Tese de Doutorado:

Controle Preditivo Aplicado a Processos Fluidodinâmicos: Metodologia Baseada em Software CFD de Código Livre

Giovani Santos Correia da Silva

Universidade Federal do Rio de Janeiro
Escola de Química
Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos

Orientadores: Maurício Bezerra de Souza Júnior. D.Sc.
Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva. D.Sc.

Rio de Janeiro
2017

Controle Preditivo Aplicado a Processos Fluidodinâmicos: Metodologia Baseada em Software CFD de Código Livre

Giovani Santos Correia da Silva

Tese submetida ao corpo docente da coordenação do Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Aprovada por:

Prof. Maurício Bezerra de Souza Júnior (Orientador), D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva (Orientador), D.Sc.

Prof. Andrea Valdman, D.Sc.

Prof. Fábio Pereira dos Santos, D.Sc.

Prof. Jovani Luiz Favero, D.Sc.

Prof. Luiz Augusto da Cruz Meleiro, D.Sc.

Prof. Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Rio de Janeiro, RJ-Brasil

2017

CIP - Catalogação na Publicação

S586c

Silva, Giovani Santos Correia da
Controle Preditivo Aplicado a Processos Fluidodinâmicos: Metodologia Baseada em Software CFD de Código Livre / Giovani Santos Correia da Silva. - Rio de Janeiro, 2017.
xix,165 f.

Orientador: Mauricio Bezerra De Souza Jr..
Coorientador: Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva.
Tese (doutorado) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa de Pós Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, 2017.

1. Controle Preditivo. 2. Fluidodinâmica Computacional. 3. OpenFOAM. I. De Souza Jr., Mauricio Bezerra, orient. II. Silva, Luiz Fernando Lopes Rodrigues , coorient. III. Título.

Elaborado pelo Sistema de Geração Automática da UFRJ com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Para a minha família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, José Gilvan e Maria de Lourdes, pelo incentivo à busca pelo conhecimento. Obrigado por guiarem e iluminarem meus caminhos e por serem a minha base de sustentação nos momentos alegres e nos tristes. Obrigado por não pouparem esforços para fazer de mim o que sou hoje;

Agradeço a minha esposa, Anie Daniela Medeiros Lima, pela paciência, carinho, incentivo e contribuição nesse processo de conclusão de curso e elaboração deste trabalho;

Aos meus irmãos, que sempre estiveram presentes nos momentos especiais de minha vida;

Aos Professores Maurício e Luiz Fernando, pela orientação e pelas sugestões dedicadas à realização desta Tese de Doutorado;

Aos colegas da Petrobras, que contribuíram com sugestões valiosas para o enriquecimento desta inovação;

Por fim, agradeço aos que acreditam em mim como profissional.

RESUMO

CORREIA DA SILVA, Giovani Santos. Controle Preditivo Aplicado a Processos Fluidodinâmicos: Metodologia Baseada em Software CFD de Código Livre. Orientadores: Maurício Bezerra de Souza Jr. & Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva. Rio de Janeiro: UFRJ/ EQ; 2017. Tese (Doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos).

O uso de fluidodinâmica computacional (CFD) permite a análise de fenômenos locais de escoamento. No entanto, estudos CFD integrados a controle de processos são escassos. O presente trabalho tem como objetivo a implementação de algoritmos de controle preditivo MPC (*Model Predictive Control*) no *software* CFD de código livre *OpenFOAM*. Para tanto, foi escolhido o algoritmo clássico DMC (*Dinamic Matrix Control*) em duas versões: com um único passo de predição e empregando a técnica do horizonte descendente. A implementação do controle avançado foi validada com simulações monofásicas e polidispersas. A simulação monofásica representou um sistema hipotético de aquecimento de ar. Foram propostas mudanças no *set-point* a partir do estado estacionário e perturbações na temperatura de alimentação do ar e na carga térmica trocada pelas paredes. A temperatura de saída do ar foi controlada pela manipulação da magnitude da velocidade de entrada do ar. O problema polidisperso consistiu em uma simulação de balanço populacional envolvendo os processos de quebra e coalescência, sem acoplamento com as equações de balanço de energia, massa e momento. O diâmetro de saída da partícula foi controlado pela manipulação da velocidade de entrada das partículas. Os MPCs tiveram seu desempenho comparado com os controladores clássicos. Os resultados mostraram o sucesso da implementação das estruturas de controle do MPC na ferramenta CFD *OpenFOAM*. Esta aplicação direta de técnicas de controle de processo em um *software* CFD proporciona uma economia de custo computacional quando comparada aos acoplamentos clássicos de simulações CFD com *softwares* empregados em controle, e implementados, por exemplo, em MATLAB.

PALAVRAS-CHAVE

CFD, Controle Preditivo, *OpenFOAM*

ABSTRACT

CORREIA DA SILVA, Giovani Santos. Predictive Control Applied to Fluid Dynamics Processes: Methodology Based on Open Source CFD Software. Advisors: Maurício Bezerra de Souza Jr. & Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva. Rio de Janeiro: UFRJ/ EQ; 2017. Thesis (Doutorado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos).

The use of CFD allows the analysis of flow´s local phenomena. However, CFD integrated with process control studies are scarce. The objective of this study is an implementation in an open source CFD OpenFOAM software of predictive control algorithms MPC (Model Predictive Control). For this, the classic DMC (Dinamic Matrix Control) algorithm was chosen in two versions: with a single prediction step and employing the descending horizon technique. The implementation of advanced control was validated by monophase and polydisperse simulations. The monophase simulation represented a hypothetical air heating system. Changes were proposed in the set-point from the steady state and disturbances in the feed air temperature and in the heat load exchanged by the walls. The air outlet temperature was controlled by manipulating the magnitude of the air inlet velocity. The polydisperse problem consisted of a population balance simulation, involving breakage and coalescence processes, without coupling with energy, mass and momentum balance equations. The outlet particle diameter was controlled by manipulating the particle inlet velocity. The MPCs had their performance compared to the classic controllers. The results showed the successful embedded implementation of MPC control structures in the OpenFOAM CFD tool. This direct application of process control techniques in CFD software provides computational cost savings when compared to the classical couplings of CFD simulations with software used in control, and implemented, for example, in MATLAB.

KEYWORDS

CFD, Predictive Control, OpenFOAM

LISTA DE SIGLAS

CFD - *Computational Fluid Dynamics*
DNS - *Direct Numerical Simulation*
DQMOM - *Direct Quadrature Method of Moments*
EBP - Equação de Balanço Populacional
DTP - Distribuição do Tamanho de Partículas
DMC - *Dynamic Matrix Control*
fvm - *Finite Volume Method*
fvc - *Finite Volume Calculus*
IMC - *Internal Model Control*
ISE - I*ntegral of the Squared Error*
GPC - *Generalized Predictive Control*
MIMO - *Multiple Input Multiple Output*
MOM - *Method of Moments*
MPC - *Model Predictive Control*
OpenFOAM - *Open Field Operation And Manipulation*
Os - *Overshoot*
P - Proporcional
PDE - *Partial Derivative Equation*
PI - Proporcional Integral
PID - Proporcional Integral Derivativo
P-PID - Proporcional Integral Derivativo em Paralelo
S-PID - Proporcional Integral Derivativo em Série
QMOM - *Quadrature Method of Moments*
RANS - *Reynolds Average Navier-Stokes*
SISO - *Single Input Single Output*
Te - Tempo de Assentamento ou de Estabilização
Trise - Tempo de Subida
TTR - Teorema do Transporte de Reynolds

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

a - Frequência de coalescência;

a_N - Coeficientes de resposta do sistema frente a uma perturbação degrau unitário;

b (v) - Frequência de quebra;

$B_a(x,v,t)$ - Taxa de nascimento de partículas pelo processo coalescência;

$B_b(x,v,t)$ - Taxa de nascimento de partículas pelo processo quebra;

C_α - Termo dispersivo para a fase α, método do DQMOM;

$C_{1\varepsilon}$ - Constante empíricas da equação de dissipação de energia cinética;

$C_{2\varepsilon}$ - Constante empíricas da equação de dissipação de energia cinética;

$D_a(x,v,t)$ - Taxa de morte de partículas pelo processo de coalescência;

$D_b(x,v,t)$ - Taxa de morte de partículas pelo processo de quebra;

D_x - Coeficiente de difusão anisotrópico;

d_s - Diâmetro médio de Sauter da partícula;

E_k - Erro no instante corrente;

e_k - Erro do *kth* instante de amostragem para k = 1, 2... da variável controlada;

f - Função de densidade numérica da partícula, que quantifica o número médio de partículas no tempo por unidade de volume no espaço testado;

G(x,v,t) - Taxa de crescimento da partícula;

G(z) - Função de transferência do processo representada no domínio z;

g - Gravidade;

H(x,v,t) - Termo fonte da EBP que inclui os efeitos de nucleação, crescimento, agregação e quebra;

h - Entalpia do fluido;

h_N - Coeficiente de resposta do sistema frente a uma perturbação tipo impulso unitário;

J - Transporte molecular de matéria ou energia;

$J_{nu}(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$ - Taxa de nucleação de partículas;

k - Condutividade térmica do material;

K_C - Constante proporcional;

N - Número de intervalos na função de convolução;

n - Vetor normal unitário.

Oh - Número de Ohnesorge;

P - Pressão, Pa;

$P(v|v')$ - Probabilidade de distribuição de tamanho de filhas geradas no processo de quebra;

q - Fluxo de calor por condução (transporte molecular);

$\dot{q}$ - Representa o calor por unidade de volume. Ou seja, o calor gerado/consumido no volume.;

R - Coeficiente de correlação de Pearson (regressão linear).

R^2 - Coeficiente de determinação (regressão linear).

Re - Número de Reynolds;

S - Área Superficial;

S_κ - Produção de energia cinética turbulenta;

s - Função escalar de posição e tempo.

T - Temperatura, K;

$\overline{T}$ - Temperatura de referência, 300K;

t - Tempo de escoamento, em s.

U - Energia interna;

u - Velocidade do fluido ou partícula, m/s.

V - Volume de Controle;

x - direção "x" do eixo cartesiano;

y - direção "y" do eixo cartesiano;

Y(z) - Variável de saída do processo no domínio z;

U(z) - Variável de entrada do processo no domínio z;

$\overline{w}$ - Frequência de colisão;

w - *Set-point;*

We - Número de Weber;

z - direção "z" do eixo cartesiano;

Símbolos Gregos

Δp - Sinal de saída do controlador;

τ_I - Constante de tempo integral;

τ_D - Constante de tempo derivativa;

Δt - Período de amostragem;

β - Coeficiente de expansão térmica;

ω_α - Peso da fase dispersa α para a equação do DQMOM;

ξ_α - Abscissa da fase dispersa α para a equação do DQMOM;

ς_α - Abscissa ponderada da fase dispersa α para a equação do DQMOM;

α - Filtro constante para o controle preditivo MPC; como subscrito representa a fase dispersa em escoamento multifásico;

α_N - Fração volumétrica da fase dispersa

θ_α - Termo fonte dos pesos da equação do DQMOM para a fase α

γ_α - Termo fonte da abscissa ponderada da equação do DQMOM para a fase α

κ - Energia cinética turbulenta;

ε - Dissipação de energia;

μ - Viscosidade dinâmica.

μ_t - Viscosidade turbulenta;

μ_k - Momento k de distribuição;

ϕ - Variável genérica intensiva do escoamento, em unidades de massa;

Γ - Coeficiente de difusão;

ρ - Densidade do fluido, kg/m^3.

