

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

JULIANA TIEMI KICHISE
VALÉRIA HIROMI ARASHIRO OTA

PROJETO E SIMULAÇÃO DO CONTROLE DE UM REATOR SOLAR HÍBRIDO
PARA DEGRADAÇÃO DE FENOL

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

ORIENTADOR:
DARCI ODLOAK

SÃO PAULO
2010



ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

**PROJETO E SIMULAÇÃO DO CONTROLE DE UM REATOR SOLAR HÍBRIDO
PARA DEGRADAÇÃO DE FENOL**

Trabalho de Conclusão de Curso

Área de Concentração:
Engenharia Química

Juliana Tiemi Kichise

Valéria Hiromi Arashiro Ota

Orientador:
Darci Odloak

SÃO PAULO
2010

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Darci Odloak, pelo aprendizado obtido, pela atenção e paciência durante a orientação e supervisão deste trabalho.

Aos Profs. Dr. Roberto Guardani e Dr. Antonio Carlos Silva Costa Teixeira, pelo apoio e supervisão deste trabalho.

À pós-doutoranda Kátia Ribeiro, pelo apoio e contribuições para este trabalho.

À Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, por fornecer os recursos necessários para nossa formação acadêmica.

A todos os professores, funcionários e colegas da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, que durante todos esses anos contribuíram para nossa formação como engenheiros e cidadãos.

Juliana Tiemi Kichise

Valeria Hiromi Arashiro Ota

LISTA DE FIGURAS

Figura 4.1: Exemplo de Diagrama de Blocos de um sistema de controle (Adaptado de Odloak, 2009)	12
Figura 4.2: Curva de resposta típica de um processo de primeira ordem com tempo morto	15
Figura 4.3: Diagramas de Bode (Odloak, 2009)	20
Figura 4.4: Diagrama de Blocos de um sistema com controlador e ação antecipatória	21
Figura 4.5: Estrutura dos algoritmos MPC	22
Figura 5.1: Esquema do equipamento (Ribeiro 2009)	27
Figura 5.2: Esquema simplificado do sistema	28
Figura 5.3: Algoritmo utilizado para a otimização do controle clássico	31
Figura 6.1: Estado estacionário obtido com a simulação do reator a partir das condições iniciais	33
Figura 6.2: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na vazão de solução de peróxido de hidrogênio	34
Figura 6.3: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na concentração da solução de peróxido de hidrogênio	34
Figura 6.4: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na vazão da corrente de alimentação do reator	35
Figura 6.5: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na concentração de matéria orgânica na corrente de alimentação do reator	35
Figura 6.6: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na potência total das lâmpadas	36
Figura 6.7: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma maior variação em degrau na potência total das lâmpadas	36
Figura 6.8: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na intensidade da radiação solar	37
Figura 6.9: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma maior variação em degrau na intensidade da radiação solar	37
Figura 6.10: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na concentração de íons Fe	38
Figura 6.11: Resposta da variável controlada (COD na corrente de saída do reator) a um degrau unitário na variável manipulada (vazão de entrada de solução de peróxido de hidrogênio)	39
Figura 6.12: Determinação dos parâmetros do processo	40
Figura 6.13: Diagrama de blocos	41
Figura 6.14: Gráfico de COD variando ao longo do tempo em malha fechada.	42
Figura 6.15: Gráfico da vazão de peróxido variando ao longo do tempo em malha fechada	42
Figura 6.16: Gráfico de COD para um degrau no <i>set-point</i> (350 mgC/L)	43
Figura 6.17: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau no <i>set-point</i> (350 mgC/L)	43
Figura 6.18: Gráfico de COD para um degrau na concentração de entrada do peróxido (300mmol/L)	44
Figura 6.19: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na concentração de entrada do peróxido (300mmol/L)	44

Figura 6.20: Gráfico de COD para um degrau na concentração de COD na entrada (600mgC/L)	45
Figura 6.21: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na concentração de COD na entrada (600mgC/L)...	46
Figura 6.22: Gráfico de COD para um degrau na potência fornecida pelas lâmpadas (625 W).....	46
Figura 6.23: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na potência fornecida pelas lâmpadas (625 W).....	47
Figura 6.24: Gráfico de COD para um degrau na radiação solar (847 W/m ²)	47
Figura 6.25: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na radiação solar (847 W/m ²).....	48
Figura 6.26: Gráfico de COD para um degrau na vazão de alimentação da matéria orgânica (2L/min)	48
Figura 6.27: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na vazão de alimentação da matéria orgânica (2L/min)	49
Figura 6.28: Gráfico de COD para um degrau na concentração de ferro (1 mmol/L)	49
Figura 6.29: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na concentração de ferro (1 mmol/L)	50
Figura 6.30: Gráfico de COD para múltiplas perturbações	50
Figura 6.31: Gráfico da vazão de peróxido para múltiplas perturbações.....	51
Figura 6.32: Degrau na vazão da corrente de alimentação do reator, de 1,0 para 1,5L/min após 500min do início da simulação.....	52
Figura 6.33: Alteração na variável manipulada após o degrau na vazão de corrente de alimentação do reator	53
Figura 6.34: Efeito na variável controlada após o degrau na vazão de corrente de alimentação do reator	53
Figura 6.35: Degrau na concentração da corrente de alimentação do reator, de 450 para 470mgH ₂ C/L após 500min do início da simulação	54
Figura 6.36: Alteração na variável manipulada após o degrau na concentração de corrente de alimentação do reator	54
Figura 6.37: Efeito na variável controlada após o degrau na concentração de corrente de alimentação do reator	55
Figura 6.38: Degraus na vazão e concentração da corrente de alimentação do reator, após 500 e 800min do início da simulação, respectivamente	55
Figura 6.39: Alteração na variável manipulada após o degrau nos distúrbios considerados	56
Figura 6.40: Efeito na variável controlada após o degrau nos distúrbios considerados.....	56
Figura 6.41: Degraus consecutivos na vazão e concentração da corrente de alimentação do reator	57
Figura 6.42: Alteração na variável manipulada após a aplicação de vários degraus consecutivos nos distúrbios	57
Figura 6.43: Efeito na variável controlada após a aplicação de vários degraus consecutivos nos distúrbios.....	58
Figura 6.44: Gráfico da variação da COD para a condição inicial I da otimização.....	59
Figura 6.45: Gráfico da variação de peróxido para a condição inicial I da otimização.	60
Figura 6.46: Gráfico da variação do custo para a condição inicial I da otimização.	60
Figura 6.47: Gráfico da variação da potência para a condição inicial I da otimização.....	61
Figura 6.48: Gráfico da variação da COD para a condição inicial II da otimização.	62
Figura 6.49: Gráfico da variação da vazão de peróxido para a condição inicial II da otimização.....	62
Figura 6.50: Gráfico da variação do custo para a condição inicial II da otimização.	63
Figura 6.51: Gráfico da variação da potência para a condição inicial I da otimização.....	63

Figura 6.52: Gráfico da variação da COD para a condição inicial I da otimização com aumento do custo da energia elétrica	64
Figura 6.53: Gráfico da variação da vazão de peróxido para a condição inicial I da otimização com aumento do custo da energia elétrica	64
Figura 6.54: Gráfico da variação do custo para a condição inicial I da otimização com aumento do custo da energia elétrica	65
Figura 6.55: Gráfico da variação da potência para a condição inicial I da otimização com aumento do custo da energia elétrica	65
Figura 6.56: Gráfico da variação de COD com MPC e distúrbio na vazão de alimentação	67
Figura 6.57: Gráfico da variação da vazão de peróxido com MPC e distúrbio na vazão de alimentação.....	68
Figura 6.58: Gráfico da variação da potência com MPC e distúrbio na vazão de alimentação.....	68
Figura 6.59: Gráfico da variação da COD com MPC e distúrbio na concentração de alimentação	69
Figura 6.60: Gráfico da variação da vazão de peróxido com MPC e distúrbio na concentração de alimentação .	69
Figura 6.61: Gráfico da variação da potência com MPC e distúrbio na concentração de alimentação	70
Figura 6.62: Efeito na COD após o degrau nos distúrbios considerados.....	70
Figura 6.63: Alteração na vazão de peróxido (variável manipulada) após o degrau nos distúrbios considerados	71
Figura 6.64: Alteração na vazão de peróxido (variável manipulada) após o degrau nos distúrbios considerados	71
Figura 6.65: Efeito da COD após a aplicação de degraus maiores consecutivos nos distúrbios	72
Figura 6.66: Alteração da vazão de peróxido (manipulada) após a aplicação de degraus maiores consecutivos nos distúrbios.....	72
Figura 6.67: Alteração da potência das lâmpadas (manipulada) após a aplicação de degraus maiores consecutivos nos distúrbios	73
Figura 6.68: Efeito na COD após o degrau na radiação solar.....	74
Figura 6.69: Alteração da vazão de peróxido após degrau na radiação solar.....	74
Figura 6.70: Gráfico da variação da potência com MPC após degrau na radiação solar. Primeira simulação (à esquerda) e segunda simulação (à direita).....	75
Figura 6.71: Gráfico da variação da COD com uma variação na vazão de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC.....	76
Figura 6.72: Gráfico da variação da vazão de peróxido com uma variação na vazão de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC.....	76
Figura 6.73: Gráfico da variação da potência com uma variação na vazão de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC. Primeira simulação (à esquerda) e segunda simulação (à direita)	77
Figura 6.74: Gráfico da variação da COD com uma variação na concentração de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC	77
Figura 6.75: Gráfico da variação da vazão de peróxido com uma variação na concentração de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC	78
Figura 6.76: Gráfico da variação da potência com uma variação na concentração de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC	78

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1: Sintonia do controlador segundo o Método de Ziegler & Nichols	21
Tabela 5.1: Tabela de valores das variáveis em seus valores máximo e mínimo.....	29
Tabela 5.2: Tabela de valores dos parâmetros	29
Tabela 6.1: Condições de operação do reator utilizadas em sua simulação.....	32
Tabela 6.2: Condições iniciais de operação I do reator	59
Tabela 6.3: Condições iniciais de operação II do reator.....	61
Tabela 6.4: Parâmetros para o MPC	67
Tabela 6.5: Novos parâmetros para o MPC.....	75

SUMÁRIO

RESUMO	7
1. INTRODUÇÃO	8
2. JUSTIFICATIVA	8
3. OBJETIVO	8
4. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	9
4.1. Processo Oxidativo Avançado Foto-Fenton	9
4.2. Reatores fotoquímicos	9
4.3. Controle de processos químicos – conceitos gerais	10
4.3.1. Nomenclatura em controle de processos	11
4.3.2. Algumas estratégias de controle	12
4.3.3. Modelagem de processos	13
4.3.4. Controle clássico	13
4.3.5. Controlador PID	15
4.3.6. Estabilidade e sintonia	18
4.3.7. Controle antecipatório (<i>feed forward</i>)	21
4.4. Controle avançado – controlador multivariável preditivo (MPC)	22
4.4.1. Modelagem do sistema	22
4.4.2. Combinação do modelo do sistema com o observador de estados	24
4.4.3. Cálculo do MPC	25
5. METODOLOGIA	27
5.1. O reator solar a ser controlado	27
5.2. Modelos utilizados para o controle	28
5.3. Simulação do reator em malha aberta e implementação do controle clássico	30
5.4. Otimização do uso das lâmpadas e do peróxido de hidrogênio	31
5.5. Implementação do controle preditivo multivariável	31
6. RESULTADOS E DISCUSSÕES	32
6.1. Implementação de estratégias de controle clássico no reator	32
6.1.1. Simulação em malha aberta	32
6.1.2. Determinação do controlador	38
6.1.3. Modelagem do processo	39
6.1.4. Determinação dos parâmetros do controlador pelo método de Ziegler & Nichols	40
6.1.5. Simulação do controlador em malha fechada	42
6.1.6. Implementação do controle antecipatório	51
6.2. Otimização	58
6.3. Implementação de estratégias de controle avançado no reator	65

6.3.1. Influência da vazão de alimentação	67
6.3.2. Influência da concentração da corrente de alimentação	69
6.3.3. Variação da vazão e da concentração de orgânicos em uma mesma simulação	70
6.3.4. Variação na radiação solar	73
6.3.5. Variação nos parâmetros do controlador MPC.....	75
7. CONCLUSÕES	79
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	80
APÊNDICES.....	81
Apêndice I: Simulação em MatLab® para o reator em malha aberta.....	81
Apêndice II: Simulação em MatLab® para o reator em malha fechada	84
Apêndice III: Simulação em MatLab® para o reator com controle antecipatório.....	87
Apêndice IV: Simulação em MatLab® para a otimização do custo operacional.....	92
Apêndice V: Simulação em MatLab® para o reator com controle multivariado.....	99

RESUMO

Ribeiro (2009) realizou o estudo e modelagem de um reator solar híbrido o qual se encontra no Centro de Estudos de Sistemas Químicos da Universidade de São Paulo (CESQ – USP) e tem como objetivo remover compostos orgânicos tóxicos utilizando o processo Foto-Fenton. Entretanto, não foi considerada nenhuma estratégia de controle nesse estudo, o que seria interessante analisar, dados os distúrbios aos quais esse sistema está sujeito.

Desse modo, neste trabalho foram propostas algumas estratégias de controle nesse reator, de maneira a manter a concentração de compostos orgânicos dissolvidos (COD) na corrente de saída no valor desejado. Primeiramente, foi proposta a utilização de um controlador do tipo PI de forma a manipular a vazão de solução de peróxido de hidrogênio para controlar a concentração de matéria orgânica na saída do reator. Em uma segunda etapa do projeto, foi proposta a utilização do controle antecipatório, tendo como distúrbios a concentração e a vazão de matéria orgânica de entrada, a otimização do uso das lâmpadas e da vazão de peróxido, e a introdução de um controlador preditivo multivariável (MPC). Foram feitas simulações no *software* MatLab[®] para verificar o comportamento do processo quando submetido a variações em suas condições de operação com o uso do controlador original e com a implementação do controle antecipatório e MPC, para fins de comparação.

Os resultados obtidos mostraram que o controle do sistema é eficiente para manter a COD na saída do reator no valor desejado, amenizando as flutuações do sistema. O controle antecipatório realmente apresenta-se como melhoria em relação ao controle exercido simplesmente por um controlador PI. Quanto ao MPC, há melhorias em relação ao controle clássico na estabilidade e resposta do sistema aos distúrbios em grande parte dos casos. A partir desses estudos, novos trabalhos poderão ser desenvolvidos com o objetivo de implementar as estratégias de controle analisadas.

1. INTRODUÇÃO

A radiação solar é uma fonte de energia que, por ser renovável, ter custo baixo e ser suficiente para suprir toda a demanda energética das atividades humanas, vem sendo estudada e empregada não somente como fonte de aquecimento, mas também como fonte de fótons para processos fotoquímicos. Dentre esses processos, o sistema Foto-Fenton está sendo amplamente estudado como um tratamento para águas contaminadas com poluentes difíceis de tratar pelos métodos tradicionais, atingindo altas taxas de degradação, mesmo quando a fonte utilizada é apenas radiação solar. Este estudo visa analisar o modelo já desenvolvido de um processo de degradação de fenol em um reator solar híbrido para o tratamento de efluentes e propor o controle através da adaptação e simulação desse modelo. Estratégias de controle são amplamente empregadas nesse tipo de processo, principalmente para atender requisitos de segurança, especificação de produtos, regulamentações ambientais e limites de operação. Sendo assim, sistemas de controle são extremamente importantes para a manutenção das condições ótimas de um processo.

2. JUSTIFICATIVA

Os Processos Oxidativos Avançados vem sendo eficientemente utilizados para a remoção de poluentes em soluções aquosas contendo compostos orgânicos tóxicos ou recalcitrantes. Dada a importância desse tipo de processo, Ribeiro (2009) estudou o reator solar híbrido do Centro de Estudos de Sistemas Químicos da Universidade de São Paulo (CESQ – USP), o qual utiliza, entre outros fatores, a radiação solar para a degradação de matéria orgânica na corrente de alimentação, medida em termos de concentração de carbono orgânico dissolvido. Foi desenvolvido um modelo matemático e de simulação para esse sistema sem, no entanto, aplicar-se o controle do processo. Este trabalho propõe, então, a análise das estratégias de controle da concentração de compostos orgânicos dissolvidos (COD) na corrente de saída do reator, visando maximizar a operação em regime contínuo, aumentar a eficiência do processo e minimizar o uso de reagentes. Futuramente, os estudos feitos poderão ser utilizados para a implementação prática do controle no reator analisado e como protótipo para equipamentos em escala industrial.

3. OBJETIVO

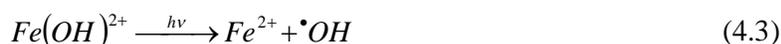
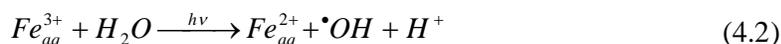
Desenvolver e comparar estratégias de controle clássico e avançado para controlar a concentração de matéria orgânica na saída do reator solar híbrido do Centro de Estudos de Sistemas Químicos da Universidade de São Paulo (CESQ – USP) por meio de modelagem e simulação.

4. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

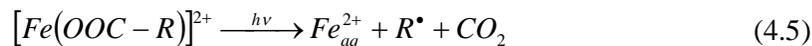
4.1. Processo Oxidativo Avançado Foto-Fenton

Os Processos Oxidativos Avançados (POAs) são alternativas promissoras para a remoção de poluentes orgânicos de efluentes líquidos. Esses processos são baseados na geração de radicais hidroxila, espécies altamente oxidantes e não-seletivas (potencial de redução de 2,08V) que degradam o poluente, podendo levar à mineralização total, ou seja, transformando toda a matéria orgânica em gás carbônico. Dentre os POAs estudados, a reação Foto-Fenton é uma das mais promissoras, apresentando altas taxas de reação para comprimentos de onda de até 410nm, o que viabiliza o uso de radiação solar. A profundidade de penetração da radiação UV-VIS é alta e o contato entre poluente e agente oxidante é bastante intenso, devido à fase homogênea da solução.

Nesse sistema, a geração dos radicais hidroxila é baseada na oxidação do Fe(II) a Fe(III) com o peróxido de hidrogênio como oxidante, produzindo o íon e o radical hidroxila (4.1). Na presença de fótons de comprimentos de onda de até 410nm, ocorre também a redução fotoquímica dos íons Fe(III) (4.2), os quais existem em solução como um complexo se dissociando na espécie $Fe(OH)^{2+}$ em pH ácido. Esta espécie, ao absorver fótons, regenera os íons Fe(II) e forma novamente os radicais hidroxila (reações (4.3) e (4.4)), aumentando a degradação do poluente.



Além da redução fotoquímica apresentada pela equação (4.2), existe também a recuperação do Fe(II) por meio da equação (4.5):



Em contrapartida, como desvantagens deste processo, podem-se citar os baixos valores de pH necessários, normalmente inferiores a 4, além da necessidade da remoção de ferro após a reação.

4.2. Reatores fotoquímicos

Os processos fotoquímicos podem utilizar tanto a luz artificial quanto a luz solar como fonte de fótons. Quando a fonte de luz é artificial existe a vantagem de se obter uma alta eficiência de degradação do composto orgânico, devido à manutenção de irradiação UV constante e controlada e à maior conversão em menor volume irradiado. Entretanto, as lâmpadas que geram a radiação consomem uma grande quantidade de energia elétrica,

elevando os custos operacionais do processo. Já a luz solar, embora apresente um menor rendimento e nenhum controle sobre a irradiação do processo, tem um baixo custo operacional e ainda um maior volume irradiado. Além disso, o Brasil, por estar em uma região intertropical, possui um grande potencial de aproveitamento da luz solar, apresentando uma irradiância global entre 4,25 e 6,5kW/m² (ATLAS BRASILEIRO DE ENERGIA SOLAR, 2006).

Um reator fotoquímico deve ser projetado de forma a minimizar as perdas por espalhamento e reflexão e, dentre outros fatores, maximizar a absorção total da radiação para evitar perdas desnecessárias de energia radiante (como a absorção pelas paredes do reator).

Visando esses requisitos, e como os processos oxidativos não conseguem utilizar toda a radiação que chega ao reator solar, este deve ser cuidadosamente projetado, sendo de grande importância a configuração, geometria e material da superfície refletora dos coletores, o material dos tubos reatores e seu diâmetro ótimo (Galvez, 2003). O reator utilizado era do tipo CPC (Compound Parabolic Collectors – Coletores Parabólicos Compostos), o qual é capaz de utilizar tanto radiação difusa como direta.

Para um reator com fonte de luz artificial deve ser considerado também o espectro de absorção da solução e dos oxidantes, dado que as lâmpadas apresentam diferentes espectros de emissão, potência e geometria, alterando a taxa de degradação do poluente. A distribuição espectral da radiação emitida pela fonte deve ser o mais próximo possível da absorção pelos reagentes.

4.3. Controle de processos químicos – conceitos gerais

O Controle de Processos consiste na manipulação de uma ou mais variáveis relevantes para se atingir condições que resultem na operação adequada do processo de modo a se alcançar as metas produtivas.

Em processos químicos, as variáveis mais frequentemente controladas são temperatura, pressão, vazão, nível, e composição, entre outras. Em muitos casos, o controle desses parâmetros é feito manualmente, o que traz, entretanto, algumas problemáticas. Primeiramente, é necessário um acompanhamento contínuo da medida da variável que está sendo controlada, a qual, se diferir muito do valor desejado, demanda uma ação a ser tomada. Daí decorre outro problema que é a escolha de diferentes decisões de acordo com o operador, o que pode ter como consequência operações não muito consistentes. Além disso, em um mesmo processo pode existir uma grande variedade de variáveis a serem controladas, que exigem muitos operadores e a sincronia de suas ações. Frente a essas dificuldades, utiliza-se do controle automático de processos, ou seja, o controle de sistemas sem a necessidade de intervenção do operador.

Os sistemas de controle são amplamente empregados na indústria química, principalmente no que se refere às áreas de segurança, especificação de produtos, cumprimento de regulamentos ambientais, restrições de operação e otimização de ganhos econômicos. Desse modo, o controle de processos industriais é extremamente importante para a manutenção das condições ótimas de operação de um sistema. Os principais motivos para se implementar um sistema de controle são: minimizar a influência de perturbações externas, garantindo assim a estabilidade do processo; reduzir a necessidade de monitoramento

contínuo das variáveis por parte dos operadores; otimizar o desempenho de um processo, aumentando a sua produtividade, a eficiência dos equipamentos, a qualidade dos produtos, e reduzindo custos; preservar elementos finais de controle, como válvulas, bombas e compressores.

4.3.1. Nomenclatura em controle de processos

Principais terminologias utilizadas em controle

A seguir, são apresentados os significados de alguns dos principais termos utilizados em controle de processos químicos.

- Variável controlada: variável de estado do processo que se deseja controlar.
- Variável manipulada: variável passível de modificação a qual pode ser manipulada de forma a manter o valor desejado da variável controlada.
- Variável de perturbação: variável de entrada sobre a qual não se pode atuar e que altera o estado do sistema quando modificada.
- Estratégia de controle: filosofia básica de controle utilizada, o que define as relações de interferência entre os instrumentos de controle e os equipamentos.
- *Set-point*: valor de referência (desejado) para a variável controlada.
- Erro: desvio entre o valor do *set-point* e o valor medido da variável controlada.
- *Offset*: diferença entre o estado estacionário final atingido pela variável controlada e o seu valor desejado de *set-point*. Na maioria dos casos, deseja-se um *offset* igual a zero.

Elementos de uma malha de controle

O controle de um processo químico é realizado através de instrumentos (elementos da malha de controle) sendo que os mais utilizados são os descritos abaixo:

- Sensor: elemento de medição de uma variável do processo.
- Transmissor: elemento que recebe o sinal de saída de um sensor, e o padroniza de forma a torná-lo um sinal apropriado para a entrada no controlador.
- Controlador: elemento em que é implementada a lógica de controle. Produz um sinal de saída para o atuador, baseado no erro, com o objetivo de corrigir o desvio entre a variável controlada e o seu *set-point*.
- Atuador: elemento final de controle que recebe o sinal de saída do controlador e que atua diretamente sobre o processo, alterando a variável manipulada.

Representação de uma malha de controle

O Diagrama de Blocos é uma representação resumida do modelo de um processo, constituído por seus componentes básicos e as interações estabelecidas entre eles, através das quais é possível se verificar o fluxo de informações ao longo do sistema de controle. Cada bloco representa um elemento, o qual pode ser um processo (ou equipamento), um controlador, um sensor, um transmissor ou um atuador, em que se estabelece uma relação entre sua entrada e sua saída. A Figura 4.1 é um exemplo de Diagrama de Blocos de um sistema simples de controle.

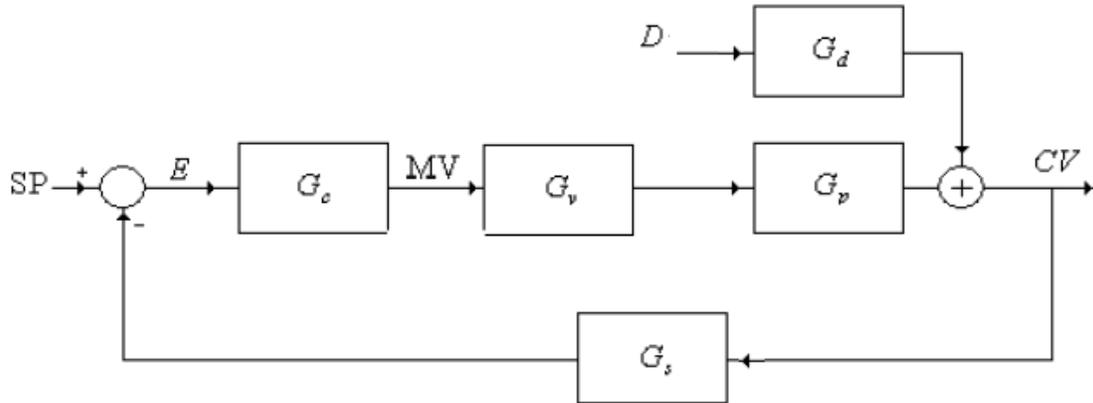


Figura 4.1: Exemplo de Diagrama de Blocos de um sistema de controle (Adaptado de Odloak, 2009)

Na Figura 4.1, a simbologia utilizada é:

G_c : controlador;

G_v : transmissão, transdutor e válvula;

G_p : processo;

G_s : sensor, transdutor, transmissão

G_d : perturbação

SP : *set-point*

E : erro

D : distúrbio

MV : variável manipulada

CV : variável controlada

4.3.2. Algumas estratégias de controle

Existem diferentes tipos de estratégias de controle a serem utilizadas. No controle *on-off*, a saída do controlador possui apenas dois estados, 0 ou 1, de modo que o elemento final opera sempre nos seus limites mínimo ou máximo de ação. O controle é chamado *feedback* quando a variável de processo controlada é medida e o seu valor é utilizado para ajustar outra variável de processo a qual pode ser manipulada. Esse tipo de controle pode ser negativo ou positivo. Outra forma de controle é do tipo *feedforward*, o qual consiste em ajustes antecipatórios para prevenir o desequilíbrio das saídas do processo em função de uma perturbação conhecida. A malha em cascata utiliza dois controlados, denominados “mestre” e “escravo”, sendo muito utilizada em situações em que o *set-point* de um dos controladores (“escravo”) é obtido a partir do sinal de saída do outro (“mestre”). Uma solução adequada para o controle de nível de água em tanques de armazenamento é um compensador de tempo morto, o qual melhora a rapidez na resposta da malha. Em situações mais complexas, em que existem múltiplas variáveis controladas e manipuladas interrelacionadas, pode-se utilizar o controle multivariável, para o qual é necessário conhecer bem o processo de modo a escolher o emparelhamento mais adequado das variáveis. Formas mais avançadas ainda podem ser obtidas com controle multivariável preditivo (MPC), controle estatístico, supervisorio, além da implementação de modelos de otimização (RTO) (Seborg *et al.*, 1989).

4.3.3. Modelagem de processos

A modelagem adequada de um processo é necessária para se ter o conhecimento de como uma alteração em uma variável de entrada influencia na resposta do mesmo. A partir de um modelo é possível ter uma idéia de qual a magnitude da modificação na variável controlada, qual a velocidade de resposta do sistema e a forma do efeito obtido na sua saída.

No caso dos processos em que se utiliza controle, o modelo envolve equações diferenciais devido aos termos de acúmulo de massa, energia, quantidade de movimento, que aparecem nos balanços. Desse modo, muitos modelos apresentam formas semelhantes. Para balanços mais simples, aparecem apenas equações lineares, mas quando as equações possuem termos não-lineares, é necessário utilizar-se de uma linearização, baseada na expansão e truncamento da série de Taylor em torno do estado estacionário, para simplificar o sistema. Assim, em controle, trabalha-se apenas com equações lineares.

Mesmo sendo lineares, nem sempre é trivial resolver as equações diferenciais. O ideal é modelar cada elemento da malha de controle individualmente, combinar esses elementos conforme desejado e determinar as características mais importantes sem precisar resolvê-los. Esses modelos individuais são chamados de funções de transferência, as quais relacionam a variável de saída do elemento com a variável de entrada, considerando nulas as condições iniciais. A maneira utilizada para facilitar a modelagem de equações diferenciais para se obter essas funções é simplificá-las matematicamente, por exemplo através da Transformada de Laplace ou da Transformada Z.

4.3.4. Controle clássico

No controle clássico, busca-se controlar alguma variável crítica do processo através da manipulação de variáveis cuja influência na primeira pode ser representada por meio de modelos matemáticos simples (funções de transferência), muitas vezes obtidas utilizando-se as Transformadas de Laplace ou Transformada Z. O cálculo da ação do controlador é, então, baseado na diferença entre o valor do *set-point* e o valor real (medido) da variável que está sendo controlada.

Modelo de primeira ordem com tempo morto

O comportamento dinâmico de sistemas lineares pode ser sistematizado considerando algumas classes de sistemas. Um modelo simples que pode ser adequado para muitos processos reais é o modelo de primeira ordem com tempo morto. Os sistemas de primeira ordem resultam da aplicação de balanços de massa ou energia em sistemas bem concentrados, ou seja, bem agitados com propriedades uniformes ao longo do tempo. A equação diferencial que representa esses sistemas é do tipo mostrado a seguir:

$$\tau \frac{dy(t)}{dt} + y(t) = K_p \cdot x(t) \quad (4.6)$$

em que:

t : tempo;

$x(t)$: variável de entrada;

$y(t)$: variável de saída;
 τ : constante de tempo;
 K_p : ganho estacionário.

O ganho estacionário é o valor do ganho do sinal de saída obtido em relação ao sinal de entrada quando o tempo tende a infinito. A constante de tempo é uma medida relacionada com a rapidez com que o processo responde a uma perturbação. Quanto menor o valor da constante de tempo, mais rápido o sistema atinge o novo estado estacionário.

Aplicando-se a Transformada de Laplace a essa equação diferencial, obtém-se a seguinte função de transferência ($G_p(s)$):

$$G_P(s) = \frac{y(s)}{x(s)} = \frac{K_P}{\tau s + 1} \quad (4.7)$$

Quanto ao tempo morto, ele corresponde ao intervalo de tempo em que nenhuma resposta é observada na variável de saída após a perturbação na variável de entrada. Na prática, corresponde a um atraso de transporte, por exemplo quando há o deslocamento de um fluido ao longo de um tubo, não dependendo da magnitude da perturbação. O tempo morto por si só é representado pela seguinte função de transferência:

$$G_{TP}(s) = \frac{y(s)}{x(s)} = e^{-\theta s} \quad (4.8)$$

em que:

θ : tempo morto.

Se o processo for de primeira ordem e apresentar tempo morto, então a função de transferência do processo torna-se:

$$G_P(s) = \frac{y(s)}{x(s)} = \frac{K_P \cdot e^{-\theta s}}{\tau s + 1} \quad (4.9)$$

Uma maneira de se determinar quais os parâmetros que definem as características do processo (ganho, constante de tempo e tempo morto) é aplicar um degrau unitário na variável de entrada e observar a curva correspondente à resposta obtida na variável de saída. Para um sistema de primeira ordem com tempo morto, tem-se:

$$\begin{aligned} x(s) = \frac{1}{s} \Rightarrow y(s) &= \frac{K_P \cdot e^{-\theta s}}{\tau s + 1} \cdot x(s) \Rightarrow y(s) = \frac{K_P \cdot e^{-\theta s}}{\tau s + 1} \cdot \frac{1}{s} \\ y(t) &= L^{-1} \left[\frac{K_P \cdot e^{-\theta s}}{\tau s + 1} \cdot \frac{1}{s} \right] \Rightarrow y(t) = K_P \left(1 - e^{-\frac{(t-\theta)}{\tau}} \right) \end{aligned} \quad (4.10)$$

A curva típica da variável de saída tem a forma mostrada na Figura 4.2:

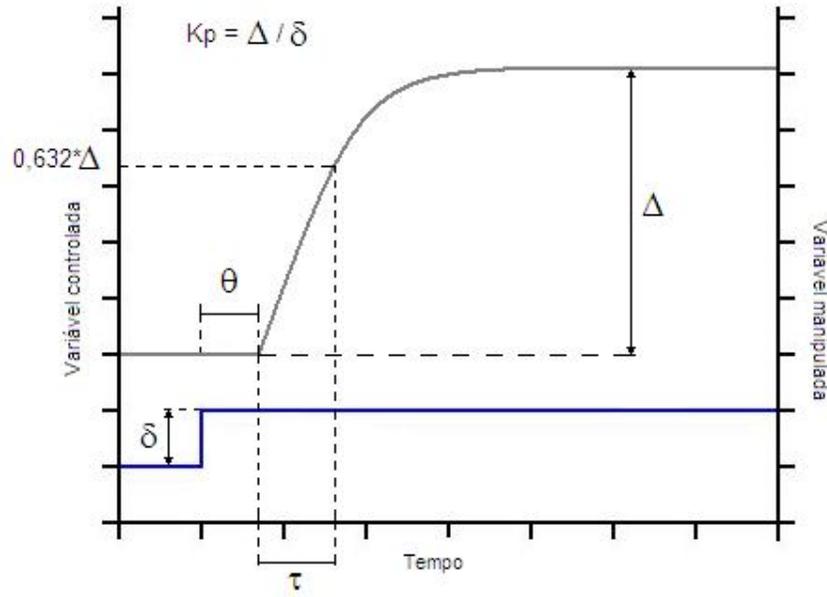


Figura 4.2: Curva de resposta típica de um processo de primeira ordem com tempo morto

O ganho K_p pode ser determinado a partir da diferença observada entre o valor da variável de saída antes da aplicação do degrau e depois de ser atingido um novo estado estacionário. O tempo morto θ é definido visualmente como sendo o tempo decorrido entre o instante em que foi aplicado o degrau e o início da modificação na variável de saída. Já a constante de tempo corresponde ao instante, a partir do degrau e descontando-se o tempo morto, em que a variável de saída difere do seu valor inicial em 63,2% do valor do ganho. A Figura 4.2 também ilustra a determinação desses parâmetros.

4.3.5. Controlador PID

O controlador Proporcional-Integral-Derivativo (PID) é o algoritmo de controle *feedback* mais utilizado na indústria, dada a simplicidade de ajuste de seus parâmetros e a sua implementação em grande parte dos equipamentos industriais. Seu funcionamento se baseia no cálculo do desvio (erro) entre o valor desejado para uma variável controlada (*set-point*) e a medida dessa variável. A partir da adoção de um modelo, o controlador gera um sinal de saída a fim de eliminar esse desvio. Para se produzir o sinal de saída, o controlador pode utilizar-se de três modos: proporcional (P), integral (I) e derivativo (D).

Modo proporcional

No controle proporcional, a ação é proporcional ao erro calculado (E), possuindo um fator de proporcionalidade denominado ganho do controlador. O cálculo do algoritmo de saída é dado pela seguinte expressão:

$$MV(t) = K_c \cdot E(t) + I_p, \quad (4.11)$$

em que:

t : tempo;
 MV : variável manipulada;
 K_c : ganho do controlador;
 $E(t)$: erro, sendo $E(t) = SP - CV(t)$, ou seja, a diferença entre o *set-point* (SP) e a variável controlada ($CV(t)$);
 I_p : valor da variável manipulada no estado estacionário ou constante de inicialização, sendo $I_p = [MV(t) - K_c \cdot E(t)]|_{t=0}$.

A ação proporcional apresenta a mesma dinâmica do erro, de forma que, se o erro não variar, a saída do controlador também permanecerá constante. Assim, esse modo permite um erro em regime permanente de maneira que sempre há um desvio residual quando o sistema sofre uma perturbação, ou seja, existe um *offset* em relação ao *set-point*, cuja existência constitui-se em uma desvantagem desse tipo de sistema.

