

# Modelagem de controle preditivo aplicada no controle da concentração de uma reação em um reator perfeitamente agitado

Rodolfo Ribeiro Oliveira Neto  
Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade Federal de Viçosa – Viçosa - MG  
E-mail: [rodolfo\\_62381@hotmail.com](mailto:rodolfo_62381@hotmail.com)

*Resumo- O desenvolvimento de controladores capazes de atuarem em sistemas não-lineares é um ramo importante da engenharia de controle. Este trabalho propõe aplicar um algoritmo para o controle de um processo químico industrial. Após o procedimento, constatou-se a eficácia do modelo de controle preditivo no controle da concentração de um produto em um reator perfeitamente agitado, proporcionando estabilidade do processo para diversos pontos de operação.*

*palavras-chave:* controle preditivo, reatores, química

## I. INTRODUÇÃO

A sociedade contemporânea vem buscando cada vez mais tornar tarefas que exijam esforço humano em tarefas automatizadas e que tragam resultados de maneira rápida e eficiente. O aumento crescente desta necessidade impacta na estrutura dos processos automatizados, solicitando que os mesmos se adaptem, tornando-se mais complexos.

No ramo da indústria, é notável que os combustíveis baseados no petróleo desempenham um papel vital para as demandas dos processos industriais. O crescente aumento na procura e o fato de ser um recurso natural finito, obrigam que os processos industriais envolvendo sua produção sejam realizados da maneira mais otimizada possível.

Em termos de otimização de um processo, duas palavras que proporcionam aumento dos lucros nos remetem: tempo e qualidade. Não se restringindo apenas ao processo de criação de combustíveis derivados do petróleo, qualquer processo industrial que seja executado de maneira rápida, minimizando custos de produção e mantendo a qualidade do produto final, trará uma maximização do lucro sobre o produto.[1]

Entretanto, grande parte dos processos industriais possuem especificações singulares que não permitem que simples algoritmos de controle satisfaçam suas condições de aplicação. Estas especificações incluem não-linearidade, sistemas multivariáveis, otimização de custo, restrições físicas, entre outras.

Um dos modelos práticos mais utilizados em processos químicos é conhecido como RPA, Reator Perfeitamente Agitado, ou CSTR, do inglês *Continuous Stirred Tank Reactor*. Este refere-se, em engenharia química, a um reator ideal usado para estimar as variáveis principais de uma operação unitária. Devido ao fato das reações químicas apresentarem decaimento exponencial, o controle da temperatura e concentração dos reagentes deve contemplar estratégias que permitam tomar em consideração estas características não-lineares.

As estratégias de controle, caem em controle clássico e esquemas de controle avançado, entre os quais, o controlador proporcional integral derivativo (PID) é o mais comum com mínimas respostas transitórias e baixa rejeição de carga. Outras estratégias propostas incluem o controlador *fuzzy* e o controlador *multi-loop* para melhorar a resposta transitória, mas todos eles não têm a robustez suficiente para algumas aplicações industriais. Então, o Controle Baseado em Modelo, CBM, é introduzido para facilitar o desempenho no transitório e rejeição de perturbações.[2]

O CBM depende de modelos bem descritos e precisos para descrever o relacionamento entre entrada e saída do processo. Sabe-se que o Modelo de Controle Preditivo MCP é a espinha dorsal da estratégia de controle CBM. O MCP trata-se de um algoritmo que calcula uma sequência de ajustes das variáveis manipuladas para otimizar o comportamento futuro de uma planta.

Este trabalho tem como objetivo a elaboração de uma estratégia de controle CPM no controle da concentração e temperatura de uma reação química que ocorre dentro de um reator CSTR.

## II. DESENVOLVIMENTO

Para se estudar a teoria de controle em sistemas dinâmicos, ou seja, que variam com o tempo, é

necessário uma breve conceituação de o que são e como descrevê-los. Em seguida, será apresentado o modelo do reator utilizado neste trabalho, bem como a teoria por detrás da estratégia de controle a ser empregada. Ao final, serão expostos os resultados e conclusões obtidas com esse trabalho.