$\boldsymbol{\pi}$ - Tensor das Tensões;

$\Phi(\infty)$ - Parâmetro do modelo de quebra e coalescência de McCoy & Madras;

δ_{ij} - Delta de Kronecker;

$\boldsymbol{\tau}$ - Forças viscosas;

π_{ii} - Tensão normal;

π_{ij} - Tensão cisalhante;

σ_k - Constante empírica da equação de dissipação de energia;

κ_v - Viscosidade dilatacional do fluido;

λ - Eficiência ou probabilidade condicional de coalescência;

η - Microescala de Kolgomorov para turbulência;

$\varsigma(v)$ - Número de filhas geradas pelo processo de quebra da partícula;

$\Omega(v|v')$ - Frequência específica de quebra.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Representação simplificada do processo de coalescência iniciado pelo fenômeno de drenagem do liquido entre as partículas, que pode resultar em: (a) agregação das partículas ou (b) separação das mesmas (SILVA, 2008). 23
Figura 2. Estrutura de diretórios de um caso genérico (OpenCFD, 2017); 43
Figura 3. Ação do controlador MPC com horizonte de controle (M) e de predição (P) (CAMPOS *et al.*, 2013). 51
Figura 4. Estrutura básica dos cálculos no MPC (CAMACHO & BORDONS, 2007).. 52
Figura 5. Representação da Função de Transferência do Processo 53
Figura 6. Resposta do processo frente a uma perturbação em degrau unitário na entrada (DESHPANDE, 1985). 54
Figura 7. Critérios de Desempenho dos Controladores 65
Figura 8. Posicionamento do ponto de monitoramento e de entrada da coluna de bolhas. 73
Figura 9. Volume de contrrole empregado na simulação CFD e ponto de monitoramento. 81
Figura 10. Estudo do refino de malha ao longo do Eixo x. Condições de entrada do fluido: U=0,5 m/s, T_{fluido}=300,00K q=15,0 W/m^2 86
Figura 11. Perfil de temperatura ao longo do tempo na saída do aquecedor para a simulação base. U=0,75 m/s, T_{fluido} = 300,00 K e q=15,0 W/m^2 87
Figura 12. Perfil de temperatura ao longo do eixo x (centro da malha) para a simulação base. 88
Figura 13. Perfil de temperatura do transiente para a simulação base do Caso 1, para os tempos: (a) 0s, (b) 50 s; (c) 100s; (d) 200s; (e) 500s e (f) 1000s; Escala de Temperatura : 300-400 K. 89
Figura 14 Perfil de velocidade do transiente para a simulação base do Caso 1, para os tempos: (a) 0s, ; (b) 50s; (c) 100s; (d) 200s; (e) 500s e (f) 1000s; Escala de Temperatura 300-440K. 90
Figura 15. Perfis de Temperatura ao longo do eixo y no centro da geometria (x=6,0 m), para os tempos de simulação 0, 50, 100, 200, 500 e 1000s. U=0,75 m/s, T_{fluido} = 300,00 K e q=15,0 W/m^2. 92
Figura 16. Simulação do processo de aquecimento de ar para as perturbações de ± 0,25 m/s impostas na velocidade de entrada do ar. Temperaturas medidas na saída do aquecedor. 93
Figura 17. Resultado da identificação do processo frente a uma perturbação negativa de – 0,25 m/s em degrau na entrada do aquecedor 94
Figura 18. Resultado da identificação do processo frente a uma perturbação positiva de + 0,25 m/s em degrau na entrada do aquecedor 95
Figura 19. Resposta do sistema frente a uma perturbação negativa de 0,25 m/s na velocidade de alimentação do ar. 98
Figura 20. Performance do controlador Preditivo simplificado (S-DMC) frente a variações do parâmetro α. (a) *set-point* 364,000 K; (b) *set-point* 324,000 K. 100
Figura 21. Performance do controlador Preditivo simplificado (S-DMC) frente a variações do parâmetro α. : (a) temperatura de entrada do ar 310,00 K – Caso 1.3; (b) temperatura de entrada do ar 290,00 K - Caso 1.4; *set-point* de 344,98 K para ambos os casos. 101
Figura 22. Performance do controlador Preditivo simplificado frente a variações do parâmetro α. : (a) carga térmica de 16,5 W/m^2 – Caso 1.5; (b) carga térmica de 13,5 W/m^2 - Caso 1.6 *set-point* de 344,980 K para ambos os casos. 102

Figura 23. Simulações com as configurações de sintonia para os casos Servo (324,00 K) e Regulador (Carga térmica pelas paredes = 16,5 W/m^2). A: P=30; B: P=40; C: P=40 α=0,25; D: P=55; 104
Figura 24. Simulação dos controladores PID e Preditivos para casos do Problema Servo: (a) *set-point* 364,00 K-Caso 1.1; (b) *set-point* 324,00 K-Caso 1.2..... 106
Figura 25. Comportamento da variável manipulada para os controladores PID e Preditivo para os casos proposto para o Problema Servo: (a) *set-point* de 364,00 K-Caso 1.1; (b) *set-point* de 324,00 K – Caso 1.2..... 107
Figura 26. Simulação dos controladores PID e Preditivos para o primeiro problema regulador, Casos 1.3 e 1.4: (a) temperatura de entrada do ar 310,00 K e *set-point* de 344,98 K; (b) temperatura de entrada do ar 290,00 K e *set-point* de 344,98 K, respectivamente. MA-Resposta do sistema em malha aberta..... 108
Figura 27. Comportamento da variável manipulada para os controladores PID e preditivos para o primeiro problema regulador Casos 1.3 e 1.4 e *set-point* de 344,98 K. (a) temperatura de entrada do ar 310,00 K e *set-point* de 344,98 K; (b) temperatura de entrada do ar 290,00 K e *set-point* de 344,98 K. 109
Figura 28. Simulação dos controladores PID e preditivos (SDMC e DMC) para o segundo problema regulador: (a) carga térmica de 16,5 W/m^2 – Caso 1.5; (b) carga térmica de 13,5 W/m^2 - Caso 1.6 *set-point* de 344,98 K para ambos os casos. MA-Resposta do sistema em malha aberta. 110
Figura 29. Comportamento da variável manipulada para os controladores PID e preditivo para o segundo problema regulador, *set-point* de 344,98 K: (a) carga térmica de 16,5 W/m^2 – Caso 1.5; (b) carga térmica de 13,5 W/m^2 - Caso 1.6. 111
Figura 30. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1100s. (a) Estado Estacionário (t=1000s). (b) Controle PID Paralelo; (c) Controle PID Serial; (d) DMC simplificado; (e) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K..... 114
Figura 31. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1200s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K. 115
Figura 32. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1300s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K. 116
Figura 33. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1500s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K. 117
Figura 34. Pontos de Monitoramentos extras inseridos na geometria para estudar o transiente da temperatura interna do volume de controle..... 118
Figura 35. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e formulação completa (DMC) para o ponto de monitoramento T1. 119
Figura 36. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e formulação completa (DMC) para o ponto de monitoramento T2. 119
Figura 37. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e formulação completa (DMC) para o ponto de monitoramento T3 120
Figura 38. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e formulação completa (DMC) para o ponto de monitoramento T4. 120

Figura 39. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1100s para problema regulador. (a) Estado Estacionário (t=1000s). (b) Controle PID Paralelo; (c) Controle PID Serial; (e) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K..... 122
Figura 40. Estudo do transiente frente a uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes para o tempo de simulação t=1200s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K. 123
Figura 41. Estudo do transiente frente a uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes para o tempo de simulação t=1300s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K. 124
Figura 42. Estudo do transiente frente a uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes para o tempo de simulação t=1600s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K. 125
Figura 43. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e horizonte descendente (DMC) para o ponto de monitoramento T1, para o problema regulador- 16,5 W/m^2 trocados pelas paredes do sistema; PP – ponto de partida do estado estacionário; SP- *Set-point* da saída do sistema 126
Figura 44. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e horizonte descendente (DMC) para o ponto de monitoramento T2, para o problema regulador- 16,5 W/m^2 trocados pelas paredes do sistema; PP – ponto de partida do estado estacionário; SP- *Set-point* da saída do sistema 127
Figura 45. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e horizonte descendente (DMC) para o ponto de monitoramento T3, para o problema regulador- 16,5 W/m^2 trocados pelas paredes do sistema; 128
Figura 46. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e horizonte descendente (DMC) para o ponto de monitoramento T4, para o problema regulador- 16,5 W/m^2 trocados pelas paredes do sistema; 128
Figura 47. Perfis de velocidade para os tempos t=1000s (a); 1100s(b) 1200s (c); 1300s (d); 1400 s (e) e 1500s (f), para o controlador DMC frente à uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes..... 130
Figura 48. Resultado da Simulação 0D transiente para o caso de coalescência dominante. 135
Figura 49. Resultado da Simulação 1D estacionária para o caso de quebra dominante. 136
Figura 50. Simulação do processo de balanço populacional, para agregação dominante ($\Phi(\infty)$=0,1), com velocidade de entrada igual a 1m/s mostrando o estado estacionário atingido. 137
Figura 51. Simulação do processo de balanço populacional em estado estacionário e perturbações de ± 0,10 m/s na entrada da coluna a partir do tempo de 4,0 s. 138
Figura 52. Resultado da identificação do processo frente a uma perturbação degrau de -0,1000 m/s na entrada do injetor de partículas..... 139
Figura 53. Resposta do sistema frente a uma perturbação negativa de 0,10 m/s na velocidade de entrada das partículas. 142

Figura 54. Perfil de resposta do controlador S-DMC frente à variações no parâmetro α para os *set-points* 16,0 µm (Figura 54b) e 17,2 µm (Figura54a).(a) α=0,00; (b) α=0,25; (c) α=0,50; (d) α=0,75; (e) α=0,90. 143
Figura 55. Perfil de resposta do controlador DMC frente à variações nos parâmetros de sintonia, para os *set-points* 16,0 µm (Figura 55b) e 17,2 µm (Figura 55a)..... 145
Figura 56. Performance dos Controladores P, PI, PID (paralelo e em série) e Preditivos frente a perturbações: positiva de 0,60 µm – *set-point* 17,20 µm (a) e negativa de 0,60 µm no Estado Estacionário - *set-point* 16,00 µm (b). 147
Figura 57. Perfil da variável manipulada (Ua – velocidade de entrada da partícula) para os Controladores P, PI, PID (paralelo e em série) e Preditivos (SDMC e DMC) frente a perturbações: positiva de 0,60 µm – *set-point* 17,20 µm (a) e negativa de 0,60 µm no Estado Estacionário - *set-point* 16,00 µm (b)..... 148

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Propriedades Físicas do ar 82
Tabela 2 Parâmetros numéricos da simulação..... 82
Tabela 3. Propriedades físicas do ar e água e condições iniciais empregadas 84
Tabela 4: Parâmetros de simulação empregados para o escoamento polidisperso; 84
Tabela 5. Parâmetros Estatísticos de Correlação para os modelos 1 e 2 96
Tabela 6. Valores numéricos da sintonia IMC para os Controladores PID (paralelo e série) 97
Tabela 7. Índices de performance do controlador Preditivo simplificado frente a variações no parâmetro α para os Casos 1.1 e 1.2. 101
Tabela 8. Índices de performance do controlador Preditivo simplificado frente a variações no parâmetro α para os Casos 1.3 e 1.4 102
Tabela 9. Índices de performance do controlador Preditivo simplificado frente a variações no parâmetro α para os Casos 1.5 e 1.6 103
Tabela 10. Configurações empregadas na sintonia do controlador DMC para os casos Set-point (324,00 K) e Regulador (Carga Térmica pelas paredes igual a 16,5 W/m^2) 103
Tabela 11. Índice de desempenho ISE para as configurações de sintonia testadas para os casos set-point (324,00 K) e regulador (Carga Térmica 16,5 W/m^2) 105
Tabela 12. Índices de performance dos controladores para os Casos 1.1 e 1.2..... 107
Tabela 13. Índices de Performance para os controles PID e Preditivo para os Casos 1.3 e 1.4 109
Tabela 14. Índices de Performance dos Controladores para o Caso 1.5 e 1.6..... 111
Tabela 15. Pontos de Monitoramento e de Controle empregados no estudo. 113
Tabela 16. Tempo de execução para cada caso simulado para os controladores PID e preditivos 131
Tabela 17. Verificação estatística do modelo de função de transferência identificado 140
Tabela 18. Sintonia de ZIEGLER & NICHOLS (1942) para os controladores P, PI e PID (SEBORG *et al.,* 2011). 140
Tabela 19. Valores numéricos para a sintonia de ZIEGLER & NICHOLS (1942) para os controladores clássicos P, PI e PID Paralelo e em Série 141
Tabela 20. Critério de desempenho ISE para sintonia do controlador S-DMC em função da variação do Parâmetro α. 144
Tabela 21. Configurações de sintonia empregadas na simulação dos casos testados na Figura 55..... 145
Tabela 22. Critério de desempenho ISE em função da sintonia do controlador DMC empregada, para os *set-points* 16,0 e 17,2 µm. 146
Tabela 23. Índices de performance dos controladores clássicos e preditivos para o caso 2.1, set-point 17,2 µm..... 149
Tabela 24. Índices de performance dos controladores clássicos e preditivos para o Caso 2.2, set-point 16,0 µm..... 149
Tabela 25. Tempo de execução para cada caso simulado para os controladores clássicos (PIDs e PI) e preditivos. 150

SUMÁRIO

RESUMO vi
ABSTRACT vii
LISTA DE SIGLAS viii
LISTA DE SÍMBOLOS ix
LISTA DE FIGURAS xiii
LISTA DE TABELAS xvii
1. Introdução 1
2. Revisão Bibliográfica 6
2.1 Introdução 6
2.2 Definições Gerais de Escoamento 7
2.2.1 Definição de Fluido 7
2.2.2 Classificação 7
2.3 Escoamento Monofásico 7
2.3.1 Equações Diferenciais de Conservação 7
2.3.2 Equação da Continuidade 9
2.3.3 Equação do Movimento 10
2.3.4 Equação da Energia 12
2.3.5 Aproximação de Boussinesq 15
2.3.6 Turbulência 16
2.4 Escoamento Multifásico 20
2.4.1 Introdução 20
2.4.2 A Equação de Balanço Populacional 22
2.4.2.1 Processo de Coalescência 23
2.4.2.2 Processo de Quebra 25
2.4.2.3 Métodos de Resolução das Equações de Balanço Populacional 28
2.4.2.4 Formulação de Quebra e Coalescência de McCOY & MADRAS (2003) 38
2.5 O OpenFOAM 41
2.5.1 Estrutura dos Casos 42
2.5.2 Pré-Processamento 44
2.5.3 Etapa de Resolução Numérica 45
2.5.4 Pós-Processamento 45
2.5.5 OpenFOAM – Desenvolvimento e Metodologia Numérica 46
2.5.6 *O* Número de Courant (Co) 47
2.6 Controle de Processos 47
2.6.1 Introdução 47
2.6.2 Leis de Controle Clássicas 48
2.6.3 Lei de Controle Preditivo (MPC) 49
2.6.3.1 Introdução 49
2.6.3.2 Histórico 49
2.6.3.3 Algoritmo Simplificado do MPC 57
2.6.3.4 Algoritmo DMC com Horizonte de Predição P 60
2.6.3.5 Critérios de Performance dos Controladores 63
2.7 Aplicação de Controle de Processos a Simulações CFD 66