Um controlador que possui apenas esse modo é dito controlador proporcional ou P, e sua função de transferência ($G_c(s)$) é dada por:

$$G_c(s) = \frac{MV(s)}{E(s)} = K_c. \quad (4.12)$$

Modo integral

Um controlador que contenha apenas a ação integral, em que o valor de saída depende da integral do sinal do erro, pode ser definido como:

$$MV(t) = \frac{K_c}{T_I} \int_0^t E(t') \cdot dt' + I_I, \quad (4.13)$$

em que:

T_I : tempo integral, ou T_I^{-1} : ganho integral;
 I_I : variável manipulada no estado estacionário ou constante de inicialização, sendo $I_I = MV(t)|_{t=0}$.

A ação integral apresenta um efeito pequeno enquanto o sinal do erro não persistir durante algum tempo. Entretanto, o sinal de saída pode aumentar indefinidamente se o erro permanecer diferente de zero durante longos períodos, tendendo a saturar. Para se evitar essa saturação (chamada *reset wind-up*), é possível adotar alguns métodos de *anti wind-up*, cuja idéia é impedir que o integrador continue a se carregar quando ocorrer a saturação.

Uma grande vantagem do modo integral em relação ao proporcional é que sua ação elimina o *offset*. Embora o controlador apenas integrador não sirva para uso na prática, o controlador proporcional-integral (PI) é largamente utilizado. O modo proporcional permite uma ação instantânea assim que o erro é percebido combinado com o integral que contribui para que não seja apresentado *offset*.

O algoritmo do controlador PI é expresso por:

$$MV(t) = K_c \cdot \left(E(t) + \frac{1}{T_I} \cdot \int_0^t E(t') \cdot dt' \right) + I, \quad (4.14)$$

em que:

I : variável manipulada no estado estacionário ou constante de inicialização, sendo $I = MV(t)|_{t=0}$.

Já a função de transferência de um controlador PI ($G_c(s)$) segue a expressão:

$$G_c(s) = \frac{MV(s)}{E(s)} = K_c \cdot \left(1 + \frac{1}{T_I s} \right) = K_c \cdot \left(\frac{T_I s + 1}{T_I s} \right). \quad (4.15)$$

Modo derivativo

A ação derivativa, proporcional à derivada do erro, constitui-se em uma forma de antecipar a ação do controlador, impedindo que o valor da variável controlada se afaste muito do *set-point*. Um controlador PI deverá possuir uma ação pequena se o erro e sua integral forem próximos a zero. Entretanto, se a variável controlada estiver se afastando rapidamente do *set-point*, ou seja, com uma inclinação acentuada, há aí uma tendência de grande afastamento. Assim, o modo derivativo adicionado aos modos proporcional e integral do controlador PI poderá ser muito útil nesse caso, aumentando a ação de controle caso a derivada da curva de tendência do erro for significativa.

O controlador que possui os três modos (proporcional, integral e derivativo), tem a seguinte forma:

$$MV(t) = K_c \cdot \left(E(t) + \frac{1}{T_I} \cdot \int_0^t E(t') \cdot dt' + T_D \cdot \frac{dE(t)}{dt} \right) + I, \quad (4.16)$$

em que:

T_D : tempo derivativo.

A função de transferência do controlador PID fica:

$$G_c(s) = \frac{MV(s)}{E(s)} = K_c \cdot \left(1 + \frac{1}{T_I s} + T_D s \right) = K_c \cdot \left(\frac{T_I T_D s^2 + T_I s + 1}{T_I s} \right). \quad (4.17)$$

Quanto aos parâmetros do controlador, observa-se que o aumento do valor do ganho proporcional (K_c) diminui o *offset* e faz com que o sistema tenda a ficar mais oscilatório. Já um aumento no tempo integral (T_I), ao contrário, torna a resposta mais suave, mas faz com que a variável controlada aproxime-se mais lentamente do *set-point*. Finalmente, o acréscimo do modo derivativo reduz as oscilações que são observadas em uma malha com o controlador PI mantidos os valores de K_c e T_I . Entretanto, não é recomendável utilizar um controlador PID quando a variável controlada apresentar ruídos, os quais seriam amplificados, e não se aplica esse tipo de controle sobre o *set-point*.

4.3.6. Estabilidade e sintonia

Um sistema é dito estável se toda entrada limitada no processo resultar em uma saída limitada. No entanto, essa estabilidade depende do modelo matemático que representa o processo e também dos parâmetros do controlador. O ajuste desses parâmetros (e dos demais instrumentos de controle) é conhecido como sintonia da malha de controle.

A sintonia de um processo industrial pode se tornar muito complexa, apresentando uma série de dificuldades. Dependendo do controlador utilizado, os parâmetros P, I e D podem estar muito relacionados entre si, de modo que uma modificação do ganho proporcional altera também os modos integral e derivativo.

A utilização de estimativas preliminares do modelo do processo é o ponto de partida para os procedimentos de sintonia, obtidas a partir do conhecimento da dinâmica da malha. Existem técnicas clássicas ou até ferramentas computacionais através das quais pode-se estimar o modelo do processo. O objetivo é sempre alcançar o melhor desempenho possível da malha de controle, estabilizando o sistema.

Equação característica

Seja um processo representado pela seguinte função de transferência:

$$G_p(s) = \frac{N(s)}{D(s)}, \quad (4.18)$$

em que $N(s)$ e $D(s)$ são polinômios em s com coeficientes reais, sendo:

$$D(s) = s^n + a_1s^{n-1} + \dots + a_n = (s - r_1)(s - r_2) \dots (s - r_n), \quad (4.19)$$

com r_1, r_2, \dots, r_n raízes do denominador $D(s)$ (ou pólos do sistema).

Se for aplicado um degrau no sistema, a resposta na variável controlada ($y(t)$) pode ser obtida por:

$$y(t) = L^{-1} \left\{ \frac{N(s)}{s(s - r_1)(s - r_2) \dots (s - r_n)} \right\} = L^{-1} \left\{ \frac{C_0}{s} + \frac{C_1}{s - r_1} + \frac{C_2}{s - r_2} + \dots + \frac{C_n}{s - r_n} \right\}, \quad (4.20)$$

em que C_0, C_1, \dots, C_n são constantes reais ou complexas.

$$\begin{aligned} y(t) &= L^{-1} \left\{ \frac{C_0}{s} \right\} + L^{-1} \left\{ \frac{C_1}{s - r_1} \right\} + L^{-1} \left\{ \frac{C_2}{s - r_2} \right\} + \dots + L^{-1} \left\{ \frac{C_n}{s - r_n} \right\} \Rightarrow \\ &\Rightarrow y(t) = C_0 + C_1 e^{r_1 t} + C_2 e^{r_2 t} + \dots + C_n e^{r_n t} \end{aligned} \quad (4.21)$$

De acordo com os valores das raízes r_1, r_2, \dots, r_n , há várias situações:

- $r_i \text{ real} < 0 \Rightarrow C_i e^{r_i t} \rightarrow 0 \text{ quando } t \rightarrow \infty$
- $r_i \text{ real} > 0 \Rightarrow C_i e^{r_i t} \rightarrow \infty \text{ quando } t \rightarrow \infty \text{ (instável)}$

- r_i complexo = $\alpha_i + \beta_i j$ com $\alpha_i < 0 \Rightarrow C_i e^{r_i t} = C_i e^{(\alpha_i + \beta_i j)t} = C_i e^{\alpha_i t} \cdot (\cos \beta t + j \sin \beta t)$
- Como $|C_i e^{r_i t}| = |C_i e^{\alpha_i t}| \cdot ((\cos \beta)^2 + (\sin \beta)^2)^{1/2} = |C_i e^{\alpha_i t}|$,
tem-se $|C_i e^{r_i t}| \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$

- r_i complexo = $\alpha_i + \beta_i j$ com $\alpha_i > 0 \Rightarrow C_i e^{r_i t} = C_i e^{(\alpha_i + \beta_i j)t} = C_i e^{\alpha_i t} \cdot (\cos \beta t + j \sin \beta t)$
- Como $|C_i e^{r_i t}| = |C_i e^{\alpha_i t}| \cdot ((\cos \beta)^2 + (\sin \beta)^2)^{1/2} = |C_i e^{\alpha_i t}|$,
tem-se $|C_i e^{r_i t}| \rightarrow \infty$ quando $t \rightarrow \infty$ (instável)

Desse modo, as raízes do denominador da função de transferência determinam a estabilidade da malha fechada. Por esse motivo, ele é chamado de equação característica do processo.

Critério de estabilidade de Bode

A verificação da estabilidade da malha de controle segundo a equação característica é simples, mas podem surgir dificuldades em determinar as suas raízes. Isso acontece quando, por exemplo, o sistema apresentar tempo morto, o que faz com que apareça um termo e^{-bs} na equação. Nesse caso, pode ser utilizado outro critério para a verificação da estabilidade, como é o caso do Método de estabilidade de Bode.

Esse método é baseado nas observações feitas quando se impõe uma entrada senoidal no sistema. Se depois de um ciclo a onda tiver amplitude maior do que a inicial, então ela irá aumentar a cada vez que completar o percurso ao longo da malha e o sistema será instável. Entretanto, a onda se reforça apenas quando sofre um atraso de 180° devido à dinâmica dos elementos da malha de controle, o que determina a frequência crítica para a estabilidade.

Sendo $G(s)$ a função de transferência que representa o sistema em malha fechada, a frequência crítica ω_c é tal que:

$$\phi(G(j\omega_c)) = -180^\circ, \text{ com } \phi(G(j\omega_c)) = \arctg\left(\frac{\text{Im}(G(j\omega_c))}{\text{Re}(G(j\omega_c))}\right). \quad (4.22)$$

Para que exista a frequência crítica, a equação característica da malha fechada deve ser pelo menos de terceira ordem ou apresentar tempo morto. Definido o ω_c do sistema, o critério de estabilidade determina que o módulo da função de transferência do sistema (razão de amplitude AR) seja menor do que 1:

$$AR = |G(j\omega_c)| < 1. \quad (4.23)$$

Para melhor compreender o Método de estabilidade de Bode, observa-se os seguintes diagramas (Figura 4.3), os quais relacionam a razão de amplitude e a fase com a frequência:

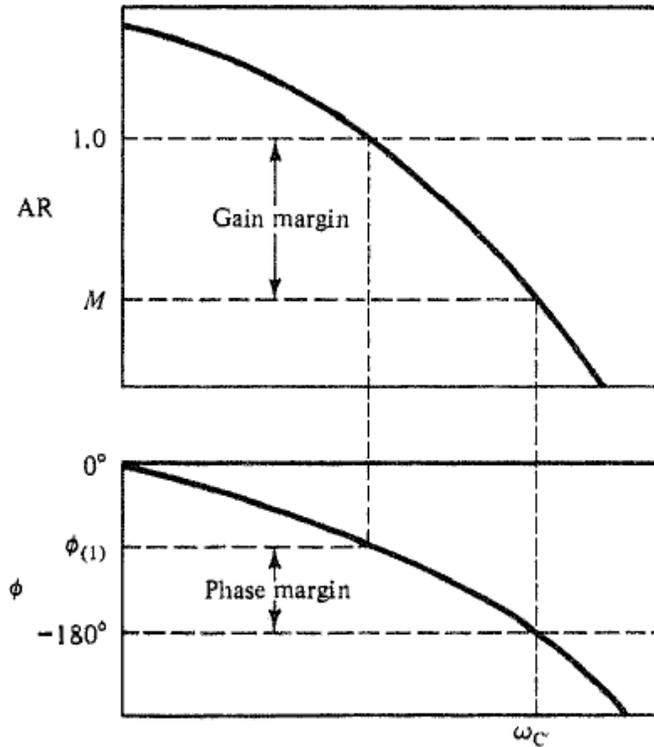


Figura 4.3: Diagramas de Bode (Odloak, 2009)

Alguns dos critérios para se fazer a sintonia de uma malha de controle levam em conta a adoção de uma margem de ganho (MG) ou de uma margem de fase (MF).

A margem de ganho é tal que:

$$\text{Para } |G(j\omega_c)| = AR_c, MG = \frac{1}{AR_c}. \quad (4.24)$$

Com uma margem de fase:

$$\phi(G(j\bar{\omega})) = -180^\circ + MF, \text{ com } \bar{\omega} \text{ tal que } |G(j\bar{\omega})| = 1. \quad (4.25)$$

Método de Ziegler & Nichols para determinação dos parâmetros de um controlador

Para a sintonia de Ziegler & Nichols, não é levada em conta a função de transferência que representa o controlador. Sendo todos os outros elementos considerados conjuntamente ao processo (ou seja, em $G_p(s)$), é preciso determinar o valor da frequência última ω_u , em que:

$$\phi(G_p(j\omega_u)) = -180^\circ, \omega_u \text{ em rad/s}. \quad (4.26)$$

A partir daí são definidos os valores de K_u e P_u , tais que:

$$K_u = \frac{1}{|G_p(j\omega_u)|}. \quad (4.27)$$

$$P_u = \frac{2\pi}{\omega_u}. \quad (4.28)$$

A sintonia recomendada por Ziegler & Nichols, a partir da determinação de K_u e P_u , é apresentada na Tabela 4.1 a seguir, em que encontram-se expressões para os parâmetros do controlador:

Tabela 4.1: Sintonia do controlador segundo o Método de Ziegler & Nichols

Controlador	K_c	T_I (min)	T_D (min)
P	$K_u/2$	-	-
PI	$K_u/2,2$	$P_u/1,2$	-
PID	$K_u/1,7$	$P_u/2$	$P_u/8$

4.3.7. Controle antecipatório (*feed forward*)

O controle antecipatório, ou *feed forward*, visa à atenuação do efeito de distúrbios no processo, de modo a antecipar e neutralizar possíveis alterações na variável controlada. Para tanto, é considerada uma função de transferência antes do controlador (G_{ff}), a qual deve anular o efeito do distúrbio na variável controlada, dado pela função de transferência correspondente (G_d) (Odloak, 2009). O Diagrama de Blocos representado na Figura 4.1 com a implementação dessa estratégia é apresentado na Figura 4.4.

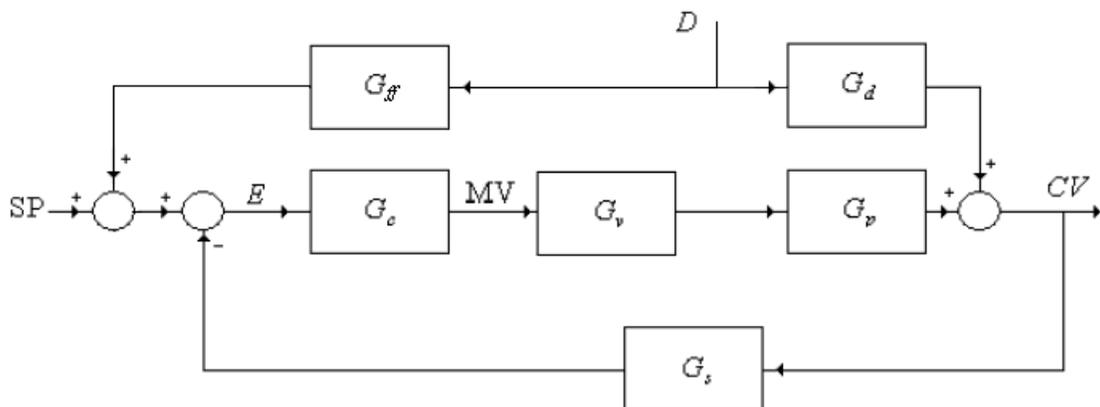


Figura 4.4: Diagrama de Blocos de um sistema com controlador e ação antecipatória

Uma vez conhecidas as funções de transferência representativas do sistema, é possível determinar a função de transferência do controle antecipatório (G_{ff}) que anula o efeito do distúrbio (Odloak, 2009):

$$D \cdot G_{ff}(s) \cdot G_c(s) \cdot G_v(s) \cdot G_p(s) = D \cdot G_d(s) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow G_{ff}(s) = \frac{D \cdot G_d(s)}{D \cdot G_c(s) \cdot G_v(s) \cdot G_p(s)} \Rightarrow G_{ff}(s) = \frac{G_d(s)}{G_c(s) \cdot G_v(s) \cdot G_p(s)}, \quad (4.29)$$

4.4. Controle avançado – controlador multivariável preditivo (MPC)

Enquanto o controle clássico se baseia apenas na diferença entre o *set-point* e o valor medido de uma única variável como informação para se calcular a resposta do controlador, o controle multivariável preditivo (MPC) tem como base a utilização de um modelo do processo (planta) para a predição dos resultados da ação de controle efetuada, permitindo assim que diversas variáveis sejam controladas simultaneamente e tornando essa estratégia bastante eficaz.

Além disso, no controle avançado é possível incorporar restrições para as variáveis manipuladas, fazendo com que o processo passe a respeitá-las automaticamente e sempre que o controlador estiver atuando. Numa planta real, isso permite que se trabalhe dentro das especificações dos produtos, aumentando também a segurança do processo.

A Figura 4.5 apresenta a estrutura básica dos algoritmos MPC (Odloak, 2010).

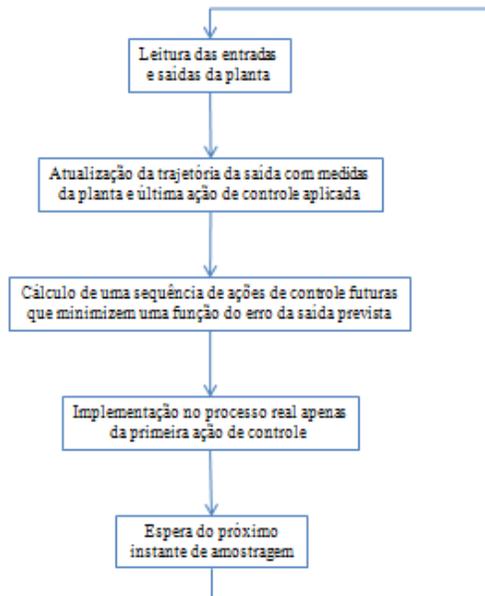


Figura 4.5: Estrutura dos algoritmos MPC

4.4.1. Modelagem do sistema

O modelo de função de transferência discreto utilizado em MPC tem a forma (Odloak, 2010)

$$\frac{Y(z)}{U(z)} = \frac{b_0 z^n + b_1 z^{n-1} + \dots + b_{n-1} z + b_n}{z^n + a_1 z^{n-1} + \dots + a_{n-1} z + a_n} \quad (4.30)$$

sendo equivalente à seguinte equação de diferenças:

$$\begin{aligned}
 & y(k+n) + a_1 y(k+n-1) + a_2 y(k+n-2) + \dots + a_{n-1} y(k+1) + a_n y(k) \\
 & = b_0 u(k+n) + b_1 u(k+n-1) + b_2 u(k+n-2) + \dots + b_{n-1} u(k+1) + b_n u(k)
 \end{aligned} \quad (4.31)$$

Desse modo, pode ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 x(k+1) &= Gx(k) + Hu(k) \\
 y(k) &= Cx(k) + Du(k)
 \end{aligned} \quad (4.32)$$

em que se define as variáveis de estado como sendo

$$\begin{aligned}
 x_1(k) &= y(k) - h_0 u(k) \\
 x_2(k) &= x_1(k+1) - h_1 u(k) \\
 x_3(k) &= x_2(k+1) - h_2 u(k) \\
 &\vdots \\
 x_n(k) &= x_{n-1}(k+1) - h_{n-1} u(k)
 \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde:

$$\begin{aligned}
 h_0 &= b_0 \\
 h_1 &= b_1 - a_1 h_0 \\
 h_2 &= b_2 - a_1 h_1 - a_2 h_0 \\
 &\vdots \\
 h_n &= b_n - a_1 h_{n-1} - \dots - a_{n-1} h_1 - a_n h_0
 \end{aligned} \quad (4.34)$$

Com a definição dessas variáveis, obtém-se a seguinte equação de estado discretizada e saídas para o sistema definido anteriormente:

$$\begin{bmatrix} x_1(k+1) \\ x_2(k+1) \\ \vdots \\ x_{n-1}(k+1) \\ x_n(k+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ -a_n & -a_{n-1} & \dots & -a_2 & -a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(k) \\ x_2(k) \\ \vdots \\ x_{n-1}(k) \\ x_n(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_{n-1} \\ h_n \end{bmatrix} [u(k)] \quad (4.35)$$

$$y(k) = [1 \quad 0 \quad \dots \quad 0] \begin{bmatrix} x_1(k) \\ x_2(k) \\ \vdots \\ x_{n-1}(k) \\ x_n(k) \end{bmatrix} + h_0 u(k)$$

Esse sistema pode ser simplificado por:

$$\begin{aligned}x(k+1) &= Ax(k) + Bu(k) \\y(k) &= Cx(k)\end{aligned}\tag{4.36}$$

Entretanto, há a permanência de um *off-set* nesse sistema. Para eliminá-lo, utiliza-se a forma incremental:

$$\begin{aligned}\tilde{x}(k+1) &= \tilde{A}\tilde{x}(k) + \tilde{B}\Delta u(k) \\y(k) &= \tilde{C}\tilde{x}(k)\end{aligned}\tag{4.37}$$

Partindo-se da equação (4.36) em diferentes instantes k , é possível obter a seguinte equivalência

$$\begin{aligned}x(k+1) - x(k) &= Ax(k) - Ax(k-1) + B\Delta u(k) \\x(k+1) - (I+A)x(k) + Ax(k-1) &= B\Delta u(k)\end{aligned}\tag{4.38}$$

a qual pode ser representada por

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix}x_1(k+1) \\x_2(k+1)\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}0 & I \\-A & (I+A)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1(k) \\x_2(k)\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}B \\(I+A)B\end{bmatrix}\Delta u(k) \\y(k) &= [I \quad 0]\begin{bmatrix}x_1(k) \\x_2(k)\end{bmatrix}\end{aligned}\tag{4.39}$$

Assim, os parâmetros de (4.37) são determinados como:

$$\tilde{x}(k) = \begin{bmatrix}x_1(k) \\x_2(k)\end{bmatrix}; \quad \tilde{A} = \begin{bmatrix}0 & I \\-A & (I+A)\end{bmatrix}; \quad \tilde{B} = \begin{bmatrix}B \\(I+A)B\end{bmatrix}; \quad \tilde{C} = [I \quad 0]$$

4.4.2. Combinação do modelo do sistema com o observador de estados

No controle preditivo, o modelo da planta (equação (4.36)) é combinado com o observador de estados da planta (equação (4.40)), resultando na equação (4.41) (Odloak, 2010).

$$\hat{x}(k+1) = \bar{A}\hat{x}(k) + \bar{B}\Delta u(k) + K_F [y(k+1) - C\{\bar{A}\hat{x}(k) + \bar{B}\Delta u(k)\}]\tag{4.40}$$

$$\begin{bmatrix}\hat{x}(k+1) \\x(k+1)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}(I - K_F C)\bar{A} & K_F C A \\0 & A\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{x}(k) \\x(k)\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\bar{B} + K_F C(B - \bar{B}) \\B\end{bmatrix}\Delta u(k)\tag{4.41}$$

O modelo considerado pelo observador (A, B) não é necessariamente igual ao da planta real (\bar{A}, \bar{B}) . Além disso, a combinação é feita considerando-se um valor de ganho do observador (K_F) , tal que $(I - K_F C)\bar{A}$ seja estável. Caso contrário, o sistema em malha fechada será instável.

4.4.3. Cálculo do MPC

Considerando a forma incremental do sistema como sendo

$$\begin{aligned} x(k+1) &= Ax(k) + B\Delta u(k) \\ y(k) &= Cx(k) \end{aligned} \quad (4.42)$$

define-se a seguinte função J_k (Odloak, 2010):

$$J_k = \sum_{j=1}^p (y(k+j|k) - y^{sp})^T Q (y(k+j|k) - y^{sp}) + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j|k)^T R \Delta u(k+j|k) \quad (4.43)$$

em que p é o horizonte de predição das saídas e m é o horizonte de predição das entradas.

Para as saídas, temos que

$$\begin{aligned} y(k+1|k) &= Cx(k+1|k) = CAx(k) + CB\Delta u(k|k) \\ y(k+2|k) &= CAx(k+1|k) + CB\Delta u(k+1|k) \\ &= CA^2x(k) + CAB\Delta u(k|k) + CB\Delta u(k+1|k) \\ y(k+2|k) &= CA^3x(k) + CA^2B\Delta u(k|k) + CAB\Delta u(k+1|k) + CB\Delta u(k+2|k) \\ &\vdots \\ y(k+j|k) &= CA^jx(k) + CA^{j-1}B\Delta u(k|k) + CA^{j-2}B\Delta u(k+1|k) + \dots + CB\Delta u(k+j-1|k) \end{aligned} \quad (4.44)$$

Como

$$\Delta u(k+m|k) = \Delta u(k+m+1|k) = \dots = \Delta u(k+m-1|k) = 0$$

as equações acima na forma matricial ficam:

$$\begin{bmatrix} y(k+1|k) \\ y(k+2|k) \\ \vdots \\ y(k+m|k) \\ y(k+m+1|k) \\ \vdots \\ y(k+p|k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} CA \\ CA^2 \\ \vdots \\ CA^m \\ CA^{m+1} \\ \vdots \\ CA^p \end{bmatrix} x(k) + \begin{bmatrix} CB & 0 & \dots & 0 \\ CAB & CB & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ CA^{m-1}B & CA^{m-2}B & \dots & CB \\ CA^mB & CA^{m-1}B & \dots & CAB \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ CA^{p-1}B & CA^{p-2}B & \dots & CA^{p-m}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u(k|k) \\ \Delta u(k+1|k) \\ \vdots \\ \Delta u(k+m-1|k) \end{bmatrix} \quad (4.45)$$

Definindo

$$\bar{y}(k) = \Psi x(k) + \bar{\Theta} \Delta u_k \quad (4.46)$$

a expressão de J_k passa a:

$$J_k = \left(\Psi x(k) + \bar{\Theta} \Delta u_k - \bar{y}^{sp} \right)^T \bar{Q} \left(\Psi x(k) + \bar{\Theta} \Delta u_k - \bar{y}^{sp} \right) + \Delta u_k^T \bar{R} \Delta u_k \quad (4.47)$$

com

$$\Delta u_k = \left[\Delta u(k/k)^T \quad \Delta u(k+1/k)^T \quad \cdots \quad \Delta u(k+m-1/k)^T \right]^T \quad (4.48)$$

$$\bar{Q} = \text{diag} \left[\underbrace{Q \quad \cdots \quad Q}_p \right] \quad \bar{R} = \text{diag} \left[\underbrace{R \quad \cdots \quad R}_m \right] \quad \bar{y}^{sp} = \left[\underbrace{y^{spT} \quad \cdots \quad y^{spT}}_p \right]^T \quad (4.49)$$

em que Q é a matriz diagonal que indica os pesos relativos às variáveis controladas, R é a matriz diagonal que fornece os pesos das ações de controle adotadas e y^{sp} é o vetor que contém os valores de *set-point* das variáveis controladas.

Simplificando novamente J_k :

$$J_k = \Delta u_k^T \bar{H} \Delta u_k + 2\bar{c}_f^T \Delta u_k + \bar{c} \quad (4.50)$$

define-se

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \bar{\Theta}^T \bar{Q} \bar{\Theta} + \bar{R} \\ \bar{c}_f^T &= \left(\Psi x(k) - \bar{y}^{sp} \right)^T \bar{Q} \bar{\Theta} \\ \bar{c} &= \left(\Psi x(k) - \bar{y}^{sp} \right)^T \bar{Q} \left(\Psi x(k) - \bar{y}^{sp} \right) \end{aligned} \quad (4.51)$$

Finalmente, tem-se a função a ser minimizada:

$$\begin{aligned} \min_{\Delta u_k} \quad & \Delta u_k^T \bar{H} \Delta u_k + 2\bar{c}_f^T \Delta u_k \\ \text{s.t.} \quad & \\ & u_{\min} \leq u(k+j/k) \leq u_{\max}, \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \\ & -\Delta u_{\max} \leq \Delta u(k+j/k) \leq \Delta u_{\max}, \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \end{aligned} \quad (4.52)$$

com

$$\begin{aligned} u_k &= \tilde{M} \Delta u_k + \tilde{I} u(k-1) \\ \tilde{M} &= \begin{bmatrix} I_{nu} & 0 & \cdots & 0 \\ I_{nu} & I_{nu} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ I_{nu} & I_{nu} & \cdots & I_{nu} \end{bmatrix}; \quad \tilde{I} = \begin{bmatrix} I_{nu} \\ I_{nu} \\ \vdots \\ I_{nu} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.53)$$

5. METODOLOGIA

5.1. O reator solar a ser controlado

O reator fotoquímico desenvolvido por Ribeiro (2009) foi construído de forma a utilizar tanto luz solar como artificial como fonte de radiação, sendo este o sistema no qual será implantado o controle estudado no projeto.

O sistema utilizado (Figura 5.1) é composto por:

- Tanque de PVC de 20L (TQ1), sendo ele o tanque de recirculação e reator multi-lâmpada com possibilidade de introdução de até 5 lâmpadas de vapor de mercúrio de 125W cada;
- Tanque de descarte de 20L (TQ2);
- Tanque de alimentação de 20L (TQ3);
- Bomba de recirculação (BC);
- Bomba peristáltica que retira o efluente do sistema (BP1);
- Bomba peristáltica que alimenta o efluente a ser tratado no sistema (BP2);
- Bomba peristáltica de alimentação de peróxido (BP3);
- Válvula de amostragem (VA1);
- Válvula de ajuste da vazão de recirculação (VA2);
- Medidor de OD, pH e temperatura (YSI).

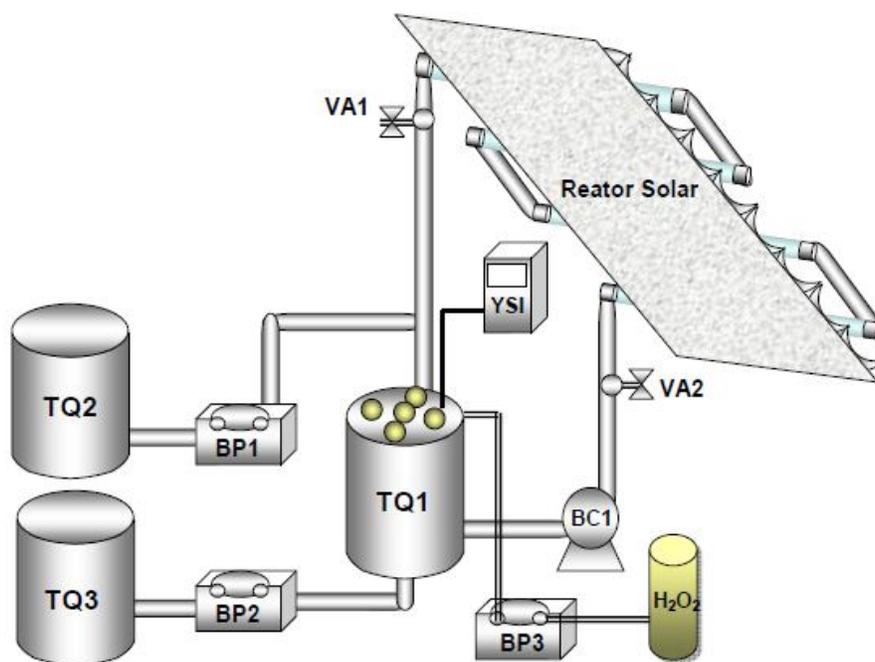


Figura 5.1: Esquema do equipamento (Ribeiro 2009)

O controle será aplicado no reator operando de modo contínuo, de forma que o sistema (tanque TQ1 mais o reator solar) opera com volume constante de 26L, podendo utilizar luz

solar e/ou artificial. Para que a concentração de orgânicos na saída do reator possa ser controlada, foi proposto inicialmente que a variável a ser manipulada deveria ser a vazão de peróxido, fornecida pela bomba BP3.

5.2. Modelos utilizados para o controle

O modelo utilizado para o controle foi baseado no esquema simplificado mostrado pela Figura 5.2:

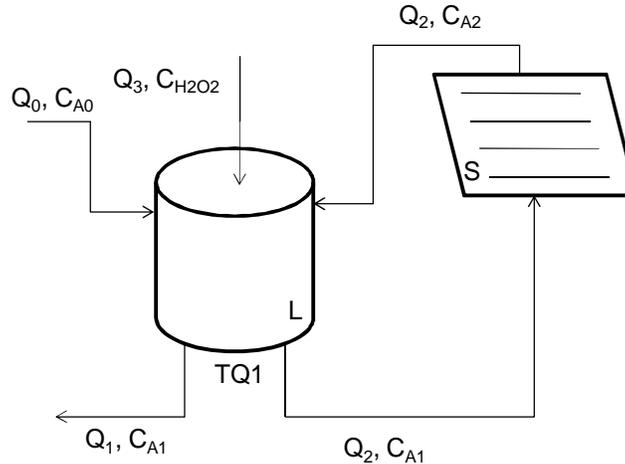


Figura 5.2: Esquema simplificado do sistema

O esquema considera que o tanque de recirculação e reator multi-lâmpada TQ1 tem um volume L (20L) recebendo as correntes de entrada Q_0 (solução com o poluente fenol a uma concentração C_{A0}), Q_2 (efluente que sai do reator solar e retorna ao tanque TQ1) e Q_3 (solução de peróxido). Desse tanque sai a corrente Q_1 , efluente já tratado, e uma nova corrente Q_2 que irá circular no reator solar de volume S (6L).

Assim, o balanço de massa global para o líquido de densidade constante fica:

$$\frac{dL(t)}{dt} = Q_0(t) + Q_3(t) - Q_1(t). \quad (5.1)$$

Considerando o reator do tipo CSTR:

$$Q_1(t) = Q_0(t) + Q_3(t). \quad (5.2)$$

O balanço de COD resulta em:

$$\frac{dC_{A1}(t)}{dt} = \frac{1}{L} \cdot \{Q_0(t) \cdot [C_{A0}(t) - C_{A1}(t)] + Q_2(t) \cdot [C_{A2}(t) - C_{A1}(t)]\} - (-r_{AL}). \quad (5.3)$$

Segundo Ribeiro (2009), o reator solar é admitido como tubular ideal e considera-se que para as vazões de operação típicas o tempo de retenção do líquido no reator solar é pequeno, mas não desprezível. Com essas considerações, admitindo Q_2 constante e sendo τ o tempo de residência no reator solar PFR, o balanço de COD no reator solar é:

$$C_{A2}(t) = C_{A1}(t-\tau) - \int_{t-\tau}^t (-r_{AS}) d\tau \quad (5.4)$$

Substituindo a equação (5.4) na (5.3) tem-se o balanço de COD para o sistema híbrido:

$$\frac{dC_{A1}(t)}{dt} = \frac{1}{L} \cdot \left\{ Q_0(t) \cdot [C_{A0}(t) - C_{A1}(t)] + Q_2(t) \cdot \left[C_{A1}(t-\tau) - \int_{t-\tau}^t (-r_{AS}) d\tau - C_{A1}(t) \right] \right\} - (-r_{AL}) \quad (5.5)$$

O modelo matemático para estimar a taxa de remoção de COD em cada reator foi baseado inicialmente no modelo para simulação em conjunto com um modelo de rede neural já desenvolvido por Ribeiro (2009). No entanto, visto a impossibilidade do uso das redes neurais para baixas taxas de radiação, foi desenvolvido outro modelo que melhor representasse a taxa de degradação do carbono orgânico presente em solução. Este modelo, ajustado para uma expressão de potências e com base nos dados experimentais está apresentado na equação (5.6):

$$-r_{AS} = k \cdot C_{A1\text{norm}}^{n1} \cdot Fe_{\text{norm}}^{n2} \cdot C_{H_2O_2\text{norm}}^{n3} \cdot Rad^{n4} \quad (5.6)$$

Sendo a taxa dada em mg C/(L.min), k a constante de velocidade da reação em mg.C/(L.min), $C_{A1\text{norm}}$ a concentração normalizada da matéria orgânica, $CH_2O_2\text{norm}$ a concentração de peróxido normalizada e Rad a radiação global normalizada. Para fazer a normalização deve-se usar a seguinte equação:

$$\text{Variável normalizada} = \frac{\text{Variável} - \text{Variável}_{\text{mínimo}}}{\text{Variável}_{\text{máximo}} - \text{Variável}_{\text{mínimo}}} \quad (5.7)$$

Os valores das variáveis em seus valores máximo e mínimo estão apresentados na Tabela 5.1 e os valores das constantes obtidas estão na Tabela 5.2:

Tabela 5.1: Tabela de valores das variáveis em seus valores máximo e mínimo

Variável	C_{A1} (mg.C/L)	Fe (mg/L)	$C_{H_2O_2}$ (g/L)	Radiação global (W/m ²)
Mínimo	0	11,2	0,8	0
Máximo	559,6	280,0	30,6	867,0

Tabela 5.2: Tabela de valores dos parâmetros

k (mg C/(L.min))	n1	n2	n3	n4
8	1,7	1,2	1,6	1,2

Para o caso das lâmpadas, foi considerada a mesma taxa de degradação, sendo a variável radiação global sendo substituída pela potência das lâmpadas. Assim, a equação fica:

$$-r_{AL} = k \cdot C_{A1\text{norm}}^{n1} \cdot Fe_{\text{norm}}^{n2} \cdot C_{H_2O_2\text{norm}}^{n3} \cdot \text{Potência}^{n4} \quad (5.8)$$

Para que o ajuste continuasse adequado para o caso da taxa de reação quando utilizada luz artificial, foram considerados os mesmos valores máximo e mínimo da radiação global.