### A. Sistemas Dinâmicos

Um sistema dinâmico é caracterizado pela variação de seus estados com o passar do tempo. Em outras palavras, dado um estímulo  $u$  e uma variável alvo  $y$ , este sistema é dito dinâmico se existir a função  $f$  tal que

$$\frac{dy}{dt} = f(y, u)$$

Este conceito pode ser estendido para uma abordagem matricial, que é mais comumente vista, através da inserção das variáveis de estado. A representação de um sistema dinâmico através de seu espaço de estado é útil para determinar diversos aspectos como: controlabilidade, observabilidade, entre outros.[3] Um típico sistema representado por suas equações de espaço de estado é dado por

$$\begin{cases} \dot{X} = A \cdot X + B \cdot U \\ Y = C \cdot X + D \cdot U \end{cases}$$

Quando as matrizes  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $D$  são invariantes no tempo, o sistema é dito linear. Caso contrário, são denominados sistemas não-lineares, que representam uma grande parcela dos sistemas na engenharia.

Na engenharia de controle é comum o termo linearização que se refere a uma técnica capaz de transformar um sistema não-linear em um sistema linear, em torno de um ponto de operação. Fora deste, a linearização pode não representar fidedignamente o sistema original.[3]

O procedimento para a linearização de um sistema se dá pela expansão por série de Taylor das equações do sistema tornando-o linear em termo dos desvios de suas variáveis.

O sistema dinâmico utilizado neste trabalho apresenta aspectos não-lineares. Portanto, será necessária a sua linearização.

### B. O Problema

O CSTR é um modelo amplamente utilizado nas industriais petrolíferas. As variáveis manipuladas

deste processo são a concentração  $y_2(t)$  e a temperatura  $y_1(t)$  de um produto  $A$ .

Como ilustrado na Figura 1, na entrada do CSTR o reagente  $A$  é alimentado a um fluxo constante  $F$  através de uma área de tubulação  $A$ . Após agitação, o produto flui para fora do tanque na mesma velocidade que o reagente  $A$  é alimentado no tanque. A estratégia de controle requer que a temperatura do líquido de refrigeração seja modificada para manter a concentração e temperatura do reagente  $A$  nos níveis desejados. O CSTR é modelado usando análise do espaço de estados. Como a temperatura no tanque pode variar significativamente durante a operação do reator, é desejável certificar-se de que esta variável de processo seja mantida dentro dos limites.[4]

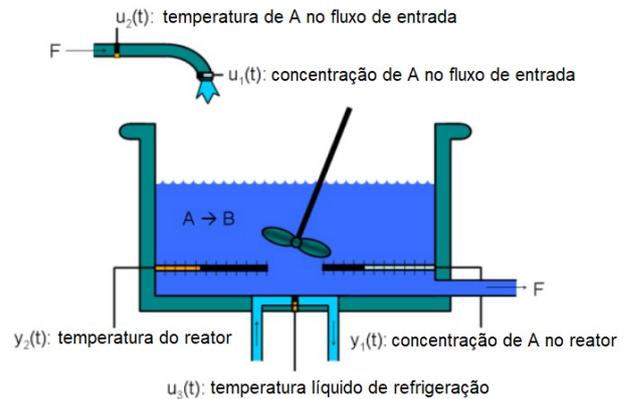


Figura 1: Esboço do sistema de um CSTR

O modelo dinâmico, considerado na execução deste trabalho, segue as seguintes premissas:

- Densidade constante do componente  $A$  no reator;
- A reação que ocorre no reator é uma reação de primeira ordem irreversível do tipo  $A \rightarrow B$ ;
- A reação é exotérmica e o processo é adiabático.

### C. Modelo Matemático

A modelagem do sistema do CSTR baseia-se, primeiramente, nos princípios da conservação de massa e balanceamento entre massa total, energia e moles dentro de um dado volume de controle. De modo geral, a equação matemática que descreve a lei geral de balanceamento, por unidade de tempo e considerando um volume de controle, é dada por:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = B_{dentro} - B_{fora} + B_{gerado} - B_{perdas}$$

onde B é a variável física que se deseja estudar, e.g. massa, mol, energia.[5]

Para a temperatura do reator teremos:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{v(T_f - T_c)} - \frac{H}{C_p \cdot \rho} \cdot r(t) - \frac{U \cdot A}{C_p \cdot \rho \cdot V} (T - T_c)$$

que mostra que o acúmulo de energia, através do aumento da temperatura, é um balanço entre a energia liberada pelo processo, a reação de Arrhenius e a taxa de transferência de calor entre meio e o volume de controle. Onde:

- F – fluxo de entrada no tanque;
- V – volume do tanque;
- A – área do tanque;
- T – temperatura do tanque;
- T<sub>f</sub> – temperatura de *feedback*;
- T<sub>c</sub> – temperatura do refrigerador;
- H – coeficiente de transferência térmica;
- C<sub>p</sub> – capacidade térmica;
- v – coeficiente estequiométrico;
- U – coeficiente de transferência de calor global;
- ρ – densidade do líquido.