3. Metodologia 72
3.1 Introdução 72
3.2 Regra de Controle Aplicada no OpenFOAM 72
3.2.1 Manipulação de um Escalar no *OpenFOAM* 73
3.2.2 Condição de Contorno para Controle no *OpenFOAM* 74
3.2.3 Algoritmo de Cálculo do Incremento de controle para os controladores clássicos 76
3.2.4 Algoritmo de Cálculo do Incremento de controle para o controlador DMC simplificado (P=1 e M=1): 77
3.2.5 Algoritmo de Cálculo do Incremento de controle para o controlador DMC. 78
3.3 Metodologia para a Resolução do Caso Monofásico (CASO 1) 80
3.4 Metodologia para a Resolução do Caso Multifásico (CASO 2) 82
4. Resultados e Discussão para o Sistema Monofásico 85
4.1 Introdução 85
4.2 Refino de Malha 85
4.3 Análise Fluidodinâmica do Comportamento em Malha Aberta 88
4.4 Identificação do Sistema e Sintonia dos Controladores PIDs 92
4.5 Comparação de Controladores em Malha Fechada 99
4.5.1 Definição dos Problemas Servo e Regulador 99
4.5.2 Sintonia dos Controladores Preditivos 100
4.5.3 Resultados do Problema *Servo* 105
4.5.4 Resultados do Primeiro Problema Regulador 108
4.5.5 Resultados do Segundo Problema Regulador 110
4.6 Análise Fluidodinâmica do Comportamento em Malha Fechada 112
4.6.1 Estudo do Transiente – Caso Servo – 324,00K 112
4.6.2 Estudo do Transiente – Caso Regulador – Perturbação Positiva na Carga Térmica – 16,5 W/m^2 121
4.7 Estudo do Custo Computacional 131
5. Resultados e Discussão para o Sistema Polidisperso 133
5.1 Introdução 133
5.2 Estudo da Implementação do DQMOM 133
5.3 Identificação do Sistema e Sintonia dos Controladores PIDs 136
5.4 Comparação de Controladores em Malha Fechada 141
5.4.1 Definição dos Problemas Servo 141
5.4.2 Sintonia dos Controladores Preditivos 142
5.4.3 Resultados do Problema *Servo* 146
5.5 Estudo do Custo Computacional 150
6. Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros 152
6.1 Conclusões 152
6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros 154

1. Introdução

Segundo HOHMANN *et al.* (2017) uma planta química é um arranjo de unidades ou módulos de processamento integrados de forma sistemática. O objetivo principal da planta é converter matérias-primas em produtos desejados, utilizando as fontes de energia disponíveis da forma mais econômica. Durante sua operação, as plantas de processo devem satisfazer a uma série de requisitos na presença de distúrbios externos, sendo a segurança pessoal, ambiental e de equipamentos, os primários. Além disso, a planta deve produzir de acordo com as especificações do projeto, restrições operacionais, condições de mercado e especificações dos produtos (MARLIN, 2000; CAMACHO & BORDONS, 2007).

Todos os requisitos listados acima ditam a necessidade de monitoramento contínuo e de controle externo da operação de uma planta de produtos químicos, garantindo, desta forma, a satisfação dos objetivos operacionais (MACIEJOWSKI, 2002; CAMACHO & BORDONS, 2007).

A aplicação de controle de processo envolve, necessariamente, a seleção de instrumentos que são utilizados para a medição e ajuste contínuo de variáveis de processo, possibilitando a implementação da estratégia de controle. Atualmente, o uso dos computadores no processamento e armazenamento de informações permite o projeto de controladores mais avançados, que realizam cálculos mais complexos do que os PID convencionais. Pode-se considerar que o *Model Predictive Control* (MPC) é a forma mais geral de colocar o problema de controle no domínio do tempo. A formulação envolve: controle ótimo, controle estocástico, controle de processo com tempo de atraso, trajetória de referência de controle multivariável e restrições (DONES *et al.,* 2010). Um algoritmo MPC que vem sendo largamente usado na indústria é o DMC ou *Dinamic Matrix Control* (QIN & BADGWELL, 2003), o qual emprega um modelo interno da planta baseado em resposta ao degrau.

Entretanto, quando o interesse do estudo do sistema não está restrito a atuação do controlador, mas também nos fenômenos internos do escoamento, a aplicação conjunta da ferramenta de CFD (Computação Fluido Dinâmica) com controle de processos apresenta-se como a solução mais adequada. A técnica de CFD tem sido utilizada na concepção de projetos, pois permite, entre outras coisas, a redução de custos e a otimização de um projeto tradicional. Este método de modelagem reproduz detalhes locais do escoamento em equipamentos de forma tridimensional e transiente e possibilita a análise de fenômenos físicos

complexos, tais como: escoamentos multifásicos, turbulentos, reacionais. Um dos exemplos de aplicação das simulações CFD é a reprodução de detalhes locais de escoamento que detectam o superaquecimento em um ponto específico de um reator ou aquecedor, fato que não poderia ser diagnosticado sem um custo dispendioso. O emprego de CFD na indústria moderna oferece uma ferramenta de resolução de problemas relativamente barata e eficiente, que favorece a obtenção de resultados consolidados (MOUKALLED *et al.,* 2016; ISHII & HIBIKI, 2011).

Alguns autores empreenderam esforços para acoplar as ferramentas CFD com softwares de controle, tais como o MATLAB. Como exemplos de uso desta técnica, podem ser citados LAO *et al.* (2016), em processo de reforma de metano e LISOWSKI & FILO (2016), para controle de válvula de fluxo. Há também pesquisadores que empregaram dados gerados com simulações CFD para elaborar o algoritmo de controle em ferramentas de controle de processos como OUSEGUI *et al.* (2012) em processo alimentício, e GERBER *et al.* (2002) em fusão de plásticos. Apesar disso, as técnicas de controle de processo embutidas em fontes de CFD ainda são escassas e a implementação de técnicas avançadas de controle na ferramenta CFD *OpenFOAM* (OpenCFD, 2017), de código livre, é uma inovação tecnológica, uma vez que permite o uso de controladores diretamente na simulação fluidodinâmica (VASCELLARI *et al.*, 2015), permitindo não só estabelecer o controle desejado adequadamente, bem como estudar os detalhes locais do escoamento.

O objetivo geral desta Tese de Doutorado é investigar os ganhos do emprego de técnicas de controle de processos, baseados em modelo, a sistemas de escoamentos de fluidos simulados em software CFD. Para proceder tal estudo, foram implementados algoritmos de controle DMC (*Dynamic Matrix Control*) para o caso SISO (entrada única, saída única), um com previsão de um único passo no tempo (DESHPANDE, 1995) e outro com formulação completa, empregando a técnica do horizonte descendente, sendo esta a primeira implementação de um controle avançado no *software OpenFOAM*. Estas versões são comparadas com os controles clássicos já implementados no *OpenFOAM* (NOGUEIRA & MEDEIROS, 2012).

Para validar a implementação do MPC no *OpenFOAM*, dois sistemas foram estudados. O primeiro é um sistema monofásico, que representa uma região de troca térmica, bidimensional, no qual o controle foi empregado para evitar um superaquecimento do fluido transportado no sistema. Já o segundo sistema é um escoamento polidisperso que consiste em um injetor de bolhas de ar.

A escolha de uma região de troca térmica se justifica, pois plantas químicas, assim como refinarias de petróleo, são grandes consumidoras de energia. Desta forma, o estudo de regiões de troca térmica é de muita valia, pois permite a recuperação energética proveniente de regiões ou correntes quentes de uma unidade de processamento e o consequente aquecimento de equipamentos ou linhas de unidades de processo que necessitem de elevação de temperatura. Este processo de economia energética é denominado de integração energética (GADALLA, 2015). Uma das formas de se utilizar a energia excedente de certas unidades é por meio do emprego de trocadores de calor. Tem-se como exemplo as torres de destilação, unidades típicas de refinarias, que utilizam integração energética para realizar o pré-aquecimento do petróleo a ser destilado (KAYODE, 2010). A aplicação deste artifício permite uma economia de cerca de 40% do consumo energético em uma coluna de destilação (BEHROOZSARAND & SHAFIEI, 2011; MAITI *et al*., 2013). Nesta Tese propõe-se estudar um trocador de calor que se destina ao aquecimento de ar, em um sistema monofásico.

Para o teste das implementações do controle MPC no caso do sistema monofásico empregado, o objetivo específico foi o controle da temperatura de saída do fluído por meio da manipulação da velocidade de entrada. Para o sistema polidisperso, o objetivo consistiu em controlar o diâmetro de saída da partícula por meio da manipulação da velocidade de entrada. Dada a sua maior complexidade, discorre-se melhor sobre esse sistema e as motivações para o seu controle nos parágrafos a seguir.

Nos sistemas industriais onde existem fluidos com *sprays*, lamas, pós, bolhas e gotas, a população de partículas final do processo é normalmente diferente da população inicial. Para entender este comportamento, é necessário um estudo sobre a evolução, no espaço e no tempo, da densidade do tamanho das partículas (DTP) e seus efeitos sobre o sistema (SILVA & LAGE, 2011). Pode-se modelar a interação existente entre as partículas num escoamento polidisperso por meio da chamada equação de balanço populacional (PARK & HEISTER, 2013; HAN *et al.*, 2013).

Considerando um meio polidisperso, a fase dispersa é composta por partículas (sólidas ou fluidas) que são continuamente destruídas e recriadas pela dinâmica do processo que ocorre no sistema sob estudo. As partículas em dispersão estão em constante colisão, podendo ou não coalescer ou quebrar, gerando novas partículas com diâmetros extremamente variados (CHAISEMARTIN *et al.*, 2009). A frequência e a intensidade da quebra e da coalescência das

gotas ou bolhas em um escoamento turbulento de um sistema líquido-líquido ou gás-liquido determinam a evolução da distribuição de tamanho de partículas na dispersão e, portanto, a área de contato entre as fases.

Nestes escoamentos, a hidrodinâmica e as forças interfaciais são os fatores preponderantes que afetam a área interfacial. Os processos de quebra e coalescência ocorrem de maneira simultânea, até o equilíbrio ser atingido, quando as mudanças na distribuição de partículas não são mais observadas (RAMKRISHNA, 2000). Em uma simulação de um sistema na qual a fase dispersa é gasosa, tal como em uma coluna de bolhas, quanto mais acurados os cálculos do diâmetro das partículas, mais acurados serão os resultados obtidos para as transferências de massa e de calor do sistema em estudo.

Foi estudado um sistema utilizando o modelo de McCoy-Madras (McCOY & MADRAS, 2003) para explicar os fenômenos de coalescência e de quebra, a fim de controlar o Diâmetro médio de Sauter das partículas na saída de uma coluna. Sendo assim, controlar o diâmetro médio de saída das partículas do reator ou da coluna é de extrema importância, uma vez que as flutuações nos cálculos da transferência de calor e massa irão afetar a temperatura de saída das partículas do sistema. Esta é uma das justificativas para a aplicação de técnicas de controle de processos em simulações de escoamentos usando CFD (*Computational Fluid Dynamics*).

Este trabalho apresenta uma Tese de Doutorado. Para tanto, segue uma divisão em capítulos. A Introdução (Capítulo 1) e os Capítulos 2, Revisão Bibliográfica; 3, Metodologia; 4, Resultados e Discussão para o Sistema Monofásico ; 5, Resultados e Discussão para o Sistema Polidisperso; e 6, Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros. No Capítulo 2 são revistos os fundamentos do escoamento monofásico, as equações de balanço de massa, momento e energia e uma breve discussão acerca de turbulência. São abordados também os conceitos básicos sobre escoamentos multifásicos, a equação de balanço populacional envolvendo os fenômenos de quebra e coalecência. Por fim, as leis de controle clássicas são mostradas e é dado destaque ao desenvolvimento da leis de controle preditivo a serem implementadas (DESHPANDE, 1985; SEBORG *et al.,* 2011). No Capítulo 3 encontra-se uma breve discussão acerca do funcionamento do aplicativo *OpenFOAM e* dos *solvers* empregados para a resolução das equações de balanço populacional e de escoamento monofásico com troca térmica pelas paredes. O Capítulo 3 também aborda o detalhamento dos casos

elaborados para testar o desempenho dos controles preditivos em escoamentos monofásico e polidisperso. Em “Resultados e Discussão para o Sistema Monofásico” e “Resultados e Discussão para o Sistema Polidisperso”, Capítulos 4 e 5, respectivamente, são introduzidos e discutidos os dados obtidos para as simulações monofásica e polidispersa. A sintonia dos controladores clássicos, a obtenção da função convolução empregada nos controles preditivos, as performances obtidas com os controladores clássicos e preditivos e o cálculo de índices de desempenho dos controladores são, também, assuntos destes capítulos. O Capítulo 6 encerra o texto trazendo as conclusões finais desta investigação e as sugestões referentes a trabalhos futuros. Complementam o texto as Referências Bibliográficas.

2. Revisão Bibliográfica

2.1 Introdução

Este capítulo está dividido em 7 seções. Inicialmente, são revistos os princípios gerais dos escoamentos, tais como o conceito de fluido e sua classificação em escoamentos monofásicos e multifásicos.

No que tange aos escomentos monofásicos, serão abordadas as equações de balanço de massa, calor e momento, além do equacionamento da turbulência, uma vez que será implementada uma malha de controle a este tipo de escoamento.

