

```
A = [-0.3172 0 -2.06E-05 0.0 0.0 0.0
      -0.3647 -0.3297 0.001616 0.0 0.0 0.0
      16.9190 0.680242 -0.3197 0.2333 0.0 0.0
      0.0 0.0 0.07873 -0.2211 0.0 0.0
      0.001299 0.0 1.24E-05 0.0 -0.3150 0
      37.9821 1.5271 0.5133 0.0 0.0 -0.3150];
```

```
B1 = [1.34E-6; 4.513E-04; 0.0188; 0.0; -8.03E-07; -0.04699];
```

```
B2 = [0.0; 0.0; 0.0; -3.070E-03; 0.0; 0.0];
```

```
C1 = [0.0 0.0 0.0 0.0 -7498.0850 0.1282];
```

```
C2 = [0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0];
```

```
D=0;
```

%FT de Viscosidade em funÁ,,o de Qi

```
[NUM11,DEN11] = SS2TF(A,B1,C1,D);
```

```
Gp11=tf(NUM11, DEN11);
```

```
s11=step(Gp11,1:Tfinal);
```

```
Ge11=tf([-49.7671],[13.5150 7.8748 1.0]);
```

```
s11e=step(Ge11, 1:Tfinal)/3600.0;
```

```
figure(1), hold on, plot(s11+2.91,'b')
```

```
figure(1), hold on, plot(s11e+2.91,'r')
```

```
ylabel('Viscosidade(1/g)'),xlabel('t(h)');
```

```

%FT de Viscosidade em função de Qc
[NUM12,DEN12] = SS2TF(A,B2,C1,D);

Gp12=tf(NUM12, DEN12);
s12=step(Gp12,1:Tfinal);

Ge12=tf([4.4347],[64.0145 52.7290 13.4498 1.0]);
s12e=step(Ge12, 1:Tfinal)/3600.0;

figure(2), hold on, plot(s12+2.91,'b')
figure(2), hold on, plot(s12e+2.91,'r')
ylabel('Viscosidade(1/g)'),xlabel('t(h)');

%FT da Temperatura em função de Qi
[NUM21,DEN21] = SS2TF(A,B1,C2,D);

Gp21=tf(NUM21, DEN21);
s21=step(Gp21,1:Tfinal);

Ge21=tf([144.7925],[10.6786 8.3396 1.0]);
s21e=step(Ge21, 1:Tfinal)/3600.0;

figure(3), hold on, plot(s21+323.6,'b')
figure(3), hold on, plot(s21e+323.6,'r')
ylabel('Temperatura(°C)'),xlabel('t(h)');

%FT da Temperatura em função de Qc
[NUM22,DEN22] = SS2TF(A,B2,C2,D);

Gp22=tf(NUM22, DEN22);
s22=step(Gp22,1:Tfinal);

Ge22=tf([-47.5589],[18.2571 10.0141 1.0]);
s22e=step(Ge22, 1:Tfinal)/3600.0;

figure(4), hold on, plot(s22+323.6,'b')
figure(4), hold on, plot(s22e+323.6,'r')
ylabel('Temperatura(°C)'),xlabel('t(h)');

S = zeros(2,2,Tfinal);
Se = zeros(2,2,Tfinal);

for i=1:Tfinal
    S(1,1,i)=s11(i);
    S(1,2,i)=s12(i);
    S(2,1,i)=s21(i);
    S(2,2,i)=s22(i);
    Se(1,1,i)=s11e(i);
    Se(1,2,i)=s12e(i);
    Se(2,1,i)=s21e(i);

```

```

    Se(2,2,i)=s22e(i);
end

Sp = S;
Spe = Se;

% Vari-veis utilizadas
% u - Vari-veis manipuladas em funÁ,,o do tempo
% y - Vari-veis controladas em funÁ,,o do tempo
% p - Horizonte de otimizÁ,,o
% m - Horizonte de controle
% n - Horizonte de prediÁ,,o do modelo
% nu - N'mero de MV's
% ny - N'mero de CV's
% nsim - Tempod e simulaÁ,,o
% q - Pesos das CV's
% r - Fator de restriÁ,,o das CV's
% S - Modelo das respostas ao degrau do controlador, feito no ex.1
% sp - Modelo das respostas ao degrau do processo, considerado igual a S
% umax,umin - Valores max e min para as MV's
% dumax - VariaÁ,,o maxima das MV's em funÁ,,o do tempo
% u0 - Valor inicial das MV's
% y0 - Valor inicial das CV's
% ys - Set-points para as CV's

n = 120;
p = 60;
m = 5;
nu = 2;
ny = 2;
nsim = 120;
q = [50.0 0.5];
r = [0.001 0.0001];
qe = [50.0 0.5];
re = [0.001 0.0001];
umax = [216.0; 900.0];
umin = [54.0; 288.0];
dumax = [30.0; 30.0];
u0 = [108.0; 471.6];
y0 = [2.9; 323.5];
ys = [2.98; 322.8];

[ur,yr]=qdmc_06(p,m,n,nu,ny,nsim,q,r,S,Sp,umax,umin,dumax,u0,y0,ys);

[ure,yre]=qdmc_06(p,m,n,nu,ny,nsim,qe,re,Se,Spe,umax,umin,dumax,u0,y0,ys);

figure(11),hold on, plot(yr(1,:),'b')
figure(11),hold on, plot(yre(1:,:),'r')
figure(11),hold on, plot(ys(1)*ones(1,120),'--k')
figure(11), hold on, legend('Linearizado','Emplrico','y1sp')

