

Diana Esperanza Sandoval Rodríguez

# **CONTROLE PREDITIVO NÃO LINEAR PARA SISTEMAS DE PARÂMETROS DISTRIBUÍDOS**

**São Carlos - SP, Brasil,**

**Agosto de 2014.**



Diana Esperanza Sandoval Rodríguez

# **CONTROLE PREDITIVO NÃO LINEAR PARA SISTEMAS DE PARÂMETROS DISTRIBUÍDOS**

Dissertação apresentada à Faculdade de  
Engenharia Química como parte dos requi-  
sitos exigidos para a obtenção do título de  
Mestre em Engenharia Química

Universidade Federal de São Carlos – UFSCar

Faculdade de Engenharia Química

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Wu Hong Kwong

São Carlos - SP, Brasil,

Agosto de 2014.

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da  
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

S218cp

Sandoval Rodríguez, Diana Esperanza.

Controle preditivo não linear para sistemas de parâmetros distribuídos / Diana Esperanza Sandoval Rodríguez. -- São Carlos : UFSCar, 2014.

89 p.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2014.

1. Engenharia química. 2. Controle preditivo não-linear. 3. Reator de branqueamento. 4. Colocação ortogonal. 5. Colocação equidistante. 6. Diferenças finitas. I. Título.

CDD: 660 (20<sup>a</sup>)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE Mestrado DE  
DIANA ESPERANZA SANDOVAL RODRÍGUEZ APRESENTADA AO PROGRAMA DE  
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL  
DE SÃO CARLOS, EM 28 DE AGOSTO DE 2014.

BANCA EXAMINADORA:

*Wu Hong Kwong*  
Wu Hong Kwong  
**Orientador, UFSCar**

*Nivaldo Aparecido Corrêa*  
Nivaldo Aparecido Corrêa  
**USP**

*Antonio José Gonçalves da Cruz*  
Antonio José Gonçalves da Cruz  
**UFSCar**



# Agradecimentos

Aos meus pais, Jesús e Esperanza, por seu apoio e amor incondicional em cada etapa da minha vida.

Ao William Nova, pela força e o carinho.

Ao professor Wu Hong Kwong, pela orientação e dedicação demonstrada em todas as etapas deste trabalho.

Aos integrantes da banca examinadora, pelas valiosas contribuições apresentadas.

A todos os professores e colegas do Departamento da Engenharia Química, que de diversas formas contribuíram neste período de aprendizado.

A CAPES pelo suporte financeiro.





# Resumo

Em geral, os processos químicos podem ser representados mediante modelos matemáticos que, no caso dos sistemas de parâmetros concentrados, incluem equações diferenciais ordinárias, ou então, equações diferenciais parciais, quando são sistemas de parâmetros distribuídos, sendo necessário nos dois casos o uso de métodos numéricos na resolução destes modelos, com a finalidade de simular, analisar e controlar o processo.

A implementação de sistemas de controle em processos químicos, traz consigo múltiplas vantagens, entre essas, a melhora e a estabilidade nas taxas de produção, a garantia da qualidade do produto e a possibilidade de uma operação segura do processo. Desta forma, nos últimos 30 anos, foram desenvolvidas diferentes metodologias de controle, sendo uma das técnicas mais empregadas, o Controle Preditivo Baseado no Modelo. Seu sucesso se deve ao fato de que este tipo de controle aceita restrições nas variáveis de entrada e saída do processo, determinando os movimentos futuros deste, além de otimizar uma função objetivo para conseguir levar a saída do processo até o Set-Point desejado. Assim, o objetivo deste projeto é implementar o Controlador Preditivo com Modelo Não Linear (CPNL) para um reator de branqueamento de celulose, mediante o uso de dióxido cloro, cujo modelo matemático está constituído por equações diferenciais parciais, sendo assim, um modelo de parâmetros distribuídos. Na implementação do controlador, a planta é discretizada, mediante o Método das Diferenças Finitas e o modelo do processo é resolvido com a técnica de Colocação Ortogonal. A integração dos sistemas de equações diferenciais ordinárias resultantes é realizada mediante o método de Runge- Kutta. O Controlador Preditivo foi comparado com um Controlador Proporcional-Integral (PI). Os estudos mostraram que o CPNL possui melhor desempenho, apresentando uma resposta mais rápida e valores da Integral do Erro Absoluto (IAE) e a Integral do Erro Quadrático (ISE) menores que os calculados para o controlador PI.

**Palavras-chaves:** Controle Preditivo Não Linear, Reator de Branqueamento, Colocação Ortogonal, Diferenças Finitas.



# Abstract

In general, the chemical processes can be represented using mathematical models, in the case of lumped systems include ordinary differential equations, or, partial differential equations, when distributed parameter systems using methods is necessary in both cases numerical resolution in these models, with the purpose to simulate, analyze and control the process.

The implementation of control systems in chemical processes, brings with it many advantages, among these, the improvement and stability in production rates, ensuring product quality and the possibility of a safe operation of the process. Thus, in the last 30 years, different control methodologies were developed, one of the most used techniques, the Model Predictive Control Based on. Its success is due to the fact that this type of control accepts constraints on input variables and process output, determining the future of this movement, while optimizing an objective function can lead to the output of the process until the desired set point. The objective of this project is to implement the Model Predictive Controller with Nonlinear (CPNL ) for a reactor pulp bleaching by the use of chlorine dioxide, whose mathematical model is comprised of partial differential equations, thus being a model parameter distributed. Implementation of the controller, the plant is discretized by the Finite Difference Method and the process model is solved with the technique of Orthogonal Collocation. The integration of the resulting ordinary differential equations systems is performed by the method of Runge-Kutta. The Predictive Controller was compared with a Controller Proportional-Integral (PI). Studies have shown that CPNL has better performance, with faster response and values of the Integral Absolute Error (IAE) and Integral Square Error (ISE) smaller than those calculated for the PI controller.

**Key-words:** Nonlinear Predictive Control, Reactor Bleaching, Orthogonal Collocation, Finite Difference.



# Lista de figuras

Figura 1 – Elementos Básicos no Controle Preditivo. . . . .	27
Figura 2 – Fluxograma do processo e equipamentos para estágio com dióxido de cloro. . . . .	38
Figura 3 – Esquema de Implementação dos Métodos Numéricos na Resolução do Reator de Branqueamento de Celulose . . . . .	48
Figura 4 – Divisão do Comprimento do Reator de Branqueamento de Celulose.	49
Figura 5 – Discretização no Espaço do Reator de Branqueamento. . . . .	50
Figura 6 – Diagrama de Blocos do Processo Malha Aberta. . . . .	56
Figura 7 – Diagrama de Blocos do Processo Malha Fechada. . . . .	57
Figura 8 – Resposta na saída de Lignina ao Degrau no Dióxido de Cloro. . . .	57
Figura 9 – Saída de Lignina em Função da Entrada do Dióxido de Cloro. . . .	59
Figura 10 – Construção da Matriz Dinâmica de Controle . . . . .	61
Figura 11 – Diagrama de Blocos do Controle Preditivo Não Linear . . . . .	63
Figura 12 – Perfil de Saída de Lignina em Função do Tempo Empregando Diferenças Finitas. . . . .	65
Figura 13 – Perfil de Saída de Lignina e Cloro em Função do Tempo Empregando Colocação Ortogonal. . . . .	66
Figura 14 – Desvio do Set-Point Estabelecido para Lignina. . . . .	68
Figura 15 – Resposta na Saída de Lignina com Controle PI. . . . .	68
Figura 16 – Ações de Controle na Entrada de Dióxido de Cloro Estabelecidas pelo Controlador PI. . . . .	69
Figura 17 – Reator Planta Diferenças Finitas . . . . .	70
Figura 18 – Reator Modelo Colocação Ortogonal. . . . .	70
Figura 19 – Colocação Ortogonal e Diferenças Finitas . . . . .	71
Figura 20 – Saída de Lignina com Controle CPNL Implementado Set-Point=12. .	71
Figura 21 – Coeficientes da Matriz Dinâmica de Controle. . . . .	72
Figura 22 – Ações de Controle na Entrada de Dióxido de Cloro para o Controle na Saída de Lignina Set-Point=12. . . . .	73
Figura 23 – Diferença Entre o Set-Point de Lignina e Saída do Reator Set-Point =12. . . . .	73
Figura 24 – Ações de Controle do CPNL com L=1, 2 e 3. . . . .	74
Figura 25 – Saída de Lignina com L=1, 2 e 3. . . . .	74



# Lista de quadros

2.1	Descrição dos Processos de Branqueamento Químico . . . . .	42
4.1	Principais Elementos na Implementação do CPNL em um Reator de Branqueamento de Celulose . . . . .	45
4.2	Caraterísticas dos Métodos Numéricos Utilizados . . . . .	56
4.3	Parâmetros do Controle Preditivo Não Linear . . . . .	61
5.1	IAE e ISE para o PI e CPNL com Set-Point =12 . . . . .	72
5.2	Valores de IAE e ISE para Variações no Horizonte de Controle L . . . .	74





# Lista de abreviaturas e siglas

CHMP	Controle Heurístico por Modelo Preditivo
CMD	Controle com Matriz Dinâmica
CPNL	Controle Preditivo com Modelo Não Linear
EDO's	Equações Diferenciais Ordinárias
EDP's	Equações Diferenciais Parciais
IAE	Integral do Erro Absoluto
ISE	Integral Square Error
MCP	Modelo de Controle Preditivo
MIMO	Múltiplas Entradas e Múltiplas Saídas
P	Proporcional
PD	Proporcional – Derivativo
PDE	Partial Differential Equation
PI	Proporcional – Integral
PID	Proporcional – Integral – Derivativo
SISO	Singular In Singular Out



# Lista de símbolos

$b$	Bios Correction
$\beta$	Matrix Dinâmica de Controle
$Cl_0$	Condições Iniciais de Dióxido de Cloro
$Cl$	Concentração de Dióxido de Cloro
$C_{in}$	Alimentação de Dióxido de Cloro na Entrada do Reator
$Cl_{Sp}$	Set – point Dióxido de Cloro
$C_{ss}$	Valor do Dióxido de Cloro na Entrada do Reator em Estado Estacionário
$D$	Dispersão
$\hat{E}_o$	Erro na Predição
$h_i$	Resposta ao Pulso Unitário
$l$	Comprimento do Reator
$k$	Ganho do Processo em Estado Estacionário
$k_c$	Lei de Controle
$L$	Concentração de Lignina
$L_0$	Condições Iniciais de Lignina
$L_{in}$	Alimentação de Lignina na Entrada do Reator
$L_{Sp}$	Set – point Lignina
$N$	Horizonte do Processo
$Pe$	Número de Peclet
$R$	Horizonte de Previsão
$r_C$	Cinética de Reação para o Dióxido de Cloro
$r_L$	Cinética de Reação para o Lignina
$t$	Tempo

$t_d$	Tempo Morto do Processo
$t_s$	Tempo de Resposta da Malha Aberta
$\tau$	Constante de Tempo do Processo
$\tau_I$	Constante de Tempo Integral
$u_k$	Entrada ao Processo
$v$	Velocidade Superficial
$y_k$	Saída do Processo no Instante k
$y_m$	Saída do Modelo
$y_p$	Saída da Planta
$y_r$	Trajectoria de Referência
$\hat{y}_{k+1}$	Predição da Saída do Processo
$z$	Variável de Espaço

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>21</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>23</b>
<b>2.1</b>	<b>Sistemas de Controle de Processos</b>	<b>23</b>
2.1.1	Controle de Processos Proporcional - Integral	24
2.1.2	Controle Preditivo com Modelo Linear	25
2.1.3	Controle Preditivo com Modelo Não Linear (CPNL)	28
<b>2.2</b>	<b>Métodos Numéricos Empregados em Sistemas Não Lineares</b>	<b>31</b>
2.2.1	Métodos de Discretização de Equações Diferenciais	34
2.2.1.1	Método das Diferenças Finitas	35
2.2.1.2	Colocação Ortogonal	35
<b>2.3</b>	<b>Otimização com Mínimos Quadrados</b>	<b>37</b>
<b>2.4</b>	<b>Reator de branqueamento de celulose</b>	<b>38</b>
2.4.1	Variáveis do Processo de Branqueamento	39
2.4.2	Modelo Matemático do Reator de Branqueamento de Celulose	40
<b>3</b>	<b>OBJETIVOS</b>	<b>43</b>
<b>4</b>	<b>MATERIAIS E MÉTODOS</b>	<b>45</b>
<b>4.1</b>	<b>Modelo Matemático do Processo</b>	<b>46</b>
4.1.1	Método Numérico	47
4.1.1.1	Desenvolvimento das Diferenças Finitas no Reator de Branqueamento de Celulose	48
4.1.1.2	Desenvolvimento da Colocação Ortogonal no Reator de Branqueamento de Celulose	52
<b>4.2</b>	<b>Controle de Processos Proporcional-Integral</b>	<b>56</b>
<b>4.3</b>	<b>Controle Preditivo com Modelo Não Linear</b>	<b>58</b>
<b>4.4</b>	<b>CrITÉrios para Avaliação do Desempenho dos Controladores</b>	<b>63</b>
<b>5</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>65</b>
<b>5.1</b>	<b>Modelo matemático empregado</b>	<b>65</b>
5.1.1	Diferenças finitas	65
5.1.2	Colocação ortogonal	66
<b>5.2</b>	<b>Tipos de Controle Usados no no Reator de Branqueamento de Celulose</b>	<b>67</b>
5.2.1	Controle Proporcional – Integral	67
5.2.1.1	Simulação Reator de Branqueamento de Celulose em Malha Aberta	67
5.2.1.2	Implementação do controle PI	67

5.2.2	Controle Preditivo Não Linear . . . . .	69
5.2.3	Comparação do Controlador PI com o Controlador CPNL . . . . .	72
5.2.4	Efeito do Horizonte de Controle no CPNL . . . . .	73
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES . . . . .</b>	<b>75</b>
<b>7</b>	<b>SUGESTÕES . . . . .</b>	<b>77</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>79</b>
	<b>APÊNDICES . . . . .</b>	<b>81</b>
	<b>APÊNDICE A – CODIGO CONTROLE PREDITIVO NÃO LINEAR .</b>	<b>83</b>
A.1	CPNL 1807 . . . . .	83
A.2	MPCNL1807 . . . . .	84
A.3	CPI1R3 . . . . .	86
A.4	CILPIR3 . . . . .	88

# 1 INTRODUÇÃO

Todo processo químico é a combinação de diferentes operações unitárias (trocadores de calor, reatores, colunas de destilação, absorvedores, tanques, evaporadores, etc). O objetivo principal de qualquer unidade é transformar matérias primas, junto com energia aplicada, em produtos finais, porém, também precisa-se atingir objetivos específicos, tais como: garantir a segurança durante a operação do processo, manter as taxas de produção estabelecidas que maximizem o lucro, e produzir produtos de acordo com as especificações de qualidade definidas. Assim, monitorar de forma contínua e realizar mudanças no processo, são ações essenciais que ajudam a garantir o cumprimento do objetivo principal e dos objetivos específicos. Estas ações são desenvolvidas mediante o controle de processos (STEPHANOPOULOS, 1984).

A maior parte dos processos químicos podem ser representados mediante modelos matemáticos não lineares e dependentes de mais de uma variável. Desta forma, além da seleção da metodologia de controle, a seleção dos métodos numéricos empregados na resolução dos modelos matemáticos que representam a dinâmica do processo químico é de grande importância. Com base nestas considerações, surgiu o interesse de se estudar o Controle Preditivo Não Linear, implementado em um reator de branqueamento de celulose com dióxido de cloro, de acordo com o modelamento matemático e parâmetros do processo apresentados por Renou (2000). Na implementação do controle, a planta é discretizada mediante o Método das Diferenças Finitas e o modelo do processo, mediante Colocação Ortogonal. Assim, escolheu-se o processo de branqueamento de celulose por dióxido de cloro, devido a que, o modelo matemático desse processo é caracterizado por equações diferenciais parciais parabólicas.

O presente trabalho encontra-se dividido em cinco capítulos. No primeiro, é apresentada a introdução do projeto, no segundo capítulo, tratam-se os principais temas empregados no desenvolvimento deste trabalho tais como: tipos de controladores, métodos numéricos, otimização por mínimos quadrados e princípios do reator de branqueamento de celulose. No seguinte capítulo, mostra-se os materiais e os métodos empregados para o desenvolvimento dos métodos numéricos e o desenho dos controladores que são de interesse deste estudo.

No capítulo 3 são apresentados os objetivos e no capítulo 4, são apresentados os resultados da implementação dos métodos numéricos na resolução do modelo do reator de branqueamento de celulose e o uso dos controladores no processo. No último capítulo, a partir dos objetivos propostos, são apresentadas as conclusões geradas no desenvolvimento deste projeto.





## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 Sistemas de Controle de Processos

Segundo Stuart Bennett (1996), os sistemas de controle feedback vem sendo desenvolvidos durante mais de 2000 anos; como por exemplo o relógio de água atribuídos a Ktesibios (270aC). Mas a partir dos anos 50 que, com ajuda do crescimento da tecnologia, o controle de processos tomou maior importância na indústria e na pesquisa.

As estratégias de controle podem ser classificadas como: Feedback, Feedforward e Controle Avançado. Sendo as estratégias Feedback, aquelas que medem a variável controlada e a usam para ajustar a variável manipulada. Neste tipo de controle, a variável de perturbação não é medida. No caso das estratégias Feedforward, a variável de perturbação é medida, e não a variável controlada. Dentro do Controle Avançado se tem estratégias especializadas que proporcionam melhoras no controle dos processos. Algumas destas estratégias são: Controle Cascada, Compensação de Tempo de Atraso, Controle Inferencial, Controle Seletivo, Controle Não Linear, Controle Adaptativo, Controle Multivariado e Controle Preditivo (SEBORG et al., 2003). Essas estratégias de controle são especialmente desenvolvidas para processos que apresentam características inerentes, que não podem ser manejadas com o controle convencional, tais como:

- a. A dinâmica do processo nem sempre é conhecida.
- b. Modelo detalhado, porém, de ordem maior, de parâmetros distribuídos e/ou não linear.
- c. Sua linearização gera perdas de informação sobre o processo.
- d. A interação do processo é multivariável.
- e. Possui restrições nas variáveis manipuladas e controladas.
- f. Não todas as variáveis são medidas continuamente.
- g. As variações das condições nas vizinhanças ao processo e na qualidade da matéria prima variam.
- h. O processo apresenta tempos mortos e perturbações. (BETTAYEB; SHAH, 2004).

O Controle Preditivo é uma das técnicas de controle avançado com maior impacto na engenharia de controle, tornou-se a metodologia de controle mais importante, após o PID (MACIEJOWSKI, 1999).

### 2.1.1 Controle de Processos Proporcional - Integral

O Controle Feedback é baseado no desvio da variável controlada do processo frente ao Set-Point estabelecido. A forma como o controlador determina o sinal de controle, faz com que existam diferentes tipos de Controle Feedback (OGUNNAIKE; RAY, 1994).

Os tipos de Controle Feedback característicos são: Controle Proporcional, Controle Integral e Controle Derivativo. Na prática, é mais comum empregar esses tipos de controles em conjuntos como, PI, PD ou PID. Mesmo nos casos em que o Controle Proporcional pode ser usado de forma direta, os controles, integral e derivativo, quase nunca podem ser usados de forma independente.