A quarta seção apresenta os aspectos acerca dos escoamentos multifásicos, introduzindo temas como sua definição e classificação. A abordagem multifásica para esta Tese de Doutorado envolve a aplicação da Equação de Balanço Populacional (EBP), não contemplando o acoplamento desta com as equações multifásicas de transporte. Para a EBP, apenas os fenômenos de quebra e coalescência foram empregados. A formulação de MCCOY & MADRAS (2003) foi utilizada e o seu equacionamento foi detalhado no seu referido item. Os principais métodos de resolução da EBP também foram estudados, com ênfase para os métodos híbridos. Uma atenção especial foi dedicada ao Método DQMOM (MARCHISIO & FOX, 2005), empregado na resolução da EBP no *OpenFOAM* (SILVA & LAGE, 2011; JATOBÁ *et al.*, 2014).

A Seção 5 contempla uma revisão acerca do *software* CFD *OpenFOAM* e sobre o número de Courant (Co) empregado para indicar a boa estabilidade em simulações CFD.

A seção seguinte refere-se ao Controle de Processo, onde são apresentadas as formulações: simplificada do algoritmo de controle avançado MPC (*Model Predictive Control*), desenvolvido por DESHPANDE (1985), e a completa, empregando a técnica do horizonte descendente, que foram implementadas no *software OpenFOAM*. Por fim, apresenta-se uma revisão bibliográfica sobre estudos envolvendo CFD e controle de processo, evidenciando a inovação tecnológica da implementação do controle avançado em um *software* de computação fluidodinâmica, no caso, o *OpenFOAM*.

2.2 Definições Gerais de Escoamento

2.2.1 Definição de Fluido

A definição mais amplamente empregada é aquela que classifica como fluido qualquer substância que se deforma continuamente sob a ação de uma força cisalhante (tangencial) de qualquer magnitude. Essa definição é válida tanto para líquido quanto para gases, lembrando que sólidos se deformam frente a uma tensão de cisalhamento, mas não continuamente. O grau de deformação de um determinado fluido sob a influência de uma tensão de cisalhamento é função de sua viscosidade (FOX *et al.*, 2011; HAUKE, 2008).

2.2.2 Classificação

Os escoamentos podem ser classificados em escoamentos monofásicos e multifásicos. Os escoamentos monofásicos abrangem os fluxos que contenham apenas um fluido; ao passo que, o termo escoamento multifásico é empregado para designar qualquer fluxo de fluido que contenha mais de uma fase (CROWE *et al.*, 1998).

A fase pode apresentar um significado termodinâmico ou de modelagem. Do ponto de vista termodinâmico, corresponde a uma mistura de compostos a nível molecular, que se apresenta em qualquer estado físico da matéria (líquido, sólido ou gasoso) e que pode ser imiscível ou parcialmente imiscível nas demais. Por outro lado, sob a ótica da modelagem, uma fase pode ser diferenciada por uma característica, como por exemplo o diâmetro das partículas (CROWE *et al.*, 1998).

Considerando esta classificação, a próxima seção traz as equações de balanço de massa, momento e energia para um escoamento monofásico

2.3 Escoamento Monofásico

2.3.1 Equações Diferenciais de Conservação

Todo escoamento de fluido obedece às mesmas leis de conservação, válidas para sistemas bem delimitados e para as suas propriedades extensivas. Estas dependem da extensão do sistema definido, como por exemplo a primeira lei da termodinâmica e a segunda lei de Newton. As leis de conservação podem ser aplicadas diretamente sobre um volume de fluido ou de partículas, que será tomado como referencial para o acompanhamento do fenômeno.

Entretanto, para a solução de problemas práticos, é preferível que estas leis de conservação sejam aplicadas sobre um volume que é atravessado pelo fluido de interesse. Esse volume é definido como volume de controle (HAUKE, 2008).

O Teorema do Transporte de Reynolds (TTR) afirma que definido um volume de controle em um determinado instante de tempo, a taxa de variação de dada quantidade extensiva (por exemplo, da massa) contida no sistema é igual à soma da taxa desta propriedade dentro do volume de controle e da taxa líquida desta grandeza através da superfície que delimita o sistema por meio do mecanismo denominado de transporte advectivo (segundo termo do lado direito da Equação 1). Este teorema transporta os enunciados originais das leis de conservação para a formulação desejada, em termos de volume de controle (MOUKALLED *et al.*, 2016; TEIXEIRA, 2016). O Teorema de Transporte de Reynolds é mostrado na Equação 1:

$$\frac{d}{dt}\int_V s dV = \int_V \frac{\partial s}{\partial t} dV + \int_S s(\mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}) dS \tag{1}$$

tal que: s é uma função escalar de posição e tempo. Esta função pode representar uma propriedade a ser conservada, t é o tempo, V é o volume de uma região em um espaço envolvido pela superfície S, **n** é o vetor normal à superfície S e $\mathbf{u}_s$ é a velocidade (BIRD *et al.,* 2004).

As equações de conservação na sua forma integral podem ser obtidas pela combinação das leis de conservação com o Teorema de Transporte de Reynolds, pois cada princípio de conservação fornece uma relação para a variação temporal de certa propriedade. As quantidades extensivas possuem uma relação relativamente simples com as correspondentes propriedades intensivas do escoamento. Essas propriedades intensivas não dependem da extensão do sistema e são expressas por unidade de volume ou massa. Por meio das equações integrais de balanço, é possível estudar efeitos dos escoamentos em equipamentos. No entanto, não é factível a obtenção de resultados para todas as regiões do espaço, ou ponto a ponto, das propriedades do escoamento, tais como pressão e velocidade. Para o cálculo destas distribuições, faz-se necessário o uso de equações diferenciais de balanço, que podem ser obtidas pela aplicação do Teorema da Divergência de Gauss que estabelece relação entre a integral do divergente de um campo vetorial **F** no interior de um volume de controle com a integral de **F** sobre a superfície deste volume de controle (TEIXEIRA, 2016). As equações

diferenciais de balanço possuem a forma geral conforme a Equação 2 (ISHII & HIBIKI, 2011; FOX *et al.*, 2011):

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) = -\nabla \cdot J + \rho \psi \tag{2}$$

tal que: ϕ é uma variável genérica intensiva do escoamento, em unidades de massa; J representa o transporte molecular de matéria ou energia; ψ corresponde ao termo fonte; ρ e **u**, são a densidade do fluido e a velocidade vetorial do escoamento.

Para materiais isotrópicos, muitos autores, entre os quais, VERSTEEG & MALALASEKERA (2007) e MOUKALLED (2016) incluem na Equação 2 os termos de fluxos moleculares difusivos proporcionais ao gradiente da variável considerada. Desta forma, a Equação de Diferencial de Balanço pode ser representada também pela Equação 3:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_{\phi} \tag{3}$$

tal que: Γ é o coeficiente de difusão e S_{ϕ} representa o termo fonte.

O primeiro termo da Equação 3 expressa a variação temporal da variável em estudo por unidade de volume; o segundo, representa o transporte advectivo (movimento macroscópico do fluído), também chamado de divergente do fluxo e expressa a taxa líquida de saída da propriedade intensiva por unidade de volume; o terceiro, o transporte difusivo e o último termo é denominado de termo fonte.

As Equações 2 e 3 serão utilizadas para a obtenção das equações de conservação de massa, momento e energia. Estas serão aplicadas numa simulação de um escoamento monofásico para o aquecimento do ar visando testar a performance dos controles preditivos implementados.

2.3.2 Equação da Continuidade

A conservação de massa pode ser obtida por meio das Equações 2 e 3. Para isso, basta estabelecer que: ϕ=1, J=0 , S=0 e ψ =0. A Equação 4 resultante é denominada de Equação da Continuidade (BIRD *et al.*, 2004; ISHII & HIBIKI, 2011):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \tag{4}$$

Fisicamente, o primeiro termo da Equação 4 fornece a taxa de acúmulo de massa por unidade de volume e o segundo termo descreve a taxa líquida de diminuição de massa pelo mecanismo de transporte advectivo em base volumétrica (BIRD *et al.*, 2004).

2.3.3 Equação do Movimento

Pela segunda lei de Newton, a soma de todas as forças atuando sobre o sistema é igual a taxa de variação da quantidade de movimento. As forças que atuam sobre o fluido em um determinado volume de controle podem ser divididas em: forças de campo, que atuam por todo o volume do fluido sem contato físico com o mesmo e forças de superfície, que atuam por contato direto com o fluido (BIRD *et al*., 2004. FOX *et al.*, 2011).

A principal força de campo a se considerar é o campo gravitacional da terra. Logo, a aceleração gravitacional vetorial (**g**) deve ser substituída pela variável ψ na Equação 2, levando a ψ=**g.** As forças de superfície são obtidas pela integração superficial do Tensor Molecular, ou também chamado de tensor das tensões, representado por $\boldsymbol{\pi}$. Existem duas contribuições para o tensor das tensões ($\boldsymbol{\pi}$): uma parcela associada à pressão (P) e a parcela referente às forças viscosas ($\boldsymbol{\tau}$). A Equação 5 representa o tensor das tensões ($\boldsymbol{\pi}$) (BIRD *et al.*, 2004; KLEINSTREUER, 2010):

$$\boldsymbol{\pi} = -P\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \tag{5}$$

Na Equação 5, **I** é tensor unitário e seus componentes são dados pelo Delta de Kronecker (δ_{ij}) que vale 1, se i=j; 0, se i≠j. A força de pressão (P) será sempre perpendicular à face exposta e será exercida com o fluido em repouso ou em movimento. As forças viscosas atuam sempre que existirem gradientes de velocidades no fluido. As tensões $\pi_{ii} = -P + \tau_{ii}$ são denominadas de tensões normais e as tensões $\pi_{ij} = \tau_{ij}$, para i≠j, são chamadas de tensões cisalhantes (BIRD *et al.*, 2004).

O tensor das tensões (π_{ij}) pode ser interpretado fisicamente de duas maneiras:

- Representa a força na direção j sobre uma área unitária perpendicular à direção i, onde sabe-se que o fluido da região de x_i menor exerce a força sobre o fluido de x_i maior.
- Consiste num fluxo de momento de direção j na direção i positiva, isto é, da região x_i menor para a de maior x_i.

A primeira interpretação é útil na descrição das forças exercidas pelo fluido sobre as superfícies sólidas. A segunda, é especialmente importante para a obtenção da equação do movimento, descrita pela Equação 6, fazendo-se $J = -\pi$, $\phi = u$ e $\psi = \mathbf{g}$ (BIRD *et al.*, 2004; ISHII & HIBIKI, 2011).

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \tag{6}$$

Se as forças viscosas tiverem pouca influência sobre o escoamento, faz-se $\nabla \cdot \tau = 0$ na Equação 6. Caso as forças viscosas tenham importância sobre o escoamento, faz-se necessária a utilização de uma equação constitutiva reológica para $\boldsymbol{\tau}$. Para a maioria dos fluidos, sendo estes Newtonianos, pode-se aplicar a seguinte generalização da Lei de Newton da Viscosidade (ISHII & HIBIKI, 2011; BIRD *et al.*, 2004):

$$\boldsymbol{\tau} = \mu\left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T\right] - \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa_v\right)(\nabla \cdot \mathbf{u})\delta_{ij} \tag{7}$$

tal que: $\nabla \mathbf{u}$ é o tensor gradiente de velocidade com componentes $\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\right)u_j$; $(\nabla \mathbf{u})^T$ é o transposto do tensor gradiente de velocidade com componentes $\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\right)u_i$; $(\nabla \cdot \mathbf{u})$ é o divergente do vetor velocidade $\mathbf{u}$; μ e κ_v são a viscosidade e a viscosidade dilatacional do fluido, respectivamente.

No entanto, ao se resolver a maioria dos casos de dinâmica dos fluidos, não é necessário o conhecimento do coeficiente κ_v. Se o fluido for um gás, frequentemente admite-se que ele apresenta um comportamento de gás ideal monoatômico, para o qual κ_v é identicamente nulo. Se o escoamento for de um líquido, ele é tratado como incompressível, pois as variações em sua massa especifica são desprezíveis e o termo da Equação 7 que contém a viscosidade dilatacional é anulado, uma vez que a equação da continuidade para

estes casos se resume a $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. O emprego da Equação 7 limita-se a líquidos e gases que possuam massas molares de no máximo 5000 kg/mol. O uso da Equação 7 não é recomendado para escoamentos de pastas, polímeros e emulsões, que são fluidos não newtonianos (BIRD *et al.*, 2004; TEIXEIRA, 2016).