A reação de Arrhenius mostra a dependência entre temperatura e a velocidade de uma reação. Sua modelagem matemática é dada pela equação:

$$r(T) = k e^{-\frac{E}{R} \cdot T}$$

onde k é denominado constante pré-exponencial, E<sub>a</sub> a energia de ativação da reação, R a constante universal dos gases e T a temperatura absoluta da reação.

Pelo mesmo princípio, a equação de balanceamento para a concentração molar é dada por:

$$\frac{dC_0}{dt} = \frac{F}{v} \cdot (C_{af} - C_a) - r(t) \cdot C_a$$

onde:

- C<sub>a</sub> – concentração de A na entrada;
- C<sub>o</sub> – concentração de saída;
- C<sub>af</sub> – concentração de *feedback*,

Através das equações do modelo dinâmico, é possível, então, estimar e controlar a temperatura interna T e a concentração C<sub>a</sub> do produto A em B na saída do tanque.[6]

#### D. Modelo de Controle Preditivo

Todos os algoritmos de controle preditivo do modelo possuem 3 elementos fundamentais:

desenvolver um modelo de predição, definir uma função custo e obter a lei de controle.[7]

A cada instante de amostragem, o modelo linearizado, usando a série de Taylor, é usada para prever o comportamento futuro da planta ao longo de um número finito de etapas de tempo futuro, digamos N<sub>p</sub> que é chamado horizonte de previsão. Dado um ponto de operação

$$(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n, \bar{u}_1, \bar{u}_2, \dots, \bar{u}_n)$$

a predição do modelo N<sub>p</sub> passos à frente é dada por:

$$x[k + (j + 1)] = A_i(x[k + j] - \bar{x}_i) + B_i(u[k + j] - \bar{u}_i)$$

$$\forall j \in \{0, 1, 2, \dots, N_c - 1\}$$

$$x[k + (j + 1)] = A_i(x[k + j] - \bar{x}_i) + B_i(u[k + N_c - 1] - \bar{u}_i)$$

$$\forall j \in \{N_c, \dots, N_p - 1\}$$

onde N<sub>c</sub> é o horizonte de controle. A predição da variável de saída N<sub>p</sub> passos à frente é dada por:

$$y[k + j] = C x[k + j] \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, N_p\}$$

Para um *set-point* futuro y<sub>i</sub>[k+j], a função custo será dada por:

$$J = \sum_{j=1}^{N_p} [y_r[k + j] - y[k + j]]^T Q [y_r[k + j] - y[k + j]] + \sum_{j=0}^{N_c} [u[k + j] - u[k + j - 1]]^T R [u[k + j] - u[k + j - 1]]$$

onde Q é denominada matriz de ponderação de erros e R a matriz de ponderação do controlador, sob a seguinte restrição:

$$u_{\min} \leq u[k + j] \leq u_{\max}$$

$$\forall j \in \{0, 1, 2, \dots, N_c - 1\}$$

$$y_{\min} \leq y[k + j] \leq y_{\max}$$

$$\forall j \in \{1, 2, \dots, N_p\}$$

$$du_{\min} \leq u[k + j] - u[k + j - 1] \leq du_{\max}$$

$$\forall j \in \{1, 2, \dots, N_c - 1\}$$

Dado um conjunto de N<sub>c</sub> entradas futuras

$$u_f = (u[k], u[k + 1], \dots, u[k + N_c - 1])$$

para se gerar a lei de controle, é necessário apenas minimizar a função

$$c[k] = \min \{u_f J\}$$

### III. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Utilizando o *software* Matlab®, foi elaborado o diagrama de blocos apresentado na Figura 2.

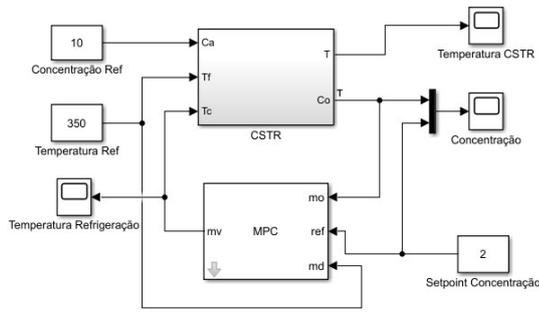


Figura 2: Diagrama geral da planta controlada

As especificações utilizadas no modelo do bloco CSTR encontram-se descritas na Tabela 1. Foi necessária a inclusão de duas variáveis denominadas  $C_o[0]$  e  $T[0]$ , que tratam-se das condições iniciais de temperatura e concentração do tanque.