No presente trabalho será apresentado o controle PI. Sendo  $p(t)$ , o sinal dado pelo controle e  $p_s$ , o valor do sinal quando o erro ( $\epsilon$ ), é igual a zero, o controle Proporcional-Integral é dado por:

$$p(t) = p_s + k_c \left[ \epsilon(t) + \frac{1}{\tau_I} \int_0^t \epsilon(t) dt \right] \quad (2.1)$$

A Equação 2.1 contém a parte proporcional e integral do erro no tempo. Depois de empregar transformada da Laplace na Equação 2.1, obtém-se a Equação 2.2:

$$c(s) = k_c \left( 1 + \frac{1}{\tau_I s} \right) \epsilon(s) \quad (2.2)$$

Assim a função de transferência para o controlador Proporcional – Integral é:

$$G_c = k_c \left( 1 + \frac{1}{\tau_I s} \right) \quad (2.3)$$

Os ajustes dos parâmetros do processo e do controlador  $k_c$ ,  $\tau$ ,  $\tau_I$  e  $t_d$ , podem ser realizados mediante o método da curva de reação de Cohen-Coon. Baseado no gráfico da resposta do processo, calcula-se os parâmetros do processo e do controlador. A resposta de um processo de primeira ordem com tempo morto é:

$$G_c = \frac{k \exp^{-t_d s}}{\tau s + 1} \quad (2.4)$$

onde

$$k = \frac{\Delta \text{variável de saída}}{\Delta \text{variável de entrada}} = \frac{B}{A}$$

$t_d$  = o tempo morto do processo

$\tau$  = tempo que a Saída atinge o 0.632 da variação total-Tempo início da resposta

Os parâmetros do controlador Proporcional – Integral, de acordo com o método de Cohen – Coon, são:

$$k_c = \frac{1}{k} \frac{\tau}{t_d} \left( 0.9 + \frac{t_d}{12\tau} \right) \quad (2.5)$$

$$\tau_I = t_d \frac{30 + 3\frac{t_d}{\tau}}{9 + 20\frac{t_d}{\tau}} \quad (2.6)$$

Como resultado da implementação do controle PI pode-se observar os seguintes efeitos:

- a. A ordem da resposta do processo é incrementada
- b. Elimina o offset

Esses dois efeitos são ocasionados pelo controle integral. De acordo com Stephanopoulos (1984), quando o  $k_c$  aumenta, a resposta também, e oscila mais diante às mudanças de Set-Point. Além disso, a diminuição do  $\tau_I$ , para um  $k_c$  constante, torna a resposta mais rápida, porém, oscila bastante.

## 2.1.2 Controle Preditivo com Modelo Linear

Segundo Lee (2011), o surgimento do Controle Preditivo não pode ser atribuído a uma só pessoa. O Controle Heurístico Por Modelo Preditivo (CHMP), desenvolvido por Richalet et al. e a Matriz Dinâmica de Controle (MDC), por Charlie Cutler em 1979, são os primeiros tipos de Controle Preditivo que foram desenvolvidos em tempos próximos. Estes tipos de metodologias, assim como a metodologia MAC e ID-COM, acabaram sendo implementadas devido a sua fácil aplicação em refinarias e plantas petroquímicas. Todas essas técnicas são chamadas de Controle Preditivo.

De acordo com Lee (2011), o MCP vem se desenvolvendo nos últimos trinta anos. Durante a primeira década, a metodologia foi desenvolvida e adotada pela indústria, na segunda década, os avanços foram guiados por um maior entendimento matemático e, conseqüentemente, houve a melhora da técnica, já nesta terceira década, os esforços concentraram-se em fazer o Controle Preditivo mais ágil em termos de tempo. Durante essas décadas, o campo de ação do MCP tem sido ampliado, passou a ser usado em aplicações mecânicas e sistemas eletrônicos. As razões que levaram o MCP a ter sucesso na indústria são que ele:

- a. Pode ser empregado em problemas multivariáveis com facilidade.
- b. Leva em conta as limitações do processo e os tempos mortos.
- c. Permite a operação do processo perto das restrições, em comparação com o controle convencional, o que faz com que o lucro seja maior.
- d. Tem taxas de atualização do controle são relativamente baixas, o que faz com que haja tempo suficiente para realizar cálculos computacionais on-line (BOMBARD et al., 2010; MACIEJOWSKI, 1999).

O principal objetivo do MCP é definir as mudanças futuras da variável de entrada (em um horizonte de controle), a fim de otimizar o comportamento do processo (RAWLINGS, 2000; WILLIS, 2000; QIN; BADGWELL, 2003).

De acordo com Ogunnaike e Ray (1994), qualquer tipo de Controle Preditivo, está composto por quatro elementos básicos, apresentados na Figura 1, os quais são:

1. Trajetória de referência: É a trajetória desejada para a saída do processo  $y_r$ . Esta pode ser estabelecida como o próprio Set-Point ou com a seguinte aproximação:

$$y_r^d(k+1) = \alpha^j y_k + (1 - \alpha^j) r_k \quad (2.7)$$

Onde  $\alpha$  é um parâmetro que define a rapidez com que a saída do processo  $y_k$  atinge o Set-Point (OGUNNAIKE; RAY, 1994; WU, 2009).

2. Predição da saída do processo: As predições da saída,  $\hat{y}_{(k+1)}$ , são feitas mediante o modelo matemático do processo para  $R$  intervalos de tempo no futuro. Para o cálculo da saída, pode se utilizar a resposta do modelo ao pulso unitário,  $h_i$ , conforme a Equação 2.8.

$$\hat{y}_{(k+1)} = \sum_{i=1}^N h_i u_{(k+1-i)} \quad (2.8)$$

Onde  $N$ , corresponde ao horizonte do modelo. Assim, o modelo é elemento essencial no MPC, mesmo ele não proporcione predições perfeitas. A retroalimentação ajuda manejar os efeitos ocasionados pelo uso de modelos que divergem bastante do processo, porém, desenvolver o controle com este tipo de modelos, pode ocasionar que a retroalimentação seja realizada quando ela já não é mais efetiva.

3. Cálculo da sequência de ações de controle: O mesmo modelo usado para realizar as predições do processo, é aproveitado no cálculo dos  $L$  movimentos da ação



degrau alcança 99% da variação total. É comum selecionar  $30 \leq N \leq 120$ . Quando o horizonte de controle  $L$  aumenta, o controle requer maior esforço computacional, no entanto, isto pode ser reduzido utilizando entradas em blocos. É usual escolher  $5 \leq L \leq 20$  e  $N/3 \leq L \leq N/2$ . Em relação ao horizonte de predição  $R$ , é frequente selecionar  $R = N + L$ , assim, o efeito das entradas passadas são levadas em conta (SEBORG et al., 2003; KWONG, 2010).

### 2.1.3 Controle Preditivo com Modelo Não Linear (CPNL)

Em geral, a maior parte dos sistemas físicos são não lineares. A não linearidade do processo é proporcionada por elementos como, balanços de massa, energia, equilíbrios de fase e relações cinéticas. Quando o processo não apresenta alta linearidade, é recomendável linearizar o processo ao redor do ponto de operação e empregar controladores para modelos lineares. (BETTAYEB; SHAH, 2004; RAWLINGS, 2000).

Teoricamente é possível estender o uso do Controle Preditivo utilizado em processos lineares até processos não lineares, só que na prática, surgem algumas dificuldades, já que parte do sucesso do Controle Preditivo se deve à facilidade para obter uma resposta do modelo ao pulso ou ao degrau, no entanto, em modelos não lineares é mais difícil de construir, além disso, a implementação é complexa, devido à dificuldade na procura de um ótimo global em problemas não convexos. Mesmo com os avanços feitos na programação não linear, ainda se tem como obstáculo a complexidade computacional para usar o algoritmo Controle Preditivo e em garantir estabilidade deste (LEE, 2011; OGUNNAIKE; RAY, 1994). De acordo com Frank (2000), algumas vantagens e desvantagens que possui o Controle Preditivo Não linear (CPNL) são:

1. Permite o uso direto de modelos não lineares para fazer predições.
2. Permite levar em conta as restrições nas variáveis de entradas e de estado.
3. O comportamento predito é diferente comparado com o comportamento em malha fechada.
4. Para aplicá-lo, é necessário obter a solução em malha aberta e em tempo real do problema de controle ótimo.
5. Para obter a predição, deve-se medir ou estimar o estado do sistema (ALLÖWER, FRANK and ZHENG, ALEX, 2000).

Muitos trabalhos têm sido enfocados no uso do Controle Preditivo em sistemas não lineares. Bequette (1991) realizou uma revisão sobre as técnicas que empregam

modelo não linear no Controle Preditivo. Segundo Ogunnaike e Ray (1994), várias das metodologias desenvolvidas para utilizar o Controle Preditivo em sistemas não lineares são:

1. CPNL linear estendido: É uma reformulação do original Controle com Matriz Dinâmica (CMD) apresentado por Hernandez e Arkun, onde é introduzido o vetor  $d_k^{nl}$  calculado mediante a minimização das diferenças entre a saída predita com o modelo linear estendido.
2. Modelo bilinear: Metodologia proposta por Yeo e Williams, na qual o modelo não linear é aproximado mediante um modelo bilinear. Até agora obtiveram resultados para sistemas SISO.
3. Linearização programada: Nesta técnica o modelo do processo é linearizado e usado para gerar a resposta do processo ao degrau. O modelo utilizado na predição é obtido com a integração do modelo não linear em paralelo com a planta (BEQUETTE, 1991; OGUNNAIKE; RAY, 1994).

A única diferença que apresenta o CPNL frente ao Controle Preditivo Linear, é que o modelo usado na predição é não linear. Esses modelos podem apresentar-se em várias formas, com equações diferenciais ordinárias, diferenciais parciais, algébricas, entre outras. Assim, quando este é representado com equações diferenciais parciais (EDP), empregar linearização programada ajuda simplificar o modelo, desta forma, facilita sua manipulação para efetuar cálculos (MORARI; H. Lee, 1999). Em geral, o modelo dado pelas EDP é transformado em equações diferenciais ordinárias, mediante métodos como: diferenças finitas, volume finito, colocação ortogonal, método de Galerkin, decomposição modal, entre outros (BOMBARD et al., 2010).

O Controle Preditivo Não Linear pode ser estabelecido como:

$$\min_{u(t)} \Phi [x(t), u(t); p] \quad (2.9)$$

Sujeita a:

$$\frac{dy}{dt} = f [x(t), u(t); p] \quad (2.10)$$

$$y = g [x(t), u(t); p] \quad (2.11)$$

Onde  $y$  e  $u$  são respectivamente, os vetores da variável controlada e da variável manipulada,  $x$  é o vetor da variável de estado e  $p$  o vetor de parâmetros do modelo, os quais podem incluir perturbações. A função objetivo é a soma dos quadrados dos

resíduos entre as saídas do modelo predito e os valores do Set-Point, estabelecido em um horizonte do modelo  $N$ . A otimização proporciona  $L$  mudanças na variável manipulada. Depois do tempo  $L$  a variável manipulada é constante (WILLIS, 2000; OGUNNAIKE; RAY, 1994; PATWARDHAN; WRIGHT; EDGAR, 1992).

O Controle Preditivo Não Linear é baseado nas seguintes ações desenvolvidas a cada instante  $k$ :

1. As medições da planta são atualizadas para serem usadas no laço de controle feedback/feedforward.
2. O modelo da planta é aproveitado para prever a resposta do processo às variações futuras na variável controlada.
3. A função objetivo, sendo a minimização das diferenças entre as saídas do modelo predito e os valores do Set-Point, é otimizada para obter a melhor sequência de alterações da variável controlada.
4. Só o primeiro valor da sequência de variações otimizadas é implementado no processo.

No tempo  $k + 1$  estas ações são desenvolvidas de novo (BOMBARD et al., 2010):

Uma breve descrição das diferentes técnicas de CPNL que vem-se desenvolvendo, são apresentadas por autores tais como: Mayne et al., 2000; de Nicolao et al., 2000; Allgöwer et al., 1999; Rawlings, 2000; Morari and Lee, 1999 (Apud. ALLÖWER, FRANK and ZHENG, ALEX (2000)).

O CPNL tem bastante aceitação por causa da sua simplicidade, captando o interesse de empresas e pesquisadores. Segundo Lee (2011) e Qin e Badgwell (1997), que realizaram uma enquete nas cinco maiores empresas que desenvolvem software de MPC, os resultados mostraram que das 2233 aplicações dessa metodologia, a maioria delas foram realizadas em refinarias e indústrias petroquímicas, porém, empresas em setores da química, polpa e papel, comida e mineração também tem utilizado esse tipo de controle mediante algum software comercial. Quase cinco anos depois realizaram outra enquete, na qual foi possível observar que as aplicações de MPC na indústria, dobraram. A enquete identifica pelo menos 100 aplicações de CPNL, aliás, em geral, as empresas que usam esse tipo de controle, pertencem ao setor químico, de gás e de polímeros (LEE, 2011).

Como já foi mencionado, os modelos dos processos podem apresentar-se de várias formas, de acordo com Patwardhan, Wright e Edgar (1992), processos como colunas empacotadas, reatores de leito fixo e trocadores de calor são sistemas de parâmetros distribuídos. Para esse tipo de modelos existem duas formas de desenvolver



o CPNL, a primeira consiste em resolver as EDP e depois realizar a otimização da função objetivo, e a segunda é solucionar e otimizar simultaneamente, porém a primeira estratégia será empregada neste trabalho. Nessa estratégia as equações são resolvidas numericamente para obter o perfil da variável controlada. Depois a função objetivo é calculada e o perfil da variável controlada é atualizado mediante algum algoritmo de otimização, assim o processo é repetido até que se obtém a solução ótima. Esta é uma estratégia de solução e otimização sequencial, de acordo com esse autor Asselmeyer (1985), Morshedi (1986), Economou et al. (1986), Jang et al. (1987), Kiparissides e Georgiou (1987) e Peterson et al. (1989) apresentam varias versões desta metodologia (PATWARDHAN; WRIGHT; EDGAR, 1992).

Na atualidade existem diversas ferramentas computacionais para dar solução ao modelo do processo. O uso delas depende do tipo de equações e das condições de contorno que o representam. Em geral, os processos têm como variável independente o tempo e nas condições de contorno, o espaço. Sendo assim, descritos mediante equações diferenciais parciais, parabólicas, elípticas ou hiperbólicas. No caso das equações parabólicas, aparece o termo de acúmulo, diferente ao que acontece com as equações elípticas (FINLAYSON, 1980). De acordo com o objetivo deste trabalho, serão estudadas as equações parabólicas associadas ao processo de branqueamento de celulose. Serão apresentadas várias metodologias para o manejo deste tipo de equações.

## 2.2 Métodos Numéricos Empregados em Sistemas Não Lineares

O tipo de métodos numéricos empregados na resolução de sistemas depende da classe de equações que representam o processo. Desta forma, é importante identificar o grupo de equações que identificam a dinâmica do processo analisado. Em geral, o modelamento matemático dos processos químicos, inclui equações diferenciais que podem ser, ordinárias ou parciais. Nesta pesquisa será centralizada a atenção nas EDP's.

As EDP mais comuns são de primeira e segunda ordem. Elas são classificadas de acordo com a sua ordem, linearidade e condições de contorno.

A ordem da EDP é determinada pela maior ordem da derivada parcial presente na equação. Alguns exemplos de equações diferenciais parciais de primeira, segunda e terceira ordem são:

Primeira Ordem

$$\frac{\partial u}{\partial x} - \alpha \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad (2.12)$$

Segunda Ordem

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)^2 + u \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad (2.13)$$

Terceira Ordem

$$\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)^2 + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad (2.14)$$

Essas equações, por sua vez, são categorizadas em lineares, quase-lineares e não lineares. Considerando como exemplo o desenvolvimento da equação de segunda ordem:

$$a(\cdot) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 2b(\cdot) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c(\cdot) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + d(\cdot) = 0 \quad (2.15)$$

Se os coeficientes são constantes ou funções das variáveis independentes  $[(\cdot) \equiv (x, y)]$ , então é linear. Se os coeficientes são funções das variáveis dependentes e ou alguma das suas derivadas são de ordem menor que a equação diferencial  $[(\cdot) \equiv (x, y, u, \partial u / \partial y)]$ , então a equação é quase-linear. Finalmente, se os coeficientes são funções de derivadas da mesma ordem como na equação  $[(\cdot) \equiv (x, y, u, \partial^2 u / \partial x^2, \partial^2 u / \partial y^2, \partial^2 u / \partial x \partial y)]$ , a equação é não-linear. Em concordância com estas definições, a Equação 2.12 é linear, 2.13 é quase-linear e a Equação 2.14 é não linear.

Equações diferenciais parciais de segunda ordem, com duas variáveis independentes, podem ser classificadas de acordo com sua forma canônica: elíptica, parabólica e hiperbólica. A forma geral da equação é:

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + fu + g = 0 \quad (2.16)$$

quando os coeficientes são constantes ou então, são funções das variáveis independentes.

As três formas canônicas são determinadas pelo desenvolvimento do seguinte critério:

$$b^2 - ac < 0, \text{ elíptica} \quad (2.17)$$

$$b^2 - ac = 0, \text{ parabólica} \quad (2.18)$$

$$b^2 - ac > 0, \text{ hiperbólica} \quad (2.19)$$

Se  $g = 0$ , então, são equações diferenciais homogêneas (CONSTANTINIDES; MOSTOUFI, 1999, Pág 365-369).

Exemplos comuns de equações diferenciais parciais, são as equações de condução de calor em estado transiente

$$\alpha \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.20)$$

e a segunda lei de difusão de Fick

$$D_{AB} \left[ \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (2.21)$$

com condições de contorno Dirichlet, Neuman ou Cauchy.(CONSTANTINIDES; MOSTOUFI, 1999, Pág. 395)

As condições iniciais e de contorno, associadas com as equações diferenciais parciais, devem ser especificadas para obter uma solução numérica única. Em geral, as condições de contorno são divididas em três categorias. Como exemplo, apresenta-se a equação da condução de calor em estado transiente

$$\alpha \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.22)$$

Esta equação parabólica descreve essencialmente a mudança na temperatura em um sólido, onde a transferência de calor esta na direção do eixo x.

Apresentam-se as três categorias para as condições de fronteira:

- a. Condições Dirichlet (primeiro tipo): Os valores da variável dependente são dados em valores fixos da variável independente, por exemplo:

$$T = f(x) \text{ a } t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq 1 \quad (2.23)$$

ou

$$T = T_0 \text{ a } t = 0 \text{ e } 0 \leq x \leq 1 \quad (2.24)$$

Essa é uma alternativa de condição inicial que especifica que a temperatura inicial da parede é função da posição  $f(x)$  ou a constante  $T_0$ .

As condições iniciais de primeiro tipo são expressas como:

$$T = f(t) \text{ a } x = 0 \text{ e } t > 0 \quad (2.25)$$

e

$$T = T_1 \text{ a } x = 1 \text{ e } t > 0 \quad (2.26)$$

Estas condições de contorno, especificam o valor da variável independente no contorno da esquerda como uma função do tempo  $f(t)$  (esta pode ser a condição

no interior de um forno que é mantido ao perfil de temperatura pré-programado), e a condição de fronteira na direita como a constante  $T_1$  (que pode ser a temperatura no exterior do forno).

- b. Condições Neumann (segundo tipo): a derivada da variável dependente é dada como uma constante ou uma função da variável independente. Exemplo

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \text{ a } x = 1 \text{ e } t \geq 0 \quad (2.27)$$

Esta condição especifica que o gradiente de temperatura no contorno direito é zero. Em problemas de condução de calor, este pode ser simplificado teoricamente, adicionando um isolamento perfeito na fronteira do lado direito.

- c. Condições Cauchy: São condições de fronteira resultantes da combinação das condições Dirichlet e Neumann.
- d. Condições de Robbins (terceiro tipo): a derivada da variável dependente, é dada como uma função da mesma variável dependente. Para o problema de calor por condução, o fluxo de calor na interface solido-fluido, pode ser relacionado à diferença entre a temperatura na interface e o fluido, isto é:

$$\kappa \frac{\partial T}{\partial x} = h(T - T_f) \text{ a } x = 0 \text{ e } t \geq 0 \quad (2.28)$$

onde  $h$  é o coeficiente de transferência de calor de um fluido.

De acordo com estas condições iniciais e de contorno, as equações diferenciais parciais podem ser classificadas como problemas de valor inicial e de valor de contorno. No primeiro caso, pelo menos uma das variáveis independentes tem uma região aberta. Em problemas de condução de calor em estado transiente, a variável tempo, tem uma faixa de  $0 \leq t \leq \infty$ , onde em  $t = \infty$ , não se tem condição, portanto, este é um problema de valor inicial. Quando a região é fechada para todas as variáveis independentes e todas as condições são especificadas em todas as fronteiras (CONSTANTINIDES; MOSTOUFI, 1999, pág. 370-372).