Nota-se que nas duas equações de reação é necessário saber o valor da concentração de peróxido dentro do reator, variável que não era medida nos experimentos de Ribeiro (2009). Foi feito então um balanço da concentração de peróxido, mostrado na equação (5.9) e de forma simplificada, foi adotado que a taxa de reação do peróxido é igual a duas vezes a taxa de reação da matéria orgânica, ambas em base molar, considerando assim que duas moléculas de radicais hidroxila reagem com um átomo de carbono contido no fenol formando gás carbônico.

$$\frac{dC_{H_2O_2}(t)}{dt} = \frac{1}{L} \cdot \left\{ Q_3(t) \cdot C_{H_2O_2} - Q_1(t) \cdot C_{H_2O_2} + Q_2(t) \cdot \left[C_{H_2O_2}(t - \tau) - \int_{t-\tau}^t (-r_{ASPeróxido}) d\tau - C_{H_2O_2}(t) \right] \right\} - (-r_{ALPeróxido}) \quad (5.9)$$

Assim, a taxa de degradação do peróxido, em g H₂O₂/L foi calculada através das equações (5.10) e (5.11):

$$-r_{ASPeróxido} = 2 \cdot (-r_{AS}) \frac{MM_{H_2O_2}}{MM_C \cdot 1000} \quad (5.10)$$

$$-r_{ALPeróxido} = 2 \cdot (-r_{AL}) \frac{MM_{H_2O_2}}{MM_C \cdot 1000} \quad (5.11)$$

5.3. Simulação do reator em malha aberta e implementação do controle clássico

Para a simulação do processo, com o objetivo de se verificar o comportamento do sistema em malha aberta, foi utilizado o *software* MatLab[®]. Ribeiro (2009) já havia elaborado um modelo em seus estudos, o qual serviu como base para este trabalho. A principal diferença é que o novo modelo proposto leva em conta a expressão da taxa de reação do carbono orgânico no reator apresentada no item anterior em substituição às redes neurais adotada por Ribeiro (2009). As demais modificações estão relacionadas às simplificações feitas para tornar o modelo adequado à simulação do controle do processo, com a discretização no tempo. O modelo final utilizado para simular o reator em malha aberta é apresentado no Apêndice I.

A simulação em malha fechada foi conduzida após a determinação dos parâmetros de um controlador do tipo PI através do Método de Ziegler & Nichols e a partir dos resultados obtidos com as simulações em malha aberta. O modelo do sistema com o controlador em MatLab[®] foi baseado no modelo do Apêndice I e nas equações apresentadas no item 4.3.5 para considerar as ações do controlador e a variação da variável manipulada.

Adicionalmente, foi implementada a ação antecipatória para os principais distúrbios do processo, determinados a partir da simulação do sistema em malha aberta. As funções de transferência foram calculadas conforme apresentado no item 4.3.7. Para verificar as vantagens do uso do controle antecipatório no que diz respeito à variável controlada, foi utilizado o modelo para o sistema em malha fechada com modificações.

5.4. Otimização do uso das lâmpadas e do peróxido de hidrogênio

No sistema analisado, existem algumas formas de aumentar a taxa de degradação do carbono orgânico:

- Aumentar a vazão de peróxido de hidrogênio;
- Diminuir a concentração de orgânicos na entrada do reator;
- Aumentar a radiação solar ou a potência das lâmpadas;
- Aumentar a concentração do ferro presente na solução.

Visto que a vazão de peróxido já é uma variável manipulada, e a concentração de orgânicos na entrada do reator, a radiação solar e a concentração do ferro são variáveis difíceis de serem manipuladas, resta a potência das lâmpadas como outra variável manipulada que poderá aumentar a taxa de reação dos orgânicos.

Dessa forma, verificou-se qual das duas variáveis manipuladas poderia ser aumentada para que a outra pudesse ser diminuída, mantendo a COD no *set-point* e tendo-se em vista a minimização do custo operacional (custo da energia elétrica e do peróxido). Para permitir que a COD chegasse novamente ao estado estacionário, o otimizador era introduzido a cada 1000min. Segue o algoritmo da otimização (Figura 5.3):

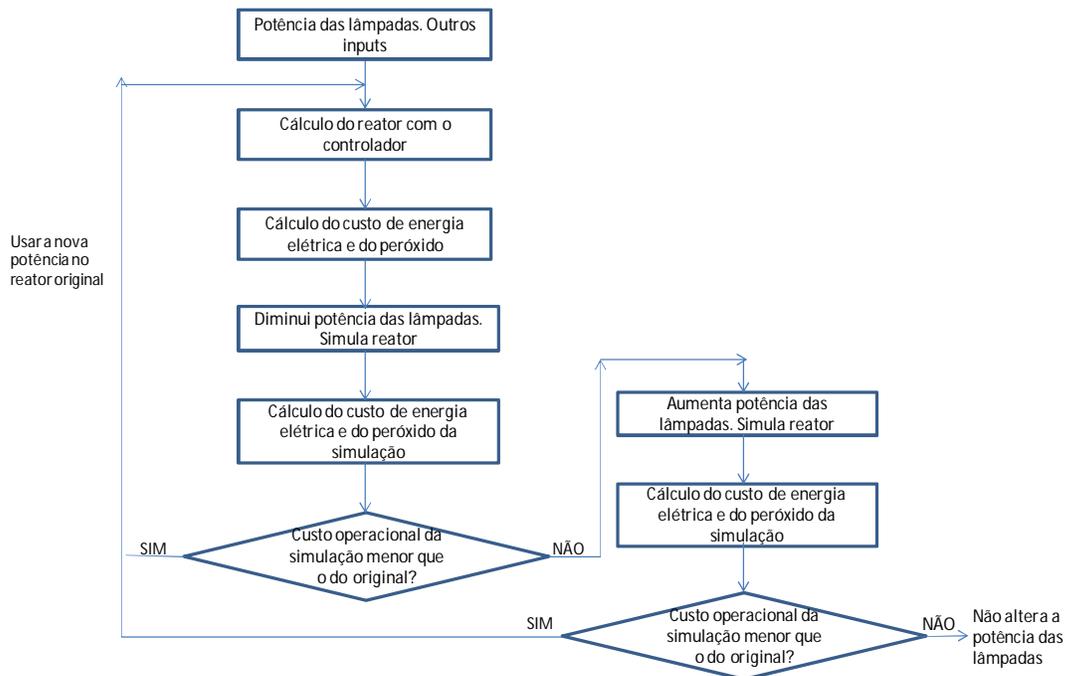


Figura 5.3: Algoritmo utilizado para a otimização do controle clássico

5.5. Implementação do controle preditivo multivariável

A implementação do controle preditivo multivariável (MPC) foi realizada com base em Odloak (2010), utilizando-se de simulações no *software* MatLab[®]. As equações utilizadas são as descritas no item 4.4 deste documento.

Para a minimização da função J_k do MPC foi utilizada a função *quadprog* disponível no MatLab[®], e para a determinação do ganho do observador (K_F), foi utilizada uma rotina pré-definida de Odloak (2010), conforme descrito mais adiante.

As variáveis manipuladas, controladas e os distúrbios considerados foram determinados com base nas simulações realizadas para a implementação do controle clássico, de modo que foi possível a posterior comparação entre as diferentes estratégias de controle adotadas.

6. RESULTADOS E DISCUSSÕES

6.1. Implementação de estratégias de controle clássico no reator

6.1.1. Simulação em malha aberta

A partir do modelo apresentado no Apêndice I, foi feita a simulação em MatLab[®] do reator solar híbrido em malha aberta. As condições de operação foram definidas com base naquelas que Ribeiro (2009) utilizou em seus experimentos e são apresentadas na Tabela 6.1:

Tabela 6.1: Condições de operação do reator utilizadas em sua simulação

COD (mgC/L)	450,0
Concentração de íons Fe (mg/L)	33,6
Vazão de alimentação (L/min)	1,0
Vazão de circulação (L/min)	4,0
Vazão de solução de peróxido (L/min)	0,5
Concentração de H ₂ O ₂ (g/L)	6,8
Volume total do reator (L)	26,0
Volume do reator solar (L)	10,0
Volume do reator tanque (L)	16,0
Intensidade da radiação solar (W/m ²)	500,0
Potência das lâmpadas (W)	500,0

Primeiramente, foi simulada a operação do reator em malha aberta adotando-se os valores apresentados na Tabela 6.1 como condições iniciais de operação. O objetivo foi acompanhar a variação da concentração de carbono orgânico dentro do reator ao longo do tempo, pois esta é a variável de processo que se deseja controlar.

De acordo com a Figura 6.1 obtida através do *software* MatLab[®], verifica-se inicialmente uma grande queda da COD seguida por uma estabilização após cerca de 180min do início da simulação, indicando uma dinâmica lenta do sistema. No estado estacionário, a COD permaneceu em torno de 425mgC/L.

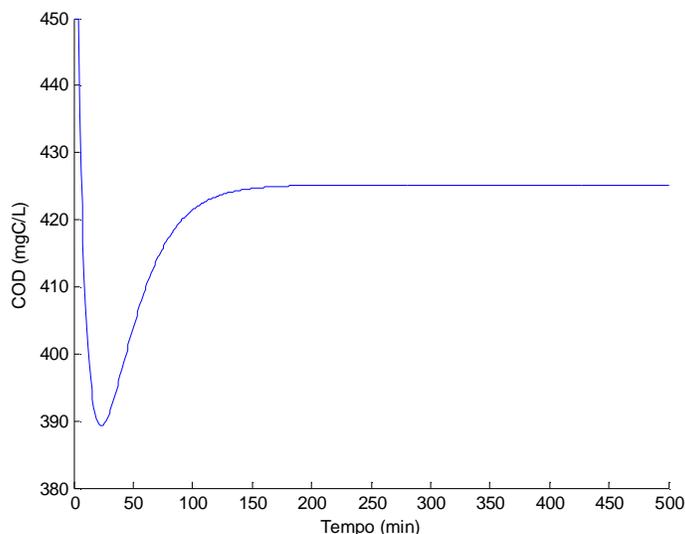


Figura 6.1: Estado estacionário obtido com a simulação do reator a partir das condições iniciais

Entretanto, em condições reais de operação, o reator está sujeito a oscilações em suas variáveis de entrada, as quais influenciam diretamente na reação, de modo que a COD pode diferir do valor do estado estacionário. Essa situação em que a variável controlada não permanece constante ou fica fora dos limites de operação é extremamente indesejável. No caso do reator estudado, que consiste no tratamento de um efluente industrial, a COD da corrente de saída deve possuir um valor máximo que não deve ultrapassar um valor previamente estabelecido (de acordo com normas de segurança ou ambientais relativas ao processo).

A seguir, é analisado como a variável controlada é influenciada por modificações nas condições de operação. Para tanto, simulou-se o comportamento da curva de COD da corrente de saída do reator quando são aplicadas variações em degrau em algumas variáveis de entrada, decorridos 500min do início da simulação.

Aplicando um degrau na vazão de solução de peróxido de hidrogênio, alterando seu valor de 0,5 para 1,0L/min, obteve-se a curva de COD mostrada na Figura 6.2. Como era de se esperar, com uma maior vazão de solução de peróxido a reação de degradação de compostos orgânicos foi mais efetiva, causando a diminuição da COD na corrente de saída do reator. Observa-se ainda uma grande influência dessa variável de entrada, já que a COD passa a ficar em torno de 395mgC/L.

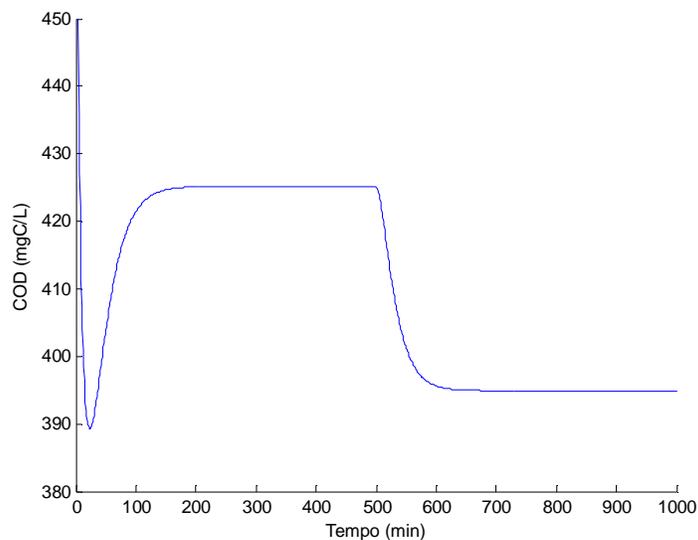


Figura 6.2: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na vazão de solução de peróxido de hidrogênio

Com uma variação da concentração de peróxido de hidrogênio de 6,8 para 13,6g/L, a curva da COD ficou com o aspecto apresentado na Figura 6.3. O resultado obtido foi coerente com o previsto, sendo semelhante ao que ocorreu quando se aumentou a vazão de entrada de H_2O_2 . Com uma maior disponibilidade desse reagente no meio, há maior degradação de matéria orgânica.

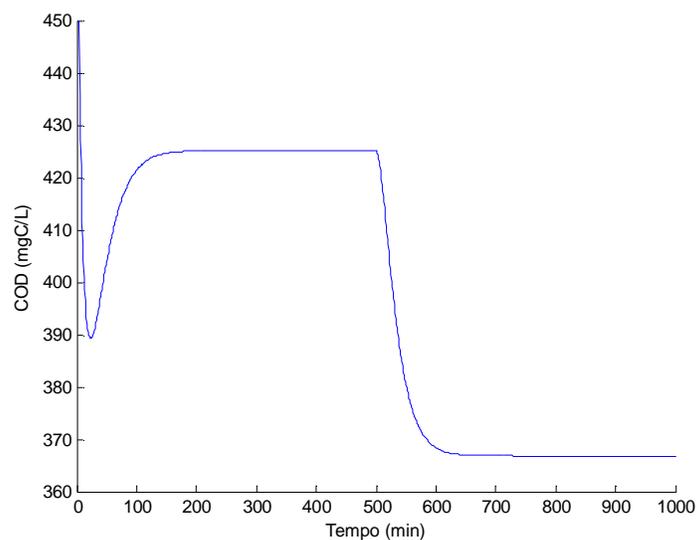


Figura 6.3: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na concentração da solução de peróxido de hidrogênio

Muitas vezes as oscilações ocorrem em relação à quantidade de efluente que deve ser tratada no reator. Para verificar qual seria o comportamento do sistema nessa situação, foi aplicado um degrau na vazão da corrente de alimentação, que passou de 1,0 para 1,5L/min.

Para esse valor de vazão, a concentração de matéria orgânica na corrente de saída do reator ficou em patamares muito altos, com um valor próximo a da alimentação, cerca de 442mgC/L. Isso pode ser observado na Figura 6.4. Conclui-se daí que a eficiência do reator seria muito baixa se fossem mantidas as demais condições operacionais.

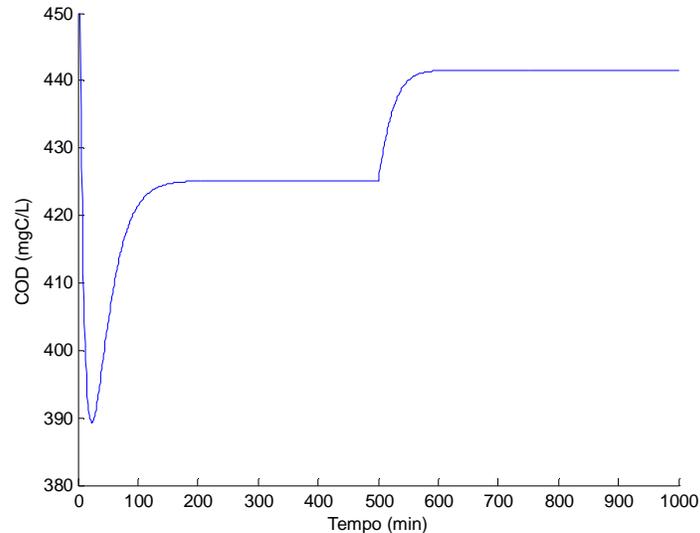


Figura 6.4: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na vazão da corrente de alimentação do reator

Também se observou a influência da concentração de matéria orgânica presente na corrente de alimentação de efluente, o que pode ser muito comum em situações reais. A Figura 6.5 mostra a variação na COD obtida a partir do aumento dessa variável, de 450 para 500mgC/L. Evidentemente, o valor da variável de saída também aumentou, atingindo valores próximos a 470mgC/L. A quantidade de matéria orgânica degradada foi proporcional à taxa conseguida anteriormente (em torno de 30mgC/L).

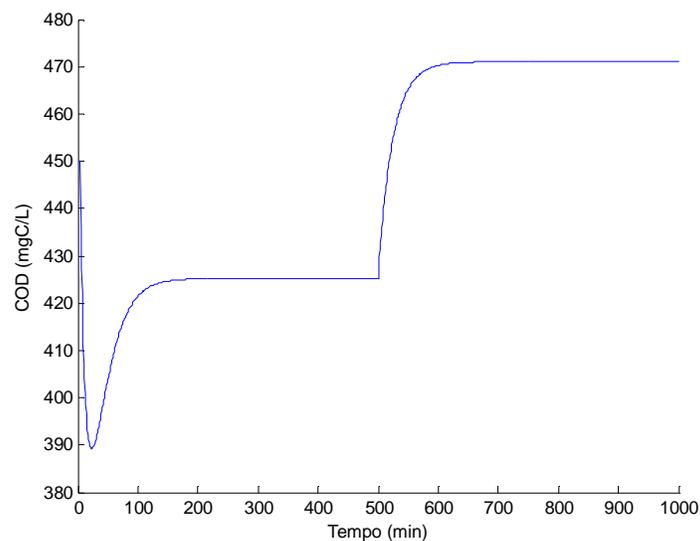


Figura 6.5: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na concentração de matéria orgânica na corrente de alimentação do reator

Acendendo mais uma lâmpada no tanque do reator, ou seja, aumentando a potência total fornecida pelas lâmpadas de 500 para 625W, a curva de COD sofre uma pequena influência, tendo seu valor diminuído para um pouco mais do que 420mgC/L (Figura 6.6).

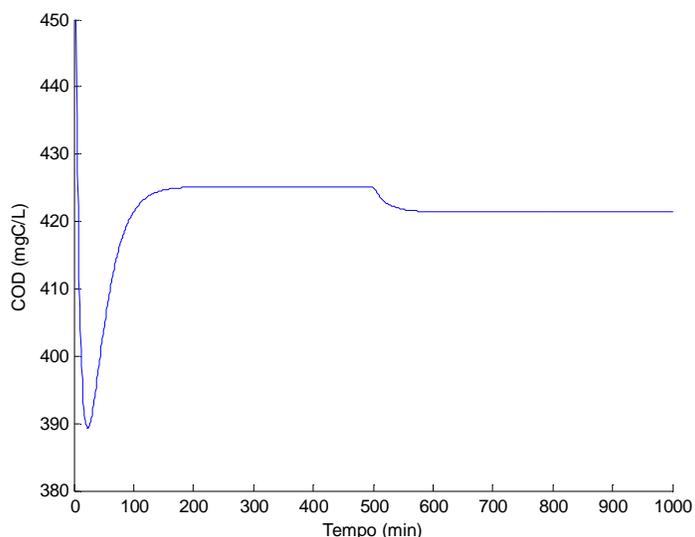


Figura 6.6: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na potência total das lâmpadas

Como a influência do aumento de uma lâmpada quando já havia quatro lâmpadas acesas foi pequena, realizou-se uma nova simulação para verificar se a influência era maior quando a potência exercida estivesse mais distante do limite máximo. Desse modo, variou-se o número de lâmpadas acesas de uma para três. A Figura 6.7 mostra que, mesmo quando o número de lâmpadas acesas é menor, a influência da potência é pequena se comparada às outras variáveis. Acendendo-se duas lâmpadas, verificou-se que houve a diminuição da concentração de orgânicos apenas de cerca de 436mgC/L para 429mgC/L.

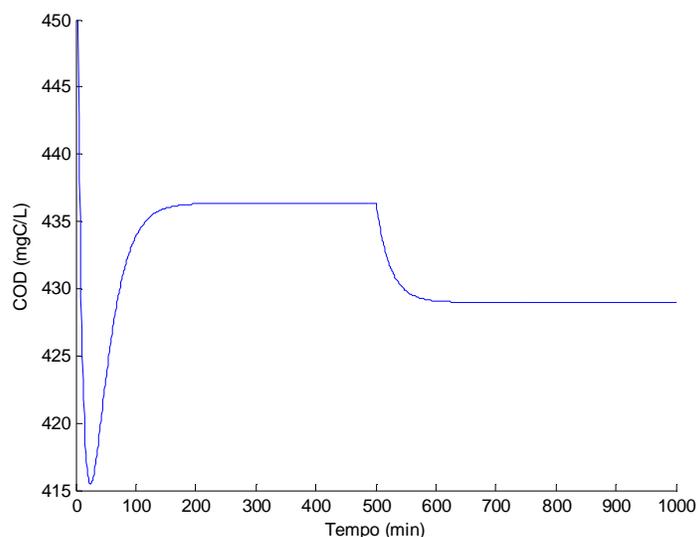


Figura 6.7: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma maior variação em degrau na potência total das lâmpadas

Simulando um aumento da intensidade da radiação solar de 500 para 800W/m², obtém-se uma curva bem parecida com a da Figura 6.6, conforme Figura 6.8:

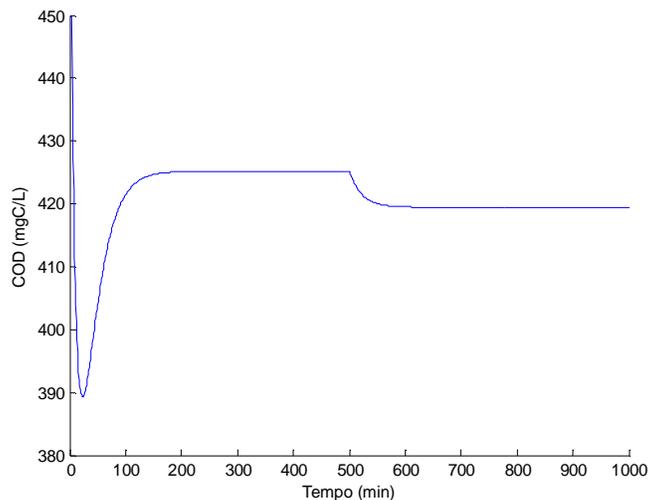


Figura 6.8: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na intensidade da radiação solar

Em termos qualitativos, obteve-se o resultado esperado, ou seja, o aumento da intensidade luminosa, tanto solar como a proveniente das lâmpadas, favoreceu a reação de degradação de matéria orgânica. No entanto, o maior fornecimento de luz não influenciou significativamente a reação, havendo apenas um pequeno decréscimo da COD da corrente de saída do reator. Para fazer a mesma análise da que foi feita com a alteração da potência das lâmpadas, também foi realizada outra simulação para uma variação da radiação solar de 100 para 500W/m². Observando-se os resultados na Figura 6.9 é possível concluir que a radiação solar também não influi significativamente, se comparada às outras variáveis, na concentração de matéria orgânica na saída do reator mesmo quando essa radiação está distante do limite máximo.

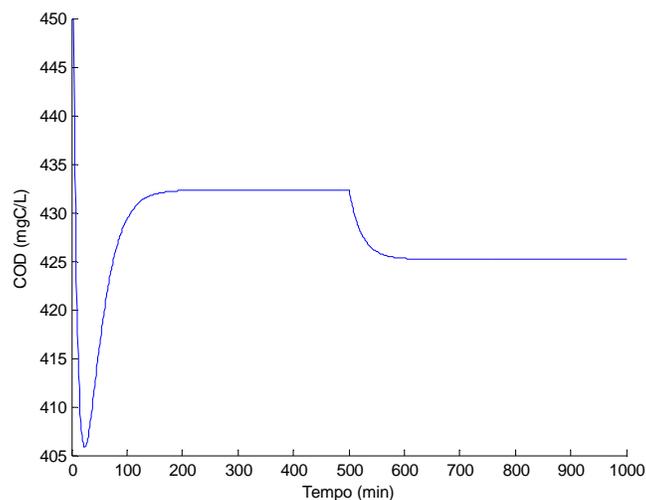


Figura 6.9: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma maior variação em degrau na intensidade da radiação solar

Outro fator que pode modificar a ocorrência da reação é a concentração de íons Fe no meio. Elevando a concentração desses íons de 33,6 para 56,0mg/L, a COD variou de acordo com a Figura 6.10. O aumento desse reagente contribuiu positivamente para o processo de degradação da matéria orgânica, cuja concentração na corrente de saída foi um pouco maior do que 400mgC/L.

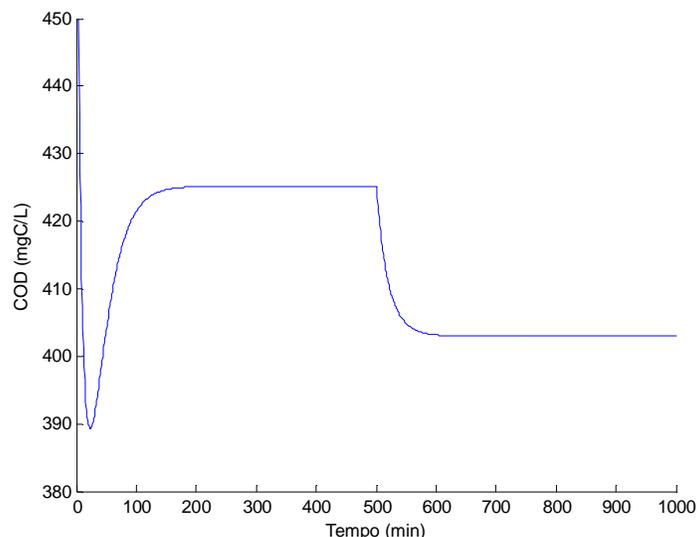


Figura 6.10: Curva da COD da corrente de saída do reator após uma variação em degrau na concentração de íons Fe

A partir dos resultados da simulação, foi possível avaliar como cada variável de entrada afeta a variável controlada. A intensidade luminosa (solar e das lâmpadas) mostrou-se um fator que não exerce grande influência sobre a COD da corrente de saída. As maiores variações foram observadas para degraus nas vazões e concentrações dos reagentes, as quais se mostraram as possíveis variáveis a serem manipuladas.

Desse modo, foi determinado que a vazão de peróxido de hidrogênio seria a variável manipulada nesse estudo, já que apresentou uma influência significativa na variável controlada e é mais fácil de ser modificada durante a operação (utilizando-se uma válvula, por exemplo) dos que as próprias concentrações de peróxido e íons Fe. Sendo assim, as demais variáveis de entrada – intensidade luminosa, vazão e concentração da corrente de alimentação e concentração de reagentes -, serão tratadas como perturbações do processo.

6.1.2. Determinação do controlador

Uma vez determinados quais os tipos de variáveis envolvidas no processo (controlada, manipulada e distúrbios), é preciso definir qual a estratégia de controle a ser utilizada. Para este estudo optou-se por um controle *feedback* da concentração de matéria orgânica na saída do reator, manipulando-se a vazão de entrada de solução de peróxido de hidrogênio através de um controlador PI. Esse tipo de controlador é amplamente utilizado na indústria, sendo adequado para o processo aqui analisado. Os próximos passos agora são determinar as características do processo partindo-se de um modelo, obter os parâmetros do controlador e

verificar, a partir de novas simulações, se a estratégia de controle adotada é adequada para esse reator.

6.1.3. Modelagem do processo

O método utilizado para a determinação dos parâmetros que caracterizam o processo será aplicar um degrau na variável manipulada e verificar o comportamento da variável controlada. Após um degrau unitário na vazão de entrada de solução de peróxido de hidrogênio (q_p), de 0,5 para 1,5L/min em 500min de simulação do reator, obteve-se a resposta na saída do reator (COD) mostrada na Figura 6.11.

Observando-se a curva obtida na Figura 6.11, é possível aproximar o processo por um modelo de primeira ordem com tempo morto. A função de transferência ($G_P(s)$) correspondente é:

$$G_P(s) = \frac{COD(s)}{q_p(s)} = \frac{K_P \cdot e^{-\theta s}}{\tau s + 1}$$

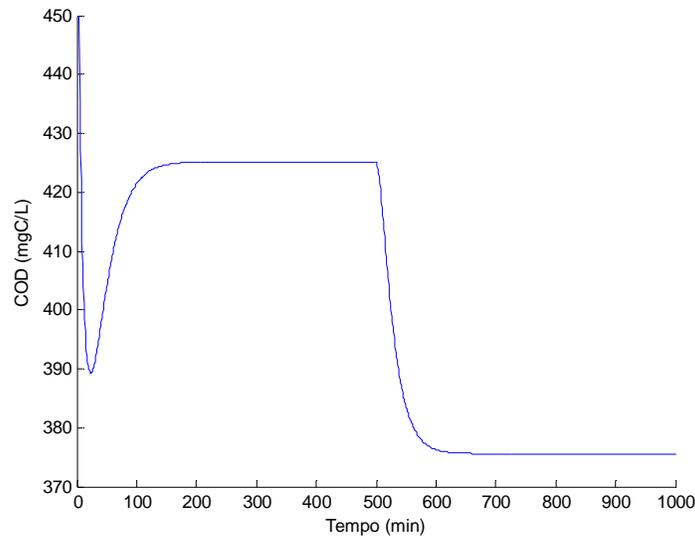


Figura 6.11: Resposta da variável controlada (COD na corrente de saída do reator) a um degrau unitário na variável manipulada (vazão de entrada de solução de peróxido de hidrogênio)

De acordo com dados do MatLab[®] e a Figura 6.12, considerou-se um tempo morto θ igual a 4min. O ganho do processo foi calculado pela diferença entre os valores de COD no estado estacionário obtido com as condições iniciais (425,18mgC/L) e após o degrau na vazão de solução de peróxido de hidrogênio (375,57mgC/L):

$$K_P = \frac{\Delta COD}{\Delta q_p} = \frac{(375,57 - 425,18) \text{ mgC/L}}{1 \text{ L/min}} \Rightarrow K_P = -49,61 \frac{\text{mgC} \cdot \text{min}}{\text{L}^2}$$

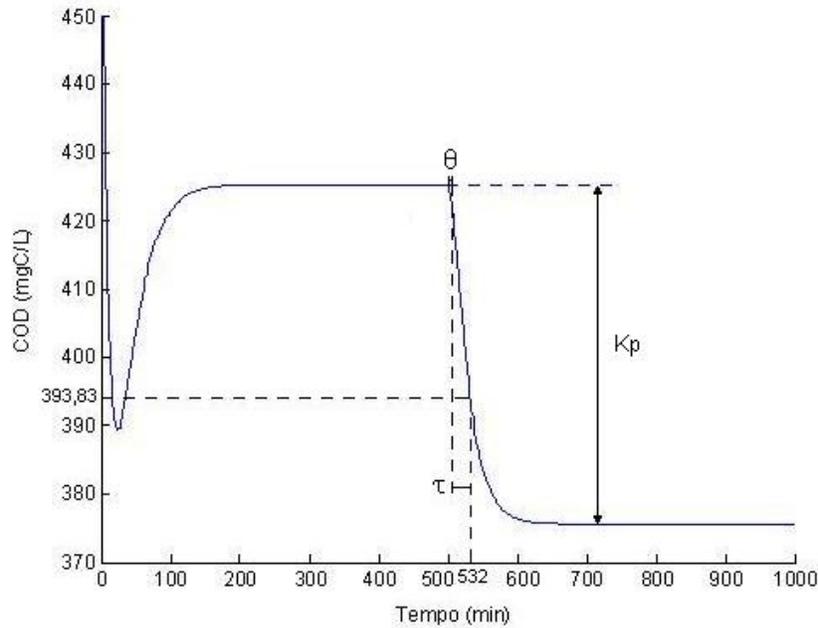


Figura 6.12: Determinação dos parâmetros do processo

A constante de tempo é o instante em que a COD atingiu o valor de 63,2% do ganho somado ao estado estacionário inicial, descontado o tempo morto a partir do degrau na variável manipulada. Analisando-se os dados no MatLab[®] encontrou-se:

$$COD(t) = 425,18 + 0,632 \cdot (-49,61) = 393,83 \Rightarrow t' = 532$$

$$\tau = t' - 500 - \theta = 532 - 500 - 4 \Rightarrow \tau = 28 \text{ min}$$

Portanto, o processo em estudo pode ser representado pela seguinte função de transferência:

$$G_p(s) = \frac{COD(s)}{q_p(s)} = \frac{-49,61 \cdot e^{-4s}}{28s + 1}$$

6.1.4. Determinação dos parâmetros do controlador pelo método de Ziegler & Nichols

Com os valores de K_p e τ pode-se calcular os parâmetros necessários para o cálculo de um controlador PI. Para que o método de Ziegler & Nichols pudesse ser utilizado, foi necessário acrescentar um valor de tempo morto, chegando-se a uma conclusão de que 4 minutos seriam suficientes para que o controlador pudesse operar adequadamente e estaria dentro de uma faixa aceitável do sistema.

Assim, fazendo os cálculos conforme mostrado no item 4.3.6:

$$\phi\left(\frac{K_p \cdot e^{-\theta \cdot \omega_u j}}{\tau \cdot \omega_u j + 1}\right) = -\pi \rightarrow -\theta \cdot \omega_u - \arctg(\tau \cdot \omega_u) + \pi = 0$$

$$AR\left(\frac{Kp \cdot e^{-\theta \cdot \omega_u j}}{\tau \cdot \omega_u j + 1}\right) = \frac{|Kp|}{\sqrt{\tau^2 \cdot \omega_u^2 + 1}}$$

Resolvendo a primeira equação, tem-se que ω_u vale 0,414 rad/min e pela segunda equação, tem-se que AR vale 4,26.

Com os valores de ω_u e AR pode-se calcular Pu e Ku. Como o controlador deverá ser PI, dividindo Pu por 1,2, tem-se Ti igual a 12,64min. Dividindo Ku por 2,2 tem-se que |Kc| deverá valer 0,107 L²/min.mgC e, pelo fato de o ganho Kp ser negativo (ao aumentar a vazão de peróxido diminui-se a concentração de orgânicos no reator), Kc deverá ser negativo também.

Assim, a um tempo morto de 4 minutos, Ti de 12,64min e Kc de -0,107L²/min.mgC, obtém-se um controlador PI que estabiliza o sistema.

Dessa forma, tendo-se como base o esquema apresentado na Figura 6.13, pode-se entender como o controlador afetará o processo.

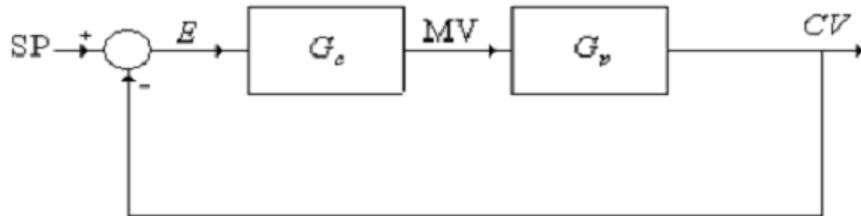


Figura 6.13: Diagrama de blocos.