2.3.4 Equação da Energia

A lei da conservação da energia é uma extensão da primeira lei da termodinâmica clássica. Desta forma, a taxa de energia total, composta pelas parcelas de energia interna, cinética e potencial é igual à taxa liquida de energia trocada com as vizinhanças, por meio de trabalho e calor (BIRD *et al.*, 2004; FOX *et al.*, 2011; SMITH *et al.*, 2001). Para os problemas de escoamento, a única forma de energia potencial considerada é o trabalho realizado pela força da gravidade. A quantidade extensiva considerada é a soma das energias cinética e interna total. A energia cinética é a energia associada ao movimento observável do fluido por unidade de volume. Por energia interna entende-se a energia das moléculas constituintes do fluido (associada ao vetor velocidade **u**) mais as energias associadas aos movimentos de vibração e rotação das moléculas e as energias de interação entre as moléculas. A propriedade intensiva considerada é a soma das energias interna (U) e cinética por unidade de massa, tal que:

$$\phi = U + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \tag{8}$$

Onde :

$$\mathbf{u}^2 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = \sum_i u_i^2 \tag{9}$$

Substituindo-se as Equações 8, 10 e 11 na Equação 2, para o caso particular da conservação da energia (ISHII & HIBIKI, 2011):

$$J = \mathbf{q} - \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{u} \tag{10}$$

$$\psi = g \cdot \mathbf{u} + \frac{\dot{q}}{\rho} \tag{11}$$

chega-se à equação da energia (Equação 12) (ISHII & HIBIKI, 2011):

$$\frac{\partial\left[\rho\left(U+\mathbf{u}^2/2\right)\right]}{\partial t}+\nabla\cdot\left[\rho\left(U+\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\mathbf{u}\right]=-\nabla\cdot\mathbf{q}+\nabla\cdot\left(\boldsymbol{\pi}\cdot\mathbf{u}\right)+\rho\left(\mathbf{g}\cdot\mathbf{u}\right)+\dot{q} \tag{12}$$

Tal que: $\mathbf{q}$ representa o fluxo de calor por condução (transporte molecular) e $\dot{q}$ representa o calor por unidade de volume, ou seja, o calor gerado ou consumido no volume (BIRD *et al.*, 2004; ISHII & HIBIKI, 2011).

A Equação 12 pode ser reescrita para separar as contribuições das forças de pressão e viscosas, pela substituição da Equação 5:

$$\frac{\partial\left[\rho\left(U+\mathbf{u}^2/2\right)\right]}{\partial t}+\nabla\cdot\left[\rho\left(U+\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)u\right]=-\nabla\cdot\mathbf{q}-\nabla\cdot\left(P\mathbf{u}\right)+\nabla\cdot\left(\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{u}\right)+\rho\left(\mathbf{g}\cdot\mathbf{u}\right)+\dot{q} \tag{13}$$

O termo $-\nabla\cdot\mathbf{q}$ representa a taxa de adição de energia, por unidade de volume, por condução. A parcela $-\nabla\cdot\left(P\mathbf{u}\right)$ representa a taxa de trabalho realizado pelas forças de pressão sobre o fluido por unidade de volume. $\nabla\cdot\left(\tau\cdot\mathbf{u}\right)$ corresponde a taxa de trabalho realizada sobre o fluido devido às forças viscosas, também por unidade de volume e o termo $\rho\left(\mathbf{g}\cdot\mathbf{u}\right)$ é o trabalho realizado sobre o fluido pela ação de forças externas, comumente, a gravidade (BIRD *et al.*, 2004).

Com a finalidade de eliminar as flutuações da energia cinética, a Equação 13 sofreu uma manipulação matemática conforme se segue: toma-se o produto escalar do vetor da velocidade pela Equação do Movimento (Equação 6), tem-se então uma equação diferencial para o balanço da energia cinética, subtrai-se a equação obtida, da Equação 13 e o resultado será uma nova equação para o balanço da energia interna. Supõe-se que a termodinâmica de equilíbrio pode ser aplicada localmente a sistemas não equilibrados e, desta forma, pode-se substituir a energia interna pela entalpia (h), seguindo a relação (BIRD *et al.*, 2004; VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007; TEIXEIRA, 2016):

$$U=h-\frac{P}{\rho} \tag{14}$$

Chegando-se à Equação 15:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \frac{\partial P}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla P) + (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u}) + \dot{q} \tag{15}$$

Para fluidos isotrópicos, nos quais a propriedade se difunde na mesma intensidade ou magnitude, independente da direção ou do sentido do fluxo, a condução de calor pode ser calculada por meio da Lei de Fourier, da condução de calor, expressa pela Equação 16 (BERGMAN *et al.,* 2011):

$$\mathbf{q} = -k \nabla T \tag{16}$$

tal que: k é a condutividade térmica do material ou fluido e T é a temperatura.

Caso o fluido seja anisotrópico o valor de k será caracterizado por um tensor de condutividade térmica (ISHII & HIBIKI, 2011).

O termo $(\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u})$ da Equação 15 representa a perda de energia por atrito, também é conhecido como aquecimento por dissipação viscosa. Segundo BIRD *et al.* (2004), em coordenadas cartesianas, a dissipação viscosa pode ser calculada pela Equação 17:

$$(\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u}) = \sum_i \sum_j \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{17}$$

tal que: os índices i e j representam as direções das coordenadas x, y, e z a cada passagem dos somatórios.

A perda por atrito consegue quantificar uma conversão de energia mecânica em térmica. Em termos práticos, é esperado que as perdas por dissipação viscosas sejam desprezíveis, a menos que gradientes de velocidade ou viscosidades de grandes magnitudes estejam envolvidos no escoamento, como por exemplo, o escoamento de ar, nas redondezas de satélites, retornando à Terra. Neste caso, a perda por atrito causa uma elevação considerável na temperatura do fluido (BIRD *et al.,* 2004).

A próxima seção apresenta a aproximação de Boussinesq, empregada no resolução do problema monofásico proposto.

2.3.5 Aproximação de *Boussinesq*

As equações de balanço de massa, momento e energia descritas pelas Equações 4, 6 e 15, sofrem algumas alterações quando se consideram o escoamento de fluidos incompressiveis e a aproximaçao de Boussinesq (BIRD *et al.*, 2004), que contabiliza os efeitos do empuxo (convecção natural) (HAUKE, 2008; BIRD *et al.,* 2004; BERGMAN *et al.*, 2011).

A equação de conservação de massa (Equação 4) pode ser simplificada para:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{18}$$

A equação da conservação do momento linear (BIRD *et al.*, 2004; FOX *et al.*, 2010), Equação 6, é modificada de maneira a introduzir a aproximação de fluido incompressivel, newtoniano e a aproximação de Boussinesq. A aproximação de Boussinesq consiste na utilização de uma equação de estado, aproximada para representar a variação de densidade com a temperatura, que é particularmente importante, pois permite o aparecimento das forças de empuxo e portanto de convecção natural (BIRD *et al.,* 2004). A equação de estado empregada é representada por:

$$\rho(T) = \overline{\rho} - \overline{\rho}\beta(T - \overline{T}) \tag{19}$$

Quando a Equação 19 é substituida no termo ρg da equação do movimento, obtém-se a Equação de *Boussinesq*, que é representada pela Equação 20 (BIRD *et al.*, 2004):

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{uu}) = (-\nabla P + \overline{\rho}\mathbf{g}) + \left[\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}\right] - \overline{\rho}\mathbf{g}\beta(T - \overline{T}) \tag{20}$$

tal que: $\boldsymbol{\tau}$ é a tensão viscosa, definida pela Equação 7, $\mathbf{g}$ é o campo gravitacional, β é o coeficiente de expansão térmica, devido aos efeitos de flutuação por variação de densidade em função da mudança de temperatura e $\overline{T}$ é uma temperatura de referência.

Essa forma da equação do movimento é bastante útil para as análises de transferência de calor. Ela consegue descrever os casos limites de convecção forçada e natural e a região entre esses extremos. Nos casos de convecção forçada, o termo de empuxo ($(-\overline{\rho}\mathbf{g}\beta(T - \overline{T}))$ é

desprezado. Na convecção natural, a parcela ($-\nabla P + \bar{\rho}\mathbf{g}$) é pequena, sendo desprezivel quase sempre, principalmente para escoamentos retilíneos verticais e para escoamentos próximos a corpos submersos em grandes corpos de fluidos (BIRD *et al.*, 2004).

2.3.6 Turbulência

O cálculo do Número de Reynolds de um fluxo é o principal parâmetro que define se o escoamento possui um perfil laminar ou turbulento. A principal característica dos escoamentos turbulentos é o aparecimento de flutuações caóticas, aleatórias e rápidas em torno dos valores médios de pressão, velocidade, temperatura e de outras variáveis do escoamento em cada ponto do fluxo. No entanto, na prática, verifica-se que quase a totalidade dos escoamentos de interesse são turbulentos (WILCOX*,* 2006; TEIXEIRA, 2016).

Mesmo nos casos em que os valores médios das propriedades variem somente em uma ou duas direções do eixo de coordenadas cartesianas, as flutuações turbulentas são inerentemente transientes e tridimensionais. Em consequência desta afirmação, aproximações bidimensionais não são capazes de detalhar satisfatoriamente os cálculos de turbulência, mesmo que o movimento médio seja bidimensional. Estruturas rotacionais de vários tamanhos, denominados de turbilhões ou vórtices, podem ser visualizadas nos escoamentos turbulentos. Os movimentos dos vórtices aumentam as difusões de massa, momento e energia, devido a aproximação das partículas de fluido. Isto se configura na mais importante característica do fenômeno de turbulência sob a ótica da engenharia (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007; WILCOX., 2006; MOUKALLED *et al.*, 2016; TEIXEIRA, 2016).

A energia que mantém a turbulência é retirada do escoamento médio pelos vórtices de maior tamanho. Estes, transmitem energia cinética turbulenta a vórtices progressivamente menores, de maneira sucessiva, até chegar as escalas mais reduzidas de turbulência, as chamadas microescalas de Kolgomorov. A realização de trabalho contra as tensões viscosas dissipa a energia dos menores vórtices em energia térmica (energia interna). Desta forma, verifica-se que a perda de energia é acentuada pela existência de turbulência (WILCOX., 2006; MOUKALLED *et al.*, 2016).

Os menores comprimentos caraterísticos de escoamentos turbulentos, mesmo que extremamente pequenos, ainda são bem maiores (várias ordens de grandeza) que as escalas

de comprimentos moleculares (WILCOX, 2006). Assim, as equações diferenciais de balanço continuam aplicáveis a problemas de escoamentos em regime turbulento.

A solução numérica precisa, tanto do ponto de vista tridimensional quanto transiente da turbulência ser capaz de obter a resolução de todas as escalas de turbulência relevantes. A simulação DNS (*Direct Numerical Simulation*) permite o cálculo das mais rápidas flutuações turbulentas pelo emprego de malhas extremamente refinadas e passos de tempo da mesma escala de grandeza que a escala de Kolgomorov, dispensando o emprego de modelos adicionais para o cálculo da turbulência. Entretanto, mesmo com avanço tecnológico dos recursos computacionais no que tange a memória e velocidade disponíveis, simulações desta natureza ainda não são viáveis para o cálculo da turbulência em escoamentos, para os casos práticos de engenharia (BIRD *et al.*, 2004; WILCOX, 2006; MOUKALLED *et al.*, 2016).

A decomposição de Reynolds é usualmente o primeiro passo para o início da modelagem da turbulência. Ela consiste na divisão da velocidade instantânea, considerando-a como uma soma entre uma velocidade média $\overline{u}$ e uma velocidade flutuante u'. Para a velocidade, pode-se escrever (BIRD *et al.,* 2004; VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007; WILCOX, 2006):

$$\mathbf{u}(x,t) = \overline{\mathbf{u}}(x,t) + \mathbf{u}'(x,t) \tag{21}$$

tal que: a barra superior representa o valor médio da propriedade, o apóstrofo representa as flutuações, x é a posição no espaço e t é o tempo.

O mesmo procedimento pode ser aplicado para outras variáveis como a pressão, temperatura e outras variáveis do problema.

O valor médio de uma propriedade é igual à média temporal do seu valor instantâneo, calculada sobre o intervalo de tempo Δt. Para a velocidade, resulta em (WILCOX, 2006):

$$\overline{\mathbf{u}}(x,t) = \frac{1}{\Delta t}\int_{t}^{t+\Delta t} \mathbf{u}(x,t)dt \tag{22}$$

Vale ressaltar que o intervalo de integração deve possuir um limite superior suficientemente menor que o tempo característico das variações não turbulentas dos valores médios com o tempo, quando elas ocorrem. No entanto, existe um problema no uso da média

temporal. Há casos nos quais os limites do intervalo de integração não diferem em ordens de grandeza suficiente, isto quer dizer que não há um limite de tempo bem definido entre as flutuações de turbulência e as variações de interesse. Uma metodologia empregada para contornar este problema é o uso da média estatística, também denominada de *ensemble average (*WILCOX, 2006). A média estatística consiste no cálculo de valores médios pela média aritmética dos valores instantâneos, medidos em diversos experimentos hipotéticos, sob condições idênticas (FERZIGER & PERIC, 2002).