## 2.2.1 Métodos de Discretização de Equações Diferenciais

Uma vez identificados os tipos de equações que representam o processo químico, é possível identificar os métodos matemáticos que ajudam com a resolução do modelo matemático. Chamar um método de explícito ou implícito, depende se a função  $f$  é avaliada em condições conhecidas  $y_i(t_n)$  ou em condições desconhecidas  $y_i(t_{n+1})$ . Os métodos explícitos de integração como o método de Euler, avaliam a função  $f$  com a informação conhecida (Equação 2.29).

$$\left. \frac{dc}{dt} \right|_{t=t_n} = f(y_n) \quad y_n = y(t_n) \quad (2.29)$$

Por outro lado, os métodos de integração, avaliam a função  $f$  na solução desconhecida  $y_i(t_{(n+1)})$ ., como exemplo, a regra do trapézio (Equação 2.30).

$$\left. \frac{dc}{dt} \right|_{t=t_n} = \frac{1}{2} [f(y_n) + f(y_{n+1})] \quad (2.30)$$

### 2.2.1.1 Método das Diferenças Finitas

Como já foi mencionado, a maior parte dos processos químicos são representados mediante EDP. Atualmente têm sido desenvolvidas técnicas numéricas baseadas no conceito das Diferenças Finitas. Este conceito se caracteriza pelo fato de definir uma equação diferencial e realizar sua integração numérica mediante o cálculo dos valores da função em pontos finitos (CONSTANTINIDES; MOSTOUFI, 1999, pág. 144). Estas aproximações podem ser, para frente, para trás ou central, dependendo do enfoque. Sua seleção está relacionada com a natureza dos processos. As equações 2.31 e 2.32., são expressões para as diferenças finitas de ordem central da primeira derivada de uma função e a aproximação da segunda derivada (CONSTANTINIDES; MOSTOUFI, 1999):

$$\frac{dy_i}{dx} \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{\Delta h} \quad (2.31)$$

$$\frac{d^2y_i}{dx^2} \approx \frac{y_{i+1} - 2y_{i-1} + y_{i-1}}{h^2} \quad (2.32)$$

O método de Diferenças Finitas pode ser empregado em EDP, gerando um sistema de EDO's no tempo. Para realizar esta aproximação, são necessárias condições de contorno na posição  $x = 0$ ,  $x = 1$  e no tempo inicial  $t = 0$  (DAVIS, 1984), que podem ser do tipo Dirichlet, Neumann, Cauchy ou Robbins, descritas no início desta seção. As equações 2.33 e 2.34 são as aproximações para EDP (RENOU, 2000):

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} \approx \frac{x(z_i, t) - x(z_{i-1}, t)}{\Delta z} \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} \approx \frac{x(z_{i+1}, t) - 2x(z_i, t) + x(z_{i-1}, t)}{\Delta z^2} \quad (2.34)$$

### 2.2.1.2 Colocação Ortogonal

Em anos recentes, a atenção tem sido focada em uma classe de métodos de parametrização chamada de métodos Pseudo-espectrais ou de Colocação Ortogonal.

No método de Colocação Ortogonal, é usado uma base finita de polinômios de interpolação global para aproximar o estado e controlar o grupo de pontos de discretização. Os pontos de colocação são escolhidos para serem as raízes de um polinômio ortogonal (ou combinações lineares de tais polinômios e suas derivadas). Uma vantagem do método de colocação ortogonal é que, para problemas suavizados, estes métodos geralmente apresentam uma rápida convergência quando comparados com outros métodos, exibindo algo chamado de “precisão espectral”. Para problemas não suavizados ou problemas onde o modelamento muda à vontade, os problemas de controle ótimo podem ser divididos em duas fases e a colocação ortogonal pode ser aplicada globalmente entre cada fase. Muitos trabalhos com problemas de controle ótimo não suavizados, tem sido resolvidos usando métodos Pseudo-espectrais (HUNTINGTON; BENSON; RAO, 2007).

A colocação ortogonal é de fácil aplicação em problemas de regime transiente. Se a solução não exibe propriedades de simetria particular, então pode ser expandida em polinômios de  $x$

$$c(x, t) = a(t) + b(t)x + x(1 - x) \sum_{i=1}^N a_i(t) P_{i-1}(x) \quad (2.35)$$

Ou pode ser escrito como

$$c(x, t) = \sum_{i=1}^{N+2} d_i(t) x^{i-1} \quad (2.36)$$

Avaliando nos pontos de colocação

$$c(x, t) = \sum_{i=1}^{N+2} d_i(t) x^{i-1} \text{ ou } c(t) = Qd(t) \quad (2.37)$$

A primeira derivada no espaço é avaliada nos pontos de colocação dados

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{x_j} = \sum_{i=1}^{N+2} d_i(t) (i-1) x^{i-2} \text{ ou } \frac{\partial c}{\partial t} = Cd(t) \quad (2.38)$$

No entanto  $Q_{ji} = x_j^{i-1}$ , independente de  $t$ , então pode ser invertida e obter

$$\frac{\partial c}{\partial t} = CQ^{-1}c \equiv Ac \quad (2.39)$$

Na seguinte equação  $c$  e  $\frac{\partial c}{\partial x}$  são funções do tempo.

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{x_j} = \frac{d}{dt} c(x_j, t) = \frac{dc_j}{dt} \quad (2.40)$$

Assim para o problema de difusão, escreve-se as equações de colocação como:

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N+2} A_{ji} D(c_i) \sum_{i=1}^{N+2} A_{il} c_l \text{ ou como} \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} = D(c_i) \sum_{i=1}^{N+2} B_{ji} c_i + \frac{dD}{dc}(c_i) \left( \sum_{i=1}^{N+2} A_{ji} c_i \right)^2 \quad (2.42)$$

Com as condições usuais iniciais e de fronteira a Equação 2.41 pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial c_j}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N+2} AA_{jl}(c) c_l \quad AA_{jl} = \sum_{i=1}^{N+2} A_{ji} D(c_i) A_{il} \quad (2.43)$$

Com a aplicação da colocação ortogonal em problemas de valor inicial, pode-se reduzir a um grupo de equações diferenciais ordinárias. Para problemas lineares e não lineares próximos a  $t = 0$ , pode-se resolver o problema, aplicando a colocação ortogonal em  $u(x, t)$  (FINLAYSON, 2003).

Aliás, Hertberg e Asbjornsen (1977), sugerem usar a colocação ortogonal para discretizar as equações diferenciais, desta forma, mantém-se o problema em uma dimensionalidade baixa (CONSTANTINIDES; MOSTOUFI, 1999).

## 2.3 Otimização com Mínimos Quadrados

O método dos Mínimos Quadrados é uma técnica de otimização matemática que procura encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados minimizando a soma dos quadrados das diferenças entre a curva ajustada e os dados. Desta forma o objetivo é diminuir o erro entre o que o processo pode fazer e que o processo deve fazer. Nesse método a Equação 2.44 representa aquela diferença a ser minimizada:

$$\min_{\Delta u(k)} \mathcal{O} = [e(k+1) - \beta \Delta u]^T [e(k+1) - \beta \Delta u(k)] \quad (2.44)$$

Diferenciando a Equação 2.44 em relação  $\Delta u$

$$\frac{\partial \mathcal{O}}{\partial \Delta u(k)} = -\beta^T [e(k+1) - \beta \Delta u(k)] \quad (2.45)$$

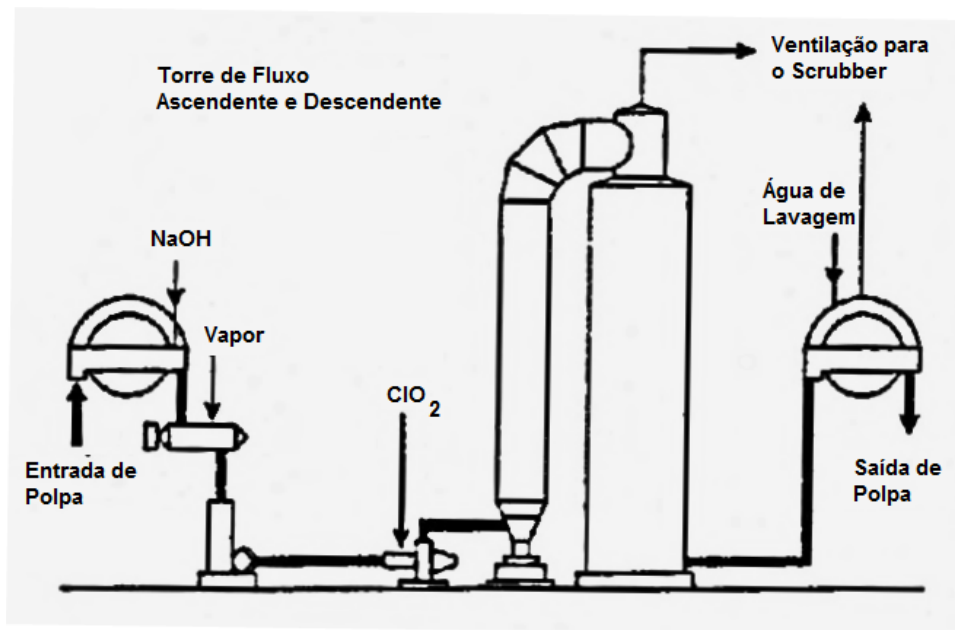
Fazendo a derivada igual a zero e isolando o termo  $\Delta u(k)$ , obtém-se a solução dos mínimos quadrados:

$$\Delta u(k) = (\beta^T \beta)^{-1} \beta^T e(k+1) \quad (2.46)$$

## 2.4 Reator de branqueamento de celulose

O papel é um material composto por celulose que se transforma em polpa mediante processos mecânicos ou químicos. A obtenção da polpa de celulose pode ser resumida em sete etapas (COPESA;Consortio Periodístico de Chile S.A, 2010), como segue:

Figura 2: Fluxograma do processo e equipamentos para estágio com dióxido de cloro.



Fonte: Navarro (2004)

**Etapa 1** Obtenção da madeira.

**Etapa 2** Remoção de casca.

**Etapa 3** Corte da madeira em partes menores.

**Etapa 4** Os pedaços de madeira são mergulhados em água a altas temperaturas ( $130^{\circ}C$  e  $179^{\circ}C$ ), com produtos químicos para separar as fibras da madeira e assim obter a polpa de celulose.

**Etapa 5** Branqueamento mediante produtos químicos como dióxido de cloro, peróxido e soda cáustica.

**Etapa 6** De acordo com o objetivo deste projeto ele se centra na etapa 5, branqueamento de celulose. A polpa de celulose contém resíduos de lignina, o que faz com que ela seja de cor marrom. Assim, para obter polpa branqueada de forma



que possa ser usada na fabricação de papel, os resíduos de lignina devem ser removidos. Um bom processo de branqueamento evita que o papel se amarele depois de um tempo, sem modificar as propriedades mecânicas das fibras da polpa (HENRICSON, 2004).

De acordo com o objetivo deste projeto ele se centra na etapa 5, branqueamento de celulose. A polpa de celulose contém resíduos de lignina o que ocasiona que ela seja de cor marrom, assim, para obter polpa branqueada que possa ser usada na fabricação de papel os resíduos de lignina devem ser removidos. Um bom processo de branqueamento evita que o papel se amarele depois de um tempo e não tenta modificar as propriedades mecânicas das fibras da polpa (HENRICSON, 2004).

Em geral, o processo de branqueamento da polpa é desenvolvido em plantas com vários estágios de branqueamento. Os produtos químicos mais usados na indústria são apresentados no 2.1

A seleção do produto químico no branqueamento, deve levar em conta sua seletividade na oxidação da lignina, afim de obter a mínima perda de resistência da celulose, além de ser econômico e assegurar que a reversão de alvura seja baixa. O dióxido de cloro possui alta seletividade, preservando a resistência da polpa (NAVARRO, 2004).

#### 2.4.1 Variáveis do Processo de Branqueamento

- **Temperatura:** Para quantidades grandes de lignina, o dióxido de cloro reage rapidamente em temperaturas baixas, entretanto, para quantidades menores de lignina, o branqueamento deve ser realizado em temperaturas maiores, possibilitando assim, usar menos dióxido de cloro e um tempo de reação não excessivo. A temperatura de  $70^{\circ}C$  é um ponto ótimo, já que, acima de dessa faixa, a reação acontece rapidamente e o dióxido de cloro é consumido por completo, ocasionando reversão da alvura e enfraquecimento das fibras de celulose. Uma temperatura menor que  $60^{\circ}C$  não permite atingir a alvura desejada.
- **Consistência:** O nível de consistência, que é a quantidade de massa seca (em g) em 100 mL de suspensão, não tem um efeito importante sobre a eficiência do branqueamento, assim outros parâmetros podem determinar a consistência a ser utilizada.
- **Tempo de Retenção:** Durante os primeiros cinco minutos do branqueamento, o processo obtém o maior aumento de alvura, depois de três horas com quantidades constantes de dióxido de cloro, a alvura aumenta. Após cerca de três horas de

retenção, aumenta o risco de reversão se o dióxido esgotar-se e o aumento de alvura for baixo.

- *pH*: O *pH* é um parâmetro que influencia bastante no processo de branqueamento e na degradação da celulose. Para um *pH* na faixa de 2 a 7, a degradação é menor, entretanto, quando o *pH* é maior que 7, a degradação aumenta e a eficiência do dióxido de cloro se reduz.
- **Quantidade de Dióxido de Cloro**: O tipo de pasta de celulose e o teor de lignina ( $\kappa$ ), influenciam na quantidade de dióxido de cloro a ser empregado. No estágio final de branqueamento deve existir um residual positivo de dióxido para evitar o amarelecimento do produto.
- **Teor de lignina**: Como medida do teor de lignina residual na celulose é usado o número Kappa, obtido mediante a quantidade de  $KMnO_4$  que reage com a lignina restante, mostrando assim o nível de branqueamento da celulose (AZEVEDO, 2012).

#### 2.4.2 Modelo Matemático do Reator de Branqueamento de Celulose

Assim, no processo de branqueamento, o objetivo principal é obter um produto com a brancura desejada e com a menor variação dela na saída e o menor custo químico. Na implementação do controle desse processo, podem ser usados diferentes tipos de modelos desenvolvidos até agora. O mais comum, é empregar a função de transferência nos modelos de entrada-saída, porém o uso do modelo fenomenológico, descrito mediante equações diferenciais parciais de forma direta, traz vantagens. Esse tipo de modelo pode ser obtido aplicando os balanços de massa da lignina ( $L$ ) e do dióxido de cloro ( $C$ ) num volume de dimensões infinitesimais (RENOU, 2000), dessa forma o balanço para a conservação da massa é expresso assim:

$$\left( \begin{array}{c} \text{Taxa de} \\ \text{Acumulação} \\ \text{do Composto} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{Taxa de} \\ \text{Entrada} \\ \text{do Composto} \end{array} \right) - \left( \begin{array}{c} \text{Taxa de} \\ \text{Saída} \\ \text{do Composto} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{Taxa de Geração} \\ \text{Consumo do Composto} \\ \text{pela Reação} \end{array} \right) \quad (2.47)$$

Sendo assim, levando em conta os fenômenos de convecção, dispersão e reação, o balanço de massa para um processo de branqueamento de lignina mediante o dióxido de cloro num reator tubular é:

- Dióxido de Cloro

$$\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} - r_C(L(z, t), C(z, t)) \quad (2.48)$$

Sujeito a condições de contorno:

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D}(C(0, t) - C_{in}(t)) \quad (2.49)$$

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=l} = 0 \quad (2.50)$$

• Lignina

$$\frac{\partial L(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} - r_L(L(z, t), C(z, t)) \quad (2.51)$$

Sujeito a condições de contorno:

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D}(L(0, t) - L_{in}(t)) \quad (2.52)$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=l} = 0 \quad (2.53)$$

Os parâmetros que caracterizam a hidrodinâmica do reator são: a velocidade superficial  $v$  e o coeficiente de dispersão  $D$ , os quais podem ser determinados mediante análise com traçador, sendo assim possível identificar o número de Peclet e fazer o modelamento global dos fenômenos presentes no reator:

$$\text{Número de Peclet} = \frac{vl}{D} \quad (2.54)$$

Além da hidrodinâmica, a caracterização da cinética de reação do processo é importante que seja definida. De acordo com Renou et al. (2002) apresentam um modelo para o reator de branqueamento de celulose mediante dióxido de cloro, onde a cinética de reação é de segunda ordem.

Quadro 2.1: Descrição dos Processos de Branqueamento Químico

Nome	Fórmula	Notação	Fabricação	Modo de Aplicação
Cloro	$Cl_2$	C	Mediante eletrólises da solução $NaCl$ , enviando-a como líquido a baixa pressão.	Gás pressurizado
Hipoclorito	$NaOCl$	H	Por reação de $Cl_2$ com $NaOH$ , aplicação in situ	Solução, $\approx 40g/l$ como equivalente, $Cl_2$
Dióxido de Cloro	$ClO_2$	D	In situ mediante redução do clorato, têm-se vários processos para realizar a redução.	Temperatura da solução baixa, $\approx 10g/l$ ou $26.3 g/l$ como equivalente $Cl_2$
Oxigênio	$O_2$	O	Mediante separação do ar, enviado como $O_2$ criogênico o separação in situ.	Gás pressurizado.
Peróxido de Hidrogênio	$H_2O_2$	P	Mediante processo catalítico do $O_2$ ou ar e hidrogênio em gás, enviado como solução 50%.	Solução
Ácido Peracético	$CH_3COOOH$	Paa	Usualmente como ácido peracético destilado, enviado como solução, também pode ser in situ do peróxido do hidrogênio.	Solução
Ozônio	$O_3$	Z	In situ mediante descarga eléctrica do $O_2$ em gás.	Gás pressurizado misturado acima do 12% $O_3$ em $O_2$
Hidrossulfito de sódio	$Na_2S_2O_4$	Y	Mediante redução de dissulfito.	Solução.
Enzimas	—	X	Isolado mediante processo de fermentação	Solução.
Hidróxido de sódio	$NaOH$	E	Mediante eletrólise da solução, $NaCl$ enviada como solução 50%.	Solução, $\approx 10\%$ .

Fonte: Navarro (2004)

Os compostos D, O, Z, P e E são os mais usados na indústria. Os processos C e H são menos usados devido aos aspectos ambientais.

### 3 OBJETIVOS

Implementar o Controle Preditivo Não Linear para sistemas de parâmetros distribuídos, aplicado em um reator de branqueamento de celulose. O modelo desse reator é resolvido empregando os métodos de Colocação Ortogonal, Diferenças Finitas e Runge-Kutta. O controlador é otimizado usando mínimos quadrados.

Identificar as vantagens e desvantagens da implementação dos métodos numéricos de Diferenças Finitas e da Colocação Ortogonal na simulação do reator de branqueamento de celulose.

Implementar o Controle Proporcional-Integral e Controle Preditivo com Modelo Não Linear, com o propósito de avaliar o desempenho deste último, mediante a critérios de desempenho da integral do erro: Integral do Erro Absoluto (IAE) e a Integral de Erro Quadrático (ISE).



## 4 MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo apresenta-se a metodologia para implementar dois tipos de controle: Controle Proporcional-Integral e o Controle Preditivo Não Linear no reator de branqueamento de celulose mediante dióxido cloro, além das ferramentas de programação e modelos matemáticos empregados no processo (Quadro 4.1).