Sendo assim, deve-se manipular a vazão de peróxido q3 de forma a diminuir o erro entre o *set-point* e o valor lido da concentração de orgânicos (variável controlada). Assim, q3 deverá ser atualizado a cada instante para que assim que houver um aumento do erro E o controlador reaja modificando o seu valor conforme a equação abaixo.

$$q3(t) = q3_{ss} + Kc \cdot \left(E(t) + \frac{1}{Ti} \cdot \int_0^t E(t) \cdot dt \right)$$

Fazendo uma discretização da vazão de q3 no ponto i e sendo h o período entre q3(i) e q3(i-1) tem-se que:

$$q3(i) = q3_{ss} + Kc \cdot \left(E(i) + \frac{1}{Ti} \cdot \sum_{j=1}^i E(j) \cdot h \right)$$

E para o ponto i-1:

$$q3(i-1) = q3_{ss} + Kc \cdot \left(E(i-1) + \frac{1}{Ti} \cdot \sum_{j=1}^{i-1} E(j) \cdot h \right)$$

Através da subtração dos dois pontos:

$$q3(i) = q3(i-1) + Kc \cdot \left(E(i) - E(i-1) + \frac{h}{Ti} \cdot E(i) \right)$$

6.1.5. Simulação do controlador em malha fechada

O modelo matemático para a simulação em malha fechada está apresentado no Apêndice II, sendo que foram utilizadas as mesmas condições iniciais da malha aberta, mostradas na Tabela 6.1.

Essa simulação consistiu primeiramente na introdução do controlador no sistema e estabelecendo-se um *set-point* na COD de 390 mgC/L. Assim, a diminuição da COD no reator pode ser verificada na Figura 6.14 e o aumento da vazão de peróxido decorrente está mostrado na Figura 6.15.

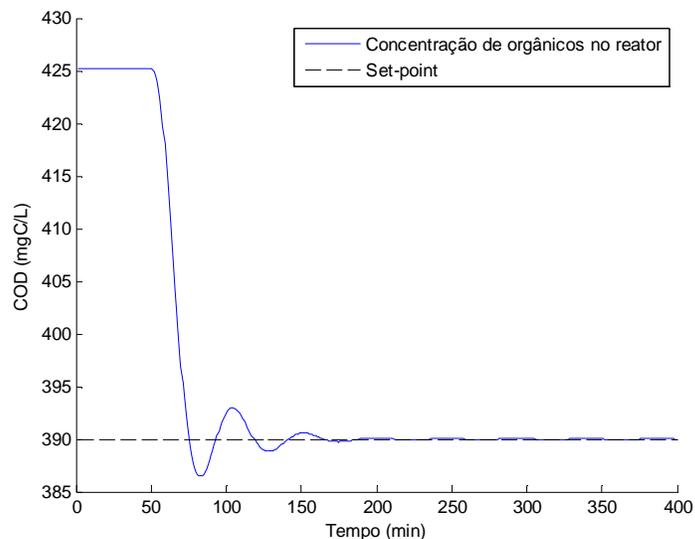


Figura 6.14: Gráfico de COD variando ao longo do tempo em malha fechada.

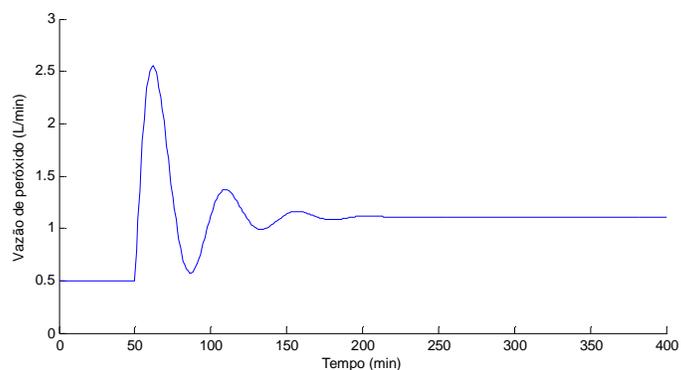


Figura 6.15: Gráfico da vazão de peróxido variando ao longo do tempo em malha fechada.

Observando os gráficos, verifica-se que ao ligar o controlador no regime estacionário, ele age forçando a COD, inicialmente a aproximadamente 425 mgC/L, a chegar ao valor do *set-point* através do aumento da vazão de peróxido até por volta de 1,2 L/min. Pode-se observar ainda que o controlador demorou cerca de 150 minutos para atingir a estabilidade, sendo esse fato causado pela dinâmica lenta do processo.

Para que possa ser analisada a influência das outras variáveis, foram aplicados degraus de maneira que cada variável estivesse em seu valor máximo, determinado por Ribeiro (2009) ou pela Tabela 5.1.

Degrau no set-point

Aplicando um degraú no *set-point* para um novo valor de 350 mgC/L:

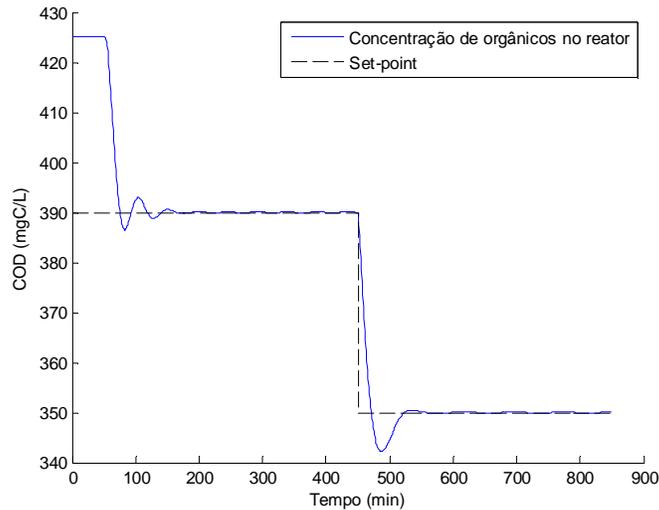


Figura 6.16: Gráfico de COD para um degraú no *set-point* (350 mgC/L)

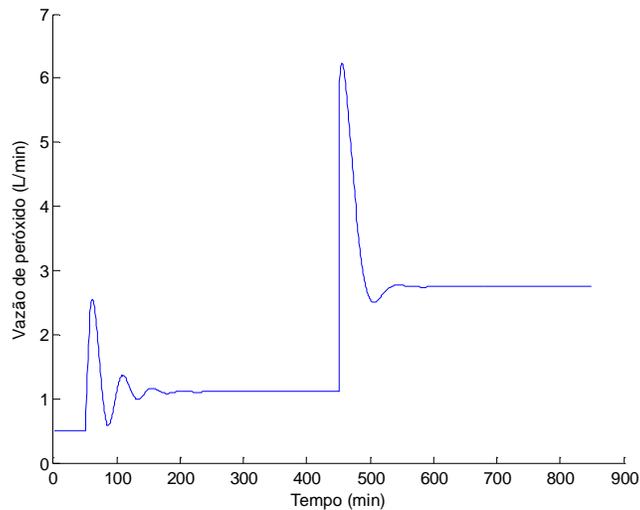


Figura 6.17: Gráfico da vazão de peróxido para um degraú no *set-point* (350 mgC/L)

Observa-se que o controlador respondeu satisfatoriamente à mudança para um *set-point* mais baixo, apresentando, no entanto, um pico na vazão de peróxido. Isso ocorre porque no degraú, a diferença (Erro) entre o novo *set-point* e a concentração de orgânicos no reator (de valor igual ao *set-point* anterior) passa a ser muito grande. Assim, para consertar esse erro, o controlador aumenta demasiadamente a vazão de peróxido, chegando até a diminuir a COD

mais do que deveria, sendo que logo em seguida já reduz a vazão para uma quantidade suficiente para manter a COD no *set-point*.

Nota-se também que uma queda de cerca de 10 % na concentração de carbono orgânico na solução faz com que a vazão de peróxido dobre, mostrando que apesar de essa ser uma variável adequada para o controle, ainda é necessário avaliar o efeito das outras variáveis para que a quantidade de peróxido utilizada não seja tão alta para baixos valores de COD.

Degrau na concentração de entrada de peróxido

Ao trocar a solução de peróxido de 200 mmol/L (6,8 g/L) por uma mais concentrada de 300 mmol/L, valor máximo considerado por Ribeiro (2009), verifica-se o seguinte comportamento dos gráficos de COD e da vazão de peróxido:

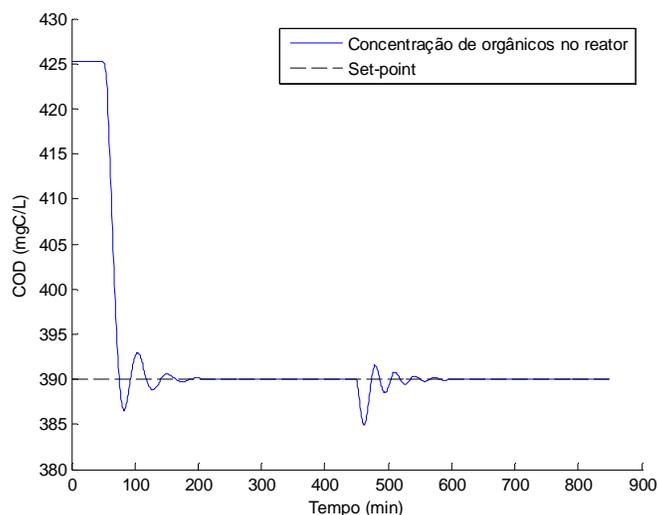


Figura 6.18: Gráfico de COD para um degraú na concentração de entrada do peróxido (300mmol/L)

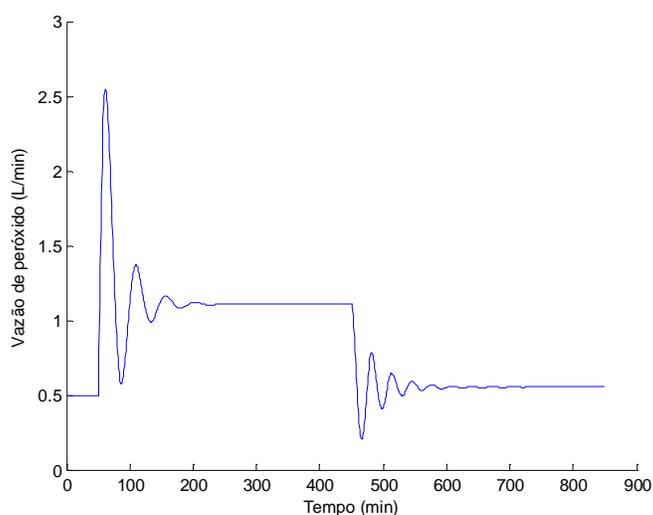


Figura 6.19: Gráfico da vazão de peróxido para um degraú na concentração de entrada do peróxido (300mmol/L)

O primeiro gráfico apresenta claramente a perturbação causada na curva da COD ao aumentar-se a concentração do peróxido. Como o esperado, nota-se que em um primeiro momento a COD cai e, logo em seguida, o controlador reage, diminuindo a vazão de peróxido, como pode ser visto na Figura 6.19. Percebe-se nesse gráfico também que o pico que existiu no caso do degrau no *set-point* já não aparece de forma acentuada nesse caso, pois a variação não foi no *set-point* diretamente, ou seja, o erro só passa a existir porque para uma mesma vazão foram introduzidas mais moléculas de peróxido que degradaram mais o carbono orgânico, causando o erro e provocando a diminuição da vazão de peróxido.

Outra observação que pode ser feita no gráfico é que apesar de um aumento na concentração da solução de peróxido causar uma diminuição significativa em sua vazão, percebe-se que o controlador demora mais para estabilizar as variáveis, fato que pode ser explicado por uma solução mais concentrada estar ligada a uma vazão menor e, conseqüentemente, a maiores imprecisões e uma maior dificuldade na manipulação da variável.

Degrau na concentração de orgânicos na entrada

Como a matéria orgânica dissolvida provavelmente virá como efluente de vários processos e não vai ser mantida na mesma concentração sempre, deve-se avaliar cuidadosamente o efeito dela no controle. Assim, mudando seu valor de 450 mgC/L para 600 mgC/L, os gráficos de COD e da vazão de peróxido ficam:

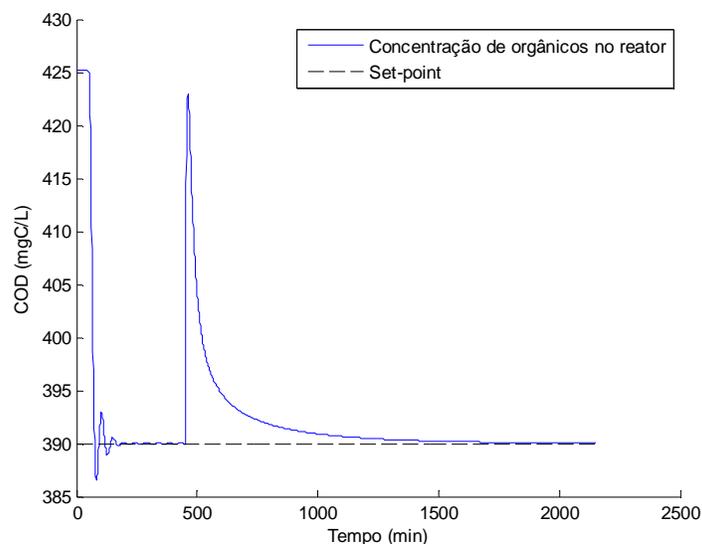


Figura 6.20: Gráfico de COD para um degrau na concentração de COD na entrada (600mgC/L)

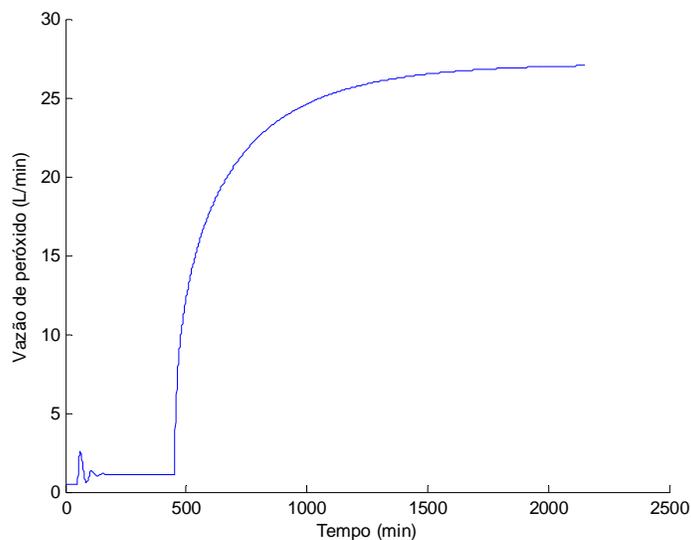


Figura 6.21: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na concentração de COD na entrada (600mgC/L)

Percebe-se que aumentando a concentração de entrada do fenol aumenta-se largamente a quantidade de peróxido necessário para degradar essa quantidade excedente. Observa-se também que o novo estado estacionário demora mais tempo para ser atingido, levando cerca de 1500 minutos, quase dez vezes mais que os anteriores.

Degrau na potência das lâmpadas

Aumentando a quantidade de lâmpadas de 4 (500 W) para 5 (625 W) tem-se que as variáveis serão modificadas da seguinte forma:

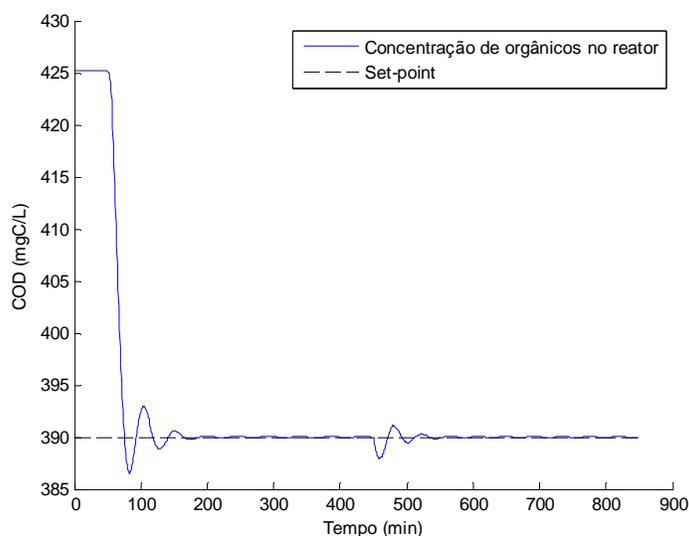


Figura 6.22: Gráfico de COD para um degrau na potência fornecida pelas lâmpadas (625 W)

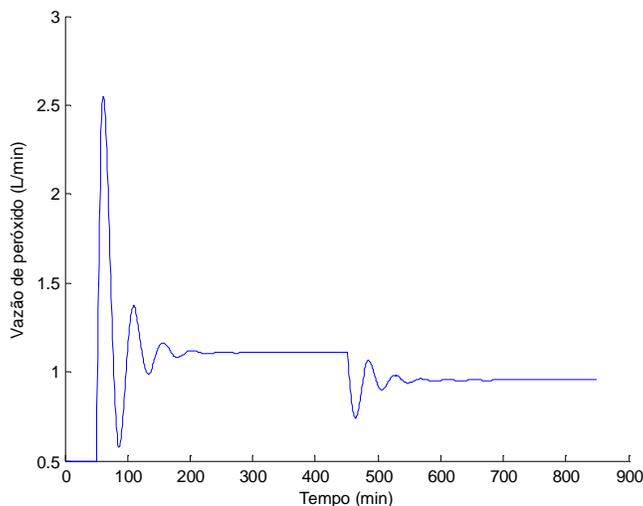


Figura 6.23: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na potência fornecida pelas lâmpadas (625 W)

Assim como no caso do aumento da concentração de peróxido, existe primeiro uma diminuição na COD devido à maior degradação provocada pelo aumento da potência fornecida pelas lâmpadas. Como a uma mesma quantidade de peróxido inserida existe uma maior reação por causa do aumento da radiação, o controlador reage de maneira a diminuir a vazão para que a COD volte ao *set-point*. Verifica-se que essa redução não ocorre de maneira significativa e, como o gasto com energia elétrica representa a maior parcela dos custos do processo, nessas condições não seria vantajoso ligar mais uma lâmpada.

Degrau na radiação solar

Como a radiação solar não poderá ser manipulada, é importante verificar como ela altera a degradação do poluente. Assim, aplicando-se um degrau na radiação solar de 500 para 847 W/m²:

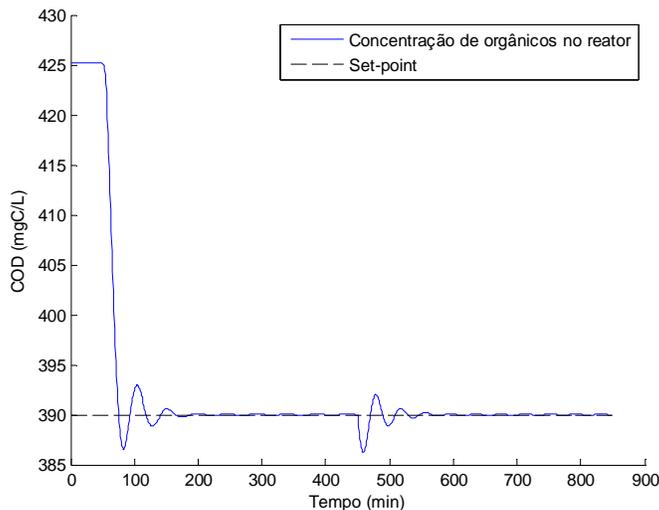


Figura 6.24: Gráfico de COD para um degrau na radiação solar (847 W/m²)

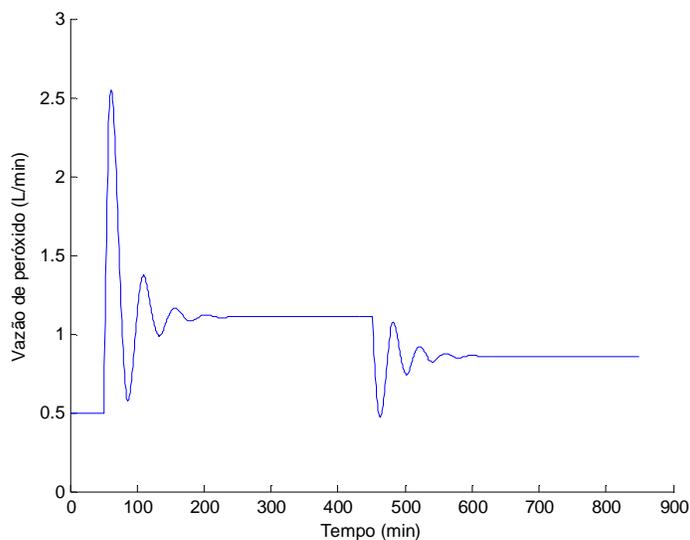


Figura 6.25: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na radiação solar (847 W/m^2)

Nota-se que assim como no caso do aumento da potência fornecida pelas lâmpadas, o aumento na radiação solar não diminuiria significativamente a vazão de peróxido introduzida no reator. No entanto, ao contrário do caso das lâmpadas, o aumento da radiação solar é um fator positivo e que, mesmo que a redução de peróxido seja pequena, ainda é vantajoso.

Degrau na vazão de alimentação de matéria orgânica

Aumentando-se a vazão da corrente de matéria orgânica de 1 L/min para 2 L/min:

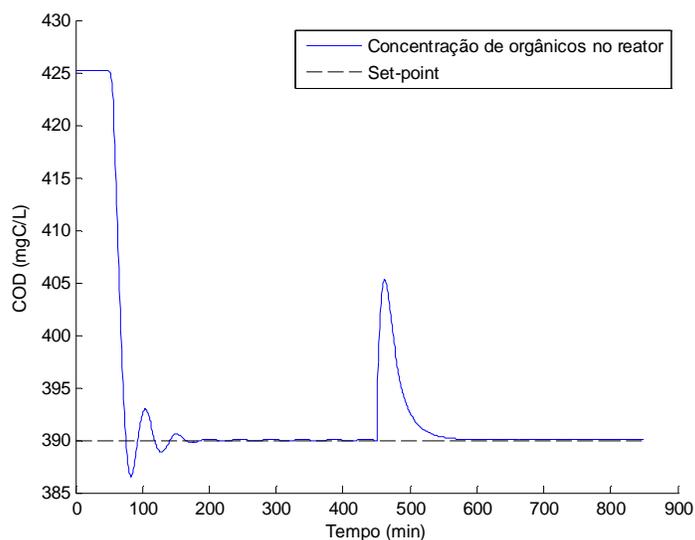


Figura 6.26: Gráfico de COD para um degrau na vazão de alimentação da matéria orgânica (2L/min)

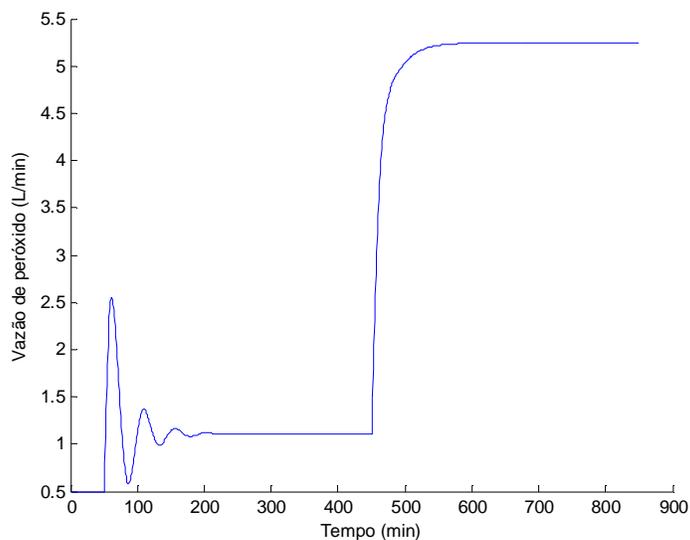


Figura 6.27: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na vazão de alimentação da matéria orgânica (2L/min)

Os gráficos mostram que apesar de a vazão de alimentação de fenol ter dobrado, o efeito dessa variável não é tão crítico quanto no caso do aumento da concentração de entrada, sendo que as variáveis chegam mais rápido ao estado estacionário. Assim, uma conclusão que pode ser tirada é de que é preferível diluir antes a corrente de entrada do efluente a ser tratado e aumentar a sua vazão do que alimentá-lo diretamente a uma baixa vazão.

Degrau na concentração de ferro

Para verificar o efeito da concentração de ferro na degradação do poluente, seu valor foi alterado de 0,6 mmol/L para 1 mmol/L.

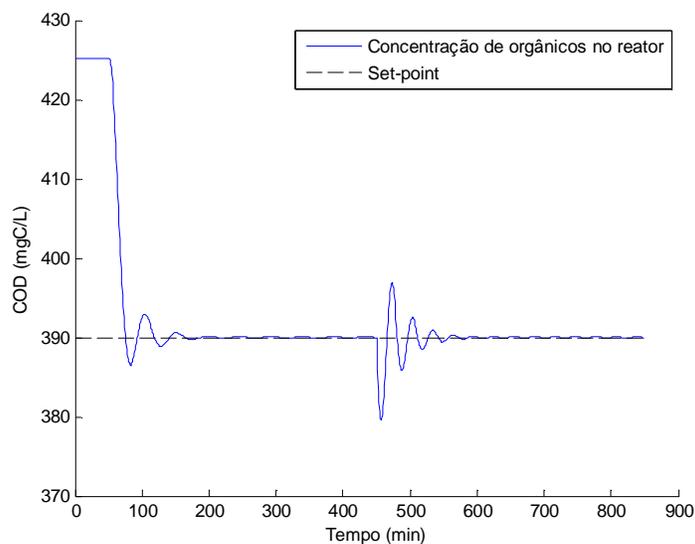


Figura 6.28: Gráfico de COD para um degrau na concentração de ferro (1 mmol/L)

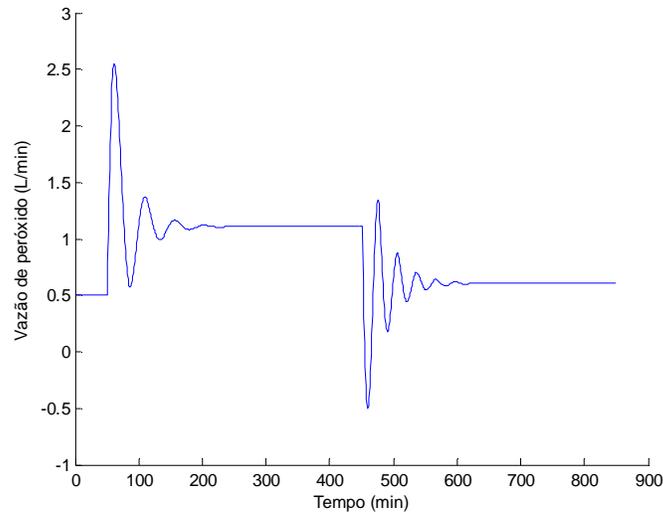


Figura 6.29: Gráfico da vazão de peróxido para um degrau na concentração de ferro (1 mmol/L)

Assim como nos casos anteriores, o aumento da concentração de ferro provoca um aumento da degradação do fenol. Assim, havendo menos poluente em solução, uma menor quantidade de peróxido é necessária para a mesma COD estabelecida como *set-point*.

Efeito do controle com múltiplas perturbações

Com o objetivo de verificar o efeito de várias perturbações em sequência na saída do reator, foram aplicados os mesmos degraus anteriores em instantes diferentes (de 200 em 200min). A Figura 6.30 mostra a variação de COD decorrente:

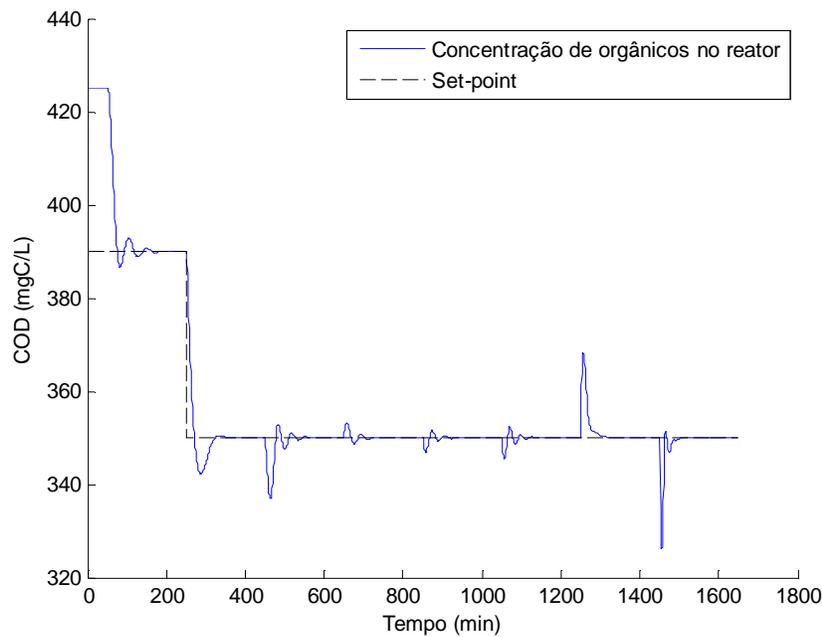


Figura 6.30: Gráfico de COD para múltiplas perturbações

Observando-se o gráfico obtido, percebe-se que a resposta do controlador foi adequada às diferentes perturbações, mantendo a COD no valor desejado. Nota-se que as maiores variações da variável controlada corresponderam aos degraus na vazão de alimentação e na concentração de íons de Fe. A mudança no *set-point* foi rapidamente alcançada com o uso do controlador, através do aumento da vazão de peróxido, conforme mostrado na Figura 6.31.

A curva de variação da variável manipulada foi condizente com o esperado, ou seja, distúrbios que favorecem a degradação da COD presente no reator fazem com que a vazão de peróxido requerida seja menor. Nos casos em que há aumento de matéria orgânica a ser decomposta, o modelo sugere que o controlador atue de forma a se obter vazões mais altas desse reagente.

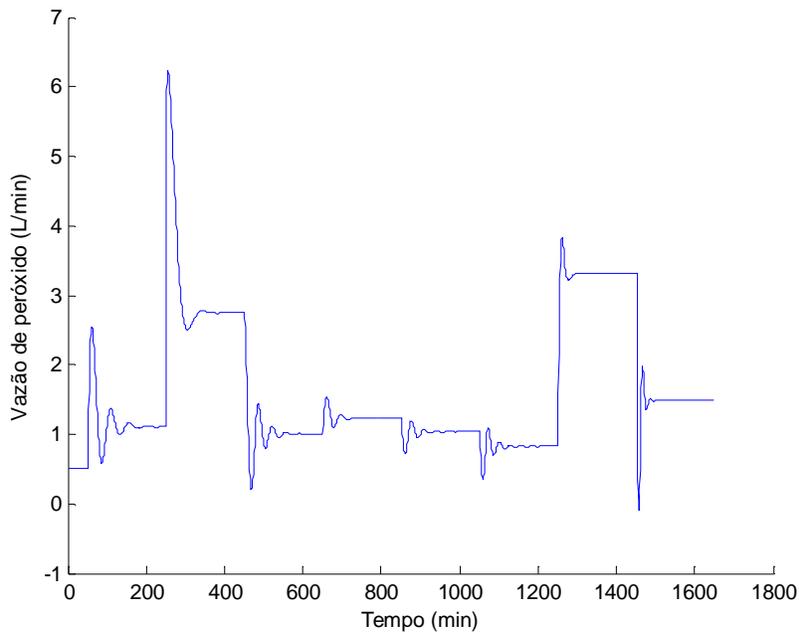


Figura 6.31: Gráfico da vazão de peróxido para múltiplas perturbações

6.1.6. Implementação do controle antecipatório

De acordo com as simulações realizadas em malha aberta, expostas no item 6.1.1, e com o conhecimento do processo, foram determinados quais os possíveis distúrbios relacionados ao controle da concentração de matéria orgânica na saída do reator. Foi notado que as principais variáveis em que haveria dificuldade na manipulação seriam a vazão e a concentração de matéria orgânica da corrente de alimentação e a radiação solar. As funções de transferência do processo para cada uma dessas variáveis consideradas foram então determinadas, analogamente ao modo como foi feito no item 6.1.3 para a variável manipulada (vazão de solução de peróxido de hidrogênio).

Os resultados para cada variável, encontram-se a seguir:

- Vazão de alimentação da corrente de entrada (q_0 , L/min)

$$G_{d1}(s) = \frac{COD(s)}{q_0(s)} = \frac{21,73 \cdot e^{-4s}}{13s + 1}$$

- Concentração de matéria orgânica na corrente de alimentação (CA_0 , mgC/L)

$$G_{d2}(s) = \frac{COD(s)}{CA_0(s)} = \frac{0,9165 \cdot e^{-4s}}{20s + 1}$$

- Radiação solar (rad_{sol} , W/m²)

$$G_{d3}(s) = \frac{COD(s)}{rad_{sol}(s)} = \frac{-0,01786 \cdot e^{-4s}}{19s + 1}$$

Como já havia sido observado, a radiação solar possui pouca influência na COD da saída do reator. Portanto, foi definido que para essa variável não seria proposta a estratégia de controle antecipatório, já que o ganho adquirido não seria significativo. Para as outras duas variáveis, primeiramente foram testados modelos considerando-as separadamente. Após alguns testes e ajustes nos parâmetros do controlador, esses modelos foram integrados e deram origem ao modelo apresentado no Apêndice III. Os ajustes nos parâmetros do controlador foram feitos a partir de tentativas e observações da estabilidade das respostas obtidas, chegando-se a um valor de ganho proporcional (K_c) igual a 80% do valor original (-0,085336) e de tempo integral igual (T_I) ao quádruplo do valor original (50,56452). Algumas simulações foram conduzidas para se verificar a coerência e aplicabilidade do modelo desenvolvido. Para todas as simulações, partiu-se do reator em estado estacionário a partir das condições apresentadas na Tabela 6.1, com o funcionamento do controlador após 50min do início do horizonte de tempo considerado.

Influência da vazão da corrente de alimentação

Aplicando-se uma variação em degrau na vazão da corrente de alimentação do reator, de 1L/min para 1,5L/min (Figura 6.32), após 500min do início da simulação, obtém-se a variação na variável manipulada (vazão da corrente de peróxido de hidrogênio) e o efeito na variável controlada (concentração de matéria orgânica na saída do reator) mostrados nas Figura 6.33 e Figura 6.34, respectivamente.

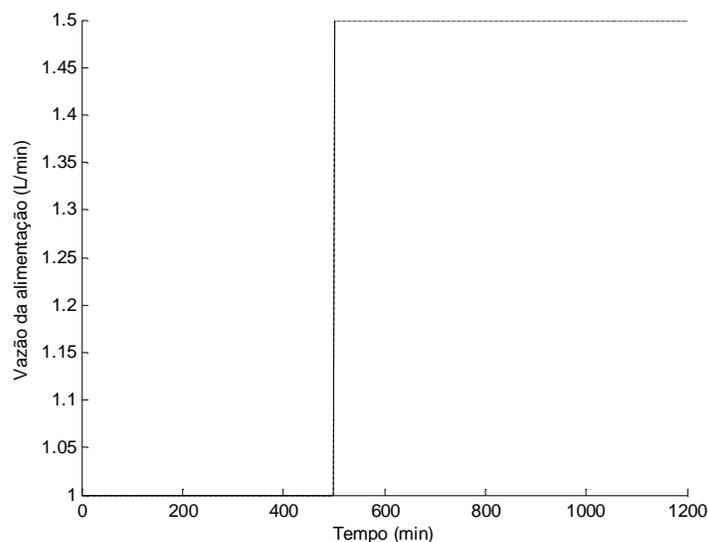


Figura 6.32: Degrau na vazão da corrente de alimentação do reator, de 1,0 para 1,5L/min após 500min do início da simulação

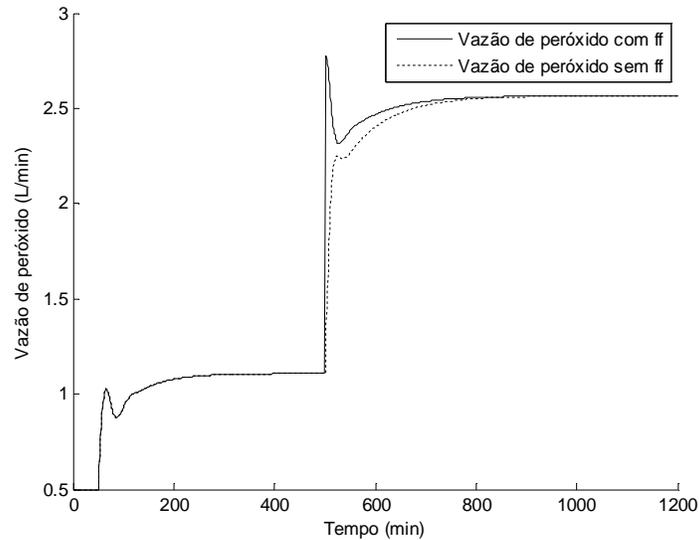


Figura 6.33: Alteração na variável manipulada após o degrau na vazão de corrente de alimentação do reator

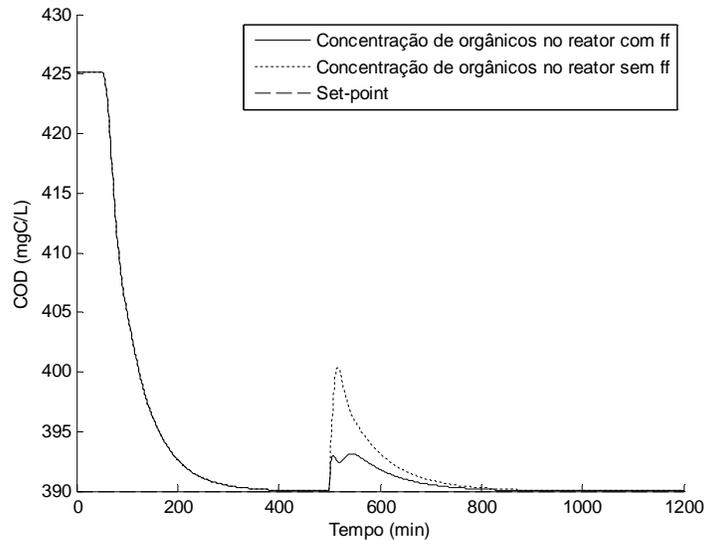


Figura 6.34: Efeito na variável controlada após o degrau na vazão de corrente de alimentação do reator

Analisando-se as figuras acima, é possível notar que realmente há uma reação mais rápida do sistema ao distúrbio quando é utilizado o controle antecipatório. Embora a modificação na variável manipulada seja mais acentuada, a variável controlada sofreu uma perturbação significativamente menor, voltando ao *set-point* mais rapidamente. Desse modo, controlar esse distúrbio (vazão de alimentação) segundo essa estratégia (controle antecipatório) é eficiente e melhora a estabilidade da variável manipulada.