Considerando-se que o comportamento médio das propriedades possui maior importância e interesse, faz-se necessário reescrever as equações de balanço em função dos valores médios das mesmas. O procedimento adotado é o cômputo das médias das próprias equações de balanço logo após a substituição das variáveis instantâneas pelas variáveis correspondentes, provenientes da decomposição de Reynolds (BIRD *et al.*, 2004; WILCOX, 2006; TEIXEIRA, 2016). A equação da continuidade (Equação 4) não sofre alteração para um fluido Newtoniano e incompressível. Para o balanço de momento linear, a equação empregada é obtida pela substituição da Lei da Viscosidade de Newton (Equação 7) na Equação 6, resultando na Equação 23 (BIRD *et al.*, 2004):

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u}\mathbf{u}\right) = -\nabla P + \mu\left[\nabla \cdot \nabla \mathbf{u}\right] + \rho \mathbf{g} \tag{23}$$

Observa-se para esta abordagem (fluido incompressível e Newtoniano), que $\nabla \cdot \left[\nabla u\right]^T = \nabla \cdot \left(\nabla \cdot u\right) = 0$ e, em coordenadas cartesianas, para a direção x, a Equação 23 toma a seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho u_x}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho u_x \mathbf{u}\right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu\left[\nabla \cdot \nabla u_x\right] + \rho g_x \tag{24}$$

Reformulando-se a Equação 24 para que as variáveis sejam representadas pelas suas médias, obtêm-se as formas das equações da continuidade (Equação 25) e do movimento (Equação 26) denominadas como *RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes)* (BIRD *et al.*, 2004; VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007):

$$\left(\nabla \cdot \overline{\mathbf{u}}\right) = 0 \tag{25}$$

$$\frac{\partial \rho \overline{u}_x}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \overline{u}_x \overline{\mathbf{u}}\right) = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x} + \mu\left[\nabla \cdot \nabla \overline{u}_x\right] + \rho g_x - \left[\frac{\partial \rho \overline{u_x^{'} u_x^{'}}}{\partial x} + \frac{\partial \rho \overline{u_y^{'} u_x^{'}}}{\partial y} + \frac{\partial \rho \overline{u_z^{'} u_x^{'}}}{\partial z}\right] \tag{26}$$

A equação média do movimento (Equação 26) difere da equação original instantânea pelo surgimento do último termo (entre colchetes), expresso em função das Tensões de Reynolds ($\rho \overline{u_i^{'} u_j^{'}}$) (BIRD *et al.*, 2004). O Tensor de Reynolds expressa o transporte advectivo de momento por meio dos vórtices turbulentos (WILCOX, 2006). Vários termos que surgem durante a dedução das equações RANS são anulados por meio das relações: $\overline{u_i^{'}} = 0$ (médias das flutuações é igual a zero) e $\overline{u_i^{'} \overline{u_i}} = 0$. No entanto, o comportamento dos vórtices turbulentos origina uma correlação entre os movimentos locais do fluido em direções distintas. As flutuações em certa direção não são independentes das flutuações em outra direção. Logo, a média $\overline{u_i^{'} u_j^{'}}$ não é nula, gerando tensões altas, quando comparadas com as tensões viscosas (BIRD *et al.*, 2004). Para calcular as variáveis médias das Equações 25 e 26, faz-se necessária a determinação de um modelo de turbulência para as Tensões de Reynolds.

O modelo ($\kappa - \varepsilon$) é uma das abordagens mais empregadas no tratamento da modelagem da turbulência (HAMIDIPOUR *et al.*, 2012; LEGENDRE & MAGNAUDET, 1997; RAHMAN *et al.*, 2013; SOKOLICHIN & EIGENBERGER, 1999; BAE *et al.*, 2017; ZAO *et al.*, 2017). Este modelo introduz duas equações de transporte adicionais ao cálculo, que são empregadas para a determinação da energia cinética turbulenta (κ) e da dissipação de energia (ε). A energia cinética afeta diretamente as escalas da estrutura turbilhonar presentes no escoamento. As maiores estruturas carregam as maiores quantidades de energia, enquanto que as menores transportam menos energia. Por isso, a taxa de dissipação de energia deve ser resolvida de maneira acoplada à energia cinética. A partir de (κ) e (ε) é possível calcular a viscosidade turbulenta local, empregada nas equações de transporte de momento linear (SILVA, 2008; VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007).

A equação de conservação de energia cinética turbulenta é descrita pela Equação 27 (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007):

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho\kappa\mathbf{u}\right) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \nabla \kappa\right] + S_k - \rho\varepsilon \tag{27}$$

tal que: μ_t é a viscosidade turbulenta definida pela Equação 29, S_κ é o termo que representa a produção de energia cinética turbulenta e σ_k é uma constante empírica da equação.

A equação de conservação da dissipação de energia turbulenta é mostrada a seguir (Equação 28): (VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007):

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\varepsilon\mathbf{u}) = \nabla\cdot\left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\nabla\varepsilon\right] + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{\kappa}S_k - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{\kappa} \tag{28}$$

Tal que: σ_ε, $C_{1\varepsilon}$ e $C_{2\varepsilon}$ são constantes empíricas da equação.

A viscosidade turbulenta pode ser calculada pela Equação 29 (FERZIGER & PERIC, 2002):

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \tag{29}$$

Desta maneira, ao se empregar o modelo $\kappa - \varepsilon$ para considerar os efeitos de turbulência nas simulações, três variáveis (κ, ε e μ_t) e três equações (27, 28 e 29) são agregadas às equações de balanço, elevando o custo computacional, embora ainda a um nível aceitável (SILVA, 2008; VERSTEEG & MALALASEKERA, 2007).

2.4 Escoamento Multifásico

2.4.1 Introdução

Os escoamentos multifásicos podem ser classificados conforme a topologia da interface entre as fases em: escoamentos dispersos e escoamentos separados (BRENEN, 2005). Os escoamentos dispersos são caracterizados pela distribuição de todas as fases dispersas na forma de partículas (sólidas ou fluidas) dentro de uma única fase não distribuída, denominada de fase contínua. Se as partículas de uma fase dispersa apresentarem características que as diferenciam uma das outras, o escoamento em questão é denominado de polidisperso. São exemplos destas características: tamanho, forma, composição etc (DREW & PASSMAN, 1999; BRENEN, 2005). Quando o fluxo se apresenta de tal forma que as fases escoam ocupando volumes conectados, cuja separação se define apenas por interfaces bem definidas, é chamado de escoamento separado (BRENEN, 2005).

Bolhas e gotas estão presentes em vários contextos industriais, tais como: operações com sprays; produção, estocagem e transporte de óleo e gás; tratamento de água; processos biotecnológicos etc. Nestes casos, a distribuição de tamanho de partículas (DTP) possui uma importância primordial para a performance de equipamentos e a qualidade do produto final (AZIZI & TAWEEL, 2010).

As variáveis que afetam a distribuição de partículas podem ser divididas em dois grupos, externas e internas. Caso as partículas da fase dispersa estejam distribuídas segundo suas propriedades intrínsecas, tais como: tamanho, composição, energia térmica, idade, etc; elas recebem a denominação de variáveis internas, **v**. Por outro lado, as variáveis externas, **x** e $\mathbf{x} \in \Omega_x$, são confinadas ao campo geométrico (espaço físico) analisado, isto é, ao espaço de coordenadas em R^3 (no máximo) (DE ARAÚJO, 2010; SILVA, 2008).

Os primeiros pesquisadores a empregarem a equação de balanço populacional para a modelagem de processos em engenharia química envolvendo sistemas com fases dispersas foram HULBURT e KATZ (1964) e VALENTAS e AMUNDSON (1966), na década de 1960.

Os fenômenos de nucleação, agregação, quebra e crescimento podem afetar o comportamento de uma população de partículas em um sistema fechado. Estes eventos estão associados à maneira como as partículas interagem, entre si e com a fase contínua, considerando o efeito do campo de escoamento sobre as propriedades das partículas. Assim, ocorrem heterogeneidades espaciais que justificam a importância da modelagem destes processos a fim de tornar os projetos de engenharia mais confiáveis (FOX *et al.*, 2008).

As áreas de aplicação para a técnica de balanço populacional são muito vastas. Pode-se citar, por exemplo, o emprego em sistemas biológicos, ambientais e biomédicos, processos multifásicos, modelos de turbulência e teoria cinética (ATTARAKIH, 2013), além de aplicações à fluidodinâmica de processos polidispersos (BUFFO *et al.*, 2013; VIE *et al.*, 2013a; VIE *et al.*, 2013b).

Neste estudo, a simulação do escoamento multifásico abordará apenas a resolução da equação de balanço populacional, sem acoplamento com as equações de balanço de massa, momento linear e energia, devido ao alto custo computacional necessário para a simulação de um sistema acoplado, que inviabiliza a aplicação de controle de processos. Por esta razão, na próxima seção serão apresentados os fundamentos teóricos da equação do balanço populacional, sua formulação completa e os termos de quebra e coalescência das partículas.

2.4.2 A Equação de Balanço Populacional

A equação de balanço populacional (EBP) descreve a variação temporal e espacial das características da fase dispersa, isto é, informa a variação de tamanho, massa, temperatura, idade etc. A EBP está descrita a seguir (RAMKRISHNA, 2000):

$$\frac{\partial f(\mathbf{x},\mathbf{v},t)}{\partial t} = -\nabla_x \cdot \left[\dot{\mathbf{X}} f(\mathbf{x},\mathbf{v},t)\right] + \nabla_x \cdot \left[\mathbf{D_x} \cdot \left(\nabla_x \cdot \mathbf{D_x^T} f(\mathbf{x},\mathbf{v},t)\right)\right] + H(\mathbf{x},\mathbf{v},t) \tag{30}$$

tal que:

- $\dot{\mathbf{X}}$ é a taxa de variação da variável externa;
- $\mathbf{D_x}$ é o coeficiente de difusão anisotrópico;
- f é a função de densidade numérica da partícula, que quantifica o número médio de partículas no tempo por unidade de volume no espaço testado;
- $H(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$ é o termo fonte da EBP que inclui os efeitos de nucleação, crescimento, agregação e quebra (DE ARAÚJO, 2010; MADRAS & MCCOY, 2003).

O segundo e o terceiro termos da EBP (Equação 30) representam o transporte convectivo e difusivo de partículas no espaço físico, respectivamente.

O termo fonte pode ser representado pela Equação 31 (RAMKRISHNA, 2000):

$$H(\mathbf{x},\mathbf{v},t) = B_a(\mathbf{x},\mathbf{v},t) - D_a(\mathbf{x},\mathbf{v},t) + B_b(\mathbf{x},\mathbf{v},t) - D_b(\mathbf{x},\mathbf{v},t) + J_{nu}(\mathbf{x},\mathbf{v},t) + G(\mathbf{x},\mathbf{v},t) \tag{31}$$

$H(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$ pode ser dividido nas seguintes parcelas: taxa de variação das propriedades das partículas (crescimento) $G(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$, taxa de nucleação $J_{nu}(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$ e taxas de nascimento e morte, $B(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$ e $D(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$, respectivamente, que podem ocorrer devido a processos de quebra (subscrito b) e coalescência, definido pelo subscrito a.

O termo $G(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$ refere-se a mudanças no estado das variáveis internas e a equação geral para esta parcela é descrita pela Equação 32:

$$G(\mathbf{x},\mathbf{v},t) = -\nabla_v \cdot \left[\dot{\mathbf{V}} f(\mathbf{x},\mathbf{v},t)\right] + \nabla_v \cdot \left[\mathbf{D_v}\left(\nabla_v \cdot \mathbf{D_v^T} f(\mathbf{x},\mathbf{v},t)\right)\right] \tag{32}$$

Nos problemas associados a escoamentos polidispersos, pelo menos uma das variáveis internas estará sempre relacionada com o tamanho da partícula (massa, diâmetro ou tamanho). Logo, este termo ($G(\mathbf{x},\mathbf{v},t)$) representa, para essa variável, o crescimento da partícula (BOVE, 2005; DE ARAÚJO, 2010).

Para um equacionamento completo do Balanço Populacional é fundamental a abordagem dos aspectos físicos e de modelagem para os fenômenos de quebra e coalescência, que serão assuntos das seções que se seguem.

2.4.2.1 Processo de Coalescência

O processo de coalescência consiste na colisão entre duas ou mais partículas gerando uma nova, de maior tamanho que as que lhe deram origem (KUMAR *et al.*, 2011).

Em um escoamento polidisperso turbulento, as partículas estão se movendo de maneira aleatória, colidindo frequentemente. A condição indispensável para que o fenômeno da coalescência ocorra é que o fluido que está presente entre as gotas ou bolhas seja drenado até a espessura de ruptura deste filme. É possível que a flutuação turbulenta, que ocorre durante o processo de drenagem, seja tão intensa, que propicie a separação por completo das partículas.

Pode-se, então, afirmar que nem toda colisão resulta em uma coalescência. Logo, a eficiência da coalescência está diretamente ligada ao fenômeno físico de colisão entre as partículas. A Figura 1 apresenta um esquema simplificado deste processo.

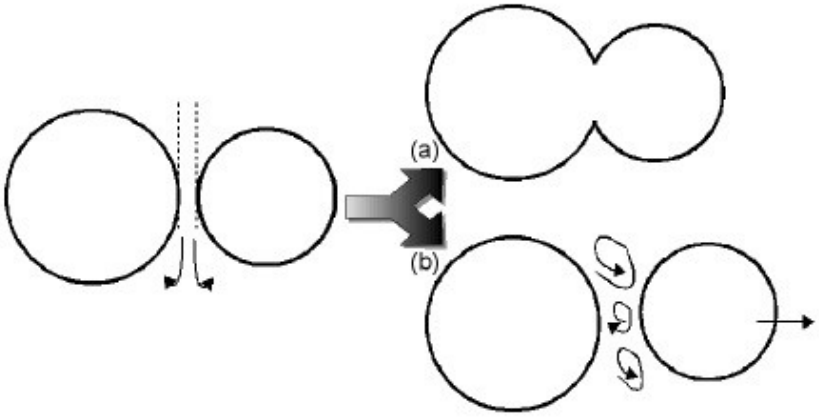

Figura 1. Representação simplificada do processo de coalescência iniciado pelo fenômeno de drenagem do liquido entre as partículas, que pode resultar em: (a) agregação das partículas ou (b) separação das mesmas (SILVA, 2008).