Quadro 4.1: Principais Elementos na Implementação do CPNL em um Reator de Branqueamento de Celulose

<p>MODELO MATEMÁTICO DO PROCESSO</p>	<p>Determina-se o modelo matemático do processo desenvolvido mediante os balanços de massa dos componentes principais: lignina e dióxido de cloro.</p>
<p>MÉTODO NUMÉRICO</p>	<p>Seleção dos métodos numéricos para a resolução das equações diferenciais parciais no tempo e no espaço.</p>
<p>ESTABELEECER PLANTA E MODELO</p>	<p>Empregar os métodos matemáticos que resolverão o modelo matemático da planta e do modelo.</p>
<p>IMPLEMENTAR OS TIPOS DE CONTROLE ESTABELECIDOS</p>	<p>Implementar o controle Proporcional-Integral e o Controle Preditivo Não Linear, definindo os parâmetros necessários para a implementação de cada um deles. Definem-se as variáveis manipuladas e controladas no processo.</p>
<p>IMPLEMENTAÇÃO DOS CONTROLADORES</p>	<p>De acordo com os métodos numéricos empregados, são implementados os dois controladores, Proporcional-Integral e Controle Preditivo Não Linear, no processo de branqueamento de celulose.</p>

Fonte: Acervo Pessoal

## 4.1 Modelo Matemático do Processo

Como já foi mencionado, o modelo matemático do reator fluxo pistonado de branqueamento de celulose é inferido mediante os balanços de massas da lignina e do dióxido de cloro, equações 4.1 e 4.2:

$$\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} - r_C(L(z, t), C(z, t))^2 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial L(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} - r_L(L(z, t), C(z, t))^2 \quad (4.2)$$

Devido ao uso dos balanços de massa obtêm-se equações diferenciais parciais que representam os fenômenos de dispersão, convecção e a cinética de reação do processo, deste modo possui-se maior informação sobre o processo. Caso contrário acontece quando é usada a função de transferência no tempo, onde não se leva em conta a natureza distribuída dele para conseguir identificar a hidrodinâmica e cinética em qualquer ponto do reator (RENOU et al., 2002). Esses tipos de equações diferenciais resultantes são de segunda ordem, classificadas em elípticas, parabólicas e hiperbólicas (CONSTANTINIDES; MOSTOUFI, 1999). Para o reator de branqueamento de celulose pode-se observar que as EDP são parabólicas, Sendo assim necessárias duas condições de contorno para cada componente com o objetivo de completar o modelo matemático. A primeira de condição de contorno (equações 4.3 e 4.4) constitui o equilíbrio do fluxo na entrada do reator:

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial t} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (C(0, t) - C_{in}(t)) \quad (4.3)$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial t} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (L(0, t) - L_{in}(t)) \quad (4.4)$$

Entanto a segunda condição (equações 4.5 e 4.6) representa o gradiente de concentração zero na saída.

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial t} \right|_{z=l} = 0 \quad (4.5)$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial t} \right|_{z=l} = 0 \quad (4.6)$$

O modelo matemático anterior (equações 4.1 a 4.6).), representa um reator de branqueamento de celulose isotérmico e isobárico (RENOU, 2000).

Para este modelo, a cinética da reação pode ser identificada mediante teste de laboratório e os parâmetros  $v$  e  $D$  mediante análise com traçador. A cinética empregada por Renou (2000), é implementada neste trabalho:



$$r_C(L, C) = -k_C C^2 L^2 = -0.0010 C^2 L^2$$

$$r_C(L, C) = -k_C C^2 L^2 = -0.0065 C^2 L^2$$

$$v = 1 \frac{m}{s} \quad D = 0,001 \frac{m^2}{s}$$

para um reator com comprimento de 30 metros.

Da mesma forma, os valores iniciais para o dióxido de cloro e a lignina, empregados pelo autor Renou et al. (2002), são usados neste projeto:

$$C_0 = 0$$

$$L_0 = 0$$

#### 4.1.1 Método Numérico

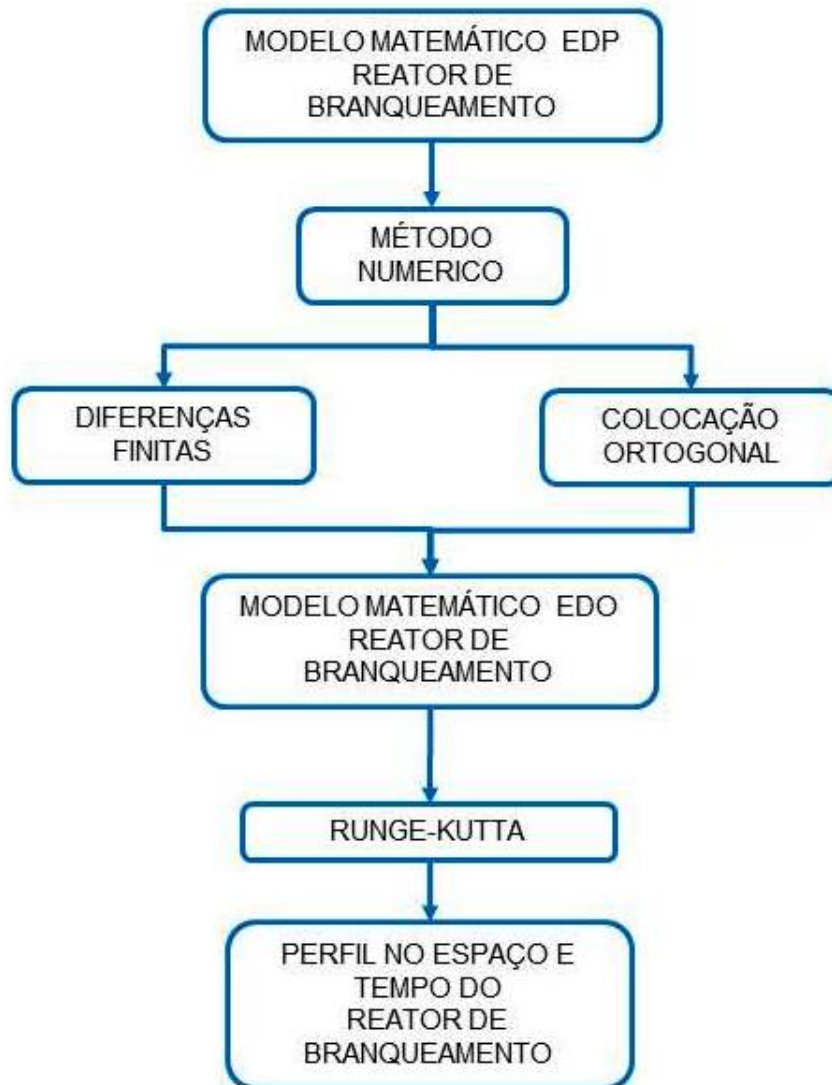
Devido aos fatos das EDP do modelo matemático do reator serem parabólicas, de acordo com Renou (2000), têm-se três métodos comumente empregados: diferenças finitas (Gerald y Wheatley, 1990), colocação ortogonal (Viacisen e Michelsen, 1978) e dos elementos finitos (Reddy, 1993), em geral, esses métodos dão bons resultados. Neste trabalho são utilizados os métodos de diferenças finitas e colocação ortogonal junto com o método de integração Runge-kutta para EDO's.

A metodologia empregada na resolução das EDP é a seguinte:

- a. Reduzir as EDP's a equações diferenciais algébricas usando as diferenças finitas ou a colocação ortogonal. Após este procedimento obtêm-se um sistema de EDO's no tempo.
- b. A integração no tempo das EDO's é realizada implementando-se o Runge-kutta. Como resultado final obtêm-se o perfil do reator no tempo em qualquer ponto do eixo z.

Na Figura 3 pode-se observar os passos no emprego dos métodos numéricos na resolução do modelo matemático do reator.

Figura 3: Esquema de Implementação dos Métodos Numéricos na Resolução do Reator de Branqueamento de Celulose



Fonte: Acervo Pessoal

#### 4.1.1.1 Desenvolvimento das Diferenças Finitas no Reator de Branqueamento de Celulose

No modelo matemático do reator de branqueamento de celulose é empregado o método das diferenças finitas de ordem central, conseguindo-se assim a discretização das equações no espaço e gerando um sistema de EDO's no tempo.

As seguintes são as aproximações das derivadas parciais de primeira e segunda ordem empregadas no modelo para sua discretização:

- Para o dióxido de Cloro

$$\frac{\partial C(z, t)}{\partial z} = \frac{C_{(i+1)} - C_{(i-1)}}{2\Delta z} \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} = \frac{C_{(i+1)} - 2C_i + C_{(i-1)}}{2\Delta z^2} \quad (4.8)$$

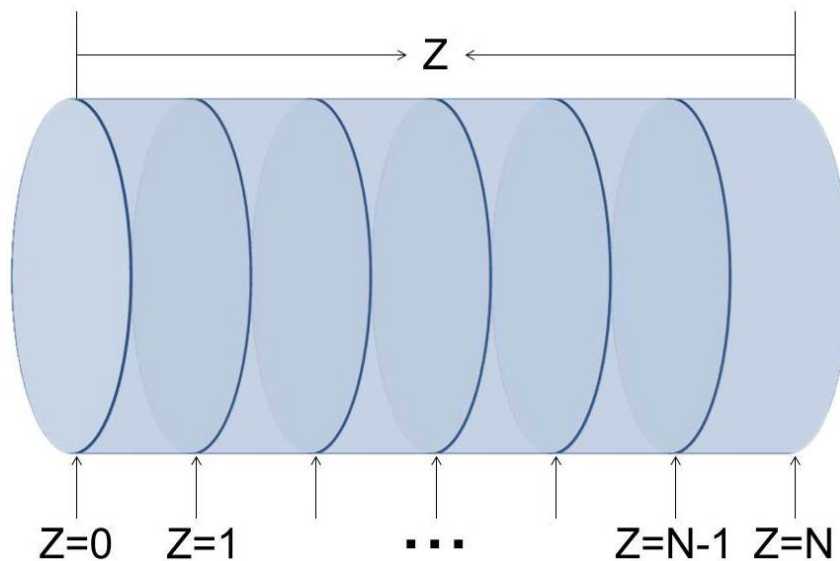
- Para a lignina

$$\frac{\partial L(z, t)}{\partial z} = \frac{L_{(i+1)} - L_{(i-1)}}{2\Delta z} \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} = \frac{L_{(i+1)} - 2L_i + L_{(i-1)}}{2\Delta z^2} \quad (4.10)$$

A Figura 4 representa a ideia de discretização no espaço do reator de branqueamento:

Figura 4: Divisão do Comprimento do Reator de Branqueamento de Celulose.



Fonte: Acervo Pessoal

O comprimento do reator é dividido N-vezes, por cada ponto é obtida uma equação diferencial, gerando-se um sistema de N EDO's no tempo.

Substituindo as aproximações da primeira e segunda derivada no espaço, (equações 4.7 a 4.10) no modelo do reator (equações 4.1 a 4.6), obtém-se o seguinte sistema EDO's:

**Para  $i=0$**

$$\frac{dC_0}{dt} = -v \frac{(C_1 - C_{-1})}{2\Delta z} + D \frac{C_1 - 2C_0 + C_{-1}}{\Delta z^2} - k_C C_0^2 L_0^2 \quad (4.11)$$

Para  $i=1$

$$\frac{dC_1}{dt} = -v \frac{C_2 - C_0}{2\Delta z} + D \frac{C_2 - 2C_1 + C_0}{\Delta z^2} - k_C C_1^2 L_1^2 \quad (4.12)$$

⋮

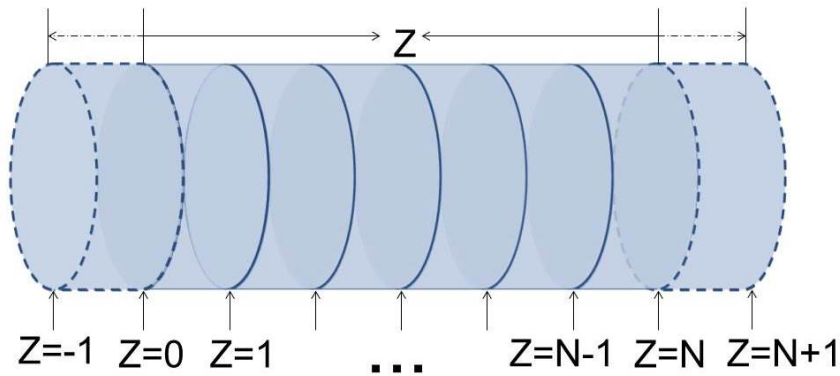
$$\frac{dC_i}{dt} = -v \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z} + D \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta z^2} - k_C C_i^2 L_i^2 \quad (4.13)$$

Para  $i=N$

$$\frac{dC_N}{dt} = -v \frac{C_{N+1} - C_{N-1}}{2\Delta z} + D \frac{C_{N+1} - 2C_N + C_{N-1}}{\Delta z^2} - k_C C_N^2 L_N^2 \quad (4.14)$$

É possível observar que o desenvolvimento do sistema de EDO leva em conta o comportamento dos pontos internos e as condições de fronteira, porém essas últimas requerem especial atenção no momento da aplicação das diferenças finitas. Como se mostra na Figura 5, precisa-se conhecer os pontos  $z = -1$  e  $z = N + 1$ .

Figura 5: Discretização no Espaço do Reator de Branqueamento.



Fonte: Acervo Pessoal

Esses pontos adicionais são estabelecidos mediante a discretização das condições de fronteira (equações 4.3 a 4.6) do modelo do reator, como segue:

$$\frac{C_1 - C_{-1}}{2\Delta z} = \frac{v}{D}(C_0 - C_{in}) \quad (4.15)$$

$$\frac{C_{N+1} - C_{N-1}}{2\Delta z} = 0 \quad (4.16)$$

Os termos  $C_{-1}$  e  $C_{N+1}$  são isolados:

$$C_{-1} = C_2 - \frac{2\Delta z v}{D}(C_1 - C_{in}) \quad (4.17)$$

$$C_{N+1} = C_{N-1} \quad (4.18)$$

Substituído essas expressões nas equações 4.3 e 4.6

**Para  $i=0$**

$$\frac{dC_0}{dt} = -v \frac{C_1 - C_2 - \frac{2\Delta zv}{D}(C_1 - C_{in})}{2\Delta z} + D \frac{C_1 - 2C_0 + C_2 - \frac{2\Delta zv}{D}(C_1 - C_{in})}{\Delta z^2} - k_C C_0^2 L_0^2 \quad (4.19)$$

**Para  $i=N$**

$$\frac{dC_N}{dt} = D \frac{2C_{N-1} - 2C_N}{\Delta z^2} - k_C C_N^2 L_N^2 \quad (4.20)$$

No final, o sistema de EDO's, para o dióxido de cloro e a lignina, é representado mediante as seguintes equações:

a. Sistema de EDO's para o dióxido de cloro

**Para  $i=0$**  (Na entrada do dióxido de cloro no reator)

$$\frac{dC_0}{dt} = -v \frac{C_1 - C_2 - \frac{2\Delta zv}{D}(C_1 - C_{in})}{2\Delta z} + D \frac{C_1 - 2C_0 + C_2 - \frac{2\Delta zv}{D}(C_1 - C_{in})}{\Delta z^2} - k_C C_0^2 L_0^2 \quad (4.21)$$

**Para  $1 < i < N$**  (Pontos intermediários)

$$\frac{dC_i}{dt} = -v \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z} + D \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta z^2} - k_C C_i^2 L_i^2 \quad (4.22)$$

**Para  $i = N$**  (Saída do dióxido de cloro no reator)

$$\frac{dC_N}{dt} = D \frac{2C_{N-1} - 2C_N}{\Delta z^2} - k_C C_N^2 L_N^2 \quad (4.23)$$

b. Sistema de EDO para a lignina

**Para  $i = 0$**  (Na entrada da lignina no reator)

$$\frac{dL_0}{dt} = -v \frac{L_1 - L_2 - \frac{2\Delta zv}{D}(L_1 - L_{in})}{2\Delta z} + D \frac{L_1 - 2L_0 + L_2 - \frac{2\Delta zv}{D}(L_1 - L_{in})}{\Delta z^2} - k_L C_0^2 L_0^2 \quad (4.24)$$

**Para  $1 < i < N$**  (Pontos intermediários)

$$\frac{dL_i}{dt} = -v \frac{L_{i+1} - L_{i-1}}{2\Delta z} + D \frac{L_{i+1} - 2L_i + L_{i-1}}{\Delta z^2} - k_L C_i^2 L_i^2 \quad (4.25)$$

**Para  $i = N$**  (Saída da lignina no reator)

$$\frac{dL_N}{dt} = D \frac{2L_{N-1} - 2L_N}{\Delta z^2} - k_L C_N^2 L_N^2 \quad (4.26)$$

#### 4.1.1.2 Desenvolvimento da Colocação Ortogonal no Reator de Branqueamento de Celulose

Segundo o método da colocação ortogonal, a solução aproximada é obtida mediante uma serie de polinômios ortogonais, seja  $P_N$  um polinômio ortogonal:

$$P_N(x) = \sum_{i=1}^N a_i x^i \quad (4.27)$$

que é definido mediante a seguinte condição de ortogonalidade:

$$\int_a^b w(x) P_k(x) P_N(x) dx = 0 \quad k = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (4.28)$$

As raízes do polinômio  $P_N(x)$  são os pontos de colocação. A solução aproximada, aplicando colocação ortogonal, para problemas sujeitos a condições de contorno pode ser:

$$\tilde{y} = x + x(1 - x) \sum_{i=1}^N a_i P_{i-1}(x) \quad (4.29)$$

Pudendo a função 4.29 ser escrita da seguinte maneira:

$$\tilde{y} = \sum_{i=1}^{N+2} d_i x^{i-1} \quad (4.30)$$

As derivadas de primeira e segunda ordem da equação 4.30 são:

$$\frac{d\tilde{y}}{dx}(x_j) = \sum_{i=1}^{N+2} d_i (i - 1) x_j^{i-2} \quad j = 1, 2, \dots, N + 2 \quad (4.31)$$

$$\frac{d^2\tilde{y}}{dx^2}(x_j) = \sum_{i=1}^{N+2} d_i (i - 1)(i - 2) x_j^{i-3} \quad j = 1, 2, \dots, N + 2 \quad (4.32)$$

Reescrevendo as equações 4.30, 4.31 e 4.32 de forma matricial, se obtém:

$$\tilde{y} = Qd \quad (4.33)$$

$$\frac{d\tilde{y}}{dx} = Cd \quad (4.34)$$

$$\frac{d^2\tilde{y}}{dx^2} = Dd \quad (4.35)$$

Isolando o termo  $d$  na equação 4.33 e substituindo nas equações 4.33 e 4.33, pode-se obter:

$$\frac{d\tilde{y}}{dx} = CQ^{-1}\tilde{y} = A\tilde{y} \quad (4.36)$$

$$\frac{d^2\tilde{y}}{dx^2} = DQ^{-1}\tilde{y} = B\tilde{y} \quad (4.37)$$

Assim as equações 4.38 a 4.41 são as aproximações das derivadas parciais mediante a colocação ortogonal para a discretização do sistema de equações do reator de branqueamento (KWONG, 1995):

$$\frac{\partial C}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^{N+2} A_{ji}C_i \quad j = 1, 2, 3, \dots, N+2 \quad (4.38)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial \xi^2} = \sum_{i=1}^{N+2} B_{ji}C_i \quad j = 1, 2, 3, \dots, N+2 \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^{N+2} A_{ji}L_i \quad j = 1, 2, 3, \dots, N+2 \quad (4.40)$$

$$\frac{\partial^2 L}{\partial \xi^2} = \sum_{i=1}^{N+2} B_{ji}L_i \quad j = 1, 2, 3, \dots, N+2 \quad (4.41)$$

Para a implementação da colocação ortogonal é necessário a adimensionalização das EDP, os seguintes são os parâmetros adimensionais, equações 4.42 à 4.46:

$$\tau = \frac{vt}{l} \quad (4.42)$$

$$d\tau = \frac{v}{l}dt \quad (4.43)$$

$$\xi = \frac{z}{l} \quad (4.44)$$

$$d\xi = \frac{dz}{l} \quad (4.45)$$

$$Pe = \frac{vl}{D} \quad (4.46)$$

As equações 4.47 a 4.52, mostram o sistema de equações do reator de branqueamento de celulose adimensionalizado, depois de substituir as equações 4.42 à 4.46 no sistema apresentado nas equações 4.1 à 4.6:

- Para o dióxido de Cloro

$$\frac{\partial C(\xi, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial C(\xi, \tau)}{\partial \xi} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} - \frac{l}{v} k_C (L(\xi, \tau), C(\xi, \tau))^2 \quad (4.47)$$

$$\left. \frac{\partial C(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = Pe(C(0, \tau) - C_{in}(\tau)) \quad (4.48)$$

$$\left. \frac{\partial C(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = 0 \quad (4.49)$$

- Para a lignina

$$\frac{\partial L(\xi, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial L(\xi, \tau)}{\partial \xi} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 L(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} - \frac{l}{v} k_L(L(\xi, \tau), C(\xi, \tau))^2 \quad (4.50)$$

$$\left. \frac{\partial L(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = Pe(L(0, \tau) - L_{in}(\tau)) \quad (4.51)$$

$$\left. \frac{\partial L(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = 0 \quad (4.52)$$