```

```
ylabel('Viscosidade(1/g)'),xlabel('t(h)');
```

```
figure(12),hold on, plot(yr(2,:), 'b')  
figure(12),hold on, plot(yre(2,:), 'r')  
figure(12),hold on, plot(ys(2)*ones(1,120), '--k')  
figure(12), hold on, legend('Linearizado', 'Empírico', 'y2sp')  
ylabel('Temperatura(K)'),xlabel('t(h)');
```

```
figure(21),hold on, plot(ur(1,:), 'b')  
figure(21),hold on, plot(ure(1,:), 'r')  
figure(21), hold on, legend('Linearizado', 'Empírico')  
ylabel('Qi(L/h)'),xlabel('t(h)');
```

```
figure(22),hold on, plot(ur(2,:), 'b')  
figure(22),hold on, plot(ure(2,:), 'r')  
figure(22), hold on, legend('Linearizado', 'Empírico')  
ylabel('Qc(L/h)'),xlabel('t(h)');
```

APÊNDICE B – ROTINA PARA CÁLCULO DO MODELO QMDC

```
function [ur,yr]=qdmc_06(p,m,n,nu,ny,nsim,q,r,s,sp,umax,umin,dumax,u0,y0,ys)
%function
[up,yp]=qdmc(p,m,n,nu,ny,nsim,eqc,lamb,um,up,umax,umin,dumax,ymax,ymin,u0,y0
,ys)
% Simulates the QDMC for step changes on the set-point
% u,y - Input and output responses
% p - Optimization horizon
% m - Control horizon
% n - Model horizon
% nu - Number of inputs
% ny - Number of outputs
% nsim - Simulation time
% q - Output weights (dimension: 1 x ny)
% r - Suppression factor (dimension: 1 x nu)
% s - Model step responses matrix (the first dimension corresponds to the output,
% the second dimension corresponds to the input and the third dimension
corresponds to
% the time instant)
% sp - Model step responses matrix (the first dimension corresponds to the output,
% the second dimension corresponds to the input and the third dimension
corresponds to
% the time instant)
% umax,umin - Max and min values for the inputs (dimension: nu x 1)
% dumax - Max input change (dimension nu x 1)
% u0 - Initial value for the input (dimension nu x 1)
% y0 - Initial value for the output (dimension ny x 1)
% ys - Set-points for the outputs (dimension ny x 1)

% Defining the initial conditions

yat=y0;
ypp=y0;
ypm=y0;
setp=ys;
for i=1:n-1;
ypp=[ypp;y0];
ypm=[ypm;y0];
setp=[setp;ys];
end
uat=u0;

% Step responses
% Model
S=[];
for in=1:n;
S=[S;s(:,in)];
end
```

```

% Plant
Sp=[];
for in=1:n;
    Sp=[Sp;sp(:,in)];
end

% Creating the Dynamic Matrix

a=S(1:ny*p,:);
Dm=[a];
for iu=1:m-1;
    a=[zeros(ny,nu);a(1:(p-1)*ny,:)];
    Dm=[Dm a];
end

%creating matrix B (to correct the last control move)

Btil=S(1:ny*n,:);
Bptil=Sp(1:ny*n,:);

%Matrices Qbar and Rbar
aux=[];
for i=1:p;
    aux=[aux q];
end
Qbar=diag(aux);

clear aux;aux=[];
for i=1:m;
    aux=[aux r];
end
Rbar=diag(aux);

%Matrix S'*Qbar*S+Rbar
H=Dm'*Qbar*Dm+Rbar;

% State
Atil=[zeros((n-1)*ny,ny) diag(ones(1,ny*(n-1)))
      zeros(ny,(n-1)*ny) diag(ones(1,ny))];

%Auxiliary constraint matrix

Na=[diag(ones(1,nu))];
aux=[diag(ones(1,nu))];
for i=1:m-1;
    aux=[aux diag(ones(1,nu))];
    Na=[Na zeros(i*nu,nu)
        aux];
end

```

```

Dumax=dumax;
Umax=umax;
Umin=umin;
for i=1:m-1;
    Umax=[Umax;umax];
    Umin=[Umin;umin];
    Dumax=[Dumax;dumax];
end

for in=1:nsim;
    in
    ur(:,in)=uat(:);
    yr(:,in)=ypp(1:ny);
    el=setp(1:ny*p)-ypm(1:ny*p);
    ct=-el'*Qbar*Dm;
    ub=uat;
    for i=1:m-1;
        ub=[ub;uat];
    end

```

%Including constraints on the inputs

```

A1=[Na;-Na];
b1=[Umax-ub;-Umin+ub];
A=A1;
b=b1;

```

%Including constraints on the input changes

```

A2=[diag(ones(1,nu*m));-diag(ones(1,nu*m))];
b2=[Dumax;Dumax];
A=[A;A2];
b=[b;b2];

```

```

du=quadprog(H,ct,A,b);

```

%Correction of the last control move

```

unew=uat+du(1:nu);
uat=unew;
ypm=ypm+Btil*du(1:nu);
ypp=ypp+Bptil*du(1:nu);

```

%Correction of the last measurement

```

d=ypp(1:ny)-ypm(1:ny);
dex=[];
for i=1:n;
    dex=[dex;d];
end
ypm=ypm+dex;

```

```
%Preparing the prediction for the next step  
ypp=Atil*ypp;  
ypm=Atil*ypm;
```

```
end
```