A agregação é modelada por meio da frequência de agregação (a), que é a probabilidade de que duas partículas no estado $(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}})$ e $(\mathbf{x}',\mathbf{v}')$ no instante t, com as propriedades da fase contínua y , se agreguem em um período de tempo de t a t+dt. A frequência de agregação (a) é obtida por meio da Equação 33 e é tradicionalmente dividida em duas parcelas: a frequência de colisão $(\overline{w})$ e a eficiência ou probabilidade condicional de coalescência (λ).

$$a(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}};\mathbf{x}',\mathbf{v}';y,t)=\overline{w}(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}};\mathbf{x}',\mathbf{v}';y,t)\lambda(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}};\mathbf{x}',\mathbf{v}';y,t) \tag{33}$$

Fisicamente significa que a primeira condição para a ocorrência do fenômeno da coalescência é que exista colisão entre as partículas. A frequência deste processo é dada pela frequência de colisão. A partir da existência da colisão, a eficiência pode ser medida por meio da intensidade, do ângulo, das características do escoamento e das propriedades das partículas, que definem se ocorrerá ou não a coalescência (CRISTINI *et al.*, 2003; KOLGOMOROV, 1949).

As taxas de nascimento (Equação 34) e morte (Equação 35) por agregação, que fazem parte do termo fonte da EBP, mostradas na Equação 31, são fornecidas por RAMKRISHNA (2000):

$$B_a(\mathbf{x},\mathbf{v},y,t)=\frac{1}{\delta}\int_{\Omega x'}\int_{\Omega v'}a(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}};\mathbf{x}',\mathbf{v}',y,t)f(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}},t)f(\mathbf{x}'.\mathbf{v}'.t)\frac{\partial(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}})}{\partial(\mathbf{x},\mathbf{v})}dV_{v'}dV_{x'} \tag{34}$$

$$D_a(\mathbf{x},\mathbf{v},y,t)=\frac{1}{\delta}\int_{\Omega x'}\int_{\Omega v'}a(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}};\mathbf{x}',\mathbf{v}',y,t)f(\mathbf{x},\mathbf{v},t)f(\mathbf{x}'.\mathbf{v}'.t)dV_{v'}dV_{x'} \tag{35}$$

tal que: δ representa o número de vezes que pares idênticos foram considerados no intervalo de integração, de forma que o termo 1/δ corrige a redundância.

O termo $\frac{\partial(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}})}{\partial(\mathbf{x},\mathbf{v})}$ corresponde ao jacobiano da transformação de coordenadas, de modo que o par de partículas que colide com as coordenadas $(\tilde{\mathbf{x}},\tilde{\mathbf{v}})$ e $(\mathbf{x}',\mathbf{v}')$ gera partículas no estado $(\mathbf{x},\mathbf{v})$ e pode ser calculado por:

$$\frac{\partial(\tilde{x},\tilde{v})}{\partial(x,v)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial v_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{x}_1}{\partial v_n} \\ \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial v_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{x}_2}{\partial v_n} \\ \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial v_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{x}_3}{\partial v_n} \\ \frac{\partial\tilde{v}_1}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{v}_1}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{v}_1}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{v}_1}{\partial v_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{v}_1}{\partial v_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial\tilde{v}_n}{\partial x_1} & \frac{\partial\tilde{v}_n}{\partial x_2} & \frac{\partial\tilde{v}_n}{\partial x_3} & \frac{\partial\tilde{v}_n}{\partial v_1} & \cdots & \frac{\partial\tilde{v}_n}{\partial v_n} \end{vmatrix} \tag{36}$$

O primeiro autor a realizar uma revisão bibliográfica a respeito dos modelos de coalescência foi CHESTERS (1991). Foram objetos do seu estudo os mecanismos de interação devido à hidrodinâmica do escoamento e à turbulência do meio contínuo. O modelo de coalescência empregado nesta Tese foi o formulado por MCCOY & MADRAS (2003), detalhado na seção 2.4.2.4.

2.4.2.2 Processo de Quebra

O primeiro estudo sobre o processo de quebra devido ao escoamento local externo à partícula foi realizado por TAYLOR (1934). Posteriormente, HINZE (1955) propôs uma classificação das causas de deformação e quebra das partículas para diferentes tipos de escoamento, resumindo o conhecimento do assunto para a época em questão (década de 50). HINZE (1955) relacionou as causas nos diversos escoamentos por meio de um balanço de forças em termos das tensões envolvidas (tensões viscosas e dinâmicas). O estudo realizado por HINZE (1955) consistiu em calcular a magnitude da tensão Y que causa deformação da partícula para cada tipo de escoamento. A tensão superficial tende a contrabalançar esta força, atuando com uma tensão da ordem de σ/d, onde d é o diâmetro da partícula. A razão entre essas duas tensões fornece um número adimensional, Yd/σ, que caracteriza a deformação da partícula. A quebra de uma partícula é esperada quando o número adimensional excede um valor limite, que depende das características do escoamento, das razões entre as densidades e viscosidades, das fases dispersa e contínua e do número de Ohnesorge (Oh). O número de Ohnesorge é a razão entre as forças viscosas e de tensão superficial na partícula fluida (CRISTINI *et al.,* 2003):

$$Oh = \frac{\mu_d}{\sqrt{\rho_d \sigma d}} \tag{37}$$

tal que: μ_d e ρ_d são a viscosidade e a densidade da fase dispersa, respectivamente, σ é tensão superficial do meio contínuo e d é o diâmetro da partícula. Usualmente, emprega-se o número de Reynolds e o número de Weber para o cálculo do número de Ohnesorge (DE ARAÚJO, 2010):

$$Oh = \frac{\mu_d}{\mu_c}\sqrt{\frac{\rho_c}{\rho_d}}\sqrt{\frac{We}{\mathrm{Re}_p^2}} \tag{38}$$

tal que: $We = \frac{\rho_c d u^2}{\sigma}$; $\mathrm{Re}_p = \frac{\rho_c u d}{\mu_c}$; o subscrito c representa a fase contínua e o subscrito d, a fase dispersa.

A teoria de quebra de partículas fluidas em escoamentos turbulentos foi proposta de forma independente por KOLMOGOROV (1949) e HINZE (1955). Ambos os autores se basearam em duas hipóteses fundamentais:

• Para vórtices maiores que a microescala de Kolgomorov, $\eta = \left(\nu^3 / \varepsilon\right)^{1/4}$, a inércia prevalece. Y será uma medida das tensões dinâmicas do escoamento, $Y=\rho U^2$, tal que U^2 é uma velocidade característica do escoamento da fase contínua.

• Apenas as flutuações da velocidade em uma distância similar ao diâmetro da partícula são capazes de causar grandes deformações. Para este caso, $Y = \overline{\rho u^2(d)}$, tal que $\overline{u^2(d)}$ é o valor médio do quadrado das flutuações da magnitude da velocidade entre dois pontos afastados pela distância d.

Para simular a evolução dos tamanhos das partículas, é necessário o conhecimento de quantas partículas quebram nas unidades de tempo e volume, isto é, a frequência de quebra das partículas (b (v)), a quantidade de filhas formadas (ς (v)) e a característica das partículas formadas (P (v|v′)) (DE ARAÚJO, 2010). Se v for massa ou volume, no caso da partícula ser incompressível, a função P (v|v′) possui as seguintes características:

- Nenhuma partícula filha pode ter massa maior que a partícula mãe.

- A probabilidade total de serem geradas partículas filhas com massa ou volume menor que ou igual à partícula mãe é unitária:

$$\int_0^{v'} P(v \mid v')dv' = 1 \tag{39}$$

- A massa se conserva na quebra, de forma que a massa de todas as partículas filhas é igual à massa da partícula mãe:
- $$\varsigma(v')\int_0^{v'} vP(v \mid v')dv = v \tag{40}$$

Os modelos de quebra de partículas fluidas podem ser classificados em dois tipos básicos:

• Os modelos de frequência de quebra, que fornecem uma equação para a frequência de quebra b (v), postulam as formas funcionais de número de filhas ς (v) e a probabilidade de tamanho das partículas geradas P (v|v′).

• Os modelos de quebra postulam apenas o número de filhas na quebra, ς(v). A frequência de quebra b(v) e a probabilidade de distribuição de tamanho de filhas P(v|v′) ou são modeladas diretamente, ou são obtidas a partir da equação para a frequência específica de quebra Ω(v|v′).

O número de filhas, a frequência de quebra e a probabilidade de distribuição do tamanho de filhas podem ser calculadas por meio da frequência específica pela Equação 41:

$$\Omega(v, v') = \varsigma(v')P(v \mid v')b(v') \tag{41}$$

Pela propriedade relatada pela Equação 39, pode-se calcular a frequência de quebra pela Equação 42:

$$b(v') = \frac{1}{\varsigma(v')}\int_0^{v'} \Omega(v \mid v')dv' \tag{42}$$

E a probabilidade do tamanho de partículas-filhas pode ser calculada pela Equação 43:

$$P(v \mid v') = \frac{\Omega(v \mid v')}{\int_0^{v'} \Omega(v \mid v')dv'} \tag{43}$$

2.4.2.3 Métodos de Resolução das Equações de Balanço Populacional

A equação de balanço populacional é uma equação integro-diferencial que nem sempre pode ser resolvida analiticamente. Logo, uma aproximação numérica deve ser empregada. Existem várias formas para a resolução desta equação e a escolha do método depende da natureza do problema a ser resolvido. A seguir, serão apresentados e discutidos os principais métodos de resolução de EBP.

Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo é um método estocástico, que simula o comportamento do sistema empregando técnicas de geração de números aleatórios para calcular as funções de probabilidade do sistema (RAMKRISHNA, 2000). A simulação estocástica do sistema substitui o cálculo direto das funções integrais e diferenciais, que possuem solução analítica apenas para casos extremamente simples (HUSSAIN *et al.*, 1992; XU *et al.*, 2014).

Nesta abordagem, os processos de nucleação, crescimento, quebra e agregação são modelados como processos discretos e aleatórios, em contraposição aos métodos determinísticos. Os primeiros autores a empregar a abordagem de Monte Carlo a sistemas particulados foram RAMKRISHNA & BORWANKER (1973; 1974). Os autores mostraram que a EBP é a primeira de uma série de infinitas equações derivadas da equação para cálculo da densidade de probabilidade principal. A EBP descreve o comportamento médio e calcula a expectativa da função de distribuição.

Método dos Resíduos Ponderados

O método dos resíduos ponderados é uma técnica geral para a solução de equações diferenciais parciais. Funções de uma base, cujos coeficientes são calculados pela ponderação dos resíduos das equações usando funções peso, são utilizados para realizar a expansão da função de distribuição. Constitui-se, desta forma, um conjunto de equações algébricas, ou diferenciais ordinárias, linearmente independentes, com as quais se obtêm os coeficientes da expansão da solução na base de funções usadas (LAGE & PINTO, 2001; SILVA, 2008). As funções empregadas são classificadas em: globais e locais. As funções globais são usualmente empregadas em problemas estacionários e quando uma aproximação da solução está

disponível. BATHIA & CHAKRABORTY (2013) empregaram a formulação global para resolver a EBP estacionária com coalescência e crescimento. A técnica de elementos finitos emprega as bases locais e permite soluções mais generalizadas. Dentre as escolhas possíveis para a função peso estão a função de delta de Dirac, que resulta nos métodos de colocação ou as próprias funções base, que geram a formulação de Galerkin (LAGE & PINTO, 2001; SILVA, 2008).

Desde a última década, os trabalhos que envolvem a resolução de EBP pelo método dos resíduos ponderados têm empregado uma formulação de solução denominada de método dos mínimos quadrados. Este método permite o acoplamento das equações de balanço populacional com as equações multifásicas ou a inserção das equações multifásicas nas EBP (DORAO & JACOBSEN, 2006, 2007, 2008; ZU *et al.*, 2008; SOLSVIK & JACOBSEN, 2012).

O método de elementos finitos possui a vantagem de permitir uma ótima convergência numérica com boa acurácia, possibilitando ainda a adaptação da malha ao problema. A sua principal desvantagem, assim como o método estocástico, é o alto custo computacional imposto pelo cálculo das integrais duplas na formulação de *Galerkin* (SOLSVIK *et al.*, 2013). O método dos mínimos quadrados garante uma convergência mais rápida que a formulação de *Galerkin*, a um custo computacional menor, mas ainda elevado (DORAO & JACOBSEN, 2007; SILVA, 2008).

Método das Classes

O método das classes se baseia em representar a distribuição da população em um número finito de classes formado pela divisão do domínio do tamanho das partículas e adotar um valor constante de tamanho em cada classe. Desta maneira, é possível transformar a EBP integro-diferencial em um sistema de equações diferenciais, com solução numérica bem definida (KOSTOGLOU & KARABELAS, 1994).

O método das classes pode ser dividido em dois tipos (SILVA, 2008):

• Os internamente consistentes, nos quais a discretização da EBP submetida a um operador integral é igual à forma discreta deste operador aplicada à EBP discretizada.

• Os inconsistentes, cuja metodologia de discretização é inconsistente em relação à propriedade integral analisada.

A eficácia desta técnica decorre da rápida e acurada obtenção das propriedades escolhidas da população, tais como o volume, diâmetro, distribuição de massa, etc, de acordo com a aplicação desejada (SILVA, 2008).

HOUNSLOW *et al.* (1988) foram os primeiros a empregar uma discretização da EBP, considerada uma metodologia relativamente simples, utilizando o teorema do valor médio. Os autores estudaram a coalescência de gotas em tanques agitados usando o volume da partícula como variável discretizada em uma malha geométrica igual a 2, isto é, $\upsilon_{i+1} = 2\upsilon$. HOUNSLOW *et al.* (1988) desenvolveram um conjunto de equações para a conservação do número de gotas e da sua massa em sistemas com agregação pura, isto é, onde apenas o fenômeno de agregação ocorre.