Uma vez o sistema de EDP se encontra adimensionalizado podem ser empregadas as aproximações das derivadas dadas pelas equações 4.38 à 4.41. Assim o modelo matemático do reator passa a ser discretizado no espaço como se mostra nas equações 4.53 à 4.58, gerando um sistema de N-equações diferenciais ordinárias e duas equações algébricas que representam o comportamento nos extremos do reator:

- Para o dióxido de Cloro

$$\frac{dC_j}{d\tau} = -\sum_{i=1}^{N+2} A_{ji} C_i + \frac{1}{Pe} \sum_{i=1}^{N+2} B_{ji} C_i - \frac{l}{v} k_C(L_j, C_j)^2 \quad (4.53)$$

Para  $j = 2, 3, 4, \dots, N + 1$

$$\sum_{i=1}^{N+2} A_{1i} C_i = Pe(C_1 - C_{in}) \quad (4.54)$$

$$\sum_{i=1}^{N+2} A_{N+2i} C_i = 0 \quad (4.55)$$

- Para a lignina

$$\frac{dL_j}{d\tau} = -\sum_{i=1}^{N+2} A_{ji} L_i + \frac{1}{Pe} \sum_{i=1}^{N+2} B_{ji} L_i - \frac{l}{v} k_L(L_j, C_j)^2 \quad (4.56)$$

Para  $j = 2, 3, 4, \dots, N + 1$

$$\sum_{i=1}^{N+2} A_{1i} L_i = Pe(L_1 - L_{in}) \quad (4.57)$$

$$\sum_{i=1}^{N+2} A_{N+2i} L_i = 0 \quad (4.58)$$

Fazendo uso das condições de contorno, equações 4.54, 4.55, 4.57 e 4.58 nas equações 4.59 a 4.64 o sistema de EDO's é representado mediante as seguintes equações:



a. Sistema de EDO's para o dióxido de cloro

$$\frac{dC_1}{d\tau} = -Pe(C_1 - C_{in}) + \frac{1}{Pe} \sum_{i=1}^{N+2} B_{1i}C_i - \frac{l}{v}k_C(L_1, C_1)^2 \quad (4.59)$$

Para  $j = 1$

$$\frac{dC_j}{d\tau} = - \sum_{i=1}^{N+2} A_{ji}C_i + \frac{1}{Pe} \sum_{i=1}^{N+2} B_{ji}C_i - \frac{l}{v}k_C(L_j, C_j)^2 \quad (4.60)$$

Para  $j = 2, 3, 4, \dots, N + 1$

$$\frac{dC_{N+2}}{d\tau} = \frac{1}{Pe} \sum_{i=1}^{N+2} B_{N+2i}C_i - \frac{l}{v}k_C(L_{N+2}, C_{N+2})^2 \quad (4.61)$$

Para  $j = N + 2$

b. Sistema de EDO's para a lignina

$$\frac{dL_1}{d\tau} = -Pe(L_1 - L_{in}) + \frac{1}{Pe} \sum_{i=1}^{N+2} B_{1i}L_i - \frac{l}{v}k_L(L_1, C_1)^2 \quad (4.62)$$

Para  $j = 1$

$$\frac{dL_j}{d\tau} = - \sum_{i=1}^{N+2} A_{ji}L_i + \frac{1}{Pe} \sum_{i=1}^{N+2} B_{ji}L_i - \frac{l}{v}k_L(L_j, C_j)^2 \quad (4.63)$$

Para  $j = 2, 3, 4, \dots, N + 1$

$$\frac{dL_{N+2}}{d\tau} = \frac{1}{Pe} \sum_{i=1}^{N+2} B_{N+2i}L_i - \frac{l}{v}k_L(L_{N+2}, C_{N+2})^2 \quad (4.64)$$

Para  $j = N + 2$

Os dois sistemas de EDO's são resolvidos simultaneamente usando o método Runge-Kutta de quarta ordem.

Estes dois métodos numéricos, as diferenças finitas e a colocação ortogonal, possuem vantagens e desvantagens na sua implementação, Quadro 4.2, como é mencionado por Renou (2000):

Quadro 4.2: Características dos Métodos Numéricos Utilizados

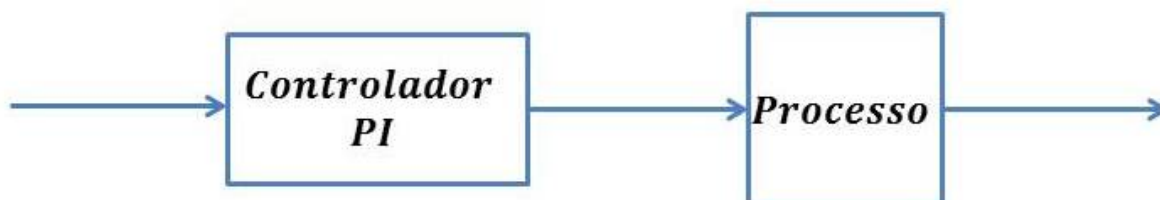
METODOLOGIA	VANTAGENS	DESVANTAGENS
DIFERENÇAS FINITAS	Fácil implementação	Apresenta difusão numérica Não consegue-se uma correta simulação de um reator de fluxo pistão Realiza manejo aproximado das condições de contorno.
COLOCAÇÃO ORTOGONAL	Reduz o número de EDO's empregadas, o que faz com que a simulação seja mais rápida.	A seleção dos pontos de colocação é complicada  Sensível às variações dos parâmetros do modelo.

Fonte: Adaptado de Renou (2000)

## 4.2 Controle de Processos Proporcional-Integral

Para o desenvolvimento do Controlador Proporcional-Integral, deve se levar em conta que o processo de branqueamento estudado possui duas entradas e duas saídas, que são, a lignina e dióxido de cloro. A Figura 6 apresenta o diagrama de blocos do processo em malha aberta, onde a variável manipulada é o dióxido de cloro e a variável controlada, a saída de lignina.

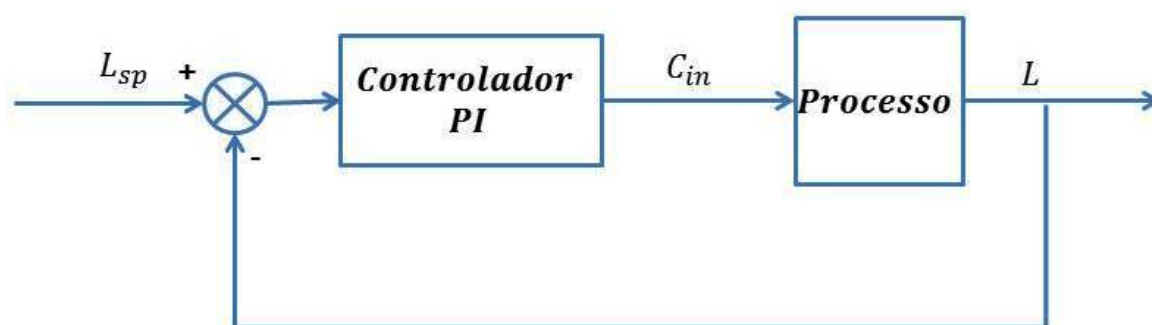
Figura 6: Diagrama de Blocos do Processo Malha Aberta.



Fonte: Acervo Pessoal

Agora, a Figura 7 mostra o diagrama de blocos em malha fechada com o controlador PI.

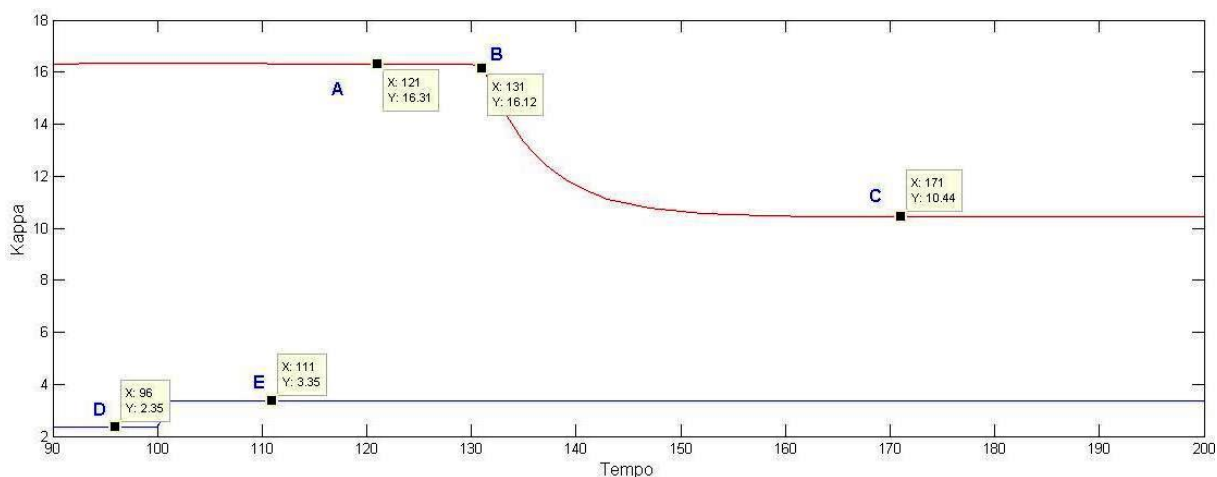
Figura 7: Diagrama de Blocos do Processo Malha Fechada.



Fonte: Acervo Pessoal

Na implementação do controle PI deve-se definir os parâmetros do processo, a fim de estabelecer os parâmetros do controlador de acordo com as equações 2.3., 4.21., 4.22. e 4.23. Estes são calculados mediante a curva de reação desenvolvida por Cohen e Coon.

Figura 8: Resposta na saída de Lignina ao Degrau no Dióxido de Cloro.



Fonte: Acervo Pessoal

Na Figura 8 os pontos A, B e C são respectivamente, a resposta do processo antes do degrau, o instante no qual o processo começa agir depois da aplicação do degrau e a saída em estado estacionário do processo logo após o degrau no dióxido de cloro. Além destes, os pontos D e E representam o degrau na variável manipulada (dióxido de cloro). Assim, os parâmetros da função de transferência que representa a resposta da saída da lignina ao degrau no dióxido de cloro, são calculados como segue:

$$k = \frac{\Delta \text{Variável de Saída}}{\Delta \text{Variável de Entrada}} = \frac{10,93-16,32}{1} = -5,89$$

$$t_d = \text{O tempo morto do processo} = 30 \text{ minutos}$$

$\tau$  = Tempo que a Saída atinge o 0,632 da variação total – Tempo início da resposta

$$\tau = 138 - 130 = 8 \text{ minutos } k = -5,86 \text{ } t_d = 30 \text{ minutos } \tau = 8 \text{ minutos}$$

Baseado nos parâmetros do processo, gerados a partir da resposta do processo ao degrau no dióxido de cloro, os parâmetros do controlador são determinados empregando o método Cohen-Coon, equações 4.22 e 4.23:

$$k_c = \frac{1}{-5,89} \frac{8}{30} \left(0,9 + \frac{30}{12*8}\right) = -0,0548953 \quad \tau_I = 30 \frac{30+3\frac{30}{8}}{9+20\frac{30}{8}} = 14,7321 \quad k_C = -0,0548953$$

$$\tau_I = 14,7321$$

Para obter o erro integral do controlador PI, é necessário estabelecer o erro e integra-lo. No processo de branqueamento de celulose o erro do processo está definido como a diferença entre o set point de lignina e sua saída do reator, Equação 4.65:

$$\epsilon = L_{in} - L_{N+1} \quad (4.65)$$

Definindo o erro integral como  $\int \epsilon dt$ , a derivada dele é o mesmo erro, constituindo assim, uma EDO referente ao controlador PI, que precisa ser resolvida em conjunto com as EDP's que representam o processo. O controlador PI é estabelecido mediante a Equação 4.66 (LUYBEN, 1989).

$$C_{in} = C_{ss} + k_c \left[ \epsilon + \frac{1}{\tau_I} \int_0^t \epsilon dt \right] \quad (4.66)$$

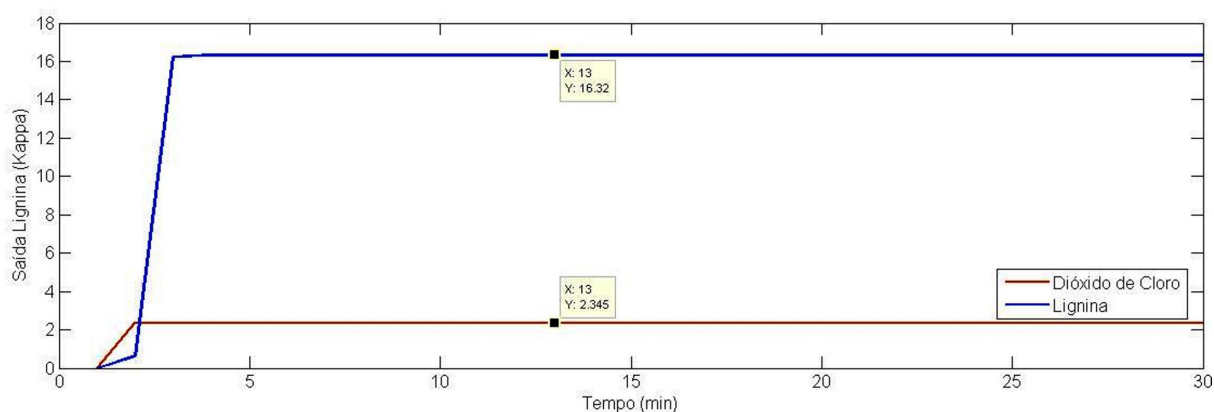
Quando estas EDP's são linearizadas mediante o método das diferenças finitas, o sistema de EDO's com o controlador, possui no final  $N + 3$  equações diferenciais, possibilitando a resolução do sistema de equações mediante o método Runge-kutta no Matlab e a implementação do controlador PI no reator de branqueamento de celulose.

O valor de  $C_{ss}$  corresponde ao valor do dióxido de cloro no estado estacionário. Na Figura 9 é apresentado este valor,  $C_{ss} = 2,345$ .

### 4.3 Controle Preditivo com Modelo Não Linear

De acordo com Renou (2000), a complexidade do problema do reator de branqueamento de celulose consiste no tempo de residência grande, na sua cinética não linear, na dificuldade de identificação, dos diversos distúrbios que influenciam o processo e da falta de sensores disponíveis no processo. O objetivo desta seção é implementar um Controlador Preditivo Não Linear no reator de branqueamento.

Figura 9: Saída de Lignina em Função da Entrada do Dióxido de Cloro.



Fonte: Acervo Pessoal

Na indústria o reator pode ser operado de forma manual, porém o controle da variação do produto e da quantidade de dióxido de cloro usado torna-se limitado. Desta forma o desenvolvimento do Controlador Preditivo Não Linear tem como prioridade otimizar o processo de branqueamento controlando o nível de branqueamento mediante a manipulação da entrada do dióxido de cloro.

Durante o controle do processo é necessário levar em conta as seguintes hipóteses:

- a. As propriedades da celulose são uniformes
- b. A medição em Kappa reflete com precisão a taxa de lignina que o produto mantém na saída do reator.
- c. Parte-se do fato que a quantidade de lignina é medida em tempo real, na entrada e na saída do reator, além do tempo de amostragem ser suficiente.
- d. Mesmo que a cinética para o processo de branqueamento possa variar, dependendo das características da celulose, assume-se que o modelo empregado neste projeto é uma representação apropriada.

No desenvolvimento do Controle Preditivo no processo de branqueamento, escolheu-se como a variável controlada a saída de lignina do reator,  $L$ , e como variável manipulada entrada de dióxido de cloro no reator,  $C_{in}$ .

O Controlador Preditivo Não Linear é desenhado usando os conceitos da Matriz Dinâmica de Controle para um modelo linear, neste caso, como o modelo usado é não

linear ele é linearizado mediante os métodos de discretização apresentados na secção anterior (RENOU, 2000).

A seguir mostra-se os passos necessários para a implementação do CPNL:

a. Definição dos parâmetros do reator:

- Condições iniciais, concentrações de lignina e dióxido de cloro dentro do reator quando se dá início ao processo:

$$L_0 = 0 \quad C_0 = 0$$

- Cinética de reação empregada para a lignina e o dióxido de cloro:

$$r_L(L, C) = -k_L C^2 L^2 = -0,0065 C^2 L^2 \quad r_C(L, C) = -k_C C^2 L^2 = -0,0010 C^2 L^2$$

- Características hidrodinâmicas:

$$v = 1 \frac{m}{s} \quad D = 0,001 \frac{m^2}{s}$$

- Quantidades de entrada da lignina e do dióxido de cloro no reator:

$$L_{in} = 31 \text{ kappa} \quad C_{in} = 2.35 \frac{g}{l}$$

Determinar os parâmetros do controle: Precisam-se definir o horizonte do modelo,  $N$ , o intervalo de amostragem,  $T$ , o horizonte de controle,  $L$ , horizonte de otimização,  $R$ , e as duas matrizes de ponderação,  $Q$  e  $R$ .

Os parâmetros  $N$  e  $T$  encontram-se relacionados, sua escolha deve ser:

$$NT \geq \text{Tempo de resposta da malha aberta}$$

Desta forma pode-se garantir que o modelo reflete a variação ao degrau na variável de entrada durante o tempo necessário para que o processo atinja o estado estacionário. A escolha deste parâmetro influi na seleção do  $R$ .

Os parâmetros de controle e otimização  $L$  e  $R$  são importantes na qualidade do controle (KWONG, 2010; SEBORG et al., 2003). Quando o valor de  $L$  aumenta, ou o valor de  $R$  diminui, as ações de controle são mais agressivas, além de demandar maior esforço computacional.

As matrizes  $Q$  e  $R$  permitem que as variáveis de entrada sejam ponderadas de acordo com sua importância (SEBORG et al., 2003). Se as saídas se encontram normalizadas utiliza-se  $Q = I$ . Para a matriz de  $R$  é comum usar  $R = fI$ , onde  $f$  é um escalar não negativo, chamado fator de supressão, usado para ponderar na função objetivo as variações nas entradas. Se  $f$  aumenta, a resposta do processo em malha fechada é mais lenta, gerando variações menores aportando maior robustez ao controle (KWONG, 2010).

O quadro 4.3 mostra os valores seleccionados para os parâmetros do controle neste projeto:

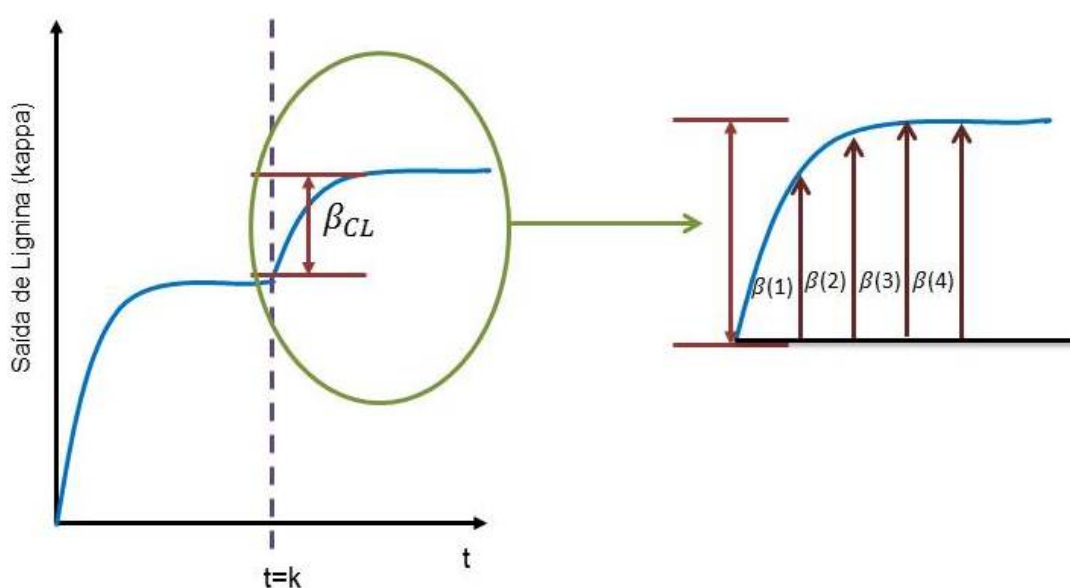
Quadro 4.3: Parâmetros do Controle Preditivo Não Linear

PARÂMETRO	VALORES EMPREGADOS
Horizonte do Modelo	$N = 100$ minutos
Intervalo de Amostragem	$T = 1$ minuto
Horizonte de Controle	$L = 3$ minutos
Horizonte de Otimização	$R = 15$ minutos
Matrix de pesos das saídas controladas	$Q = I$ (Matriz Identidade)
Matrix de pesos dos incrementos das variáveis manipuladas	$P = 100$

Fonte:Acervo Pessoal

- c. Construção da Matriz Dinâmica: Determina-se a resposta do processo ao degrau, essa variação obtém-se variando a quantidade da entrada do dióxido de cloro em uma unidade,  $\Delta C_{in} = 1$ , passando de 2,35 g/l a 3,35 g/l. A Figura 10 mostra a variação ao degrau implementado no instante  $t = k$ .