Tabela 1: Dados do CSTR

Variável	Valor
$F/v \left( \frac{K}{s} \right)$	1
$U \cdot A / C_p \cdot \rho \cdot V \left( \frac{1}{s} \right)$	0.3
$H / C_p \cdot \rho \left( K \right)$	-11.20
$E_a / R$	5963.6
$k$	34930800
$C_a \left( \frac{Kmol}{L} \right)$	10
$T_f \left( K \right)$	380
$C_o[0] \left( \frac{Kmol}{L} \right)$	8.5
$T[0] \left( K \right)$	311

Para o controlador MCP, foram escolhidas as especificações elencadas na Tabela 2.

Tabela 2: Características do MCP

Característica	Valor
Nº plantas linearizadas	1
Horizonte de Previsão	15
Horizonte de Controle	2
Q	[0 1]
R	[0 1]

As matrizes Q e R foram escolhidas arbitrariamente, e seu ajuste pode impactar em melhorias para o controle final. Foram realizados dois ensaio para demonstrar a eficácia do controlador MCP.

#### A. Variação na concentração de referência

Este ensaio propôs alterações significativas na concentração de referência  $C_o$  ao manter os níveis de concentração e temperatura de entrada fixos. Após a aplicação do algoritmo, foram obtidas formas de onda apresentadas na Figura 3.

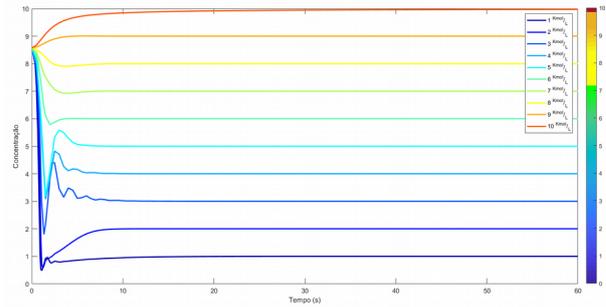


Figura 3: Concentração da solução no tanque

Percebe-se que para uma variação grande na concentração de referência  $C_o$ , mantendo-se a concentração de entrada  $C_a$  e a temperatura de entrada  $T_f$ , a concentração de saída  $C_o$  acompanha sua referência com tempo de acomodação na ordem de 20s.

A Figura 4 demonstra as variações da temperatura do líquido do refrigerador para que os dados obtidos de concentração na Figura 3 pudessem ser alcançados.

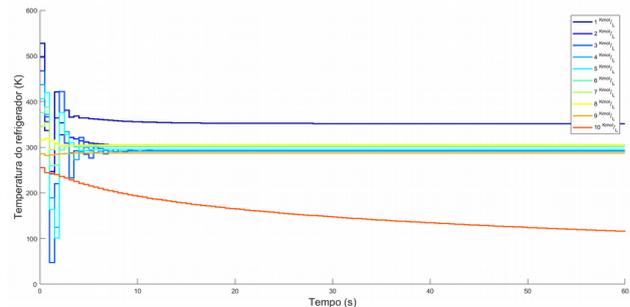


Figura 4: Temperatura do refrigerador

Percebe-se que quanto maior é a concentração de referência menos temperatura do refrigerador é necessária para manter a concentração no reator no nível desejado. Isso entra em consonância com o fato da reação ser do tipo exotérmica, necessitando que tenha menos energia associada para que a mesma produza o produto final.

#### B. Variação na concentração de entrada

De maneira análoga, foram realizadas as aquisições dos dados para uma concentração de saída  $C_o$  fixa em 2 Kmol/L com a concentração de entrada variando de 10 a 13 Kmol/L. O resultado obtido para o nível de concentração da solução dentro do tanque é ilustrado na Figura 5.