Influência da concentração da corrente de alimentação

Aplicando-se uma variação em degrau na concentração da corrente de alimentação do reator, de 450mgC/L para 470mgC/L (Figura 6.35), após 500min do início da simulação, obtém-se a variação na variável manipulada (vazão da corrente de peróxido de hidrogênio) e o efeito na variável controlada (concentração de matéria orgânica na saída do reator) mostrados nas Figura 6.36 e Figura 6.37, respectivamente.

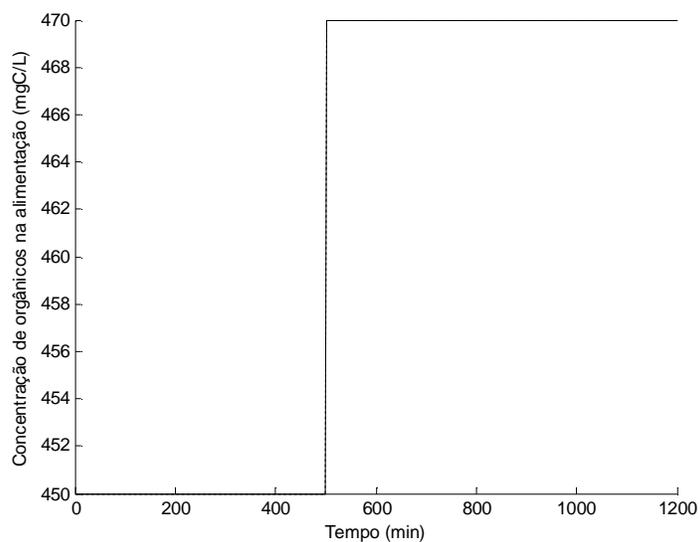


Figura 6.35: Degrau na concentração da corrente de alimentação do reator, de 450 para 470mgC/L após 500min do início da simulação

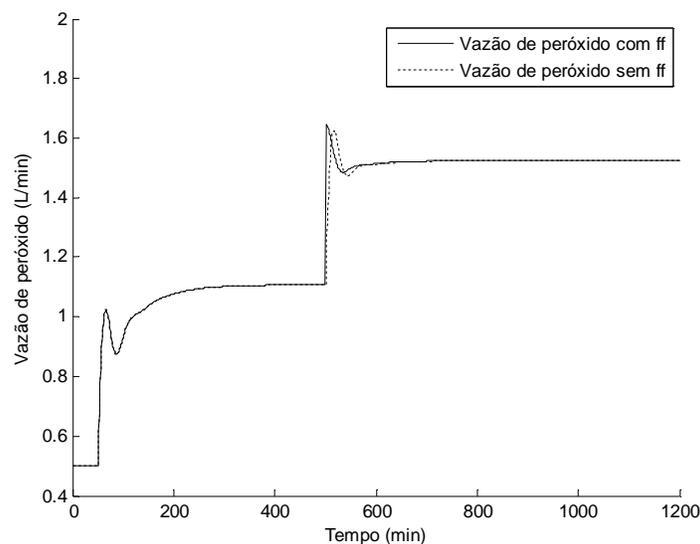


Figura 6.36: Alteração na variável manipulada após o degrau na concentração de corrente de alimentação do reator

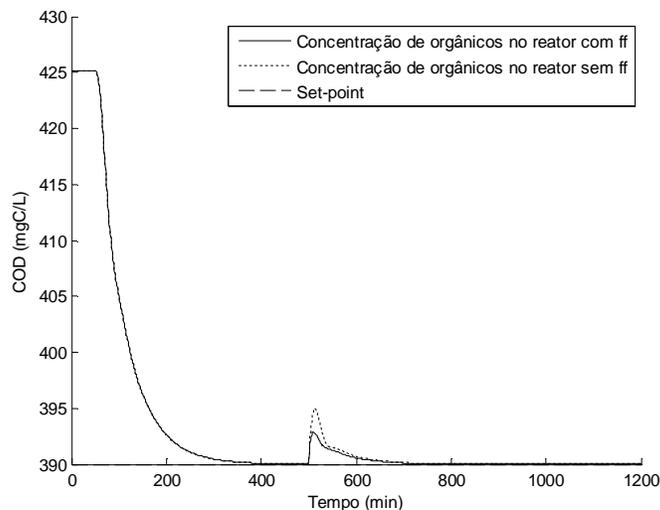


Figura 6.37: Efeito na variável controlada após o degrau na concentração de corrente de alimentação do reator

Os resultados obtidos foram análogos aos do item anterior, ou seja, o aumento da concentração da corrente de alimentação tem um efeito nas variáveis manipulada e controlada semelhante ao observado com o aumento da vazão dessa corrente. Da mesma forma, pode então ser notado que o controle antecipatório possuiu o resultado positivo esperado.

Outras variações dos distúrbios

A seguir, são apresentados os resultados obtidos com algumas simulações de variação nos distúrbios considerados anteriormente.

Nos primeiros testes apresentados, os distúrbios agiram de forma a aumentar a concentração de matéria orgânica na saída do reator. Desse modo, em seguida foi feita uma simulação para verificar o comportamento do sistema quando a tendência é diminuir a COD na saída do reator. Para tanto, aplicou-se um degrau na vazão de alimentação de 1,0 para 0,8L/min após 500min de simulação e um degrau na concentração da corrente de alimentação de 450 para 420mgC/L após 800min de simulação (Figura 6.38). Os resultados são apresentados nas Figura 6.39 e Figura 6.40.

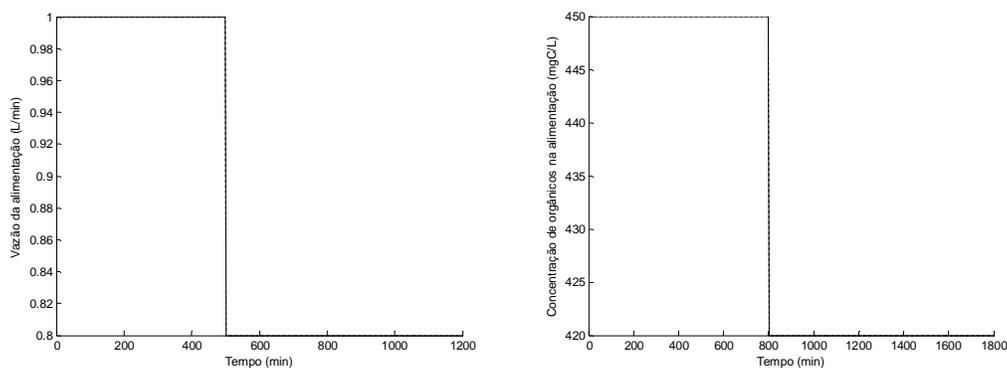


Figura 6.38: Degraus na vazão e concentração da corrente de alimentação do reator, após 500 e 800min do início da simulação, respectivamente

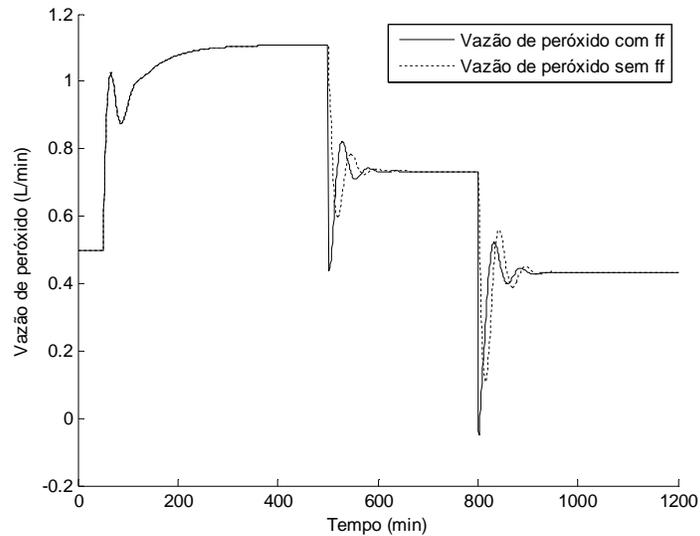


Figura 6.39: Alteração na variável manipulada após o degrau nos distúrbios considerados

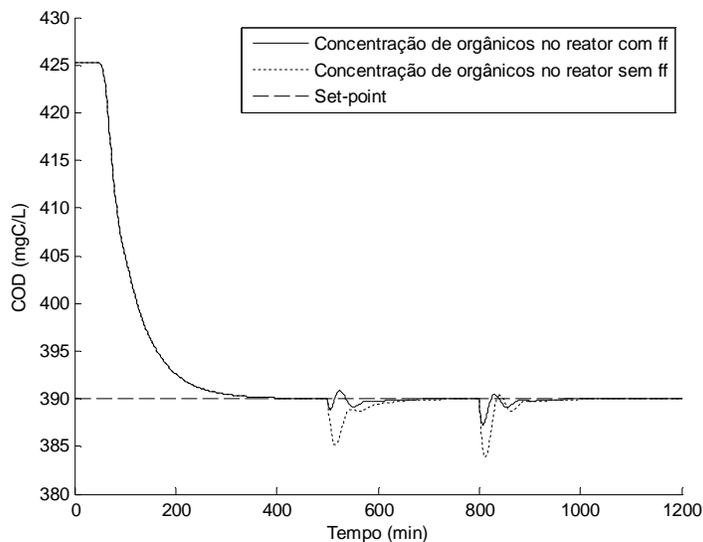


Figura 6.40: Efeito na variável controlada após o degrau nos distúrbios considerados

Os resultados obtidos mostraram que a ação antecipatória também funciona quando o desvio da corrente de alimentação se dá na direção oposta. Ao se aplicar os distúrbios de forma que a COD na saída do reator tende a diminuir, o controle faz com que se diminua a vazão da corrente de peróxido e, portanto, que a variável manipulada aumente e volte ao *set-point*.

Em outro cenário, buscou-se simular o efeito de várias alterações subsequentes nos valores das variáveis consideradas como distúrbio. Para a vazão de alimentação, aplicou-se um degrau de 1,0 para 0,8L/min após 500min de simulação, para 1,1L/min após 900min de simulação e para 0,9L/min após 1300min de simulação. Para a concentração da corrente de alimentação, aplicou-se um degrau de 450 para 470mgC/L após 700min de simulação, para

480mgC/L após 1100min de simulação e para 440mgC/L após 1500min de simulação. Essas alterações estão apresentadas na Figura 6.41 na forma gráfica e o efeito das mesmas, apresentados na Figura 6.42 e Figura 6.43.

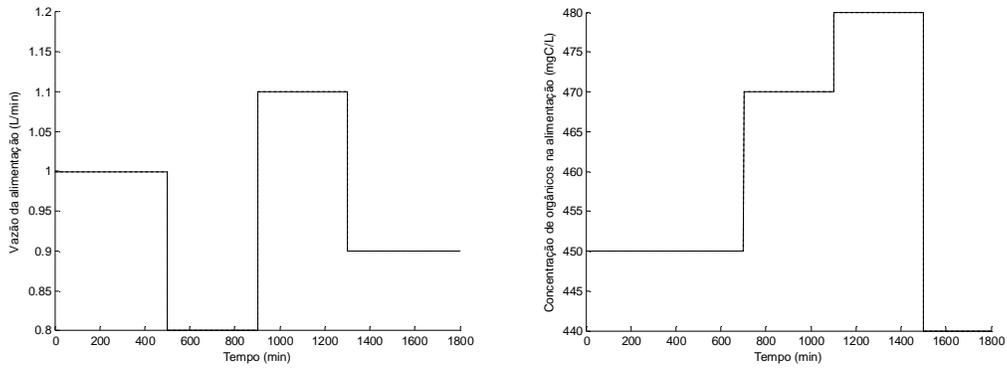


Figura 6.41: Degraus consecutivos na vazão e concentração da corrente de alimentação do reator

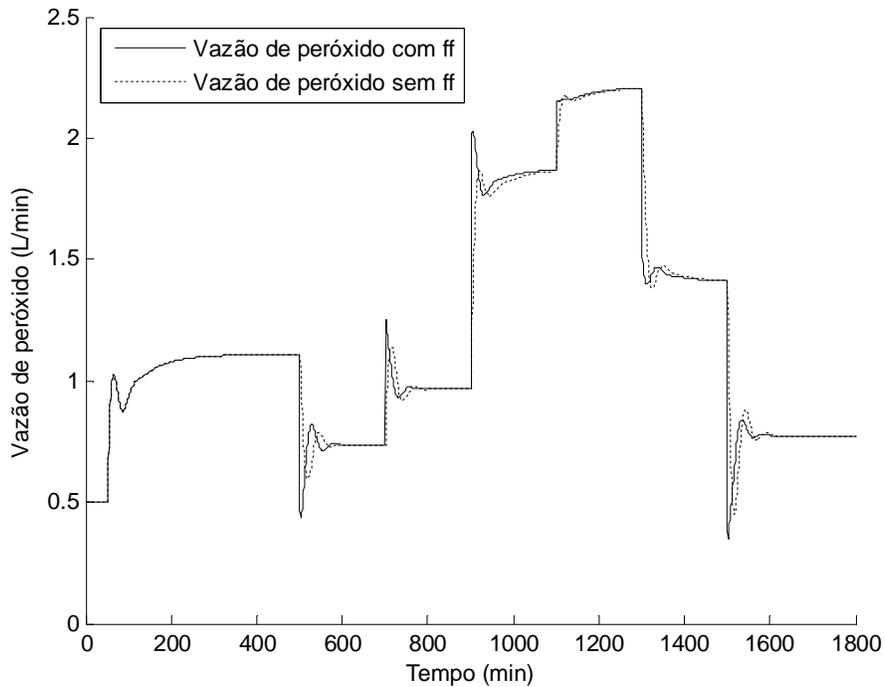


Figura 6.42: Alteração na variável manipulada após a aplicação de vários degraus consecutivos nos distúrbios

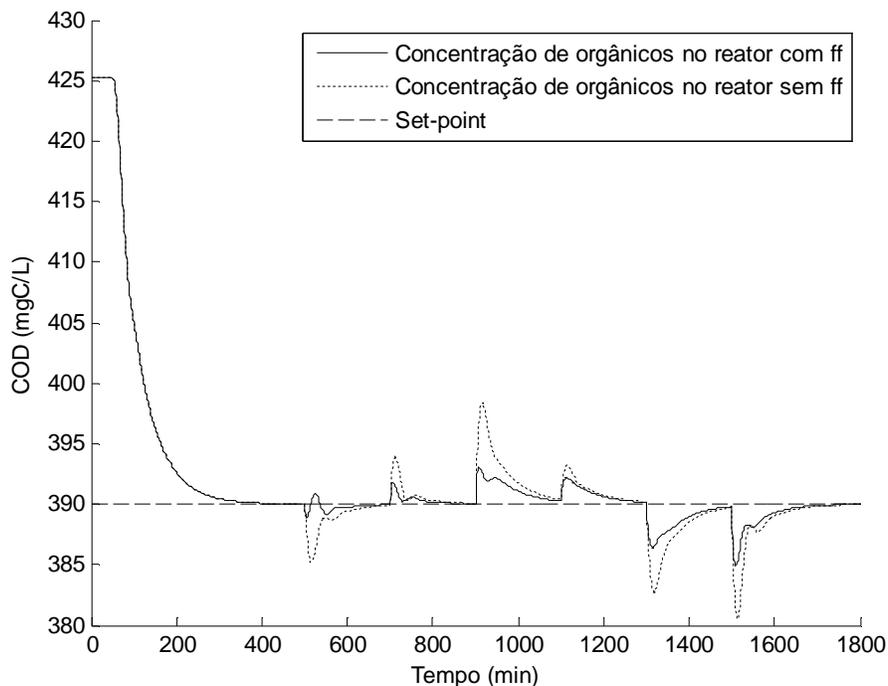


Figura 6.43: Efeito na variável controlada após a aplicação de vários degraus consecutivos nos distúrbios

Embora o controle antecipatório não anule o efeito dos distúrbios na variável controlada, ele faz com que os desvios da mesma em relação ao *set-point* sejam menores, melhorando assim a estabilidade do sistema. Em relação à variável manipulada, as alterações com esse controle são mais acentuadas e mais rápidas do que apenas com o controlador PI tradicional. Quando os distúrbios alteram o sistema na direção de piorar a reação, ou seja, aumentar a COD na saída do reator, a vazão de peróxido de hidrogênio é aumentada. Coerentemente, quando a situação é invertida, a ação de controle também muda de direção, fazendo com que a vazão desse reagente diminua, economizando assim essa corrente e mantendo a variável controlada no *set-point*.

6.2. Otimização

A otimização realizada neste estudo buscou minimizar o custo relacionado à variação nas variáveis manipuladas através do controle antecipatório. Segundo o relatório de tarifa média por classe de consumo retirado do site da ANEEL (2010), o custo médio da energia elétrica para uma classe industrial na região Sudeste é de R\$ 250,64/MWh. De acordo com a ICIS (2010), o valor médio de uma solução 35% de peróxido de hidrogênio, utilizada como base nas simulações realizadas, é 0,26US\$/lb. Com esses valores, é possível calcular o custo total da energia elétrica e do peróxido, e permitir que o controlador decida se a opção mais econômica seria ligar a lâmpada ou aumentar a vazão de peróxido para atingir o *set-point* da concentração de orgânicos.

Utilizando o reator com as condições iniciais fornecidas pela Tabela 6.2 (condição inicial I), as quais são as mesmas da simulação em malha aberta, mas com apenas uma lâmpada ligada, tem-se os resultados da otimização (Figuras 6.44 a 6.47) obtidos com o programa apresentado no Apêndice IV. As simulações foram feitas partindo-se do estado inicial do sistema, sem otimização.

Tabela 6.2: Condições iniciais de operação I do reator

COD (mgC/L)	450,0
Concentração de íons Fe (mg/L)	33,6
Vazão de alimentação (L/min)	1,0
Vazão de circulação (L/min)	4,0
Vazão de solução de peróxido (L/min)	0,5
Concentração de H ₂ O ₂ (g/L)	6,8
Volume total do reator (L)	26,0
Volume do reator solar (L)	10,0
Volume do reator tanque (L)	16,0
Intensidade da radiação solar (W/m ²)	500,0
Potência das lâmpadas (W)	250

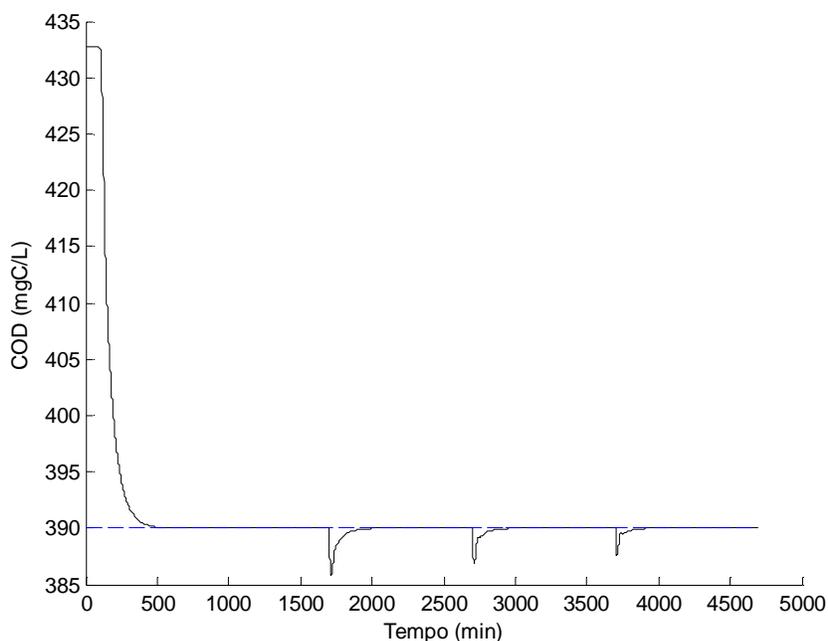


Figura 6.44: Gráfico da variação da COD para a condição inicial I da otimização.

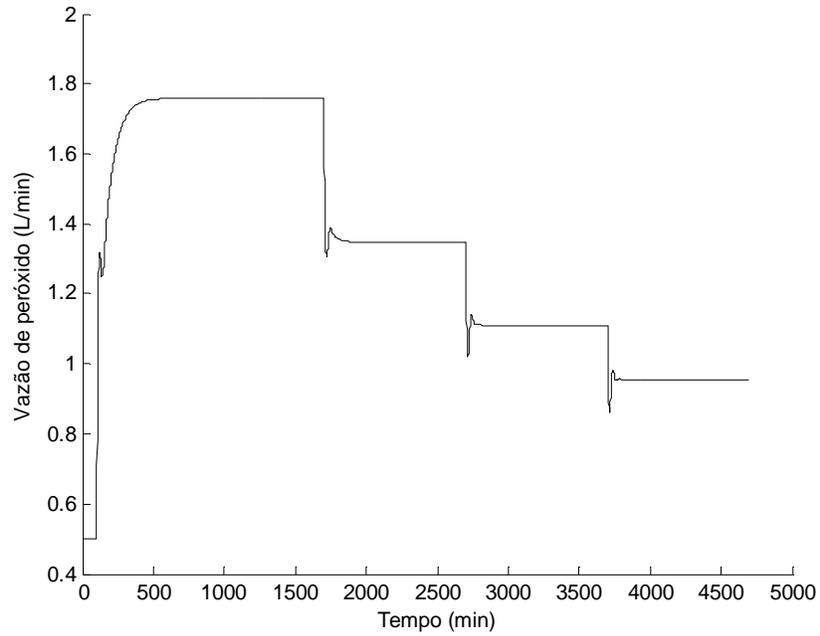


Figura 6.45: Gráfico da variação de peróxido para a condição inicial I da otimização.

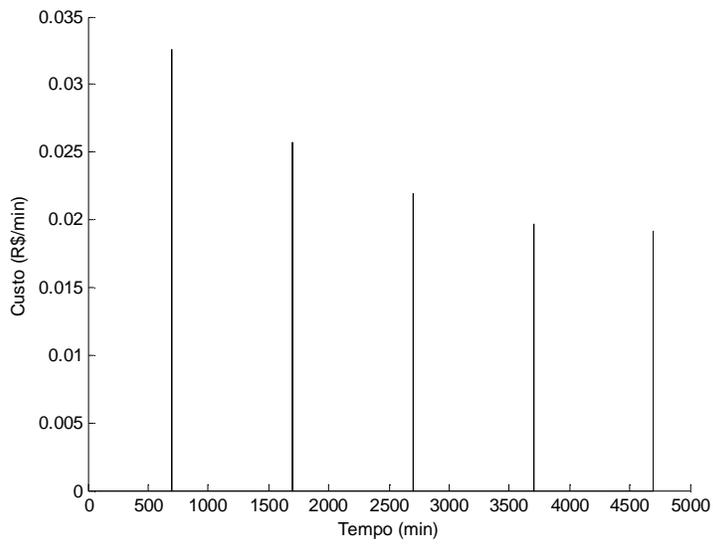


Figura 6.46: Gráfico da variação do custo para a condição inicial I da otimização.

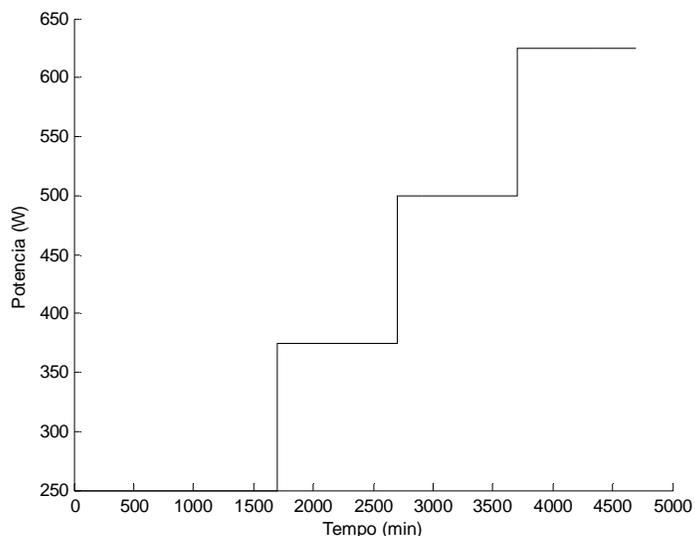


Figura 6.47: Gráfico da variação da potência para a condição inicial I da otimização.

Como mencionado anteriormente, o otimizador é implementado a cada 1000min para que o processo volte ao estado estacionário. Além disso, assumiu-se que apenas uma lâmpada era ligada ou desligada a cada vez que o otimizador era acionado. Nota-se que, como a energia elétrica possui um custo menor do que o peróxido de hidrogênio, a otimização leva o sistema a um maior número de lâmpadas ligadas e a uma menor quantidade de peróxido para manter a concentração de orgânicos dissolvidos no *set-point*. Para efeitos de comparação, foi realizada outra simulação, condição inicial II (Tabela 6.3), na qual a radiação solar é alta, o que provavelmente levará a uma maior quantidade de peróxido, uma vez que a radiação já está saturada. Os resultados obtidos são apresentados nas Figuras 6.48 a 6.51.

Tabela 6.3: Condições iniciais de operação II do reator

COD (mgC/L)	450,0
Concentração de íons Fe (mg/L)	33,6
Vazão de alimentação (L/min)	1,0
Vazão de circulação (L/min)	4,0
Vazão de solução de peróxido (L/min)	0,5
Concentração de H ₂ O ₂ (g/L)	6,8
Volume total do reator (L)	26,0
Volume do reator solar (L)	10,0
Volume do reator tanque (L)	16,0
Intensidade da radiação solar (W/m ²)	2000,0
Potência das lâmpadas (W)	500

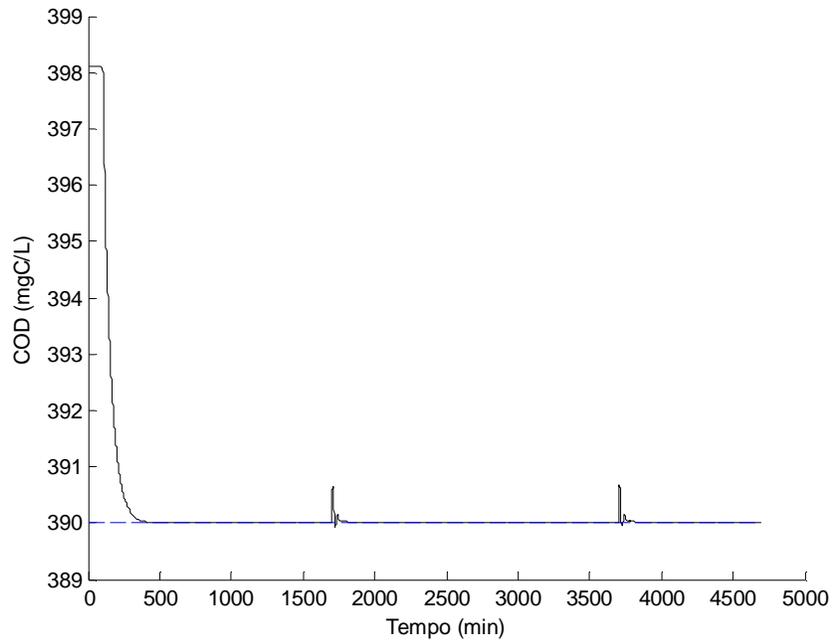


Figura 6.48: Gráfico da variação da COD para a condição inicial II da otimização.

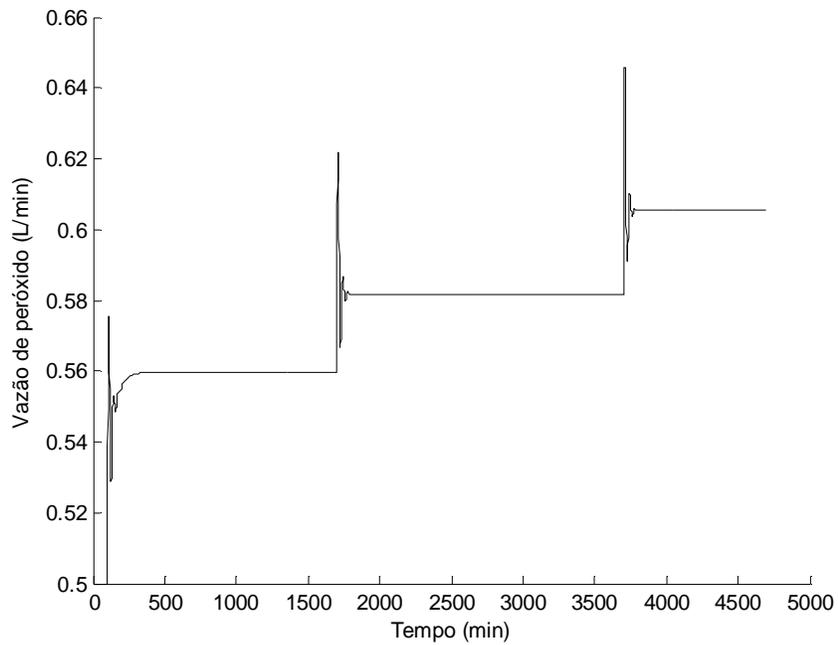


Figura 6.49: Gráfico da variação da vazão de peróxido para a condição inicial II da otimização.

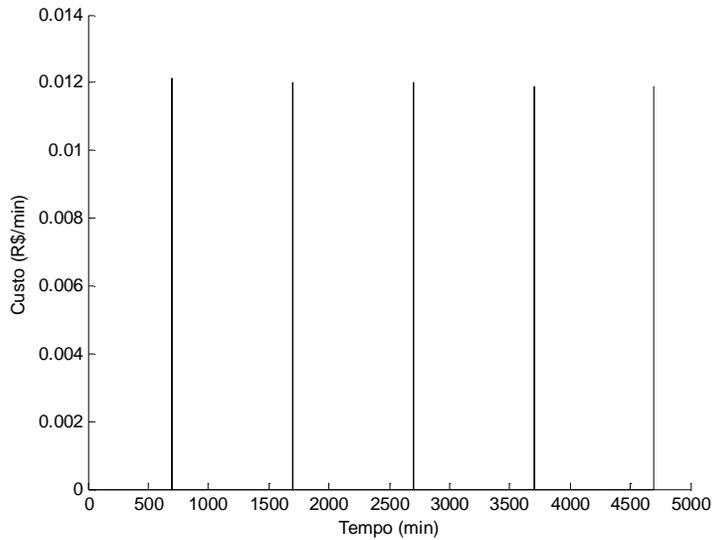


Figura 6.50: Gráfico da variação do custo para a condição inicial II da otimização.

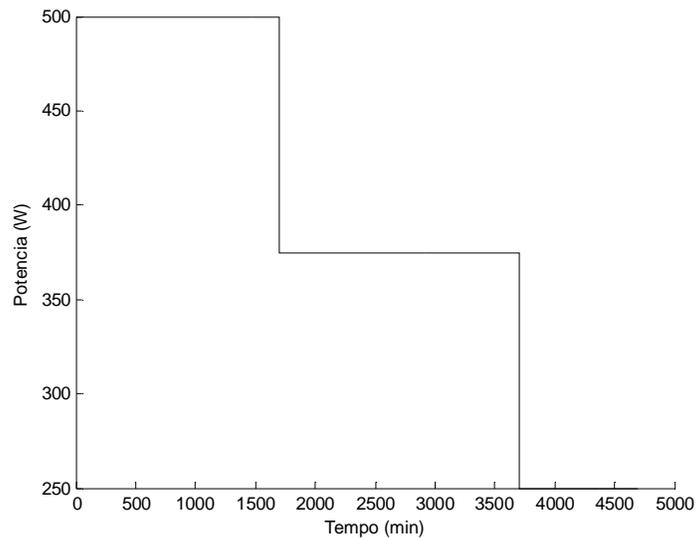


Figura 6.51: Gráfico da variação da potência para a condição inicial I da otimização.

Logo, conforme esperado, o número de lâmpadas ligadas diminuiu. Isso porque, como a radiação já é uma variável que está saturada no reator, o aumento dela não provoca uma diminuição na COD, causando apenas uma elevação nos custos. Por isso, o otimizador opta por deixar menos lâmpadas ligadas e adicionar mais peróxido de hidrogênio ao sistema.

Para as mesmas condições iniciais da I e com 4 lâmpadas ligadas, mas admitindo que o preço da energia elétrica é 10 vezes maior que a fornecida, é esperado que a preferência

pelas lâmpadas diminua. Esse fato foi verificado de acordo com os resultados mostrados nas Figuras 6.52 a 6.55.