Figura 10: Construção da Matriz Dinâmica de Controle



Fonte: Acervo Pessoal

Conhecendo-se a saída de lignina, depois de realizar a mudança na variável controlada, a matriz dinâmica pode ser estabelecida como segue:

$$\beta_{CL} = [\beta(1), \beta(2), \beta(3), \dots, \beta(N)] \quad (4.67)$$

Onde  $\beta_{CL}$  representa a variação da saída da lignina ao degrau na entrada do dióxido de cloro.

- d. Estabelecer a trajetória de referência desejada,  $Y_r$ : Essa trajetória define o caminho que a variável controlada deve seguir para atingir o valor do set point estabelecido,  $r_k$ . Este caminho pode ser uma aproximação suave ou o mesmo set point. A trajetória de referência pode ser representada como segue:

$$Y_r(k+1) = \alpha^j Y(k) + (1 - \alpha^j) r_k \quad (4.68)$$

$$j = 1, 2, \dots, R$$

(KWONG, 2010)

- e Simulação: Realiza-se a simulação da planta e do modelo para conhecer os valores operacionais, a saída da planta ( $Y_p$ ) e a saída do modelo ( $Y_m$ )
- f Cálculo do resíduo (bias correction): A diferença entre a saída da planta ( $Y_p$ ) e a saída do modelo ( $Y_m$ ) (Equação 4.69), representa o resíduo do sistema que vai ser adicionado para corrigir as previsões realizadas (OGUNNAIKE; RAY, 1994).

$$b = Y_p - Y_m \quad (4.69)$$

- g Cálculo da previsão da resposta não forçada: Empregando o modelo do processo é determinado seu comportamento futuro,  $Y_o$ , quando nenhuma ação de controle futura é implementada.
- h Correção da resposta não forçada: A resposta prevista não forçada obtida do modelo do processo é corrigida,  $Y_{oc}$ , com o resíduo calculado no passo  $f$ , da seguinte forma:

$$Y_{oc} = Y_o + b \quad (4.70)$$

- i Cálculo do erro da resposta não forçada: De acordo com a Equação 4.71, a diferença entre a trajetória da referência desejada,  $Y_r$ , e a resposta corrigida não forçada,  $Y_{oc}$ , representa o erro da resposta não forçada:

$$E_o = Y_r - Y_{oc} \quad (4.71)$$



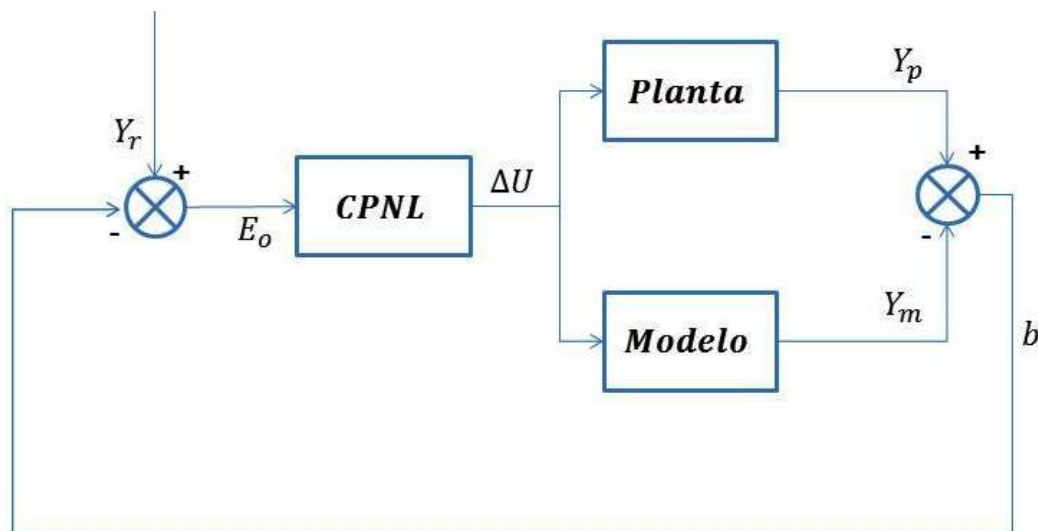
- j Cálculo da ação de controle  $\Delta U$ : Como o sistema é sobredeterminado, não possui uma solução exata, assim é possível, calcular a melhor solução usando a metodologia dos mínimos quadrados, como se apresenta na Equação 4.72.

$$\Delta U = (\beta^T * Q^T * Q * \beta + P)^{-1} * (\beta^T * Q^T * Q) * E_o \quad (4.72)$$

- k Implementação da ação de controle no seguinte instante: A melhor ação de controle, calculada no passo  $j$ , é usada na simulação da planta e do modelo do processo. Assim os valores são atualizados.

O diagrama de blocos apresentado na Figura 11 mostra o esquema usado no desenvolvimento do Controle Preditivo Não Linear empregado no reator de branqueamento de celulose.

Figura 11: Diagrama de Blocos do Controle Preditivo Não Linear



Fonte: Acervo Pessoal

#### 4.4 Critérios para Avaliação do Desempenho dos Controladores

Para comparar o desempenho dos controladores e identificar o efeito dos parâmetros no Controlador Preditivo Não Linear, é empregado os critérios da integral do erro. Entre os mais populares se encontram:

- Integral do Erro Absoluto (IAE)

$$IAE = \int_0^t |e(t)| dt \quad (4.73)$$

- Integral do Erro ao Quadrado (ISE)

$$ISE = \int_0^t [e(t)]^2 dt \quad (4.74)$$

Onde  $e(t)$  é a referência entre o Set-Point e a medição da variável controlada (SEBORG et al., 2003). Estes critérios podem ser calculados usando a seguinte fórmula discreta:

$$ISE = \sum_{k=1}^{NA} [y(k) - r(k)]^2 \quad (4.75)$$

$$IAE = \sum_{k=1}^{NA} [y(k) - r(k)] \quad (4.76)$$

onde  $y(k)$  é a saída discreta da planta,  $r(k)$  setpoint e  $NA$  o número de amostras da simulação do processo.

De acordo com Seborg et al. (2003), o ISE penaliza erros grandes, gerando parâmetros mais agressivos. O critério IAE produz parâmetros do controlador que se encontram entre os gerados pelos critérios ITAE e ISE.

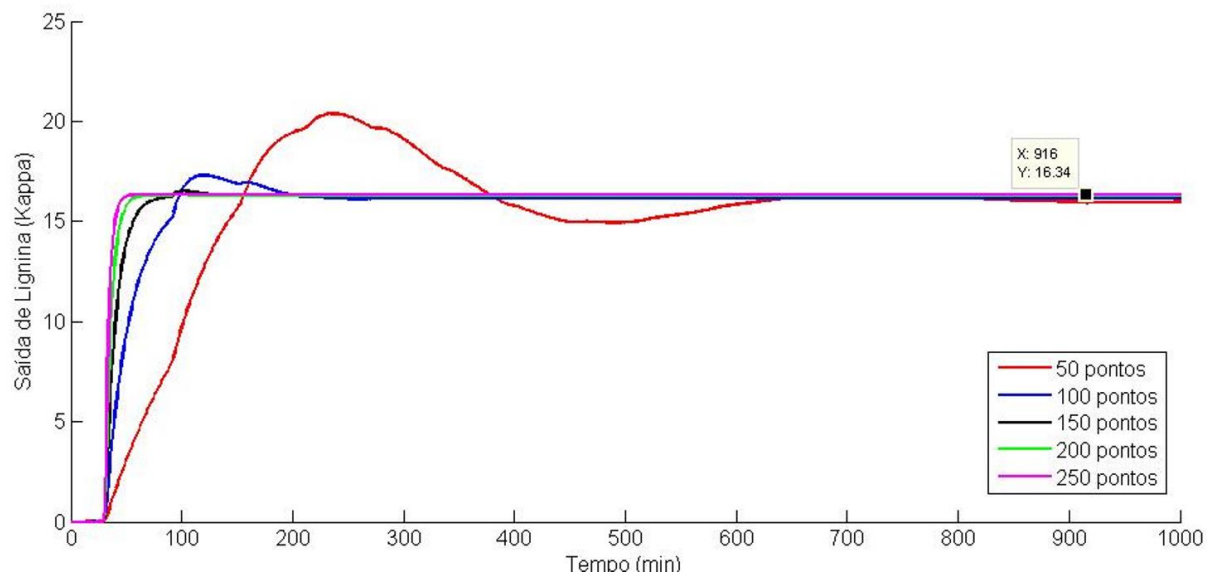
## 5 RESULTADOS

### 5.1 Modelo matemático empregado

#### 5.1.1 Diferenças finitas

Na implementação das diferenças finitas no reator de branqueamento de celulose foram usados cinco tamanhos de malhas diferentes: 50, 100, 150, 200 e 250 divisões, empregando os parâmetros (cinética de reação e condições iniciais), do modelo usado por Renou (2000). O comportamento do modelo nas diferentes malhas é apresentado na Figura 12:

Figura 12: Perfil de Saída de Lignina em Função do Tempo Empregando Diferenças Finitas.



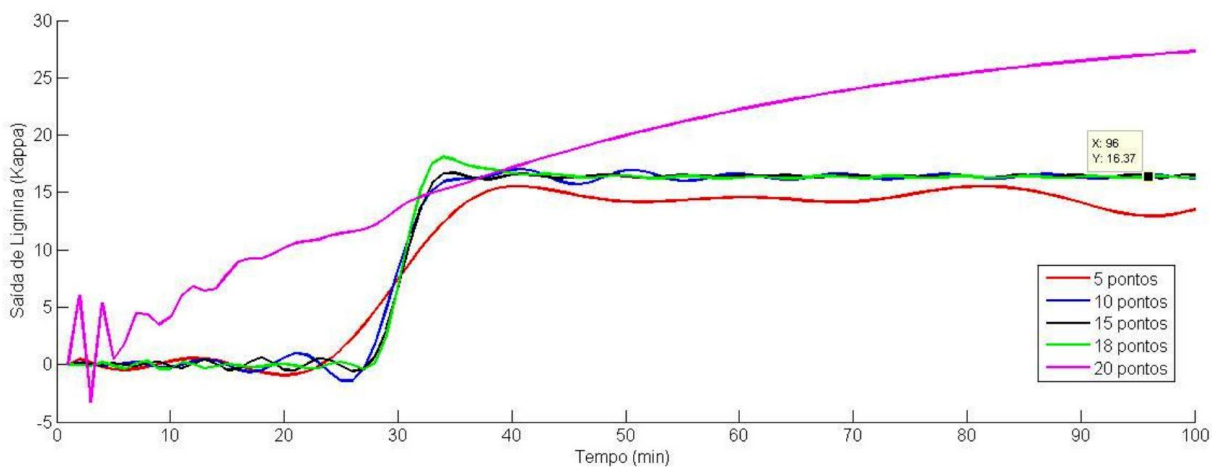
Fonte: Acervo Pessoal

Como pode se observar na figura anterior (12), todas as malhas alcançam o estado estacionário no final do tempo de simulação, porém, uma malha de no mínimo 150 pontos, possui menos variações na sua trajetória até o estado estacionário e consegue representar o comportamento do processo. Para malhas maiores não se observa uma variação significativa nos valores do processo no tempo, assim, escolher um número de pontos maior, não implica em uma melhora no desempenho na simulação do reator.

### 5.1.2 Colocação ortogonal

Do mesmo modo que foi realizado com o método das diferenças finitas, a colocação ortogonal é empregada na resolução do modelo do reator com vários pontos de colocação, com a intenção de determinar o número de pontos que melhor representa a dinâmica do processo. Na Figura 13, observa-se o comportamento do modelo do reator quando são usados 5, 10, 15, 18 e 20 pontos de colocação. Para um número de pontos maior que 18, o modelo começa apresentar diferenças e não consegue reproduzir a dinâmica do reator. Desta forma, menos de 18 pontos de colocação são suficientes para representar a dinâmica do reator, porém, 5 pontos de colocação apresentam variações no comportamento do reator (RENOU, 2000).

Figura 13: Perfil de Saída de Lignina e Cloro em Função do Tempo Empregando Colocação Ortogonal.



Fonte: Acervo Pessoal

Observando as figuras 12 e 13, é possível notar que o processo possui um tempo morto de quase 30 minutos e que as diferenças finitas demandam de um tempo maior para a estabilização da saída de lignina. As duas metodologias atingem o estado estacionário em valores bem próximos, 16,34 Kappa nas diferenças finitas e 16,37 Kappa na colocação ortogonal. Estes dois métodos numéricos possuem vantagens e desvantagens na sua implementação, Quadro 4.2, como é mencionado por Renou (2000),

## 5.2 Tipos de Controle Usados no no Reator de Branqueamento de Celulose

São desenvolvidos dois controladores para serem empregados no reator de branqueamento de celulose, o controle PI e o controle CPNL. A estrutura destes controladores é apresentada nos diagramas de blocos da Figura 7 para o controlador Proporcional-Integral e na Figura 11 para o Controle Preditivo Não Linear. O objetivo da montagem do controlador PI é empregar ele para comparar o desempenho do Controlador Preditivo Não Linear.

No desenho do controlador PI, foi usada a metodologia das diferenças finitas, com uma malha de 150 divisões para a linearização do modelo no espaço e Runge-kutta para integração no tempo. No caso do Controlador Preditivo Não Linear foram empregadas as duas metodologias: Diferenças Finitas e Colocação Ortogonal para a linearização no espaço e Runge-Kutta no tempo. Por conta de que, no CPNL se precisa da planta e do modelo do processo, selecionou-se como planta o modelo matemático resolvido mediante diferenças finitas com uma malha de 150 divisões, e como modelo do reator, o modelo matemático linearizado mediante a Colocação Ortogonal com 10 pontos de colocação. O número de divisões na malha e o número de pontos de colocação, foram selecionados baseando-se na análise realizada na seção anterior. Estabeleceu-se o Set-Point para a variável controlada Lignina de 12 Kappa.

### 5.2.1 Controle Proporcional – Integral

#### 5.2.1.1 Simulação Reator de Branqueamento de Celulose em Malha Aberta

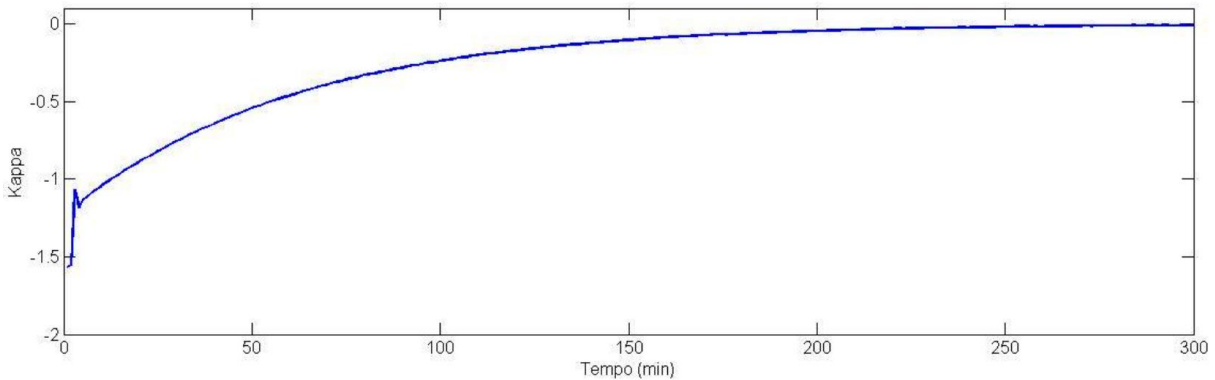
A simulação em malha aberta do reator de branqueamento de celulose, pode ser observada na Figura 12 na seção anterior. Com uma entrada de 2,35 g/l de dióxido de cloro a saída de lignina é de 16,34 Kappa.

#### 5.2.1.2 Implementação do controle PI

Para implementar o controle PI no reator de branqueamento, calculou-se o valor dos parâmetros do processo e do controlador, mediante a curva de reação de Cohen-Coon, como foi apresentado na seção 4.3. Nas figuras 14, 15 e 16 se apresenta o comportamento do processo e do controlador PI quando ele é empregado para mudar a saída de lignina de 10,43 Kappa até o Set-Point de 12 Kappa, com entrada de dióxido de cloro 3,35 g/l.

A Figura 14 mostra o desvio entre o Set-Point definido e a saída de lignina do reator de branqueamento, pode se observar que as ações de controle empregadas na entrada do dióxido de cloro, conseguem levar essa diferença até quase zero.

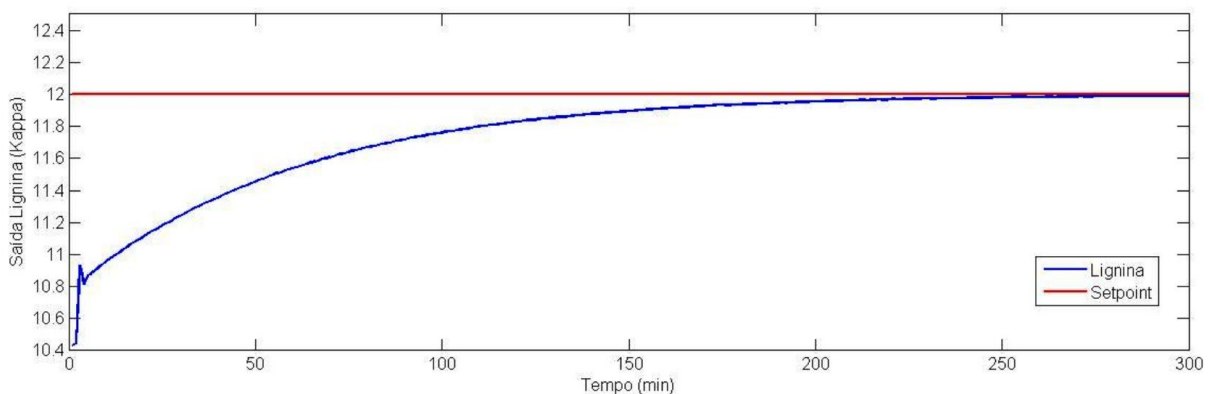
Figura 14: Desvio do Set-Point Estabelecido para Lignina.



Fonte: Acervo Pessoal

Com a implementação do controlador, se consegue manter a saída da lignina no Set-Point estabelecido, 12 Kappa, Figura 15, observa-se que o reator de branqueamento é simulado até alcançar estabilidade e logo depois o controle PI começa definir as ações de controle sobre a variável manipulada, conseguindo atingir o Set-Point na variável controlada.