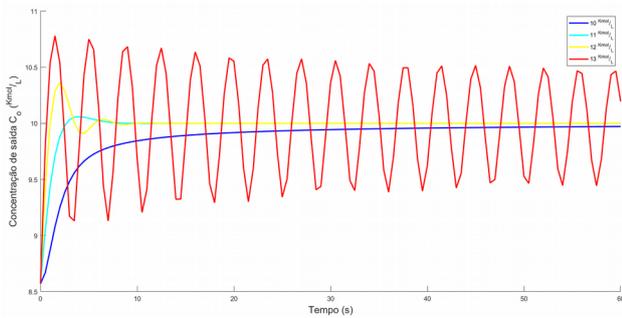


Figura 5: Concentração da solução para uma entrada variada

A temperatura interna do tanque para a mesma variação é apresentada na Figura 6.

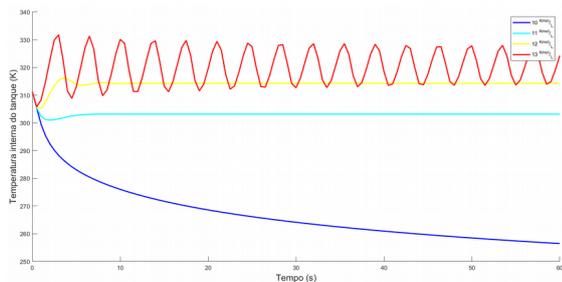


Figura 6: temperatura interna do tanque

Por fim, a Figura 7 ilustra as variações na temperatura do líquido refrigerador para cada uma das concentrações de entrada do processo.

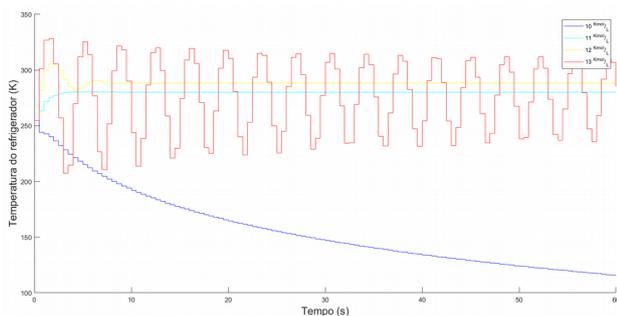


Figura 7: Temperatura do líquido refrigerador

Neste ensaio, pode-se constatar que uma variação acima de 30% entre a concentração da entrada  $C_a$  e os valores de referência de concentração do produto no tanque, produziram níveis de concentração instáveis. Portanto, o controlador não realizou seu papel para este procedimento.

#### IV. CONCLUSÃO

Este trabalho teve por finalidade demonstrar a utilização de um algoritmo específico para o

controle de processos não-lineares. O MCP demonstrou-se viável para o controle do processo de um reator do tipo perfeitamente agitado.

No ramo industrial, sua aplicação pode reduzir gastos gerados pela utilização de controladores convencionais, já que produz ações de controle que minimizam o custo do processo.

Em trabalhos futuros espera-se realizar o controle da temperatura no interior do reator em conjunto com o controle da concentração do produto da reação.

#### V. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] KUPFER, D. e HASENCLEVER, L. **Economia Industrial: Fundamentos teóricos e práticos no Brasil**, 2ª ed., Campus, 2013.
- [2] PEREIRA, J. e BOWLES, J. B., **A comparison of PID and fuzzy control of a model car**, Proceedings of 1994 IEEE 3rd International Fuzzy Systems Conference, Orlando, pp. 849-854, 1994.
- [3] OGATA, K., **Engenharia de Controle Moderno** – 4ª ed., Prentice-Hall, 2003.
- [4] LI, X., et. al., **Application of economic MPC to a CSTR process**, 2016 IEEE Advanced Information Management, Communicates, Electronic and Automation Control Conference (IMCEC), Xi'an, pp. 685-690, 2016.
- [5] SEBORG, D. E., et. al. **Process Dynamics and Control**, 3ª ed, 2014, John Wiley and Sons Inc..
- [6] TRIVEN, M. B. e RATNAKUMARI, U. V. **Comparative study of neoteric adaptive model predictive controller with model predictive control for temperature regulation of CSTR**, 2016 International Conference on Signal Processing, Communication, Power and Embedded System (SCOPEs), Paralakhemundi, pp. 2120-2024, 2016.
- [7] AGARWAL, V. et. al. **A Model Predictive Controller Using Multiple Linear Models for Continuous Stirred Tank Reactor (CSTR) and ITS Implementation Issue**, 2014 Fourth International Conference on Communication Systems and Network Technologies, Bhopal, pp. 1001-1005, 2014.