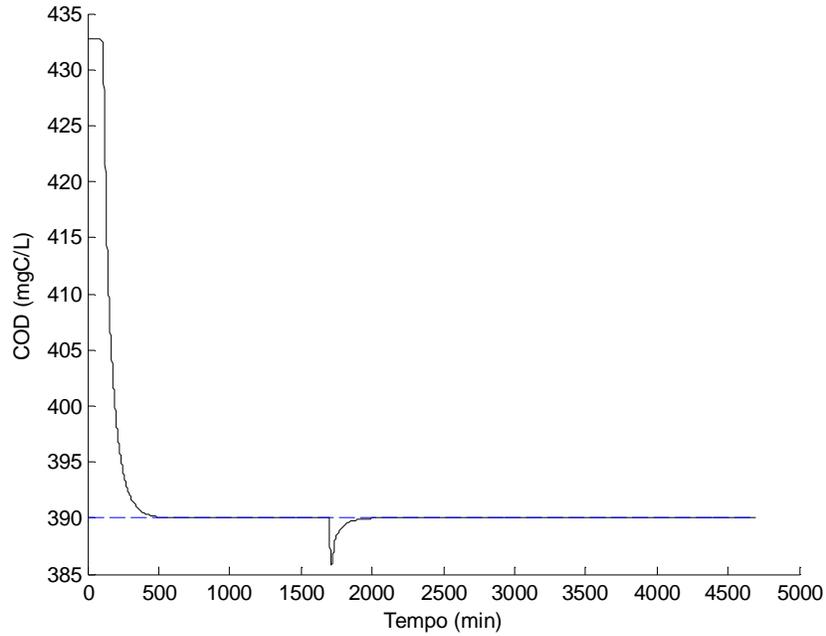


Figura 6.52: Gráfico da variação da COD para a condição inicial I da otimização com aumento do custo da energia elétrica

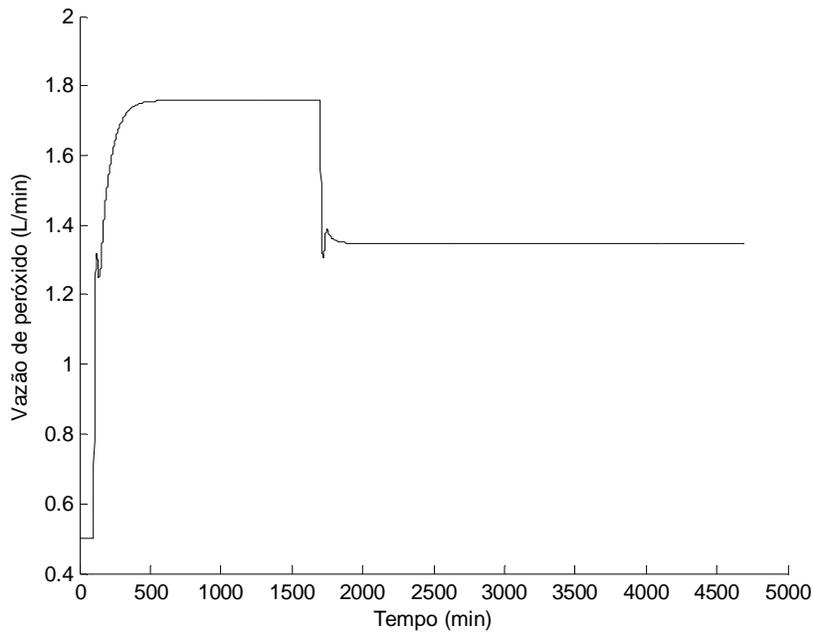


Figura 6.53: Gráfico da variação da vazão de peróxido para a condição inicial I da otimização com aumento do custo da energia elétrica

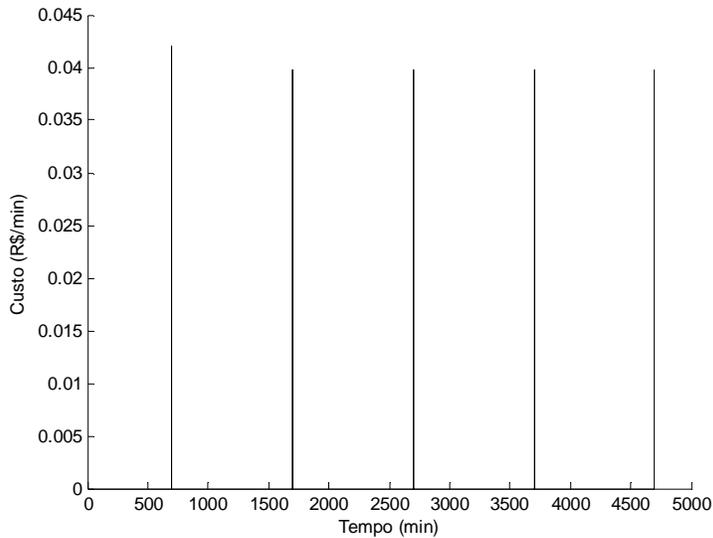


Figura 6.54: Gráfico da variação do custo para a condição inicial I da otimização com aumento do custo da energia elétrica

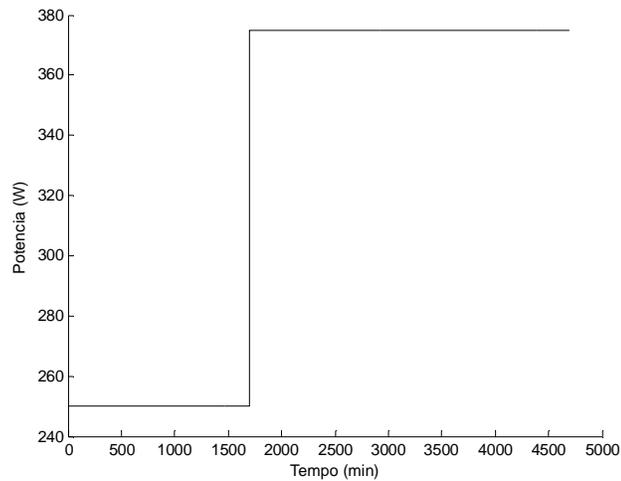


Figura 6.55: Gráfico da variação da potência para a condição inicial I da otimização com aumento do custo da energia elétrica

Pode-se notar que, diferentemente da condição I, a potência das lâmpadas não chega à máxima permitida, visto que o custo delas é muito alto.

6.3. Implementação de estratégias de controle avançado no reator

Para o caso do controle multivariado, foi definido que outra variável a ser manipulada seria o número de lâmpadas ligadas e, assim como no controle antecipatório, seria considerado o distúrbio na concentração e na vazão de orgânicos, além da radiação solar. Pelo fato dessa ser uma variável inteira, foi necessário simular o programa do MPC duas vezes:

uma não fixando a potência das lâmpadas, deixando-a livre para assumir qualquer valor dentro dos limites impostos, e a outra aproximando a potência para o número inteiro de lâmpadas correspondente à potência mais próxima obtida na primeira simulação.

O modelo foi desenvolvido com base em Odloak (2010) e nos modelos apresentados anteriormente. Além da rotina principal (*Modelo_TCC*), foram utilizadas funções auxiliares – a rotina *MPC_TCC* faz o desenvolvimento dos cálculos considerados nessa estratégia; a rotina *Reator* age como simulador das condições reais da planta; e a rotina *Fkalmán* é utilizada para se determinar o ganho do observador. Inicialmente, foi realizada uma simulação prévia em malha aberta para determinar o estado estacionário do modelo, a partir do qual deveriam ser realizadas as demais simulações. O modelo de MPC utilizado após esse ajuste é apresentado no Apêndice V.

Assim como no caso do controle antecipatório, foi necessário determinar as funções de transferência do processo para cada uma das variáveis consideradas, analogamente ao modo como foi feito no item 6.1.3 para a variável manipulada (vazão de solução de peróxido de hidrogênio). Como no caso do MPC não foi necessário acrescentar um valor de tempo morto para definição dos parâmetros, as funções de transferência foram alteradas. Os resultados para cada variável, encontram-se a seguir:

- Vazão de peróxido de hidrogênio (q_3 , L/min)

$$G_{u1}(s) = \frac{COD(s)}{q_3(s)} = \frac{-49,606}{32s + 1}$$

- Potência das lâmpadas (*potencia*, W)

$$G_{u2}(s) = \frac{COD(s)}{potencia(s)} = \frac{-0,034}{29s + 1}$$

- Vazão de alimentação da corrente de entrada (q_0 , L/min)

$$G_{d1}(s) = \frac{COD(s)}{q_0(s)} = \frac{21,733}{17s + 1}$$

- Concentração de matéria orgânica na corrente de alimentação (CA_0 , mgC/L)

$$G_{d2}(s) = \frac{COD(s)}{CA_0(s)} = \frac{0,916}{24s + 1}$$

- Radiação solar (*radsol*, W/m²)

$$G_{d3}(s) = \frac{COD(s)}{radsol(s)} = \frac{-0,01786}{23s + 1}$$

As condições iniciais do reator foram as mesmas consideradas na simulação da malha aberta (Tabela 6.1) e os parâmetros necessários para o MPC estão apresentados na Tabela 6.4:

Tabela 6.4: Parâmetros para o MPC

Número de variáveis controladas	2
Número de variáveis controladas	1
Tempo de amostragem (min)	1
Horizonte de predição da saída	50
Horizonte da entrada	1
Tempo de simulação (min)	1000/1500
Peso da saída	1
Peso da vazão de peróxido	1
Peso da potência das lâmpadas	10
Valor máximo da vazão de peróxido (L/min)	10,0
Valor mínimo da vazão de peróxido (L/min)	0,0
Valor máximo da potência das lâmpadas (W)	625
Valor mínimo da potência das lâmpadas (W)	0
Máximo valor de variação da vazão de peróxido (L/min)	0,1
Máximo valor da variação da potência das lâmpadas (W)	125

Para verificar se houve uma melhora da resposta do controlador multivariado em relação ao antecipatório foram aplicados degraus nos distúrbios da vazão e concentração da alimentação. Além disso, para observar o efeito de uma variação na radiação solar com o controlador MPC, foi colocado também um degrau nesta variável, sendo esperado que a quantidade de lâmpadas acesas diminuísse.

6.3.1. Influência da vazão de alimentação

Para verificar a influência da vazão de alimentação, foi feita uma variação desta de 1,0L/min para 1,5L/min. Após a segunda simulação obteve-se os seguintes resultados (Figuras 6.56 a 6.58):

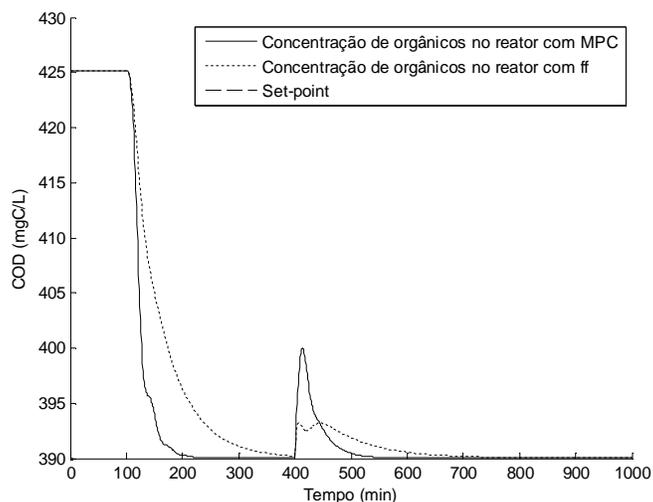


Figura 6.56: Gráfico da variação de COD com MPC e distúrbio na vazão de alimentação

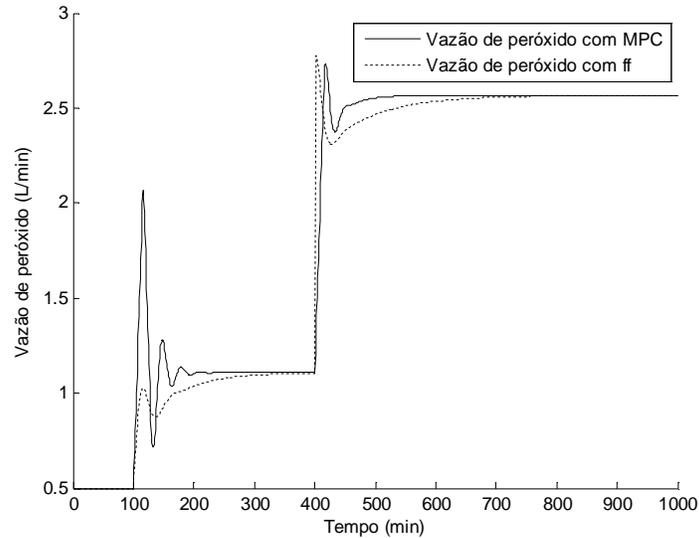


Figura 6.57: Gráfico da variação da vazão de peróxido com MPC e distúrbio na vazão de alimentação

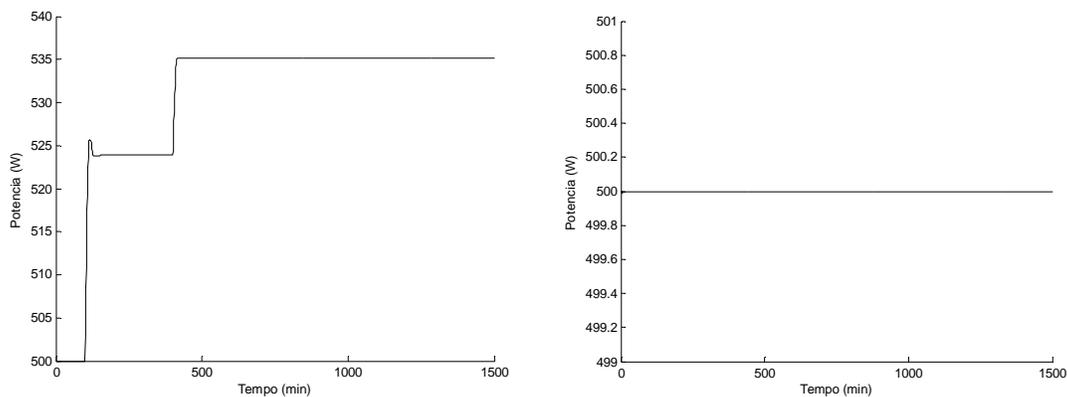


Figura 6.58: Gráfico da variação da potência com MPC e distúrbio na vazão de alimentação

O efeito sobre a COD com o distúrbio na vazão de alimentação no caso do controlador MPC, apesar de apresentar um pico maior que no caso antecipatório, chega ao *set-point* cerca de 200min antes. A primeira variável manipulada, vazão de peróxido, também fica estável mais rapidamente e a segunda manipulada, potência das lâmpadas, na primeira simulação, em que não se considera a potência como múltipla de 125W (potência de cada lâmpada), ela aumenta, mas não o suficiente para que na segunda simulação, na qual se considera a multiplicidade, chegue ao próximo número de lâmpadas ligadas (5, totalizando 625W).

6.3.2. Influência da concentração da corrente de alimentação

No caso de um distúrbio na concentração da corrente de alimentação, foi aplicado o mesmo degrau utilizado no caso do controle antecipatório (de 450mgC/L para 470mgC/L), obtendo-se os gráficos apresentados nas Figuras 6.59 a 6.61.

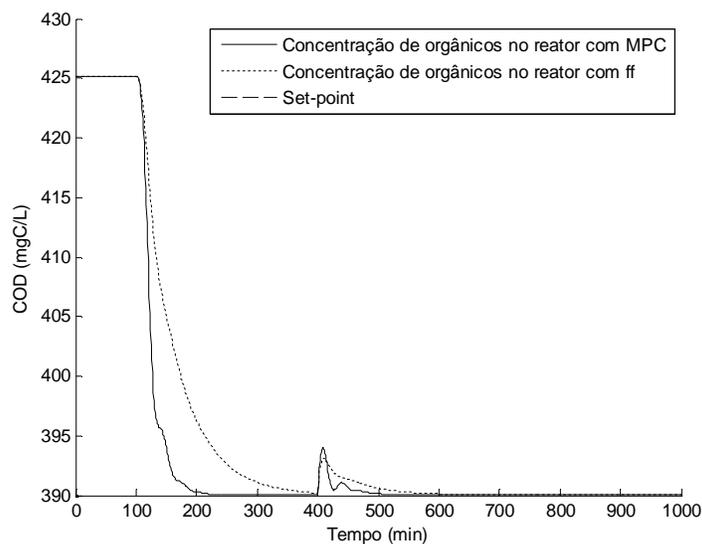


Figura 6.59: Gráfico da variação da COD com MPC e distúrbio na concentração de alimentação

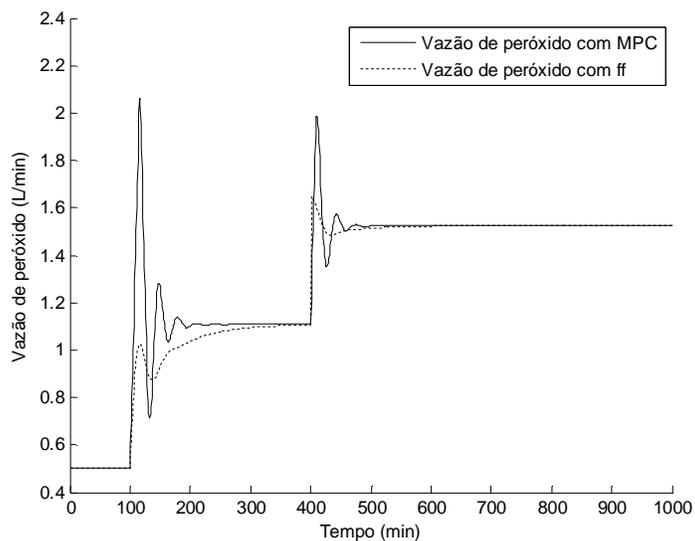


Figura 6.60: Gráfico da variação da vazão de peróxido com MPC e distúrbio na concentração de alimentação

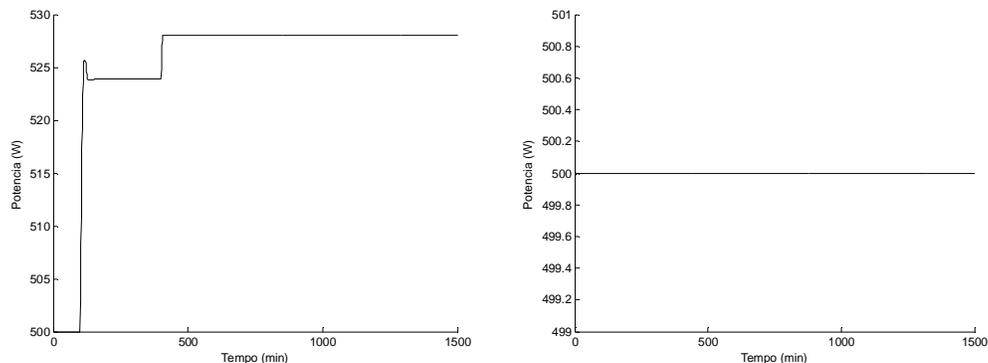


Figura 6.61: Gráfico da variação da potência com MPC e distúrbio na concentração de alimentação

Neste caso, apesar de a concentração de orgânicos no reator ir para o *set-point* mais rapidamente que no caso do antecipatório, não houve melhora significativa para a manipulada, existindo ainda uma maior oscilação. Como ocorrido anteriormente, a potência das lâmpadas na primeira simulação também aumentou, já que existe uma maior quantidade de orgânicos para ser degradada. No entanto, esse aumento não foi suficiente para aumentar para 5 lâmpadas acesas.

6.3.3. Variação da vazão e da concentração de orgânicos em uma mesma simulação

Assim como realizado no controle antecipatório, foi feita uma simulação para verificar o comportamento do sistema quando a tendência é diminuir a COD na saída do reator. Para tanto, foram aplicados os mesmos degraus, um na vazão de alimentação de 1,0 para 0,8L/min após 400min de simulação e um degrau na concentração da corrente de alimentação de 450 para 420mgC/L após 600min de simulação. Os resultados são apresentados nas Figuras 6.62 a 6.64 abaixo.

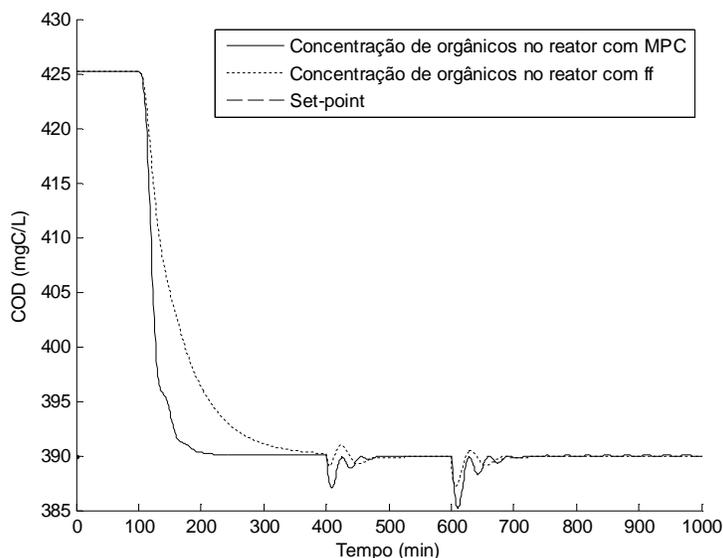


Figura 6.62: Efeito na COD após o degrau nos distúrbios considerados

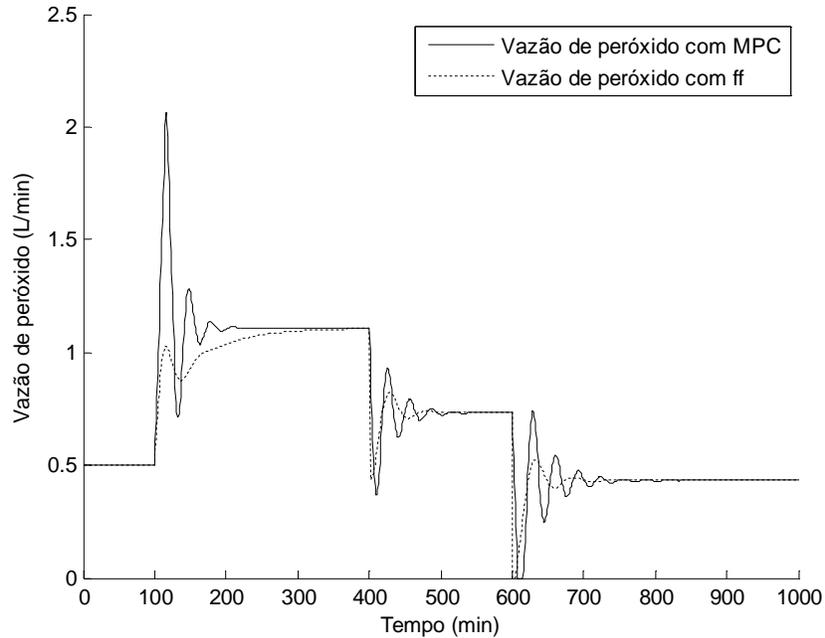


Figura 6.63: Alteração na vazão de peróxido (variável manipulada) após o degrau nos distúrbios considerados

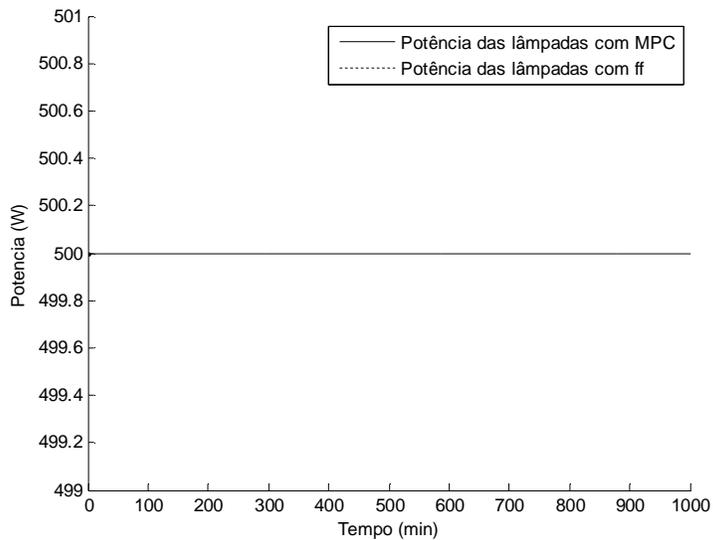


Figura 6.64: Alteração na vazão de peróxido (variável manipulada) após o degrau nos distúrbios considerados

Os resultados obtidos mostraram que, para uma diminuição nos valores dos distúrbios, o controlador MPC apresenta uma maior oscilação do que no caso do controlador antecipatório. Isso mostra que neste caso o MPC não apresenta melhoras significativas no controle do sistema.

Em outro caso, buscou-se verificar o efeito quando o distúrbio é grande a ponto de requisitar que uma lâmpada seja acesa. Para isso, aplicou-se um degrau na vazão de

alimentação de 1,0 para 1,8L/min após 400min de simulação, e de 450 para 500mgC/L após 800min de simulação. Essas alterações estão apresentadas na forma gráfica e o efeito das mesmas, apresentados abaixo (Figuras 6.65 a 6.67):

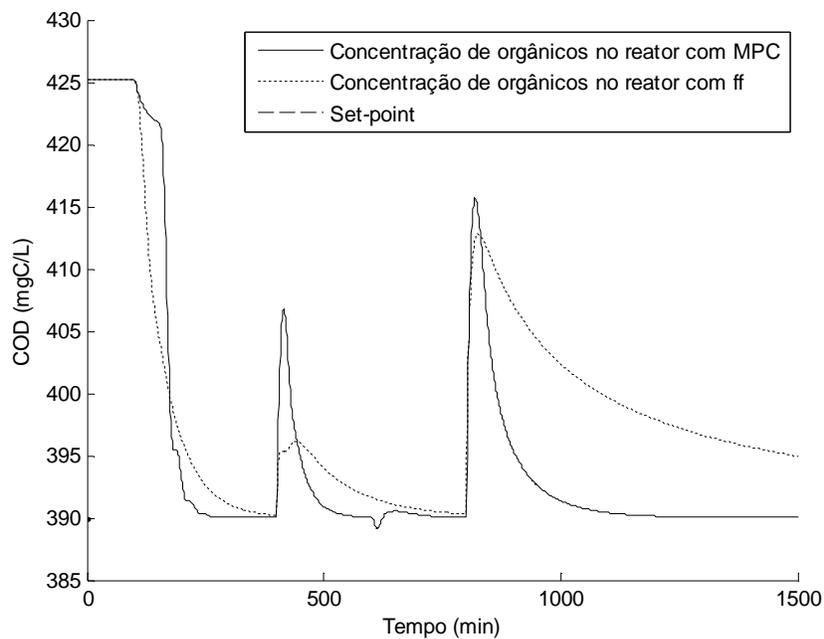


Figura 6.65: Efeito da COD após a aplicação de degraus maiores consecutivos nos distúrbios

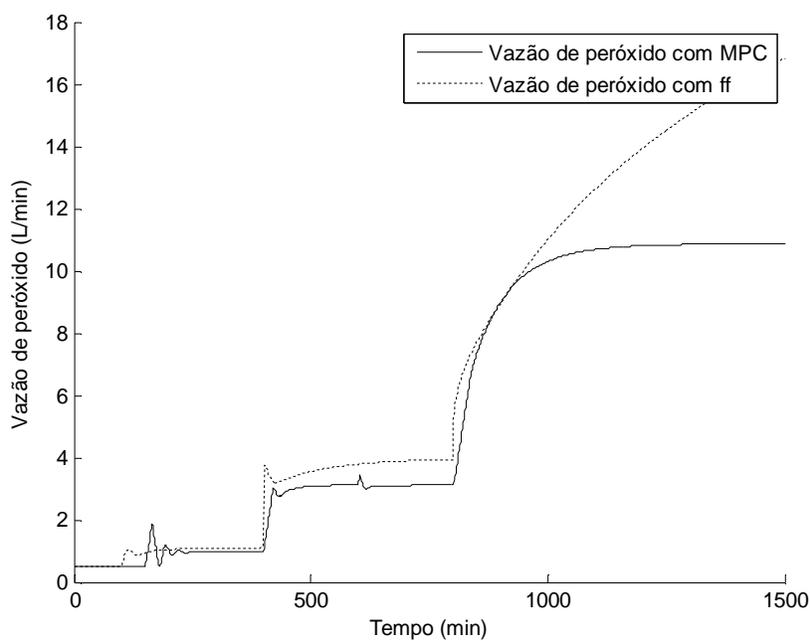


Figura 6.66: Alteração da vazão de peróxido (manipulada) após a aplicação de degraus maiores consecutivos nos distúrbios

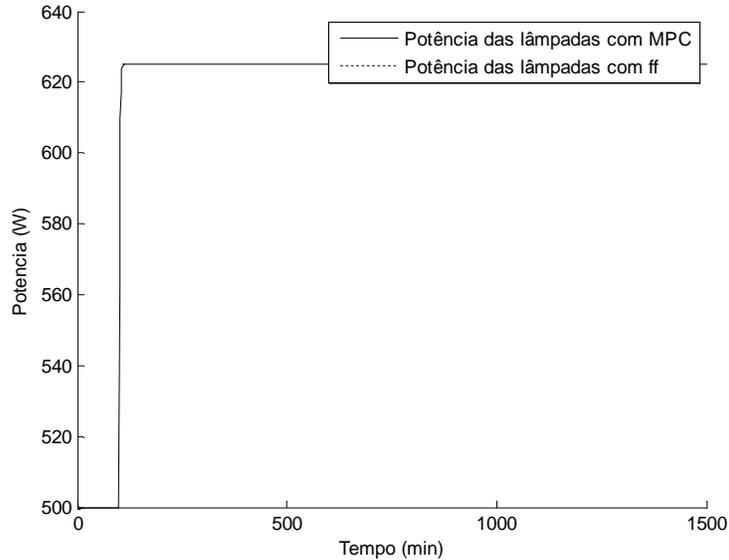


Figura 6.67: Alteração da potência das lâmpadas (manipulada) após a aplicação de degraus maiores consecutivos nos distúrbios

Nesta situação foi possível observar uma grande vantagem na implementação do controle multivariado, pois nota-se que o aumento da potência das lâmpadas fez com que a COD fosse para o *set-point*, o que não foi possível para o caso do controle antecipatório no tempo de simulação determinado. Como neste a potência das lâmpadas não é uma variável possível de manipular, ele precisa fazer a COD retornar ao *set-point* manipulando apenas a vazão de peróxido, o que torna o controle mais lento. Além disso, o caso do antecipatório requer uma vazão de peróxido quase duas vezes maior que no caso do MPC, o que aumenta os custos operacionais do reator, conclusão que pode ser comprovada pela otimização feita anteriormente.

6.3.4. Variação na radiação solar

Para observar o comportamento do controlador ao se variar outro distúrbio, um degrau de 500W/m^2 para 700W/m^2 foi aplicado na radiação solar. Como foi concluído a partir dos resultados em malha aberta, o efeito deste distúrbio é pequeno se comparado às outras variáveis e por isso não foi incluído no controle antecipatório. Desse modo, não haverá a comparação entre os dois controladores. Como existe um aumento da radiação, é esperado que uma das variáveis manipuladas diminua.

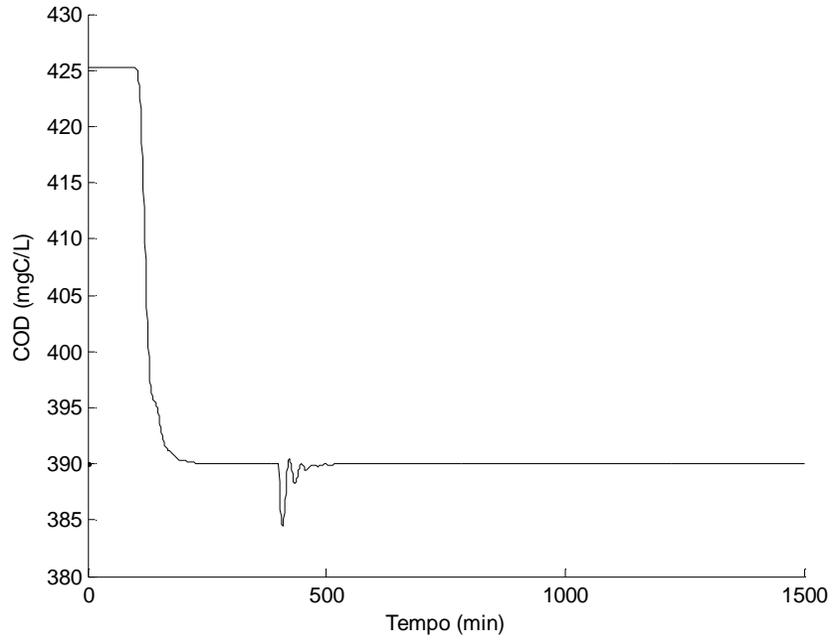


Figura 6.68: Efeito na COD após o degraú na radiação solar

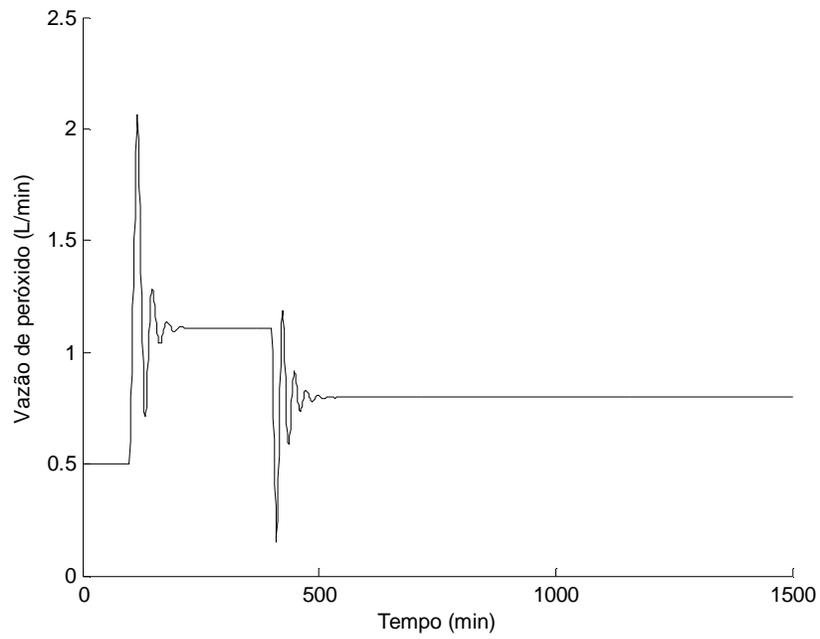


Figura 6.69: Alteração da vazão de peróxido após degraú na radiação solar

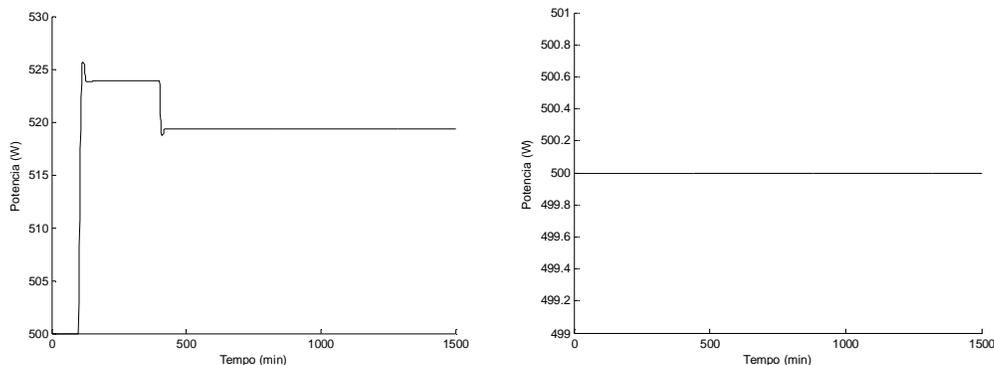


Figura 6.70: Gráfico da variação da potência com MPC após degrau na radiação solar. Primeira simulação (à esquerda) e segunda simulação (à direita)

]

O controlador respondeu satisfatoriamente ao distúrbio na radiação solar, havendo pouca oscilação na COD e voltando rapidamente ao *set-point*. Observa-se pela primeira simulação que houve uma tentativa do controlador de diminuir a potência das lâmpadas, mas como isso não foi suficiente para desligar uma lâmpada, houve uma diminuição da vazão de peróxido.

6.3.5. Variação nos parâmetros do controlador MPC

Alguns parâmetros do controlador podem influenciar bruscamente na resposta do controlador. Para observar tal efeito, foram variados o horizonte de entrada (m), horizonte de previsão de saída (p) e os pesos relativos das variáveis manipuladas (r), conforme Tabela 6.5. Foram consideradas as mesmas condições iniciais e o mesmo degrau aplicado anteriormente para a vazão de alimentação (de 1,0L/min para 1,5L/min).