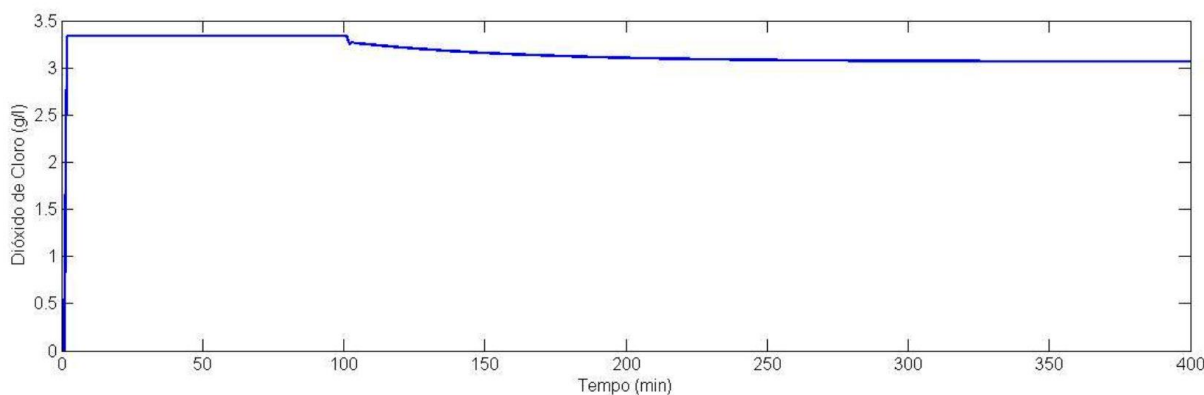
Figura 15: Resposta na Saída de Lignina com Controle PI.



Fonte: Acervo Pessoal

As ações definidas pelo controlador PI sobre a entrada de dióxido de cloro no reator, são observadas na figura PIU, o controlador inicia com um valor de 2,3448 g/l de dióxido de cloro e termina com 3,0572 g/l. A integral do erro absoluto (IAE) deste controlador é -196,6531994 e o a integral do erro ao quadrado (ISE) é 337,676821.

Figura 16: Ações de Controle na Entrada de Dióxido de Cloro Estabelecidas pelo Controlador PI.



Fonte: Acervo Pessoal

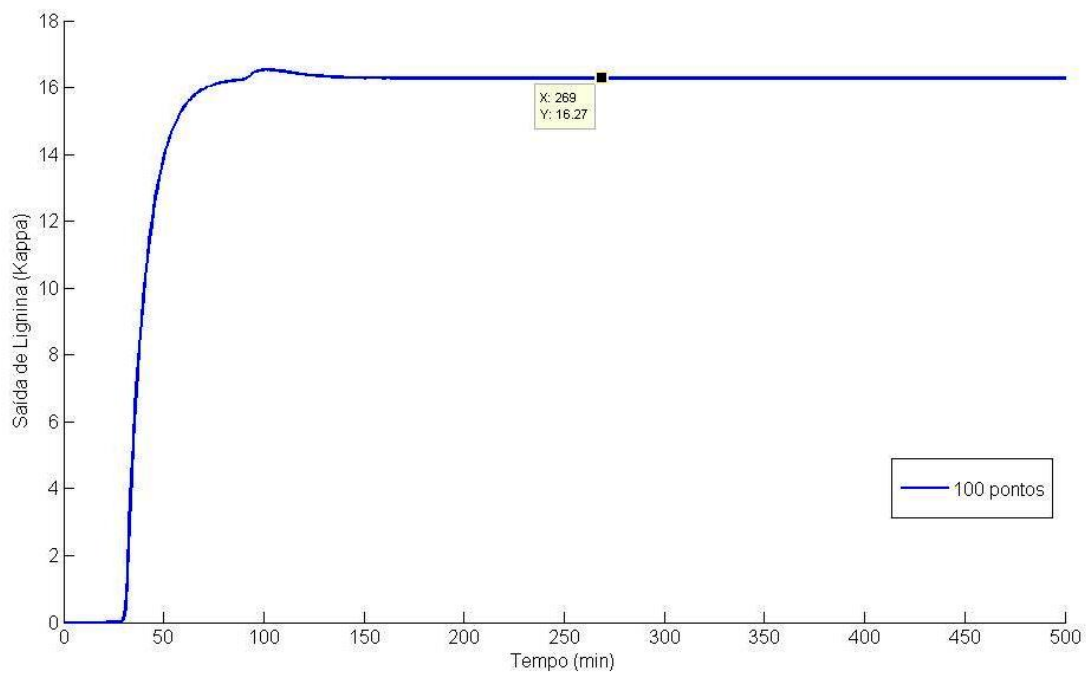
## 5.2.2 Controle Preditivo Não Linear

O Controle Preditivo foi implementado de acordo com o diagrama de blocos do Controle Preditivo Não Linear da Figura 11. Como planta empregou-se o modelo do processo resolvido mediante diferenças finitas em uma malha de 150 divisões e como modelo para realizar a previsões foi usado o reator resolvido mediante colocação ortogonal com 10 pontos de colocação.

Na Figura 17, mostra-se a simulação do reator, considerado como a planta usando diferenças finitas, com uma entrada de lignina de 31 e de dióxido de cloro de 2,35, o reator se estabiliza a saída de lignina em um valor de 16,27 Kappa.

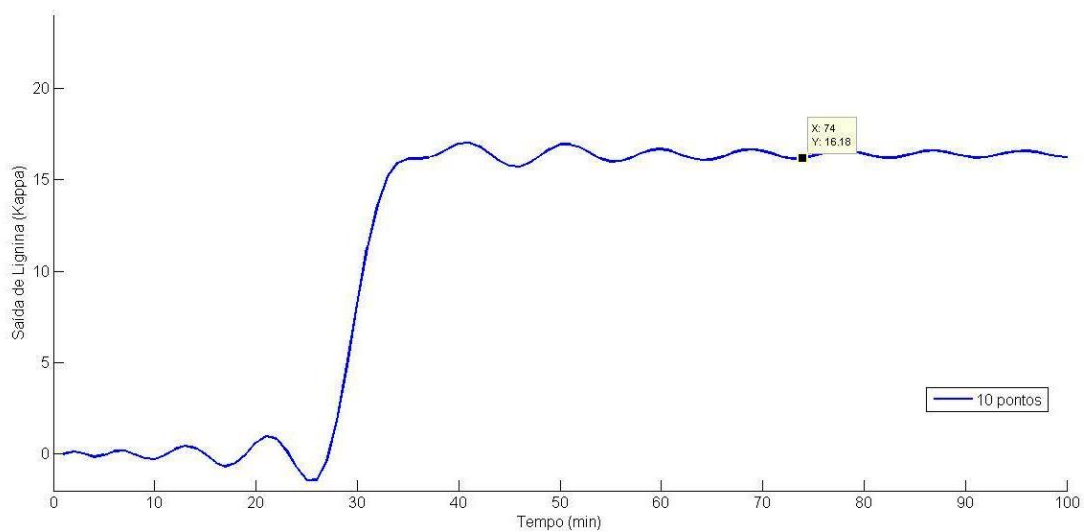
No caso do reator modelo, na Figura 18 é apresentada a simulação dele, empregando colocação ortogonal. O valor da saída de lignina no estado estacionário e de 16,18 kappa. Comparando as figuras 17 e 18 é possível observar que a planta e o modelo conseguem representar o comportamento de reator mostrando saídas próximas.

Figura 17: Reator Planta Diferenças Finitas



Fonte: Acervo Pessoal

Figura 18: Reator Modelo Colocação Ortogonal.



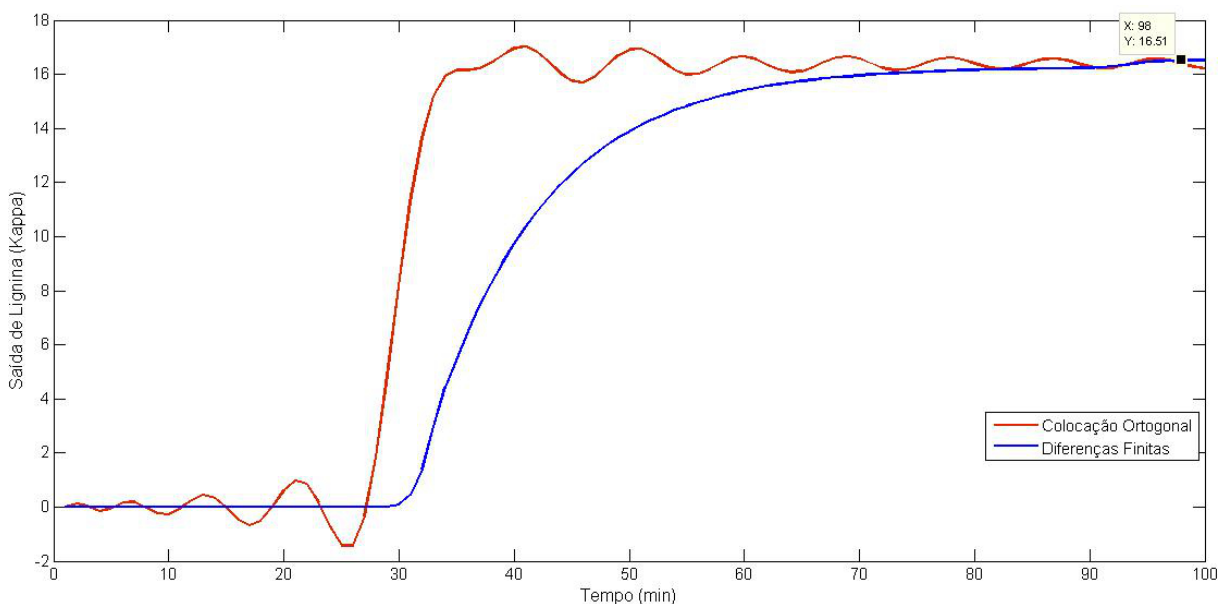
Fonte: Acervo Pessoal

Na Figura 19 se apresenta a comparação entre os dois métodos numéricos, a



colocação ortogonal com 10 pontos e as diferenças finitas com uma malha de 100. Pode-se observar que os dois métodos dão resultados similares no estado estacionário

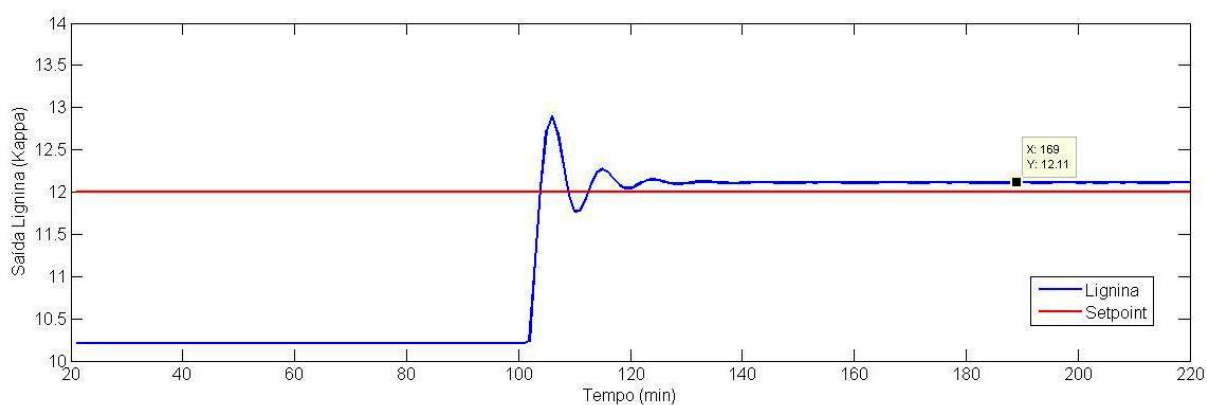
Figura 19: Colocação Ortogonal e Diferenças Finitas



Fonte: Acervo Pessoal

Na Figura 21, apresenta-se os coeficientes da matriz dinâmica de controle, que é empregada no Controle Preditivo Não Linear para o cálculo das ações futuras de controle. Os valores são negativos devem-se ao ganho também negativo que o processo possui: quanto mais dióxido de cloro é usado no processo, menor será a quantidade de lignina na saída do reator.

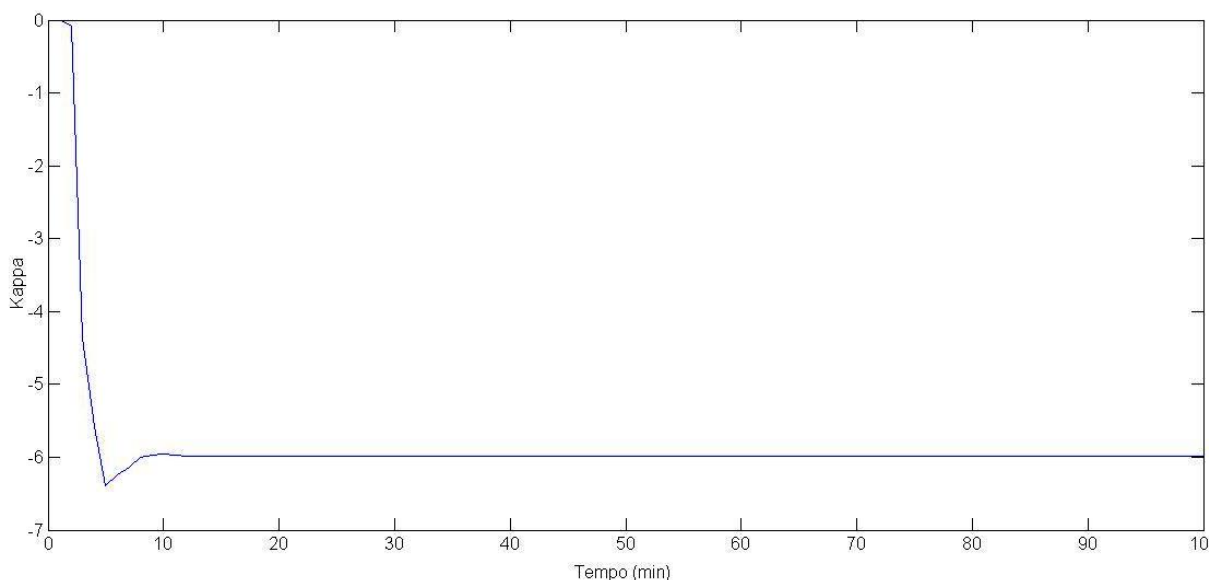
Figura 20: Saída de Lignina com Controle CPNL Implementado Set-Point=12.



Fonte: Acervo Pessoal

O Controle Preditivo Não Linear é empregado para um Set-Point de lignina de 12 kappa, com os parâmetros definidos no Quadro 4.2: Parâmetros do Controle Preditivo Não Linear. Nas figuras 22, 20 e 23, são apresentadas as ações de controle na variável manipulada, a resposta do processo na variável controlada e a diferença entre o Set-Point e a saída de lignina, quando se deseja uma saída de lignina de 12 Kappa.

Figura 21: Coeficientes da Matriz Dinâmica de Controle.



Fonte: Acervo Pessoal

### 5.2.3 Comparação do Controlador PI com o Controlador CPNL

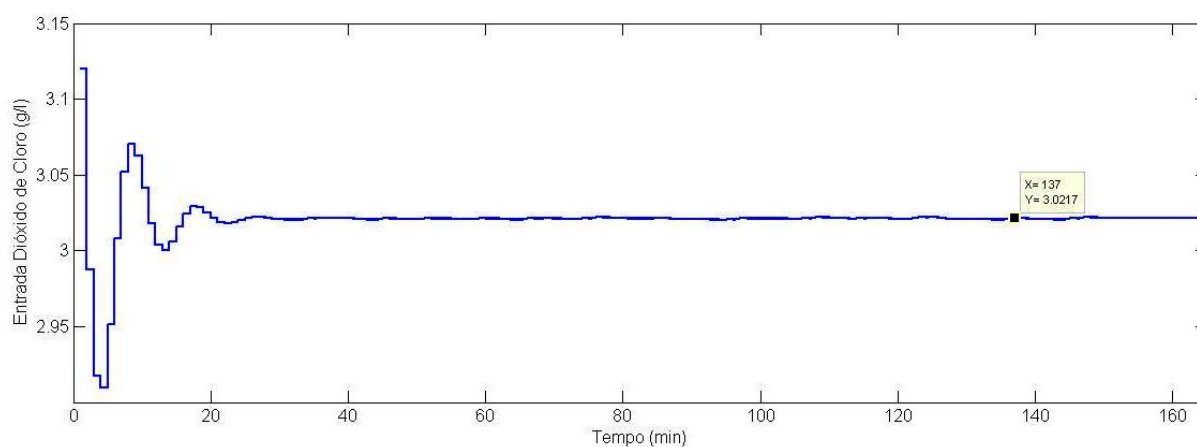
Com o objetivo de avaliar o desempenho do CPNL, é realizado um comparativo com o controlador PI. Os critérios de comparação são dois tipos de erro: IAE e ISE. No Quadro 5.1., são apresentados os valores destes erros para cada um dos controladores empregados no reator de branqueamento de celulose, com Set-Point de 12 Kappa.

Quadro 5.1: IAE e ISE para o PI e CPNL com Set-Point =12

	PI	CPNL
IAE	74,6061503	8,88
ISE	47,5236404	24,43

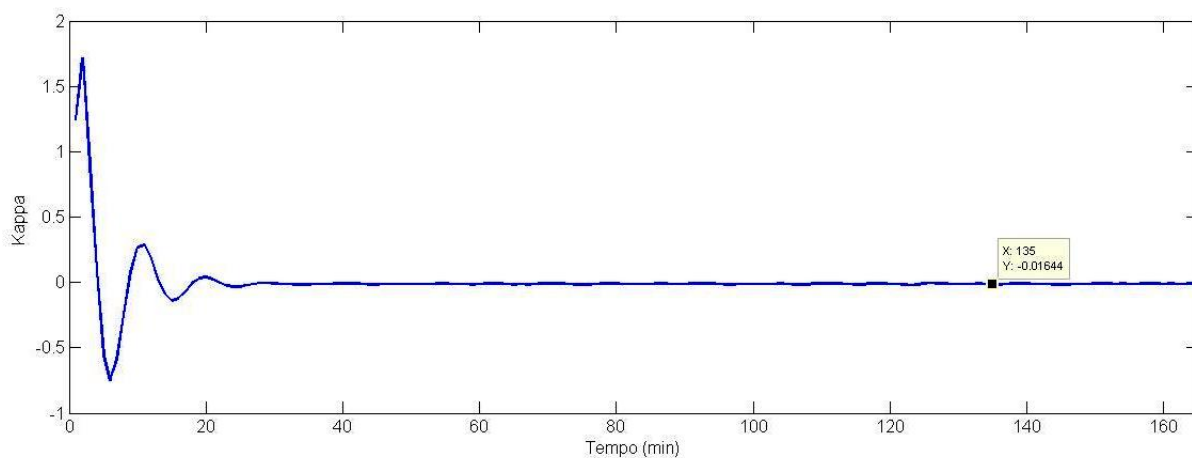
Fonte: Acervo Pessoal

Figura 22: Ações de Controle na Entrada de Dióxido de Cloro para o Controle na Saída de Lignina Set-Point=12.



Fonte: Acervo Pessoal

Figura 23: Diferença Entre o Set-Point de Lignina e Saída do Reator Set-Point =12.

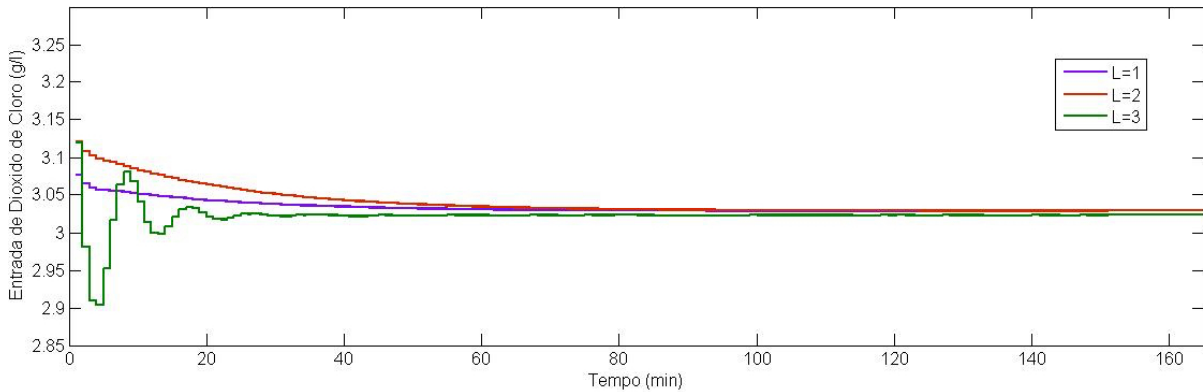


Fonte: Acervo Pessoal

#### 5.2.4 Efeito do Horizonte de Controle no CPNL

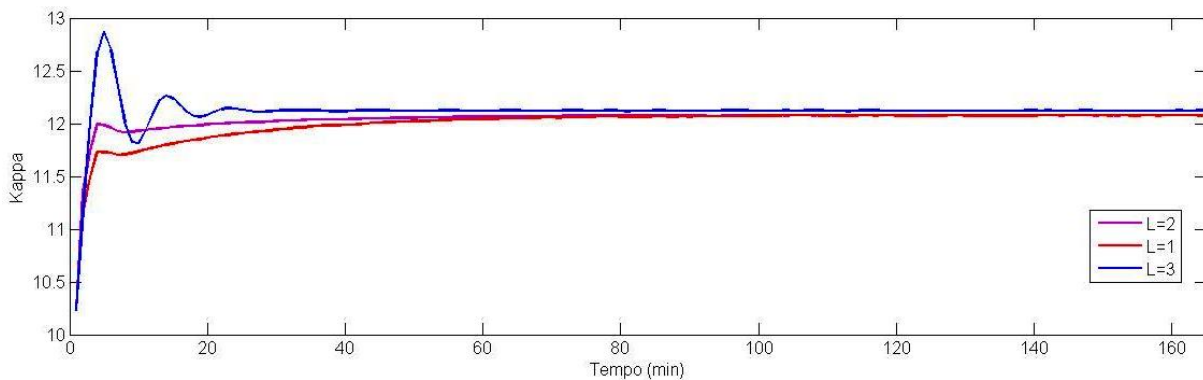
Como o objetivo é avaliar o desempenho do controlador CPNL em função do horizonte de controle  $L$ , foram feitas simulações variando este parâmetro em 1, 2 e 3, deixando o horizonte de previsão fixo em  $R=15$ . Nas figuras 24 e 25, mostra-se o efeito do horizonte de controle nas ações determinadas pelo controlador, entrada de dióxido de cloro e na saída de Lignina do reator.

Figura 24: Ações de Controle do CPNL com L=1, 2 e 3.



Fonte: Acervo Pessoal

Figura 25: Saída de Lignina com L=1, 2 e 3.



Fonte: Acervo Pessoal

No Quadro 5.2, são apresentados os valores dos dois critérios escolhidos para avaliar o efeito do horizonte de controle no CPNL.

Quadro 5.2: Valores de IAE e ISE para Variações no Horizonte de Controle L

	L=1	L=2	L=3
IAE	5,28	6,57	8,88
ISE	13,80	16,99	24,43

Fonte: Acervo Pessoal

Com os valores mostrados no quadro anterior, pode-se observar que com o aumento no tamanho do horizonte de controle, os dois critérios avaliados, IAE e ISE, também se incrementam.

## 6 CONCLUSÕES

A simulação do reator de branqueamento de celulose foi realizada empregando os balanços de massa de dióxido de cloro e de lignina, obtendo-se assim, um sistema de equações diferenciais parciais no espaço e no tempo. Para simular o comportamento do reator, foi necessário discretizar as equações do balanço de massa no espaço, isto, implementando dois métodos numéricos: Diferenças Finitas e Colocação Ortogonal, para depois realizar a integração no tempo com o método Runge-Kutta. Assim, foi possível comparar os dois métodos e garantir que estes conseguem representar a dinâmica do reator de branqueamento. No caso das Diferenças Finitas, identificou-se que o melhor tamanho da malha está em torno de 150 divisões. Com um número de malha menor mostra um processo mais instável e demora um tempo maior para atingir o estado estacionário, e no caso de um número maior que 150 divisões, apenas incrementa o tempo de processamento do sistema de equações diferenciais. Para o método de Colocação Ortogonal, implementado no reator de branqueamento, pode-se identificar que é preciso um número de pontos de colocação entre 10 até 18 pontos. Escolher um número fora dessa faixa não proporciona a dinâmica adequada do processo. Ambas as metodologias são simples na sua implementação. A Colocação Ortogonal requer um menor esforço computacional, porém, apresenta instabilidade com um número maior de pontos.

Os dois métodos numéricos foram usados no desenvolvimento dos controladores, Proporcional-Integral e Controle Preditivo Não Linear. Uma vez que o propósito do processo de branqueamento é atingir o nível de brancura na celulose mediante a quantidade de lignina residual presente na saída do reator, selecionou-se como variável manipulada, a entrada do dióxido de cloro, para assim definir como variável controlada, o nível de lignina do reator. Na determinação dos parâmetros para a sintonização do controlador PI, usou-se o processo simulado mediante às Diferenças Finitas, identificando um tempo morto de 30 minutos no processo. O reator foi simulado com uma entrada de dióxido de cloro de 3,35 g/l e de lignina de 31 Kappa, em um tempo de 1000 minutos, até atingir estabilidade na saída do reator de 10,43 Kappa. Logo após, é implementado o controlador PI com um Set-Point de 12 Kappa. Observou-se que este controlador precisa de 300 minutos para estabilizar a resposta. No caso do controlador CPNL, desenvolvido com os mesmos parâmetros de processo do controlador PI, requer um tempo menor para alcançar o Set-Point e estabilizar a saída do processo. Como medidas quantitativas de comparação dos controladores, foram escolhidos dois critérios: IAE e ISE. Uma vez que o objetivo é reduzir o valor destes critérios, é possível afirmar que o CPNL implementado no reator de branqueamento, obtém um melhor

desempenho com valores de IAE e ISE (8,88 e 24,43) menores, diante aos valores do controlador PI (74,61 e 47,52). Não entanto, o tempo empregado pelo controlador CPNL é maior do que o tempo do controlador PI, isto acontece devido ao fato de que, o controlador CPNL usa o reator planta e o reator modelo, o que resulta em dois sistemas de equações diferenciais, incrementando o tempo de cálculo, diferente do controlador PI, que só emprega um sistema de equações diferenciais dentro do seu cálculo. Por outro lado, as ações de controle do CPNL, quando  $L=3$ , são mais bruscas que as tomadas pelo controlador PI.

Para a avaliação do efeito do horizonte de controle no controlador CPNL, foram realizadas simulações variando o valor deste parâmetro em 1, 2 e 3. Gráficamente, pode-se observar que quanto maior o valor do horizonte de controle, mais agressivas são as ações implementadas no processo, além disso, o desempenho do controlador diminui, já que o valor dos erros IAE e ISE, se incrementa.

## 7 SUGESTÕES

- Implementar o controle preditivo proposto, para o processo de branqueamento de celulose, incluindo as restrições nas variáveis de entrada e de saída, o que permitiria considerar os limites de operação próprios do processo.
- Aplicar o controle proposto em outros sistemas não lineares e multivariáveis, avaliando o desempenho do controlador.
- Realizar comparativos entre o controlador proposto e outras metodologias de controle preditivo.





# REFERÊNCIAS

ALLÖWER, FRANK and ZHENG, ALEX. **Nonlinear model predictive control**. [S.l.]: Springer, 2000.

AZEVEDO, M. A. B. **Diferentes processos de branqueamento da celulose e seus efeitos nas propriedades físicas e cristalinidade**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2012.

BENNETT, S. A brief history of automatic control. **Control Systems, IEEE**, v. 44, n. June 1996, p. 17–25, 1996.

BEQUETTE, B. Nonlinear control of chemical processes: A review. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, n. 1985, p. 1391–1413, 1991.

BETTAYEB, M.; SHAH, S. State of the art advanced process control. **7th International Conference on Development And Application Systems**, 2004.

BOMBARD, I. et al. Experimental predictive control of the infrared cure of a powder coating: A non-linear distributed parameter model based approach. **Chemical Engineering Science**, v. 65, n. 2, p. 962–975, jan. 2010.

CONSTANTINIDES, A.; MOSTOUFI, N. **Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications**. [S.l.]: Prentice Hall, 1999.

COPESA; Consorcio Periodístico de Chile S.A. *El papel*. 2010. **Proceso simples de branqueamento do papel**, extraído do Icarito um suplemento educativo de La Tercera-COPESA. Disponível em: <<http://www.icarito.cl/enciclopedia/articulo/segundo-ciclo-basico/educacion-tecnologica/procesos-productivos/2010/08/74-9281-9-2-el-papel.shtml>>.

DAVIS, M. **Numerical methods and modeling for chemical engineers**. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1984.

FINLAYSON, B. A. **Nonlinear analysis in chemical engineering**. [S.l.]: Bruce Alan Finlayson, 1980.

FINLAYSON, B. A. **Nonlinear analysis in chemical engineering**. [S.l.]: Bruce Alan Finlayson, 2003.

HENRICSON, K. **An introduction to chemical pulping technology**. [S.l.]: Lappeenranta University of Technology, 2004.

HUNTINGTON, G. T.; BENSON, D.; RAO, A. V. A comparison of accuracy and computational efficiency of three pseudospectral methods. **AIAA Guidance, Navigation, and Control (GNC) Conference**, 2007.

KWONG, W. **Método da Colocação Ortogonal: Introdução a teoria e prática**. [S.l.]: Edusfcar, 1995.

KWONG, W. **Introdução ao Controle Preditivo com Matlab**. [S.l.]: Edusfcar, 2010.

LEE, J. H. Model predictive control: Review of the three decades of development. ***International Journal of Control, Automation and Systems***, v. 9, n. 3, p. 415–424, jun. 2011.

LUYBEN, W. L. ***Process modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers***. [S.I.]: McGraw-Hill Higher Education, 1989.

MACIEJOWSKI, J. Modelling and predictive control: Enabling technologies for reconfiguration. ***Annual Reviews in Control***, Elsevier, v. 23, p. 13–23, 1999.

MORARI, M.; H. Lee, J. Model predictive control: past, present and future. ***Computers & Chemical Engineering***, v. 23, n. 4-5, p. 667–682, maio 1999.

NAVARRO, R. **Estudos dos Diferentes Tipos de Processos de Branqueamento de Celulose Objetivando a Comparação Entre seus Métodos e a Geração do Potencial de Poluentes em seus Respectivos Efluentes**. Universidade Estadual De Campinas Faculdade De Engenharia Química, p. 111, 2004.

OGUNNAIKE, B. A.; RAY, W. H. ***Process dynamics, modeling, and control***. [S.I.]: Oxford University Press New York, 1994.

PATWARDHAN, A.; WRIGHT, G.; EDGAR, T. Nonlinear model-predictive control of distributed-parameter systems. ***Chemical Engineering Science***, 1992.

QIN, S.; BADGWELL, T. An overview of industrial model predictive control technology. ***AIChE Symposium Series***, 1997.

QIN, S.; BADGWELL, T. a. A survey of industrial model predictive control technology. ***Control Engineering Practice***, v. 11, n. 7, p. 733–764, jul. 2003.

RAWLINGS, J. Tutorial overview of model predictive control. ***Control Systems, IEEE***, 2000.

RENOU, S. ***Commande non-linéaire d'un système décrit par des équations paraboliques: application au procédé de blanchiment***. Tese (Doutorado) — Université de Montréal, 2000.

RENOU, S. et al. Partial differential equation model based control: Application to a bleaching reactor. In: NEW YORK; AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS; 1998. ***AIChE Symposium Series***. [S.I.], 2002. p. 423–427.

SEBORG, D. E. et al. ***Process dynamics and control***. [S.I.]: John Wiley & Sons, 2003.

STEPHANOPOULOS, G. ***Chemical process control***. [S.I.]: Prentice-Hall Englewood Cliffs, New Jersey, 1984.

WILLIS, M. Review of methods for non-linear control. ***Lorien.ncl.ac.uk***, n. 1, 2000.

WU, B. Application of dynamic matrix control algorithm based on real time operating system. ***2009 WRI World Congress on Software Engineering***, v. 1, p. 141–144, 2009.

# Apêndices





```

%finitas y Rungekutta.
CLPi=CLPa(end,:); %Novas condicoes iniciais para
%a planta.
Cin=Cin+1; %Degrau na entrada do dióxido
%de cloro
u=Cin;
[CLPa(end+1:2*length(T),:)] = Reatorf31(CLPi);
a=CLPa(end/2+1:end,end/2)-CLPa(end/2,end/2); %Vetor de resposta ao degrau.
rk=12; %Set-point na saida de lignina.
[U,YP]=MPCNL1807(a,R,L,alfa,rk,u,k); %MPCNL1807 programa para
%desenvolver o CPNL.

```

## A.2 MPCNL1807

```

%----- %
%Controle preditivo não linear para reator de branqueamento de celulose %
%com dióxido de cloro. Reator planata resolvido mediante dferenças finitas %
%e reator modelo mediante colocação ortogonal %
%-----%

function [U,YP] =MPCNL1807(a,R,L,alfa,rk,u,k)
global Cin Nm Np T nn B erro SM du CO Jo erro2 IAE ISE Yr
A=zeros(R,L);
RR=eye(L);
Q=eye(R);
N=150;
U=Cin;
%-----%
%Geracao da matriz dinca %
%-----%
for i=1:L
    A(i:R,i)=a(1:R+1-i);
end
%-----%
%Simulacao da planta e modelo do reator %
%-----%
CLPi=zeros(1,2*Np+2); %Condições iniciais para a planta
xinitial=zeros(1,2*CO); %Condições iniciais para o modelo
[CLPf]=Reatorf31(CLPi); %Simulação da Planta

```

```

[c,x] = TamanCO(xinitial,CO);           %Simulação do Modelo
CLPi=CLPf(end,:);                       %Novas condições iniciais para a planta
CLMi=x(k,:);                             %Novas condições iniciais para o modelo
Yp=CLPi(1,end/2);                        %Saida da planta
Ym=CLMi(1,end/2);                        %Saida do modelo
Yo=x(k:k+R-1,end/2)';                   %Efeito das ação de controle passadas
P=10;
IAE=0;
ISE=0;
alfa=0;                                  %Parâmetro que define quão rápido se
                                          %atinge o set point
for n=1:N+R
    Yr(n)=alfa^n*Yp+(1-alfa^n)*rk;       %Trajetória de referência
    b=Yp-Ym;
    B(n)=b;                               %Resíduo
    Yoc=Yo+b;                             %Previsão da saída sem ação de
                                          %controle futura
    Eo=Yr(n)-Yoc;                         %Erro entre a trajetória de
                                          %referência e Saída predita sem ação
%de controle futura
    erro(n)=Eo(1);
    erro2=Yp-Yr(n);
    IAE=IAE+erro2^2;
    ISE=ISE+abs(erro2);
    SM(n)=Yo(1);
    Escala=100;
    if n==2
        for cont=1:100
            P1=(Escala*cont)*eye(L);
            duft=(A'*Q*A+P1)\A'*Q*Eo';
            J(cont)=Eo*Q*Eo'+duft'*P1*duft;
        end
        [y, I]=min(J);
        P=Escala*I
        P=(Escala*I)*eye(L);
    end
    duft=(A'*Q*A+P*RR)\(A'*Q)*Eo';
    if n<=N
        du(n)=duft(1);
    end
end

```

```

        Cin=Cin+du(n);
        U(n)=Cin;
    else
    U(n)=Cin;
    end
    T=0:1:R-1;
    nn=length(T);
    [CLPf]=Reatorf31(CLPi);    %Implementação da ação de
                               %controle na planta
    [c,x] = TamanCO(CLMi,CO);
    CLPi=CLPf(2,:);          %Condições iniciais para a planta
    CLMi=x(2,:);
    Yp=CLPi(1,end/2);        %Saida da planta
    Ym=CLMi(1,end/2);        %Saida do modelo
    Yo=x(1:R,end/2)';        %Efeito das ação de controle passadas
    YP(n)=Yp;
    toc
end
plot(YP)

```

### A.3 CPI1R3

```

%~~~~~%
%Desenvolvimento de Controle Proporcional Integral para um processo de %
%parâmetros distribuídos. %
%Processo escolhido: Reator de braqueamento de lignina empregando %
%dióxido de cloro %
%~~~~~%

```

```

%~~~~~%
%Controle preditivo sobre o reator discretizado no espaço mediante %
%diferencias finitas e integração no tempo com Runge-Kutta %
%~~~~~%

```

```

clear all
global Lin Cinsp Np tt T l v D kl kc dz Pe nn Kc TAUI Linset Cin ze tao
TAUI=14.731;

```



```

Kc=-0.0549;
Np=200; %Números divisões na malha da planta
Linset=12; %Set-Point da Lignina
Lin=31; %Entrada de Lignina no reator
Cin=2.35; %Entrada de Lignina no reator
Cinsp=2.35; %Entrada de dióxido de cloro no reator
CLLPi=zeros(1,2*Np+3); %Condições iniciais para a planta
tt=100;
T=0:1:tt-1;
nn=length(T);
l=30; %Comprimento do reator
v=1; %Velocidade
D=0.001; %Difusão
k1=0.0065; %Constantes de cinética ordem 2
kc=0.001;
dz=l/Np; %Divisão do comprimento
Pe=v*l/D;
ze=dz/l; %Divisão do comprimento
tao=v*T/l;

%-----%
%Simulação do reator do reator %
%-----%
CLLPi=zeros(1,2*Np+2); %Vetor de condições iniciais
[CLP1]=Reatorf31(CLLPi); %Simulação do reator
%admimensionalizado solucionado

%com diferenças
%finitas y Runge-kutta
CLLPi(1,1:2*Np+2)=CLP1(end,:);
tt=300;
T=0:1:tt-1;
nn=length(T);
[t,dC1L]=ode15s(@CILPIR3,T,CLLPi);
CLP1(end+1:end+nn,:)=dC1L(:,1:2*Np+2);

```

## A.4 CILPIR3

```

%-----%
%Reator de branqueamento de lignina adimensionalizado solucionado com      %
%diferencias finita no                                                         %
%espaço e integração no tempo mediante o Runge-kutta                          %
%-----%
function [dClL] = CILPIR3(T,C1L)
    global v D kl kc dz Np Lin TAUI Kc Linset Cinsp Cin Pe ze l tao

    dClL=zeros(2*Np+3,1);

    erro=Linset-C1L(Np+1);
    Cins=2.3448;
    Cin=Cins+Kc*(erro+C1L(2*Np+3)/TAUI);          %Cins Entrada do Dióxido de
                                                    %Cloro no estado estacionário

%-----%
%Condição inicial da Lignina          %
%-----%

dClL(1)=-Pe*(C1L(1)-Lin)+(1/Pe)*(1/ze^2)*(2*C1L(2)-2*C1L(1)-2*Pe*ze*
(C1L(1)-Lin))-(1*kl/v)*(C1L(1)*C1L(Np+2))^2;

%-----%
%Pontos intermediários da Lignina      %
%-----%

for i=2:Np
    dClL(i)=-1/(2*ze)*(C1L(i+1)-C1L(i-1))+1/(Pe*ze^2)*(C1L(i+1)-2*
C1L(i)+C1L(i-1))-(1*kl/v)*(C1L(i)*C1L(i+Np+1))^2;
end

%-----%
%Condição de contorno da Lignina      %
%-----%

dClL(Np+1)=1/(Pe*ze^2)*(2*C1L(Np)-2*C1L(Np+1))-(1*kl/v)*
(C1L(Np+1)*C1L(2*Np+2))^2;

```

```

%-----%
%Condição inicial do Dióxido de Cloro %
%-----%

dClL(Np+2)=-Pe*(ClL(Np+2)-Cin)+1/(Pe*ze^2)*(2*ClL(Np+3)-2*
ClL(Np+2)-2*Pe*ze*(ClL(Np+2)-Cin))-(1*kc/v)*(ClL(1)*ClL(Np+2))^2;

%-----%
%Pontos intermediários do Dióxido de Cloro %
%-----%

for i=Np+3:2*Np+1
    dClL(i)=-1/(2*ze)*(ClL(i+1)-ClL(i-1))+1/(Pe*ze^2)*
(ClL(i+1)-2*ClL(i)+ClL(i-1))-(1*kc/v)*(ClL(i-Np-1)*ClL(i))^2;
end

%-----%
%Condição de contorno do Dióxido de Cloro %
%-----%

dClL(2*Np+2)=1/(Pe*ze^2)*(2*ClL(2*Np+1)-2*ClL(2*Np+2))-(1*kc/v)*
(ClL(Np+1)*ClL(2*Np+2))^2;

%Erro integral
dClL(2*Np+3)=erro;

end

```