Tabela 6.5: Novos parâmetros para o MPC

Horizonte de previsão da saída	100
Horizonte da entrada	5
Peso da saída	1
Peso da vazão de peróxido	10^4
Peso da potência das lâmpadas	0,1

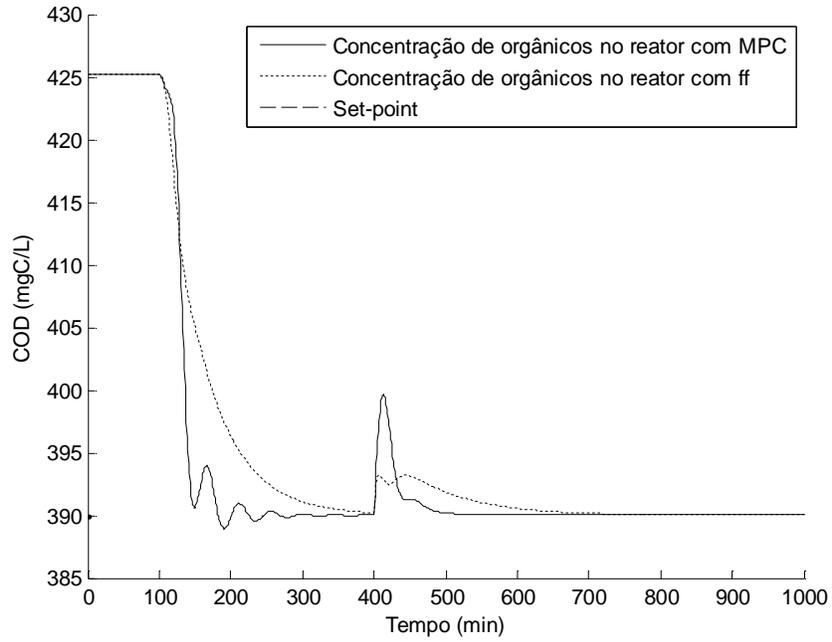


Figura 6.71: Gráfico da variação da COD com uma variação na vazão de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC

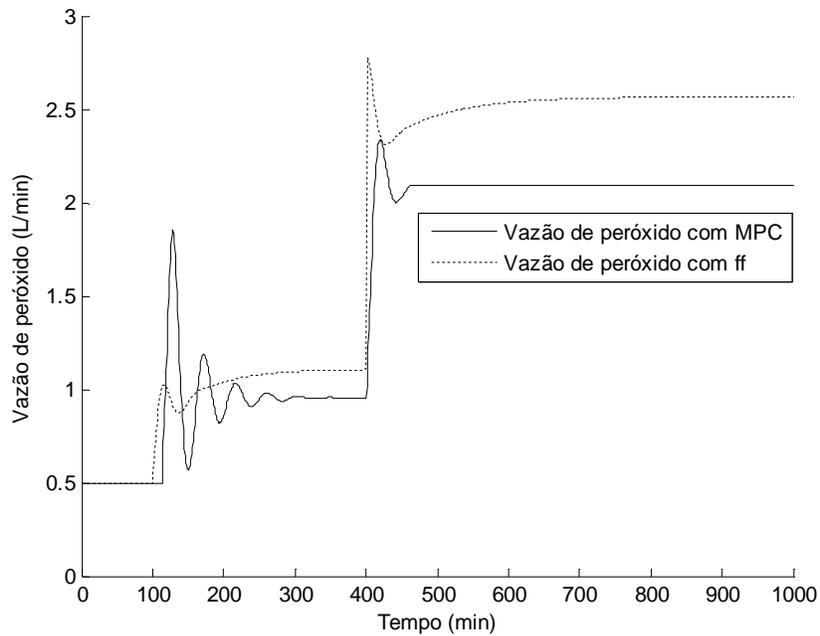


Figura 6.72: Gráfico da variação da vazão de peróxido com uma variação na vazão de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC

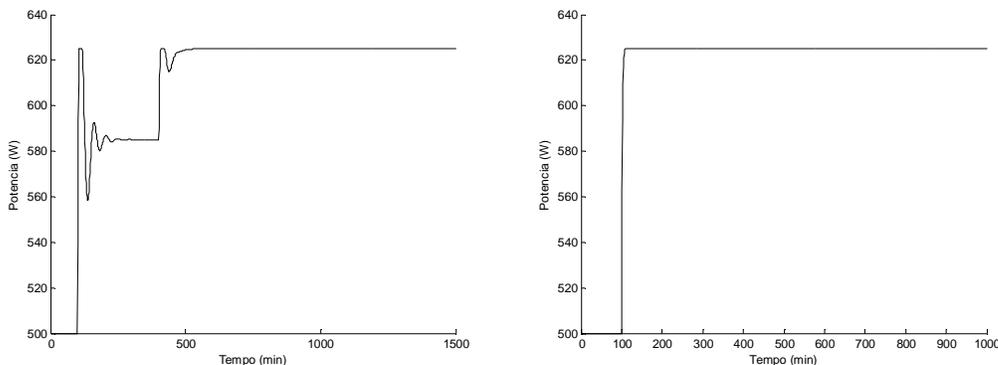


Figura 6.73: Gráfico da variação da potência com uma variação na vazão de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC. Primeira simulação (à esquerda) e segunda simulação (à direita)

A partir dos resultados observados nas Figuras 6.71 a 6.73, verificou-se que o controlador procurou aumentar a potência das lâmpadas o máximo possível. Como, mesmo atingindo esse máximo a COD na saída do reator não atingiu o valor desejado, foi necessário aumentar também a vazão de peróxido, atingindo assim o *set-point*.

Em comparação com os parâmetros anteriores (item 6.3.1), houve uma maior oscilação das variáveis. Em contrapartida, com relação à variável controlada, a COD atingiu o *set-point* mais rapidamente. Considerando-se as variáveis manipuladas, foi possível atingir o estado estacionário com uma menor vazão de peróxido, mantendo um maior número de lâmpadas acesas, o que traz uma vantagem econômica, de acordo com a análise do item 6.2.

Também foi aplicado um degrau na concentração de entrada (450mgC/L para 470mgC/L), utilizando os mesmos parâmetros apresentados na Tabela 6.5. As Figuras 6.74 a 6.76 a seguir mostram os resultados obtidos.

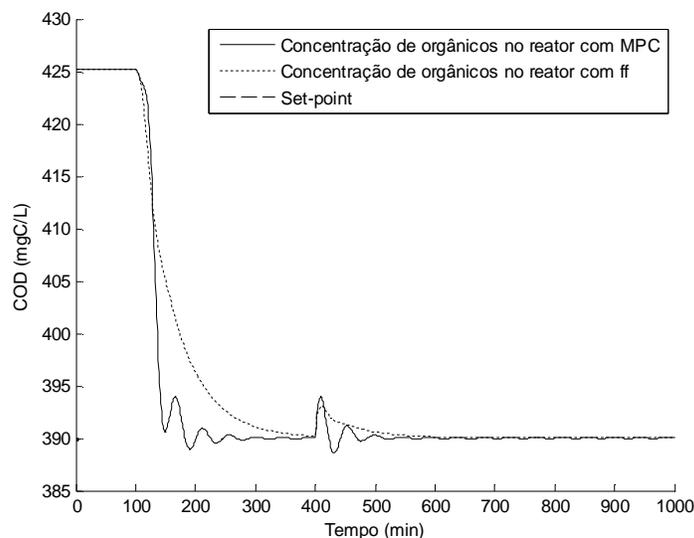


Figura 6.74: Gráfico da variação da COD com uma variação na concentração de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC

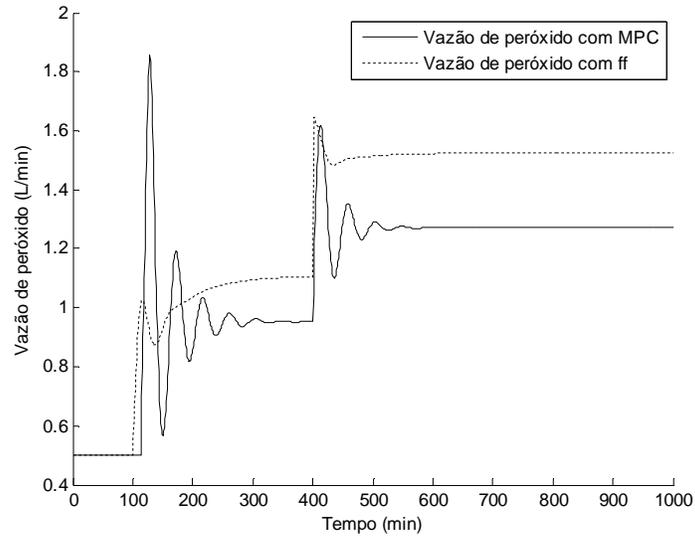


Figura 6.75: Gráfico da variação da vazão de peróxido com uma variação na concentração de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC

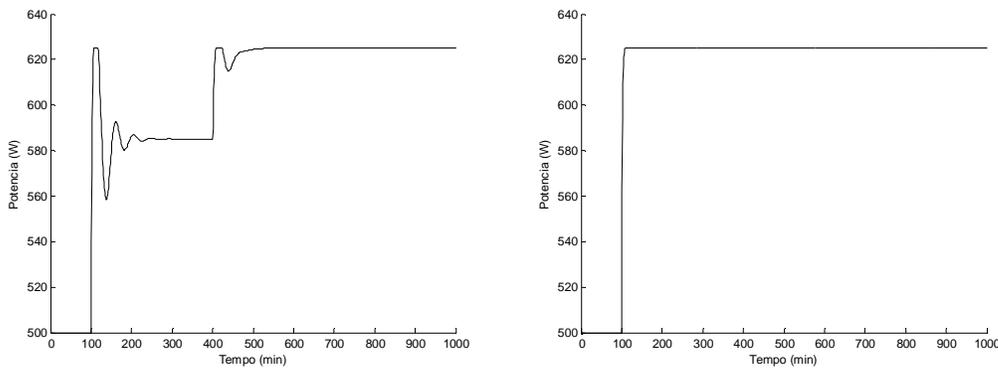


Figura 6.76: Gráfico da variação da potência com uma variação na concentração de alimentação e mudança dos parâmetros do MPC

A mudança nos parâmetros do MPC ocasionou alterações semelhantes às anteriores para o degrau na concentração de alimentação. Foi observado o aumento das oscilações nas variáveis, a diminuição da vazão de peróxido em detrimento do aumento do número de lâmpadas acesas. Entretanto, houve uma menor diferença no tempo de resposta da variável controlada em relação aos parâmetros iniciais.

Essas simulações mostram que, alterando-se os parâmetros do modelo MPC, é possível direcionar o sistema para determinadas ações de controle, como por exemplo priorizar a alteração de uma variável manipulada em detrimento de outras. No caso acima, foi interessante adotar um peso maior para a variável que representa maior custo operacional, implementando assim, no próprio MPC, uma forma de considerar critérios econômicos.

7. CONCLUSÕES

O modelo para o controle do reator solar híbrido elaborado com base no estudo de Ribeiro (2009) mostrou-se adequado para a simulação em MatLab[®] do processo de degradação de matéria orgânica. Em malha aberta, foi possível analisar a influência das condições de operação e definir a vazão de solução de peróxido de hidrogênio como sendo a variável manipulada para o controle da concentração de carbono dissolvido (COD) na saída do reator. Os possíveis distúrbios verificados foram a vazão e concentração de COD na corrente de alimentação, a concentração de peróxido de hidrogênio e de íons de Fe utilizada, e a intensidade luminosa (radiação solar e potência das lâmpadas). Através da aplicação de um degrau unitário na variável manipulada foi possível obter a curva de resposta do processo (em termos de COD) e, assim, determinar os parâmetros que caracterizam o sistema, considerado de primeira ordem com tempo morto. Como a constante de tempo encontrada foi significativa, o processo analisado apresenta dinâmica lenta.

Foi proposta a malha em *feedback* com um controlador proporcional-integral (PI), cujos parâmetros foram determinados pelo método de Ziegler & Nichols. Através de uma discretização da variável manipulada, modificou-se o modelo em malha aberta para simular o processo com o controlador (malha fechada). A partir daí, foram analisadas situações diversas para se analisar os efeitos dos possíveis distúrbios. Verificou-se que as perturbações mais críticas seriam aquelas relacionadas à corrente de alimentação. Entretanto, para todos os casos avaliados, o controlador funcionou de maneira adequada. Portanto, a estratégia de controle adotada foi suficiente para manter a variável controlada nas condições desejadas, o que traz grandes ganhos para uma operação real, como por exemplo a maior eficiência do processo e a redução do uso de reagentes.

A melhoria da estratégia de controle clássico adotada foi a implementação de uma ação antecipatória para a vazão e a concentração da corrente de alimentação, as quais foram os principais distúrbios encontrados. O controle antecipatório não anulou o efeito desses distúrbios na variável controlada; entretanto, os desvios da mesma em relação ao *set-point* foram menores. A modificação da variável manipulada foi mais acentuada e mais rápida do que apenas com o controlador PI tradicional, e buscou a direção certa (aumento ou diminuição) para que a COD na saída do reator mantivesse o valor desejado, administrando assim a quantidade necessária desse reagente (peróxido de hidrogênio).

Além das estratégias de controle mencionadas, também foi realizada uma minimização do custo operacional, em relação à energia elétrica consumida pelas lâmpadas e à solução de peróxido de hidrogênio, mantendo a COD no *set-point*. Conforme esperado, já que o custo da solução de peróxido é maior, o otimizador optou por aumentar o número de lâmpadas acesas quando possível, evitando assim aumentar a vazão de peróxido.

Com a implementação do controle preditivo, houve uma melhora no tempo de resposta do sistema, chegando-se mais rapidamente ao *set-point*, principalmente quando o distúrbio é na vazão de alimentação. Além disso, para grandes perturbações, o controlador faz uso da outra variável manipulada (potência das lâmpadas), de modo que a COD volte ao *set-point* mais facilmente, o que não é possível no controle clássico. Nota-se ainda a importância da escolha dos parâmetros de simulação do MPC, os quais exercem influência significativa na

resposta do controlador. Essa escolha pode ainda ser feita de modo a considerar outros critérios e restrições, como por exemplo priorizar ações mais econômicas.

Finalmente, verificou-se que o uso de estratégias de controle no processo de degradação de matéria orgânica no reator considerado é satisfatório e pode trazer vantagens significativas para esse sistema. As simulações mostraram que o controle é adequado mesmo quando diversas variáveis envolvidas são perturbadas. Além de permitir que a corrente de saída do reator atenda à especificação desejada (com relação à concentração de COD) sem a necessidade de um operador em tempo integral, há a administração do uso dos reagentes e de energia elétrica, de modo a reduzir custos e evitar desperdícios.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANEEL (Agência Nacional de Energia Elétrica). Disponível em: <<http://www.aneel.gov.br>>. Acesso em 18 mai 2010.
- ATLAS BRASILEIRO DE ENERGIA SOLAR. Enio Bueno Pereira; Fernando Ramos Martins; Samuel Luna de Abreu e Ricardo Rütther. – São José dos Campos: INPE, 2006
- Galvez, J. B.; Rodriguez, S. M. *Solar Detoxification*. UNESCO, 2003.
- ICIS (*Chemical Industry News & Intelligence*). *Price Reports*. Disponível em: <<http://www.icis.com.br>>. Acesso em 19 mai 2010.
- Odloak, D. *Notas de aula – PQI2407 - Controle de Processos Químicos*. Departamento de Engenharia Química, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2009.
- Odloak, D. *Notas de aula – PQI2530 - Controle Avançado de Processos*. Departamento de Engenharia Química, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2010.
- Ribeiro, K. *Estudo experimental e modelagem matemática de reator solar híbrido para degradação de fenol em solução aquosa pelo processo foto-Fenton*. Tese de doutorado. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.
- Seborg, D. E.; Edgar, T. F.; Mellichamp, D. A. *Process Dynamics and Control*. John Wiley & Sons, 1989.

APÊNDICES

Apêndice I: Simulação em MatLab® para o reator em malha aberta

```

%Simulação dinâmica simplificada do reator fotoquímico
clear all
close all

% Parâmetros
MMC=12; % Massa molar do carbono, mg/mmol
MMH2O2=34; % Massa molar do H2O2, mg/mmol
MMFE=56; % Massa molar do ferro, mg/mmol

% Dados Iniciais da Simulação
Tsim=1000; % Tempo de simulação, min
Texp=150; % Tempo de experimento, min
Dt=0.1; % Passo de integração, min
h=1.0; % Período de impressão

% Carbono orgânico
CA0=450; % Concentração da alimentação de orgânicos, mg C/L
CAss=CA0; % Concentração inicial de orgânicos, mg C/L

% Ferro
FE=0.6; % Concentração de íons Fe, mM
CFE=FE*MMFE; % Concentração de íons Fe, mg/L

% Vazões e volumes
q0=1; % Vazão de Alimentação, L/min
q2=4; % Vazão de circulação, L/min
q3=0.5; % Vazão de solução de peróxido, L/min
V=26; % Volume do reator, L
S=10; %Volume do reator solar L
Lamp=16; % Volume do reator tanque, L

% Peróxido
H2O2=200; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no reator, mmol/L
CH2O2ent=H2O2*MMH2O2/1000; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no
reator, g/L
H2O2ent=H2O2*V/Texp; % Vazão molar de H2O2, mmol/min

% Parâmetros utilizados para o cálculo da taxa de reação
kr=8; % Constante de velocidade da reação, mg/L.min
% Expoentes das concentrações de "reagentes"
n1=1.7;
n2=1.2;
n3=1.6;
n4=1.2;
% Outros
radsol=500; % Radiação solar, W/m²
potencia=500; % Potência das lâmpadas, W
Tau_S=round(S/q2); % Atraso de transporte no Reator Solar, min
N=Tau_S+1;

% valores máximos e mínimos e normalização dos parâmetros de cálculo da taxa de
reação
CAmax=559.6; % Concentração máxima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CAmin=0; % Concentração mínima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CFEmax=280; % Concentração máxima de íons Fe no reator, mg/L
CFEmin=11.2; % Concentração mínima de íons Fe no reator, mg/L
CH2O2max=30.6; % Concentração máxima de H2O2 no reator, g/L
CH2O2min=0.8; % Concentração mínima de H2O2 no reator, g/L
RadSmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator solar, W/m²
RadLmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator lâmpada, W/m²
Radmin=0; % Radiação global mínima que incide sobre o reator, W/m²

```

```

% Inicialização das variáveis
CA1(1:N)=CAss*ones(N,1); % Concentração de Orgânicos, mg C/L
CH2O21(1:N)=CH2O2ent*ones(N,1); % Concentração de H2O2 no reator, g/L
t=0:Tsim;t=t+h;

% Início da simulação
for i=N+1:Tsim;
    CFEnorm=(CFE-CFEmin)/(CFEmax-CFEmin); % Concentração normalizada de íons Fe no
    reator
    radsolnorm=(radsol-Radmin)/(RadSmax-Radmin); % Radiação solar normalizada que
    incide sobre o reator
    radlampnorm=(potencia-Radmin)/(RadLmax-Radmin); % Radiação das lâmpadas
    normalizada que incide sobre o reator
        % Variações dos parâmetros

% Para colocar degrau no Set-Point da Concentração de Orgânicos
% if i>500
%     q3=1;
% end

% Para colocar degrau na concentração de entrada de H2O2
% if i>500
%     H2O2=400; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no reator,
mmol/L
%     CH2O2ent=H2O2*MMH2O2/1000; % Concentração de entrada de H2O2 quando
entra no reator, g/L
%     H2O2ent=H2O2*V/Texp; % Vazão molar de H2O2, mmol/min
%     CH2O21(i)=CH2O2ent; % Concentração de H2O2 no reator, g/L
% end

% Para colocar degrau na concentração de entrada de orgânicos
% if i>500
%     CA0=550;
%     CA1(i)=CA0; % Concentração de Orgânicos, mg C/L
% end

% Para colocar degrau na radiação vinda das lâmpadas (múltiplos de 125W)
% if i>500
%     potencia=625;
% end

% Para colocar degrau na radiação solar
% if i>500
%     radsol=800;
% end

% Para colocar degrau na vazão de alimentação de orgânicos
% if i>500
%     q0=1.5;
% end

% Para colocar degrau na concentração de ferro II
% if i>500
%     FE=1;
%     CFE=FE*MMFE;
% end

CAi=CA1(i-1);% CAo=CA1;
CH2O2i=CH2O21(i-1);
% Início da integração ao longo do período de impressão
for ii=1:h/Dt;
    % Normalização da concentração de H2O2 no reator solar
    CH2O2norm=(CH2O2i-CH2O2min)/(CH2O2max-CH2O2min); % Concentração
normalizada de H2O2 no reator
    % Normalização da concentração de carbono orgânico no reator
    CAinorm=(CAi-Camin)/(CAmax-Camin); % Concentração normalizada de carbono
orgânico no reator

```

```

        % Cálculo da taxa de reação no reator solar
        taxaSC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radsolnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator solar, mgC/(L.min)
        RAs=taxaSC;
        % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator solar
        taxaSP=2*taxaSC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
solar, gH2O2/L
        % Cálculo da taxa de reação no reator lâmpada

taxaLC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radlampnorm^n4);
%% taxa de reação experimental no reator lâmpada, mgC/(L.min)
        RAlamp=taxaLC;
        % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator lâmpada
%
        taxaLP=2*taxaLC/(MMC*MMH2O2*1000);
        taxaLP=2*taxaLC*MMH2O2/(MMC*1000);
        % taxa de consumo de H2O2 no reator lâmpada, gH2O2/L
        % Cálculo da nova concentração de H2O2 no reator
        CH2O2i=CH2O2i+(1/Lamp*(q3*CH2O2ent-(q3+q0)*CH2O2i+q2*(CH2O2l(i-Tau_S)-
CH2O2i)-taxaSP*S)-taxaLP)*Dt;
        % Cálculo da nova concentração de C no reator
        CAi=CAi+(1/Lamp*(q0*(CA0-CAi)+q2*(CA1(i-Tau_S)-CAi)-RAS*S)-RALamp)*Dt;
    end
    % Atualização das concentrações
    CH2O2l(i)=CH2O2i;
    CA1(i)=CAi;
end
% Fim dos Cálculos

% Impressão dos resultados
figure(1),hold on, plot( CA1,'b')
ylabel('COD (mgC/L)');
xlabel('Tempo (min)');

```

Apêndice II: Simulação em MatLab[®] para o reator em malha fechada

```

% Simulação dinâmica simplificada do reator fotoquímico
clear all
close all

% Parâmetros
MMC=12; % Massa molar do carbono, mg/mmol
MMH2O2=34; % Massa molar do H2O2, mg/mmol
MMFE=56; % Massa molar do ferro, mg/mmol

% Dados Iniciais da Simulação
Tsim=1200; % Tempo de simulação, min
Texp=150; % Tempo de experimento, min
Dt=0.1; % Passo de integração, min
h=1.0; % Período de impressão

% Carbono orgânico
CA0=450; % Concentração da alimentação de orgânicos, mg C/L
CAss=CA0; % Concentração inicial de orgânicos, mg C/L

% Ferro
FE=0.6; % Concentração de íons Fe, mM
CFE=FE*MMFE; % Concentração de íons Fe, mg/L

% Vazões e volumes
q0=1; % Vazão de Alimentação, L/min
q2=4; % Vazão de circulação, L/min
q3ss=0.5; % Vazão de solução de peróxido, L/min
V=26; % Volume do reator, L
S=10; %Volume do reator solar L
Lamp=16; % Volume do reator tanque, L

% Peróxido
H2O2=200; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no reator, mmol/L
CH2O2ent=H2O2*MMH2O2/1000; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no
reator, g/L
H2O2ent=H2O2*V/Texp; % Vazão molar de H2O2, mmol/min

% Parâmetros utilizados para o cálculo da taxa de reação
kr=8; % Constante de velocidade da reação, mg/L.min
% Expoentes das concentrações de "reagentes"
n1=1.7;
n2=1.2;
n3=1.6;
n4=1.2;

% Outros
radsol=500; % Radiação solar, W/m2
potencia=500; % Potência das lâmpadas, W
Tau_S=round(S/q2); % Atraso de transporte no Reator Solar, min
N=Tau_S+1;

% valores máximos e mínimos e normalização dos parâmetros de cálculo da taxa de
reação
CAmax=559.6; % Concentração máxima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CAmin=0; % Concentração mínima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CASP=390; % Set-point para a concentração de carbono orgânico no reator, mgC/L
CFEmax=280; % Concentração máxima de íons Fe no reator, mg/L
CFEmin=11.2; % Concentração mínima de íons Fe no reator, mg/L
CH2O2max=30.6; % Concentração máxima de H2O2 no reator, g/L
CH2O2min=0.8; % Concentração mínima de H2O2 no reator, g/L
RadSmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator solar, W/m2
RadLmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator lâmpada, W/m2
Radmin=0; % Radiação global mínima que incide sobre o reator, W/m2

```

```

% parâmetros do controlador PI
Kc=-0.10667; % Ganho do controlador PI
TI=12.64113; % Tempo integral do controlador PI

% Inicialização das variáveis
CA1(1:N)=CAss*ones(N,1); % Concentração de Orgânicos, mg C/L
CH2O21(1:N)=CH2O2ent*ones(N,1); % Concentração de H2O2 no reator, g/L
erro(1:N)=0*ones(N,1); % Erro igual a (set-point) - concentração de carbono
orgânico no reator, mgC/L
q31(1:N)=q3ss*ones(N,1); % valor inicial de q3
CASP1(1:N)=CASP*ones(N,1); % Definição do Set-point
t=0:Tsim;t=t*h;

% Início da simulação
for i=N+1:Tsim;
    CFEnorm=(CFE-CFEmin)/(CFEmax-CFEmin); % Concentração normalizada de íons Fe no
    reator
    radsolnorm=(radsol-Radmin)/(RadSmax-Radmin); % Radiação solar normalizada que
    incide sobre o reator
    radlampnorm=(potencia-Radmin)/(RadLmax-Radmin); % Radiação das lâmpadas
    normalizada que incide sobre o reator

    % Variações dos parâmetros

    % Para colocar degrau no Set-Point da Concetração de Orgânicos
    % if i>800
    %     CASP=350;
    % end

    % Para colocar degrau na concetração de entrada de H2O2
    % if i>800
    %     H2O2=300; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no reator,
    mmol/L
    %     CH2O2ent=H2O2*MMH2O2/1000; % Concentração de entrada de H2O2 quando
    entra no reator, g/L
    %     H2O2ent=H2O2*V/Texp; % Vazão molar de H2O2, mmol/min
    %     CH2O21(i)=CH2O2ent; % Concentração de H2O2 no reator, g/L
    % end

    % Para colocar degrau na concentração de entrada de orgânicos
    % if i>800
    %     CA0=600;
    %     CA1(i)=CA0; % Concentração de Orgânicos, mg C/L
    % end

    % Para colocar degrau na radiação vinda das lâmpadas (múltiplos de 125W)
    % if i>800
    %     potencia=625;
    % end

    % Para colocar degrau na radiação solar
    % if i>800
    %     radsol=867;
    % end

    % Para colocar degrau na vazão de alimentação de orgânicos
    % if i>800
    %     q0=2;
    % end

    % Para colocar degrau na concentração de ferro
    % if i>800
    %     FE=1; % Concentração de íons Fe, mM
    %     CFE=FE*MMFE; % Concentração de íons Fe, mg/L
    % end

    CASP1(i)=CASP;
    q3i=q31(i-1);

```

```

CAi=CA1(i-1);% CA0=CA1;
CH2O2i=CH2O21(i-1);
erro(i)=CASP-CAi;
if i >400
% Discretização da vazão q3 com controle
q3i=q3i+Kc*(1+h/TI)*erro(i)-Kc*erro(i-1);
end
% Início da integração ao longo do período de impressão
for ii=1:h/DT;
% Normalização da concentração de H2O2 no reator solar
CH2O2norm=(CH2O2i-CH2O2min)/(CH2O2max-CH2O2min); % Concentração
normalizada de H2O2 no reator
% Normalização da concentração de carbono orgânico no reator
CAinorm=(CAi-CAmin)/(CAmax-CAmin); % Concentração normalizada de carbono
orgânico no reator
% Cálculo da taxa de reação no reator solar
taxaSC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radsolnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator solar, mgC/(L.min)
RAs=taxaSC;
% Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator solar
taxaSP=2*taxaSC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
solar, gH2O2/L
% Cálculo da taxa de reação no reator lâmpada

taxaLC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radlampnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator lâmpada, mgC/(L.min)
RALamp=taxaLC;
% Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator lâmpada
taxaLP=2*taxaLC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
lâmpada, gH2O2/L
% Cálculo da nova concentração de H2O2 no reator
CH2O2i=CH2O2i+(1/Lamp*(q3i*CH2O2ent-(q3i+q0)*CH2O2i+q2*(CH2O21(i-Tau_S)-
CH2O2i)-taxaSP*S)-taxaLP)*Dt;
% Cálculo da nova concentração de C no reator
CAi=CAi+(1/Lamp*(q0*(CA0-CAi)+q2*(CA1(i-Tau_S)-CAi)-RAs*S)-RALamp)*Dt;
end

% Atualização das concentrações
CH2O21(i)=CH2O2i;
CA1(i)=CAi;
q31(i)=q3i;

end

CA2(1:(Tsim-350))=CA1(351:Tsim);
CH2O22(1:(Tsim-350))=CH2O21(351:Tsim);
q32(1:(Tsim-350))=q31(351:Tsim);
CASP2(1:(Tsim-350))=CASP1(351:Tsim);

figure(1),hold on, plot( CA2);
figure(1),hold on, plot( CASP2,'k--');
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('COD (mgC/L)');
legend('Concentração de orgânicos no reator','Set-point');
figure(2),hold on, plot( q32);
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('Vazão de peróxido (L/min)');

```

Apêndice III: Simulação em MatLab[®] para o reator com controle antecipatório

```

% Simulação dinâmica simplificada do reator fotoquímico
clear all
close all

% Parâmetros
MMC=12; % Massa molar do carbono, mg/mmol
MMH2O2=34; % Massa molar do H2O2, mg/mmol
MMFE=56; % Massa molar do ferro, mg/mmol

% Dados Iniciais da Simulação
Tsim=2000; % Tempo de simulação, min
Texp=150; % Tempo de experimento, min
Dt=0.1; % Passo de integração, min
h=1.0; % Período de impressão

% Carbono orgânico
CA0=450; % Concentração da alimentação de orgânicos, mg C/L
CAss=CA0; % Concentração inicial de orgânicos, mg C/L

% Ferro
FE=0.6; % Concentração de íons Fe, mM
CFE=FE*MMFE; % Concentração de íons Fe, mg/L

% Vazões e volumes
q0=1; % Vazão de Alimentação, L/min
q2=4; % Vazão de circulação, L/min
q3ss=0.5; % Vazão de solução de peróxido, L/min
deltaq0=0;
deltaq3=0;
deltaCA0=0;
V=26; % Volume do reator, L
S=10; %Volume do reator solar L
Lamp=16; % Volume do reator tanque, L

% Peróxido
H2O2=200; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no reator, mmol/L
CH2O2ent=H2O2*MMH2O2/1000; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no
reator, g/L
H2O2ent=H2O2*V/Texp; % Vazão molar de H2O2, mmol/min

% Parâmetros utilizados para o cálculo da taxa de reação
kr=8; % Constante de velocidade da reação, mg/L.min
% Expoentes das concentrações de "reagentes"
n1=1.7;
n2=1.2;
n3=1.6;
n4=1.2;

% Outros
radsol=500; % Radiação solar, W/m²
potencia=500; % Potência das lâmpadas, W
Tau_S=round(S/q2); % Atraso de transporte no Reator Solar, min
N=Tau_S+1;

% valores máximos e mínimos e normalização dos parâmetros de cálculo da taxa de
reação
CAmax=559.6; % Concentração máxima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CAmin=0; % Concentração mínima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CASP=390; % Set-point para a concentração de carbono orgânico no reator, mgC/L
CFEmax=280; % Concentração máxima de íons Fe no reator, mg/L
CFEmin=11.2; % Concentração mínima de íons Fe no reator, mg/L
CH2O2max=30.6; % Concentração máxima de H2O2 no reator, g/L
CH2O2min=0.8; % Concentração mínima de H2O2 no reator, g/L

```

```

RadSmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator solar, W/m²
RadLmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator lâmpada, W/m²
Radmin=0; % Radiação global mínima que incide sobre o reator, W/m²

% parâmetros do controlador PI
Kc=-0.8*0.10667; % Ganho do controlador PI
TI=4*12.64113; % Tempo integral do controlador PI

% Inicialização das variáveis
CA1(1:N)=CAss*ones(N,1); % Concentração de Orgânicos, mg C/L
CH2O21(1:N)=CH2O2ent*ones(N,1); % Concentração de H2O2 no reator, g/L
erro(1:N)=0*ones(N,1); % Erro igual a (set-point) - concentração de carbono
orgânico no reator, mgC/L
q01(1:N)=q0*ones(N,1); % valor inicial de q0
q31(1:N)=q3ss*ones(N,1); % valor inicial de q3
CA01(1:Tsim)=CA0*ones(Tsim,1); % Concentração de alimentação, mgC/L
CASPl(1:N)=CASP*ones(N,1); % Definição do Set-point
deltaq01(1:N)=deltaq0*ones(N,1);
deltaq31(1:N)=deltaq3*ones(N,1);
deltaq32(1:N)=deltaq3*ones(N,1);
deltaCA01(1:N)=deltaCA0*ones(N,1);
t=0:Tsim;
t=t*h;
q3ii=q3ss;
q0ss=q0;

% Início da simulação
for i=N+1:Tsim;
    CFEnorm=(CFE-CFEmin)/(CFEmax-CFEmin); % Concentração normalizada de íons Fe no
    reator
    radsolnorm=(radsol-Radmin)/(RadSmax-Radmin); % Radiação solar normalizada que
    incide sobre o reator
    radlampnorm=(potencia-Radmin)/(RadLmax-Radmin); % Radiação das lâmpadas
    normalizada que incide sobre o reator

    CASPl(i)=CASP;
    q0i=q01(i-1);
    q3i=q31(i-1);
    CA0i=CA01(i-1);
    CAi=CA1(i-1); % CA0=CA1;
    CH2O2i=CH2O21(i-1);
    erro(i)=CASP-CAi;

    % Para colocar degrau na vazão de alimentação de orgânicos
    if i>800
        q0i=0.8;
    end

    % Para colocar degrau na concentração de alimentação de orgânicos
    if i>1200
        CA0i=420;
    end

    if i<=400
        deltaq31(i)=q3i-q3ss;
        deltaq32(i)=q3i-q3ss;
    end
    deltaq01(i)=q0i-q0ss;
    deltaCA01(i)=CA0i-CAss;

    % Discretização da vazão q3 com controle
    if i >400
        deltaq31(i)=0.8512*(deltaq31(i-1))+0.0447/1.741*(deltaCA01(i)-
        0.9649*deltaCA01(i-1));
        q3ii=q3ii+Kc*(1+h/TI)*erro(i)-Kc*erro(i-1);
        q3i=q3ii+deltaq31(i);
    end
end

```

```

    deltaq32(i)=0.926*(deltaq32(i-1))+5.609/1.741*(deltaq01(i)-
0.9649*deltaq01(i-1));
    q3i=q3i+deltaq32(i);
    end

    % Início da integração ao longo do período de impressão
    for ii=1:h/Dt;
        % Normalização da concentração de H2O2 no reator solar
        CH2O2norm=(CH2O2i-CH2O2min)/(CH2O2max-CH2O2min); % Concentração
normalizada de H2O2 no reator
        % Normalização da concentração de carbono orgânico no reator
        CAinorm=(CAi-CAmin)/(CMax-CAmin); % Concentração normalizada de carbono
orgânico no reator
        % Cálculo da taxa de reação no reator solar
        taxaSC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radsolnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator solar, mgC/(L.min)
        RAs=taxaSC;
        % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator solar
        taxaSP=2*taxaSC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
solar, gH2O2/L
        % Cálculo da taxa de reação no reator lâmpada

        taxaLC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radlampnorm^n4);
        % taxa de reação experimental no reator lâmpada, mgC/(L.min)
        RAlamp=taxaLC;
        % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator lâmpada
        taxaLP=2*taxaLC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
lâmpada, gH2O2/L
        % Cálculo da nova concentração de H2O2 no reator
        CH2O2i=CH2O2i+(1/Lamp*(q3i*CH2O2ent-(q3i+q0i)*CH2O2i+q2*(CH2O21(i-
Tau_S)-CH2O2i)-taxaSP*S)-taxaLP)*Dt;
        % Cálculo da nova concentração de C no reator
        CAi=CAi+(1/Lamp*(q0i*(CA0i-CAi)+q2*(CA1(i-Tau_S)-CAi)-RAs*S)-RAlamp)*Dt;
    end

    % Atualização das concentrações
    CH2O21(i)=CH2O2i;
    CA1(i)=CAi;
    q31(i)=q3i;
    q01(i)=q0i;
    CA01(i)=CA0i;
end
% Fim dos Cálculos

CA2(1:(Tsim-350))=CA1(351:Tsim);
CH2O22(1:(Tsim-350))=CH2O21(351:Tsim);
q32(1:(Tsim-350))=q31(351:Tsim);
CASP2(1:(Tsim-350))=CASP1(351:Tsim);
CA02(1:(Tsim-350))=CA01(351:Tsim);
q02(1:(Tsim-350))=q01(351:Tsim);

%%PARA COMPARAÇÃO, SEM CONTROLE ANTECIPATÓRIO
% Inicialização das variáveis
CA1(1:N)=CAss*ones(N,1); % Concentração de Orgânicos, mg C/L
CH2O21(1:N)=CH2O2ent*ones(N,1); % Concentração de H2O2 no reator, g/L
erro(1:N)=0*ones(N,1); % Erro igual a (set-point) - concentração de carbono
orgânico no reator, mgC/L
q31(1:N)=q3ss*ones(N,1); % valor inicial de q3
CA01(1:Tsim)=CA0*ones(Tsim,1); % Concentração de alimentação, mgC/L
CASP1(1:N)=CASP*ones(N,1); % Definição do Set-point
t=0:Tsim;t=t*h;

% Início da simulação
for i=N+1:Tsim;
    CFEnorm=(CFE-CFEmin)/(CFEmax-CFEmin); % Concentração normalizada de íons Fe no
reator
    radsolnorm=(radsol-Radmin)/(RadSmax-Radmin); % Radiação solar normalizada que
incide sobre o reator

```

```

radlampnorm=(potencia-Radmin)/(RadLmax-Radmin); % Radiação das lâmpadas
normalizada que incide sobre o reator

% Para colocar degrau na vazão de alimentação de orgânicos
if i>800
    q0=0.8;
end

% Para colocar degrau na concentração de alimentação de orgânicos
if i>1200
    CA0=420;
end

CASPl(i)=CASP;
q3i=q3l(i-1);
CAi=CA1(i-1); % CA0=CA1;
CH2O2i=CH2O2l(i-1);
erro(i)=CASP-CAi;
if i >400
% Discretização da vazão q3 com controle
    q3i=q3i+Kc*(1+h/TI)*erro(i)-Kc*erro(i-1);
end
% Início da integração ao longo do período de impressão
for ii=1:h/DT;
    % Normalização da concentração de H2O2 no reator solar
    CH2O2norm=(CH2O2i-CH2O2min)/(CH2O2max-CH2O2min); % Concentração
normalizada de H2O2 no reator
    % Normalização da concentração de carbono orgânico no reator
    CAinorm=(CAi-Camin)/(CAmx-Camin); % Concentração normalizada de carbono
orgânico no reator
    % Cálculo da taxa de reação no reator solar
    taxaSC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radsolnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator solar, mgC/(L.min)
    RAs=taxaSC;
    % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator solar
    taxaSP=2*taxaSC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
solar, gH2O2/L
    % Cálculo da taxa de reação no reator lâmpada

taxaLC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radlampnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator lâmpada, mgC/(L.min)
    RAlamp=taxaLC;
    % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator lâmpada
    taxaLP=2*taxaLC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
lâmpada, gH2O2/L
    % Cálculo da nova concentração de H2O2 no reator
    CH2O2i=CH2O2i+(1/Lamp*(q3i*CH2O2ent-(q3i+q0)*CH2O2i+q2*(CH2O2l(i-Tau_S)-
CH2O2i)-taxaSP*S)-taxaLP)*Dt;
    % Cálculo da nova concentração de C no reator
    CAi=CAi+(1/Lamp*(q0*(CA0-CAi)+q2*(CA1(i-Tau_S)-CAi)-RAs*S)-RAlamp)*Dt;
end

% Atualização das concentrações
CH2O2l(i)=CH2O2i;
CA1(i)=CAi;
q3l(i)=q3i;
CA0l(i)=CA0;
q0l(i)=q0;

end

CA3(1:(Tsim-350))=CA1(351:Tsim);
CH2O23(1:(Tsim-350))=CH2O2l(351:Tsim);
q33(1:(Tsim-350))=q3l(351:Tsim);
CASP3(1:(Tsim-350))=CASPl(351:Tsim);
CA03(1:(Tsim-350))=CA0l(351:Tsim);
q03(1:(Tsim-350))=q0l(351:Tsim);

```

```
figure(1),hold on, plot( CA2,'r');
figure(1),hold on, plot( CA3);
figure(1),hold on, plot( CASP2,'k--');
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('COD (mgC/L)');
legend('Concentração de orgânicos no reator com ff','Concentração de orgânicos no
reator','Set-point');
figure(2),hold on, plot( q32,'r');
figure(2),hold on, plot( q33);
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('Vazão de peróxido (L/min)');
legend('Vazão de peróxido com ff','Vazão de peróxido');
figure(3),hold on, plot( q02,'r');
figure(3),hold on, plot( q03);
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('Vazão da alimentação (L/min)');
figure(4),hold on, plot( CA02,'r');
figure(4),hold on, plot( CA03);
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('Concentração de orgânicos na alimentação (mgC/L)');
```

Apêndice IV: Simulação em MatLab[®] para a otimização do custo operacional

```

% Simulação dinâmica simplificada do reator fotoquímico
clear all
close all

global ppreal pe
global Radmin RadLmax radsolnorm radlampnorm
global CH2O2min CH2O2max CH2O2ent
global CAmin CAmx
global CFEnorm
global kr
global n1 n2 n3 n4
global MMH2O2 MMC
global Lamp S
global q2 q3ss
global Tau_S Dt Tsim h N
global Kc TI
global CA0 CASP

% Parâmetros
MMC=12; % Massa molar do carbono, mg/mmol
MMH2O2=34; % Massa molar do H2O2, mg/mmol
MMFE=56; % Massa molar do ferro, mg/mmol

% Dados Iniciais da Simulação
Tsim=5000; % Tempo de simulação, min
Texp=150; % Tempo de experimento, min
Dt=0.1; % Passo de integração, min
h=1.0; % Período de impressão

% Carbono orgânico
CA0=450; % Concentração da alimentação de orgânicos, mg C/L
CAss=CA0; % Concentração inicial de orgânicos, mg C/L

% Ferro
FE=0.6; % Concentração de íons Fe, mM
CFE=FE*MMFE; % Concentração de íons Fe, mg/L

% Vazões e volumes
q0=1; % Vazão de Alimentação, L/min
q2=4; % Vazão de circulação, L/min
q3ss=0.5; % Vazão de solução de peróxido, L/min
deltaq0=0;
deltaq3=0;
deltaCA0=0;
V=26; % Volume do reator, L
S=10; %Volume do reator solar L
Lamp=16; % Volume do reator tanque, L

% Peróxido
H2O2=200; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no reator, mmol/L
CH2O2ent=H2O2*MMH2O2/1000; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no
reator, g/L
H2O2ent=H2O2*V/Texp; % Vazão molar de H2O2, mmol/min

% Parâmetros utilizados para o cálculo da taxa de reação
kr=8; % Constante de velocidade da reação, mg/L.min
% Expoentes das concentrações de "reagentes"
n1=1.7;
n2=1.2;
n3=1.6;
n4=1.2;

% Outros
radsol=500; % Radiação solar, W/m²

```

```

potencia=250; % Potência das lâmpadas, W
Tau_S=round(S/q2); % Atraso de transporte no Reator Solar, min
N=Tau_S+1;
pp=1.03; %Preço da solução de peróxido original (35%), R$/L
ppreal=pp/(1.1155*0.35/34*10^6/H2O2); %Preço da solução diluída de peróxido de 35%,
mmolH2O2/L
pe=250.64; %Preço da energia elétrica, R$/MWh

% valores máximos e mínimos e normalização dos parâmetros de cálculo da taxa de
reação
CAmax=559.6; % Concentração máxima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CAmin=0; % Concentração mínima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CASP=390; % Set-point para a concentração de carbono orgânico no reator, mgC/L
CFEmax=280; % Concentração máxima de íons Fe no reator, mg/L
CFEmin=11.2; % Concentração mínima de íons Fe no reator, mg/L
CH2O2max=30.6; % Concentração máxima de H2O2 no reator, g/L
CH2O2min=0.8; % Concentração mínima de H2O2 no reator, g/L
RadSmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator solar, W/m²
RadLmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator lâmpada, W/m²
Radmin=0; % Radiação global mínima que incide sobre o reator, W/m²

% parâmetros do controlador PI
Kc=-0.8*0.10667; % Ganho do controlador PI
TI=4*12.64113; % Tempo integral do controlador PI

% Inicialização das variáveis
CA1(1:N)=CAss*ones(N,1); % Concentração de Orgânicos, mg C/L
CA1F(1:N)=CAss*ones(N,1);
CH2O21(1:N)=CH2O2ent*ones(N,1); % Concentração de H2O2 no reator, g/L
CH2O21F(1:N)=CH2O2ent*ones(N,1);
erro(1:N)=0*ones(N,1); % Erro igual a (set-point) - concentração de carbono
orgânico no reator, mgC/L
erroF(1:N)=0*ones(N,1);
q01(1:N)=q0*ones(N,1); % valor inicial de q0
q01F(1:N)=q0*ones(N,1); % valor inicial de q0
q31(1:N)=q3ss*ones(N,1); % valor inicial de q3
q31F(1:N)=q3ss*ones(N,1); % valor inicial de q3
CA01(1:Tsim)=CA0*ones(Tsim,1); % Concentração de alimentação, mgC/L
CA01F(1:Tsim)=CA0*ones(Tsim,1);
CASP1(1:N)=CASP*ones(N,1); % Definição do Set-point
deltaq01(1:N)=deltaq0*ones(N,1);
deltaq01F(1:N)=deltaq0*ones(N,1);
deltaq31(1:N)=deltaq3*ones(N,1);
deltaq31F(1:N)=deltaq3*ones(N,1);
deltaCA01(1:N)=deltaCA0*ones(N,1);
deltaCA01F(1:N)=deltaCA0*ones(N,1);
custo_total(1:N)=1*ones(N,1);
potencial(1:Tsim)=potencia*ones(Tsim,1);
t=0:Tsim;
t=t*h;
q3ii=q3ss;
q0ss=q0;
radlampnorminicial=(potencia-Radmin)/(RadLmax-Radmin);

% Início da simulação
for i=N+1:Tsim;
    CFEnorm=(CFE-CFEmin)/(CFEmax-CFEmin); % Concentração normalizada de íons Fe no
    reator
    radsolnorm=(radsol-Radmin)/(RadSmax-Radmin); % Radiação solar normalizada que
    incide sobre o reator
    radlampnorm=(potencia-Radmin)/(RadLmax-Radmin); % Radiação das lâmpadas
    normalizada que incide sobre o reator
    CASP1(i)=CASP;
    q0i=q01(i-1);
    q3i=q31(i-1);
    CA0i=CA01(i-1);
    CAi=CA1(i-1); % CA0=CA1;
    CH2O2i=CH2O21(i-1);

```

```

erro(i)=CASP-CAi;
if i<=400
    deltaq31(i)=q3i-q3ss;
    deltaq32(i)=q3i-q3ss;
end
deltaq01(i)=q0i-q0ss;
deltaCA01(i)=CA0i-CAss;

% Discretização da vazão q3 com controle
if i >400
    deltaq31(i)=0.8512*(deltaq31(i-1))+0.0447/1.741*(deltaCA01(i)-
.9649*deltaCA01(i-1));
    deltaq32(i)=0.926*(deltaq32(i-1))+0.609/1.741*(deltaq01(i)-0.9649*deltaq01(i-
1));
    q3ii=q3ii+Kc*(1+h/TI)*erro(i)-Kc*erro(i-1);
    q3i=q3ii+deltaq31(i)+deltaq32(i);
    if q3i<0
        q3i=0;
    end
end
end
% Início da integração ao longo do período de impressão
for ii=1:h/Dt;
    % Normalização da concentração de H2O2 no reator solar
    CH2O2norm=(CH2O2i-CH2O2min)/(CH2O2max-CH2O2min); % Concentração
normalizada de H2O2 no reator
    % Normalização da concentração de carbono orgânico no reator
    CAinorm=(CAi-Camin)/(Cmax-Camin); % Concentração normalizada de carbono
orgânico no reator
    % Cálculo da taxa de reação no reator solar
    taxaSC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radsolnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator solar, mgC/(L.min)
    RAs=taxaSC;
    % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator solar
    taxaSP=2*taxaSC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
solar, gH2O2/L
    % Cálculo da taxa de reação no reator lâmpada
    taxaLC=1000*kr*(CAinorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radlampnorm^n4);
    % taxa de reação experimental no reator lâmpada, mgC/(L.min)
    RAlamp=taxaLC;
    % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator lâmpada
    taxaLP=2*taxaLC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
lâmpada, gH2O2/L
    % Cálculo da nova concentração de H2O2 no reator
    CH2O2i=CH2O2i+(1/Lamp*(q3i*CH2O2ent-(q3i+q0i)*CH2O2i+q2*(CH2O21(i-Tau_S)-
CH2O2i)-taxaSP*S)-taxaLP)*Dt;
    % Cálculo da nova concentração de C no reator
    CAi=CAi+(1/Lamp*(q0i*(CA0i-CAi)+q2*(CA1(i-Tau_S)-CAi)-RAs*S)-RAlamp)*Dt;
end
end
% Atualização das concentrações
CH2O21(i)=CH2O2i;
CA1(i)=CAi;
q31(i)=q3i;
q01(i)=q0i;
CA01(i)=CA0i;
potencial(i)=potencia;
if i==999
    custo_total(i)=(ppreal*q3i+(potencia/(10^6))*(pe/60));
end
in=round(i/1000);
if in*1000==i
    custo_total(i)=(ppreal*q3i+(potencia/(10^6))*(pe/60));
    if q31(i)-q31(i-1)<0.0001 && i>400 %Para quando q3 não varia mais e somente
após colocar o controlador
        if i>= 2000
            if custo_total(in*1000) >= custo_total(in*1000-1000)
                iaux=i;
            end
        end
    end
end

```

```

[custo_total(i),potencia]=calculocusto(q3i,q0i,CA0i,CH2O2i,CAi,q3ss,q0ss,CASP,CAss,
potencia,custo_total,iaux);
    end
    if i==1000
    if custo_total(in*1000) >= custo_total(999)
        iaux=i;

[custo_total(i),potencia]=calculocusto(q3i,q0i,CA0i,CH2O2i,CAi,q3ss,q0ss,CASP,CAss,
potencia,custo_total,iaux);
    end
    end
    end
    end
    end
end

CA2(1:(Tsim-300))=CA1(301:Tsim);
CH2O22(1:(Tsim-300))=CH2O21(301:Tsim);
q32(1:(Tsim-300))=q31(301:Tsim);
CASP2(1:(Tsim-300))=CASP1(301:Tsim);
CA02(1:(Tsim-300))=CA01(301:Tsim);
custo_total2(1:(Tsim-300))=custo_total(301:Tsim);
potencia2(1:(Tsim-300))=potencia1(301:Tsim);

figure(4),hold on, plot( CA2,'k');
figure(4),hold on, plot( CASP2,'--');
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('COD (mgC/L)');
figure(6),hold on, plot( q32,'k');
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('Vazão de peróxido (L/min)');
figure(7),hold on, plot( custo_total2,'k');
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('Custo (R$/min)');
figure(8),hold on, plot( potencia2,'k');
xlabel('Tempo (min)');
ylabel('Potencia (W)');

function [custo_total2,potencia2] =
calculocusto(q3i,q0i,CA0i,CH2O2i,CAi,q3ss,q0ss,CASP,CAss,potencia,custo_total,iaux)

global ppreal pe
global Radmin RadLmax radsolnorm
global CH2O2min CH2O2max
global CAdmin CAmass
global CFEnorm
global kr
global n1 n2 n3 n4
global MMH2O2 MMC
global Lamp S
global CH2O2ent
global q2
global Tau_S Dt Tsim h
global Kc TI

custo_total_certo=10^6;
i=iaux;
potencia_corr=potencia;

if potencia < 625
    potencia_corr=potencia+125;
    radlampnormF=(potencia_corr-Radmin)/(RadLmax-Radmin);
    j=5;
    q31F(j-1)=q3i;
    q01F(j-1)=q0i;
    CA01F(j-1)=CA0i;
    CH2O21F(j-1)=CH2O2i;

```

```

CA1F(j-1)=CAi;
q3iiF=q3ss;
for j=5:Tsim
    CASP1F(j)=CASP;
    q0iF=q01F(j-1);
    q3iF=q31F(j-1);
    CA0iF=CA01F(j-1);
    CAiF=CA1F(j-1); % CA0=CA1;
    CH202iF=CH2021F(j-1);
    erroF(j)=CASP-CAiF;
%
%   if j>800
%       q0iF=0.8;
%       CA0iF=410;
%   end
%   if j<=400
        deltaq31F(j)=q3iF-q3ss;
        deltaq32F(j)=q3iF-q3ss;
    end
    deltaq01F(j)=q0iF-q0ss;
    deltaCA01F(j)=CA0iF-CAss;

    % Discretização da vazão q3 com controle
    if j >400
        deltaq31F(j)=0.8512*(deltaq31F(j-1))+0.0447/1.741*(deltaCA01F(j)-
        .9649*deltaCA01F(j-1));
        deltaq32F(j)=0.926*(deltaq32F(j-1))+0.609/1.741*(deltaq01F(j)-
        0.9649*deltaq01F(j-1));
        q3iiF=q3iF+Kc*(1+h/TI)*erroF(j)-Kc*erroF(j-1);
        q3iF=q3iiF+deltaq31F(j)+deltaq32F(j);
        if q3iF<0
            q3iF=0;
        end
    end
    % Início da integração ao longo do período de impressão
    for ii=1:h/Dt;
        CH202normF=(CH202iF-CH202min)/(CH202max-CH202min); % Concentração
        normalizada de H2O2 no reator
        CAinormF=(CAiF-Camin)/(CAmax-Camin); % Concentração normalizada de carbono
        orgânico no reator

        taxaSCF=1000*kr*(CAinormF^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH202normF^n3)*(radsolnorm^n4); % taxa
        de reação experimental no reator solar, mgC/(L.min)
        RAsF=taxaSCF;
        taxaSPF=2*taxaSCF*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
        solar, gH2O2/L

        taxaLCF=1000*kr*(CAinormF^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH202normF^n3)*(radlampnorm^n4);
        RAlampF=taxaLCF;
        taxaLPF=2*taxaLCF*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
        lâmpada, gH2O2/L
        CH202iF=CH202iF+(1/Lamp*(q3iF*CH202ent-(q3iF+q0iF)*CH202iF+q2*(CH2021F(j-
        Tau_S)-CH202iF)-taxaSPF*S)-taxaLPF)*Dt;
        CAiF=CAiF+(1/Lamp*(q0iF*(CA0iF-CAiF)+q2*(CA1F(j-Tau_S)-CAiF)-RAsF*S)-
        RAlampF)*Dt;
    end
    % Atualização das concentrações
    CH2021F(j)=CH202iF;
    CA1F(j)=CAiF;
    q31F(j)=q3iF;
    q01F(j)=q0iF;
    CA01F(j)=CA0iF;
end
custo_total_certo=(ppreal*q3iF+ potencia_corr/10^6*pe/60);
end

if (custo_total_certo > custo_total(i))&&(potencia>=125)
    potencia_corr=potencia-125;
    radlampnormF=(potencia_corr-Radmin)/(RadLmax-Radmin);

```

```

j=5;
q31F(j-1)=q3i;
q01F(j-1)=q0i;
CA01F(j-1)=CA0i;
CH2O21F(j-1)=CH2O2i;
CA1F(j-1)=CAi;
q3iiF=q3ss;
for j=5:Tsim
    CASP1F(j)=CASP;
    q0iF=q01F(j-1);
    q3iF=q31F(j-1);
    CA0iF=CA01F(j-1);
    CAiF=CA1F(j-1); % CA0=CA1;
    CH2O2iF=CH2O21F(j-1);
    erroF(j)=CASP-CAiF;
    if j>800
        q0iF=0.8;
        CA0iF=410;
    end
    if j<=400
        deltaq31F(j)=q3iF-q3ss;
        deltaq32F(j)=q3iF-q3ss;
    end
    deltaq01F(j)=q0iF-q0ss;
    deltaCA01F(j)=CA0iF-CAss;
    % Discretização da vazão q3 com controle
    if j >400
        deltaq31F(j)=0.8512*(deltaq31F(j-1))+0.0447/1.741*(deltaCA01F(j)-
        .9649*deltaCA01F(j-1));
        deltaq32F(j)=0.926*(deltaq32F(j-1))+0.609/1.741*(deltaq01F(j)-
        0.9649*deltaq01F(j-1));
        q3iiF=q3iiF+Kc*(1+h/TI)*erroF(j)-Kc*erroF(j-1);
        q3iF=q3iiF+deltaq31F(j)+deltaq32F(j);
        if q3iF<0
            q3iF=0;
        end
    end
    end
    % Início da integração ao longo do período de impressão
    for ii=1:h/Dt;
        CH2O2normF=(CH2O2iF-CH2O2min)/(CH2O2max-CH2O2min); % Concentração
        normalizada de H2O2 no reator
        CAinormF=(CAiF-CAmin)/(CAmax-CAmin); % Concentração normalizada de
        carbono orgânico no reator

        taxaSCF=1000*kr*(CAinormF^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2normF^n3)*(radsolnorm^n4); % taxa
        de reação experimental no reator solar, mgC/(L.min)
        RAsF=taxaSCF;
        taxaSPF=2*taxaSCF*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no
        reator solar, gH2O2/L

        taxaLCF=1000*kr*(CAinormF^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2normF^n3)*(radlampnorm^n4);
        RAlampF=taxaLCF;
        taxaLPF=2*taxaLCF*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no
        reator lâmpada, gH2O2/L
        CH2O2iF=CH2O2iF+(1/Lamp*(q3iF*CH2O2ent-
        (q3iF+q0iF)*CH2O2iF+q2*(CH2O21F(j-Tau_S)-CH2O2iF)-taxaSPF*S)-taxaLPF)*Dt;
        CAiF=CAiF+(1/Lamp*(q0iF*(CA0iF-CAiF)+q2*(CA1F(j-Tau_S)-CAiF)-
        RAsF*S)-RAlampF)*Dt;
    end
    % Atualização das concentrações
    CH2O21F(j)=CH2O2iF;
    CA1F(j)=CAiF;
    q31F(j)=q3iF;
    q01F(j)=q0iF;
    CA01F(j)=CA0iF;
end
custo_total_certo=(ppreal*q3iF+ potencia_corr/10^6*pe/60);
end

```

```
if custo_total(i)>custo_total_certo
    custo_total2=custo_total_certo;
    potencia2=potencia_corr;
else
    custo_total2=custo_total(i);
    potencia2=potencia;
end
```

Apêndice V: Simulação em MatLab® para o reator com controle multivariado

```

% Simulação dinâmica simplificada do reator fotoquímico
clc
clear all
close all

global uss
global yss
global dss
global Tau_S
global CH2O2ent
global nsim
global potencia
global CASP

% Parâmetros
MMC=12; % Massa molar do carbono, mg/mmol
MMH2O2=34; % Massa molar do H2O2, mg/mmol
MMFE=56; % Massa molar do ferro, mg/mmol

% Carbono orgânico
CA0=450; % Concentração da alimentação de orgânicos, mg C/L
CAss=CA0; % Concentração inicial de orgânicos, mg C/L

% Ferro
FE=0.6; % Concentração de íons Fe, mM
CFE=FE*MMFE; % Concentração de íons Fe, mg/L

% Vazões e volumes
q0=1; % Vazão de Alimentação, L/min
q2=4; % Vazão de circulação, L/min
q30=0.5; % Vazão de solução de peróxido, L/min
V=26; % Volume do reator, L
S=10; %Volume do reator solar L
Lamp=16; % Volume do reator tanque, L

% Peróxido
H2O2=200; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no reator, mmol/L
CH2O2ent=H2O2*MMH2O2/1000; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no
reator, g/L

% Outros
radsol=500; % Radiação solar, W/m²
potencia=500; % Potência das lâmpadas, W
Tau_S=round(S/q2); % Atraso de transporte no Reator Solar, min
CASP=390; % Set-point para a concentração de carbono orgânico no reator, mgC/L

% Well stirred reactor + MPC with state-space model in the
% conventional form
%
nu=2; % Número de variáveis manipuladas
ny=1; % Número de variáveis controladas
T=1; % Tempo de amostragem (min)
p=50; % Horizonte de predição da saída
m=1; % Horizonte da entrada
nsim=1500; % Tempo de simulação em períodos de amostragem
q=[1]; % Peso das saidas (fator de importância da variável
controlada)
r=[1,10]; % Peso das entradas (fator de atenuação das variáveis
manipuladas)
u0=[q30 potencia]'; % Valores iniciais das manipuladas
y0=[425.18]; % Valores iniciais das controladas
d0=[q0 CA0 radsol]'; % Valores iniciais dos distúrbios
ys=[CASP]; % Set-point das controladas

```

```

umax=[10 625]';      % Máximo valor das manipuladas
umin=[0 0]';        % Mínimo valor das manipuladas
dumax=[.1 125]';    % Máximo valor da variação das manipuladas
uss=u0;
yss=y0;
dss=d0;

% Funções de Transferência
%1) Manipulada u1: Vazão de peróxido q3
G11=tf([-49.606],[32 1]);
G11z=c2d(G11,T,'zoh');

%2) Manipulada u2: Número de lâmpadas
G12=tf([-0.034],[29 1]);
G12z=c2d(G12,T,'zoh');

%3) Distúrbio d1: Vazão de alimentação: q0
G13=tf([21.733],[17 1]);
G13z=c2d(G13,T,'zoh');

%4) Distúrbio d2: Concentração de alimentação: CA0
G14=tf([0.916],[24 1]);
G14z=c2d(G14,T,'zoh');

%4) Distúrbio d3: Potência da radiação solar: radsol
G15=tf([-0.01786],[23 1]);
G15z=c2d(G15,T,'zoh');

Gz=[G11z G12z G13z G14z G15z];

[A,B,C,D]=ssdata(Gz);
nx=size(A,1);

Atil=[zeros(nx) eye(nx)
      -A       eye(nx)+A];

Btil=[B
      (eye(nx)+A)*B];

Btilu=Btil(:,1:2);
Btild=Btil(:,3:5);

Ctil=[C zeros(ny,nx)];

Atilp=0;
Btilpu=0;
Btilpd=0;
Ctilp=0;

[ur,yr]=MPC_TCC(p,m,nu,ny,nx,nsim,q,r,Atil,Btilu,Btild,Ctil,Atilp,Btilpu,Btilpd,Ctilp,umax,umin,dumax,u0,y0,ys,T);

% Impressão dos gráficos
figure(6),hold on
plot(yr(1,:),'k'),ylabel('COD (mgC/L)'),xlabel('Tempo (min)')
figure(7),hold on
plot(ur(1,:),'k'),ylabel('Vazão de peróxido (L/min)'),xlabel('Tempo (min)')
figure(8),hold on
plot(ur(2,:),'k'),ylabel('Potencia (W)'),xlabel('Tempo (min)')

potencianova=ur(2,nsim);
lamp=potencianova/125;
nlamp=round(lamp);
potencianova=nlamp*125;

umax=[20 potencianova]';      % Máximo valor das manipuladas
umin=[0 potencianova-0.01]'; % Mínimo valor das manipuladas
dumax=[.1 0]';              % Máximo valor da variação das manipuladas

```

```

[ur,yr]=MPC_TCC(p,m,nu,ny,nx,nsim,q,r,Atil,Btilu,Btild,Ctil,Atilp,Btilpu,Btilpd,Ctilp,umax,umin,dumax,u0,y0,ys,T);

%Comparação com os dados
[CA2,CH2022,q32,CA02]=comparaIV;

% Impressão dos gráficos
figure(9),hold on,plot(yr(1,:), 'k'),ylabel('COD (mgC/L)'),xlabel('Tempo (min)');
figure(9),hold on,plot(CA2, 'k');
figure(9),hold on,plot(CASP, 'k--');
legend('Concentração de orgânicos no reator com MPC', 'Concentração de orgânicos no reator com ff', 'Set-point');

figure(10),hold on, plot(ur(1,:), 'k'),ylabel('Vazão de peróxido (L/min)'),xlabel('Tempo (min)');
figure(10),hold on,plot(q32, 'k');
legend('Vazão de peróxido com MPC', 'Vazão de peróxido com ff');

figure(11),hold on, plot(ur(2,:), 'k'),ylabel('Potencia (W)'),xlabel('Tempo (min)');
figure(11),hold on, plot(potencia, 'k');
legend('Potência das lâmpadas com MPC', 'Potência das lâmpadas com ff');

function
[ur,yr]=MPC_TCC(p,m,nu,ny,nx,nsim,q,r,A,Bu,Bd,C,Ap,Bpu,Bpd,Cp,umax,umin,dumax,u0,y0,ys,T)

% Simulates the closed-loop system with MPC with state-space model in the
% incremental form
global uss
global yss
global dss
global Tau_S
global CH2O2ent

% Defining the initial conditions
xmk =1.0e+002*[-2.33521364750665
-0.04634571957367
0.53668257594412
0.12873549459143
-0.01922773677746
-2.33521364753101
-0.04634571955822
0.53668257593278
0.12873549457737
-0.01922773677591];
% xmk=zeros(size(A,1),1);
ymk=C*xmk;

yssp=[];
for i=1:p;
    yssp=[yssp;ys];
end

uk_1=u0;
ypk=y0;

Phi=[];
ThA=[];
ThD=[];
for in=1:p;
    Phi=[Phi;C*A^in];
    ThA=[ThA;C*A^(in-1)*Bu];
    ThD=[ThD;C*A^(in-1)*Bd];
end

% Creating the Dynamic Matrix
a=ThA;

```

```

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

% Phi,Theta,pause
% Matrices Qbar and Rbar
aux=[];
for in=1:p;
    aux=[aux q];
end
Qbar=diag(aux);

clear aux;
aux=[];
for in=1:m;
    aux=[aux r];
end
Rbar=diag(aux);
% Qbar,Rbar,pause

Mt=[];
Itil=[];
for in=1:m
    Mt=[Mt;eye(nu)];
    Itil=[Itil;eye(nu)];
end
Mtil=Mt;
for in=1:m-1
    Mt=[zeros(nu);Mt(1:nu*(m-1),:)];
    Mtil=[Mtil,Mt];
end

% Matrix H
H=Theta'*Qbar*Theta+Rbar;

% State observer
% Kf=zeros(nx,ny);
Kf = FKalman(ny,A,C,500);
%Auxiliary constraint matrix

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

% Starting simulation

for in=1:nsim;

    d=[0;0;0];
    if in==400
        d=[0.8;0;0];
    end

    if in==600
        d=[0;50;0];
    end

%   if in==800
%       d=[0;20;0];

```

```

% end

% if in==1200
%     d=[0;0;-200];
% end

ur(:,in)=uk_1(:);
yr(in)=ypk;

el=yssp-Phi*xmk-ThetaD*d;
ct=-el'*Qbar*Theta;

% Including constraints on the input changes
A1=[Mtil;-Mtil];
b1=[Umax-Itil*uk_1;-Umin+Itil*uk_1];
Ac=A1;
bc=b1;

% size(H),size(ct),size(A),size(b)
[dukk,fval,flag]=quadprog(H,ct,Ac,bc,[],[],-Dumax,Dumax);
duk=dukk(1:nu,1);

%
if in < 100/T
    duk=dukk(1:nu,1)*0;
end

% Correction of the last control input
xmk=A*xmk+Bu*duk+Bd*d;
ymk=C*xmk;

% Parâmetros do reator
if in==1
    CAant=yss;
    CH2O2ant=2.1729;
else
    CAant=CAv(in-1);
    CH2O2ant=CH2O2v(in-1);
end

if in<=Tau_S
    CATaus=yss;
    CH2O2Taus=2.1729;
else
    CATaus=CAv(in-Tau_S);
    CH2O2Taus=CH2O2v(in-Tau_S);
end

u=uk_1;
dent=d+dss;
if in>400
    dent=[0.8;0;0]+dss;
end

if in>800
    dent=[0.8;50;0]+dss;
end

% Montar os vetores resultados com a medida da planta
[CA,CH2O2]=Reator(CAant,CATaus,CH2O2ant,CH2O2Taus,u,dent,T);

CAv(in)=CA;
CH2O2v(in)=CH2O2;

ypk=CAv(in);

%Correction of the last measurement
de=ypk-ymk;
xmk=xmk+Kf*de;

```

```

    uk_1=uk_1+duk;
end
% xmk,C*xmk,ypk

function [CAN,CH2O2n]=Reator(CAant,CATauS,CH2O2ant,CH2O2TauS,u,d,T)

% Parâmetros
MMC=12; % Massa molar do carbono, mg/mmol
MMH2O2=34; % Massa molar do H2O2, mg/mmol
MMFE=56; % Massa molar do ferro, mg/mmol

% Ferro
FE=0.6; % Concentração de íons Fe, mM
CFE=FE*MMFE; % Concentração de íons Fe, mg/L

% Vazões e volumes
q2=4; % Vazão de circulação, L/min
V=26; % Volume do reator, L
S=10; %Volume do reator solar L
Lamp=16; % Volume do reator tanque, L

% Peróxido
H2O2=200; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no reator, mmol/L
CH2O2ent=H2O2*MMH2O2/1000; % Concentração de entrada de H2O2 quando entra no
reator, g/L

% Parâmetros utilizados para o cálculo da taxa de reação
kr=8; % Constante de velocidade da reação, mg/L.min
% Expoentes das concentrações de "reagentes"
n1=1.7;
n2=1.2;
n3=1.6;
n4=1.2;

% valores máximos e mínimos e normalização dos parâmetros de cálculo da taxa de
reação
CAmax=559.6; % Concentração máxima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CAmin=0; % Concentração mínima de carbono orgânico no reator, mgC/L
CFEmax=280; % Concentração máxima de íons Fe no reator, mg/L
CFEmin=11.2; % Concentração mínima de íons Fe no reator, mg/L
CH2O2max=30.6; % Concentração máxima de H2O2 no reator, g/L
CH2O2min=0.8; % Concentração mínima de H2O2 no reator, g/L
RadSmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator solar, W/m2
RadLmax=867; % Radiação global máxima que incide sobre o reator lâmpada, W/m2
Radmin=0; % Radiação global mínima que incide sobre o reator, W/m2
Dt=T/10; % Passo de integração, min
h=1.0; % Período de impressão

% Inputs
q3=u(1);
potencia=u(2);
q0=d(1);
CA0=d(2);
radsol=d(3);

    % Início da integração ao longo do período de impressão
    for ii=1:T/Dt;

        CFEnorm=(CFE-CFEmin)/(CFEmax-CFEmin); % Concentração normalizada de íons
Fe no reator
        radsolnorm=(radsol-Radmin)/(RadSmax-Radmin); % Radiação solar
normalizada que incide sobre o reator
        radlampnorm=(potencia-Radmin)/(RadLmax-Radmin); % Radiação das lâmpadas
normalizada que incide sobre o reator

        % Normalização da concentração de H2O2 no reator solar
        CH2O2norm=(CH2O2ant-CH2O2min)/(CH2O2max-CH2O2min); % Concentração
normalizada de H2O2 no reator

```

```

        % Normalização da concentração de carbono orgânico no reator
        CAnorm=(CAant-CAmin)/(CAmax-CAmin); % Concentração normalizada de
carbono orgânico no reator
        % Cálculo da taxa de reação no reator solar
        taxaSC=1000*kr*(CAnorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radsolnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator solar, mgC/(L.min)
        RAs=taxaSC;
        % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator solar
        taxaSP=2*taxaSC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
solar, gH2O2/L
        % Cálculo da taxa de reação no reator lâmpada
        taxaLC=1000*kr*(CAnorm^n1)*(CFEnorm^n2)*(CH2O2norm^n3)*(radlampnorm^n4);
% taxa de reação experimental no reator lâmpada, mgC/(L.min)
        RAlamp=taxaLC;
        % Cálculo da taxa de consumo de H2O2 no reator lâmpada
        taxaLP=2*taxaLC*MMH2O2/(MMC*1000); % taxa de consumo de H2O2 no reator
lâmpada, gH2O2/L
        % Cálculo da nova concentração de H2O2 no reator
%
        CH2O2=CH2O2ant+(1/Lamp*(q3*CH2O2ent-(q3+q0)*CH2O2ant+q2*(CH2O2TauS-
CH2O2ant)-taxaSP*S)-taxaLP);
        CH2O2=CH2O2ant+(1/Lamp*(q3*CH2O2ent-(q3+q0)*CH2O2ant+q2*(CH2O2TauS-
CH2O2ant)-taxaSP*S)-taxaLP)*Dt;
        % Cálculo da nova concentração de C no reator
%
        CA=CAant+(1/Lamp*(q0*(CA0-CAant)+q2*(CATauS-CAant)-RAs*S)-RALamp);
        CA=CAant+(1/Lamp*(q0*(CA0-CAant)+q2*(CATauS-CAant)-RAs*S)-RALamp)*Dt;
        CH2O2ant=CH2O2;
        CAant=CA;
    end

CA=CA;
CH2O2n=CH2O2;

function [Kalman] = FKalman(ny,A,C,it)

V=.5;
W=.5;
sM=size(A);
PP=eye(sM(1));
VV=eye(ny)*V;
WW=eye(sM(1))*W;
for j=1:it;
    PP = A*PP*A'-A*PP*C'*inv(VV+C*PP*C')*C*PP*A'+ WW;
end
Kalman = A*PP*C'*inv(VV+C*PP*C');

```