A Equação 44 mostra o desenvolvimento realizado pelos autores:

$$\frac{dN_i}{dt} = N_{i-1}\sum_{j=1}^{i-2} 2^{j-i+1} a_{i-1,j} N_j + \frac{1}{2} a_{i-1,i-1} N_{i-1}^2 - N_i \sum_{j=1}^{i-1} 2^{j-1+1} 2^{j-1} a_{i,j} N_i \sum_{j=1}^{i\max} a_{i,j} N_j \tag{44}$$

Tal que: N_i é o número de partícula no ponto i da malha e $a_{i,j}$ é a frequência de agregação aplicada a partículas nos pontos i e j da malha.

A flexibilidade restrita em termos de malha, que impossibilita o refinamento das classes, é a principal desvantagem deste método. Um segundo ponto desfavorável é a necessidade de desenvolver novas equações para a conservação de outras propriedades da distribuição, que não sejam a massa ou o número de partículas.

Método dos Momentos

Esta abordagem emprega os momentos de distribuição de partículas para simular sistemas dispersos. De uma forma geral, a função de distribuição de partículas é substituída por um conjunto de momentos de baixa ordem. Na maioria das vezes, esses momentos de baixa ordem são suficientes para estimar as propriedades físicas do sistema disperso simulado (FRIEDLANDER, 1977; SILVA, 2008). O momento k de uma distribuição é dado por:

$$\mu_k = \int_0^\infty v^k f(x,v,t)dv \tag{45}$$

Os momentos fornecem informações importantes sobre a descrição estatística da população. O momento de ordem zero, k=0, representa a densidade numérica total da população, isto é, o número total de partículas por unidade de volume. O momento de ordem

1, k=1, representa a conservação das variáveis internas da população e, para a variável interna volume da partícula, os momentos fracionários, k = 1/3 e k = 2/3 fornecem, respectivamente, dados sobre o diâmetro médio e a área superficial média.

O método dos momentos possui vantagens únicas ao simular sistemas dispersos dinâmicos (HULBURT & KATZ, 1964; FALOLA *et al.*, 2013). O MOM (*Method Of Moments*) é uma metodologia que acompanha os momentos de baixa ordem ao invés da própria função de distribuição, não necessitando, portanto, de informações a respeito dela. O MOM convencional acompanha a evolução da simulação em uma forma fechada, ou seja, são equações que só envolvem funções dos momentos.

Entretanto, este método só possui forma fechada para poucos casos. Na maioria dos casos, as equações que descrevem a evolução do momento μ_k envolvem momentos de maior ordem, como μ_{k+1}, deixando o problema sem fechamento, ou com a necessidade de formas matemáticas especiais para equacionar alguns fenômenos para solucioná-lo, tais como: crescimento controlado pela difusão ou evaporação e crescimento simultâneo (SILVA, 2008; FALOLA *et al.*, 2013).

A necessidade de uma formulação para o fechamento constitui-se em uma restrição severa para este método, sendo esta a principal razão de não ter recebido mais atenção da comunidade científica. Entretanto, esta abordagem associada ao método das classes deu origem aos métodos híbridos, que serão abordados no próximo tópico.

Métodos Híbridos

Os métodos híbridos são chamados desta forma pois agregam características dos métodos das classes (discretização da variável interna) e dos momentos. O primeiro método híbrido importante foi o QMOM (*Quadrature Method Of Moments*) desenvolvido por MCGRAW (1997). Neste, as equações dinâmicas para a evolução dos momentos foram substituídas por um conjunto de aproximações baseadas em quadratura. Esta metodologia satisfaz a condição de fechamento para uma ampla faixa de problemas sem a necessidade de assunção de uma forma matemática especial para representar a distribuição ou o tamanho das partículas (SILVA, 2008).

O fechamento baseado em quadratura decorre do fato de que as abscissas (ξ_N) e os pesos (ω_N) são completamente especificados em termos dos momentos de menor ordem da função de distribuição. Ao contrário do método das classes, as abscissas e os pesos podem se

mover livremente por todo o domínio da variável interna, sem restrições, por isso, os pesos e as abscissas podem representar com excelente performance a função de distribuição.

A formulação proposta por MCGRAW (1997) apresenta uma distribuição monovariada não dependente de variáveis externas. A aproximação dos momentos por uma quadratura com n pontos para 2n momentos (k = 0 . . . 2n − 1) é representada pela Equação 46:

$$\mu_k = \int_0^\infty v^k f(x,v,t)dv = \sum_{N=1}^{n} \xi_N^k \omega_N \tag{46}$$

Desta maneira, os primeiros 2n momentos são determinados a partir de n pesos e abscissas.

A finalidade primordial do QMOM é calcular os termos fonte da EBP empregando a quadratura e avaliando os pesos e as abscissas ao longo da evolução dos momentos com o tempo. Uma simulação monovariada do crescimento de gotas de ácido sulfúrico diluído em *spray* foi estudada por MCGRAW (1997). O autor comparou as simulações realizadas pelo método dos momentos com fechamento por série de Laguerre e por quadratura, empregando 6 momentos para representar a distribuição de tamanho com a solução exata do problema. Para os momentos de menor ordem ($\mu_1 - \mu_2$) os dois métodos numéricos acompanharam a solução exata. No entanto, para os momentos de ordem mais elevada ($\mu_5 - \mu_6$) apenas o método QMOM conseguiu reproduzir a solução exata.

O método QMOM foi estendido para incluir o fenômeno de quebra e agregação de partículas por MARCHISIO *et al.* (2003). Os autores analisaram diferentes combinações de condições iniciais de distribuição de partículas e funções de agregação e quebra. Os resultados obtidos para a densidade numérica total de partículas (μ_0) e o tamanho médio das partículas ($d_{43} = \mu_4 / \mu_3$) foram comparados com a solução rigorosa da EBP obtida por VANNI (1999). O número de variáveis escalares necessárias para solucionar a EBP pelo método do QMOM é muito inferior se comparado ao método das classes, considerando a mesma performance para os resultados. A Equação 47 mostra a formulação do QMOM para a evolução de 2n momentos contendo os termos de quebra e agregação obtida por MARCHISIO *et al.* (2003):

$$\frac{\partial \mu_k}{\partial t} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{n}\left[\left(\xi_\alpha + \xi_\beta\right)^k - \xi_\alpha^k - \xi_\beta^k\right]a\left(\xi_\alpha, \xi_\beta\right) + \sum_{\alpha=1}^{n} b(\xi_\alpha)\omega_\alpha\left[\vartheta(\xi_\alpha)\pi_k(\xi_\alpha) - \xi_\alpha^k\right] \tag{47}$$

Tal que $\pi_k(\xi_\alpha)$ é o momento da densidade de probabilidade de quebra e é definida pela Equação 48:

$$\pi_k(\xi_\alpha) = \int_0^{\xi_\alpha} v^k P(v \mid \xi_\alpha) dv \tag{48}$$

Contudo, o método QMOM possui 3 fatores limitantes, quais sejam:

• Na aplicação deste modelo à distribuição multivariada, o método perde sua simplicidade e sua eficiência computacional.

• Não garante uma função de distribuição das partículas.

• Ao acompanhar apenas os momentos de distribuição de partículas, a metodologia não representa de forma realística sistemas polidispersos com forte acoplamento entre as variáveis internas e as velocidades das fases.

Para contornar estas limitações, MARCHISIO & FOX (2005) apresentaram um método derivado do QMOM, denominado DQMOM (*Direct Quadrature Method of Moments*). Este método parte do princípio de acompanhar diretamente as abscissas e os pesos na aproximação da quadratura, ao invés de acompanhar os momentos de distribuição. Da mesma forma que no método QMOM, a função de distribuição é aproximada como o somatório de funções delta de Dirac multidimensionais. A aproximação monovariada para a função de distribuição de tamanho pelo método do DQMOM é mostrada na Equação 49:

$$f(x,v,t) = \sum_{\alpha=1}^{n} \omega_\alpha(x,t)\delta\left[v - \xi_\alpha(x,t)\right] \tag{49}$$

Nesta forma funcional, pode ser analisada como um conjunto de n fases dispersas. Cada fase pode ser caracterizada por um peso ω_α e por uma abscissa ξ_α, que representam a densidade numérica e o valor da propriedade considerada em cada fase dispersa, respectivamente. O método do DQMOM é caracterizado pela substituição da Equação 49 diretamente na Equação 30, que é a equação de balanço populacional. Após algumas manipulações matemáticas, obtém-se a Equação 50:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha=1}^{n} \delta\left[v-\xi_\alpha(x,t)\right]\left[\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t}+\nabla\cdot(u_\alpha\omega_\alpha)-\nabla\cdot\left[D_x\nabla\omega_\alpha\right]\right]- \\
&\sum_{\alpha=1}^{n} \delta'\left[v-\xi_\alpha(x,t)\right]\left[\frac{\partial \varsigma_\alpha}{\partial t}+\nabla\cdot(u_\alpha\varsigma_\alpha)-\nabla\cdot\left[D_x\nabla\varsigma_\alpha\right]\right]+ \\
&\sum_{\alpha=1}^{n} \delta'\left[v-\xi_\alpha(x,t)\right]\xi_\alpha\left[\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t}+\nabla\cdot(u_\alpha\omega_\alpha)-\nabla\cdot\left[D_x\nabla\omega_\alpha\right]\right]- \\
&\sum_{\alpha=1}^{n} \delta''\left[v-\xi_\alpha(x,t)\right]\left\{D_x\omega_\alpha\left(\nabla\xi_\alpha\right)\cdot\left(\nabla\xi_\alpha\right)\right\}=H(x,v,t)
\end{aligned} \tag{50}$$

Tal que: ς_α é a abscissa ponderada, definida por $\varsigma_\alpha=\xi_\alpha\omega_\alpha$; u_α é a velocidade característica associada à fase α e δ′ e δ″ correspondem, respectivamente, à primeira e à segunda derivadas da função generalizada δ.

Pode-se definir θ_α e γ_α como termos fonte das equações de transporte do DQMOM para os pesos e abscissas ponderadas conforme as equações apresentadas a seguir:

$$\frac{\partial \omega_\alpha}{\partial t}+\nabla\cdot\left(u_\alpha\omega_\alpha\right)-\nabla\cdot\left[D_x\nabla\omega_\alpha\right]=\theta_\alpha \tag{51}$$

$$\frac{\partial \varsigma_\alpha}{\partial t}+\nabla\cdot\left(u_\alpha\varsigma_\alpha\right)-\nabla\cdot\left[D_x\nabla\varsigma_\alpha\right]=\gamma_\alpha \tag{52}$$

Define-se, também, o termo C_α:

$$C_\alpha=\left(D_x\omega_\alpha\right)\left(\nabla\xi_\alpha\right)\cdot\left(\nabla\xi_\alpha\right) \tag{53}$$

Ressalta-se que, quando não existe o termo dispersivo, C_α assume valor nulo para todas as fases. Substituindo a Equações 51 e 52 na Equação 50, multiplicando-a por v^k e integrando-a, chega-se à Equação 54:

$$(1-k)\sum_{\alpha=1}^{n}\xi_\alpha^k\theta_\alpha + k\sum_{\alpha=1}^{n}\xi_\alpha^{k-1}\gamma_\alpha = H_k^{(n)} + \overline{C_k} \tag{54}$$

Tal que $H_k^{(n)}$ e $\overline{C_k}$ são os termos fonte e são definidos pelas Equações 55 e 56.

$$H_k^{(n)} = \int_0^\infty \upsilon^k H(x,\upsilon,t)d\upsilon \tag{55}$$

$$\overline{C}_k = k(k-1)\sum_{\alpha=1}^{n}\xi_\alpha^{k-2}C_\alpha \tag{56}$$

A Equação 54 gera um sistema linear de equações, que deve ser solucionado numericamente em cada nó da malha das variáveis externas, em cada passo de tempo, para a obtenção dos termos fonte θ_α e γ_α, necessários para a resolução das Equações 51 e 52. As formulações para os casos de crescimento, dispersão, nucleação, agregação e quebra, homogêneos e monovariados e crescimento com dependência espacial para casos bivariados foram desenvolvidas no trabalho de MARCHISIO e FOX (2005). Considerando-se apenas os efeitos de quebra e agregação de partículas na formulação do DQMOM, o termo fonte pode ser expresso por:

$$\begin{aligned} H_k^{(n)} = {} & \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{n}\left[(\xi_\alpha+\xi_\beta)^k - \xi_\alpha^k - \xi_\beta^k\right]a(\xi_\alpha,\xi_\beta)w_\alpha w_\beta \\ & + \sum_{\alpha=1}^{n} b(\xi_\alpha)\, w_\alpha[\vartheta(\xi_\alpha)\pi_k(\xi_\alpha) - \xi_\alpha^k \end{aligned} \tag{57}$$

FOX (2009) demonstrou que, para EBP's bi ou multivariadas, uma má escolha do conjunto de momentos pode levar à obtenção de abscissas com soluções não únicas e pesos com valores negativos. O autor apresentou um método, sem formulação matemática, para

escolher o conjunto de momentos de modo que a matriz de coeficientes do DQMOM seja não singular e tenha um posto adequado.

Os métodos do QMOM e DQMOM apresentam dificuldades para solucionar a equação de balanço populacional devido à perda de acurácia numérica em problemas cuja magnitude dos momentos variem em uma amplo range. Quando este fato ocorre, o algoritmo PD (que define a inversão dos momentos de distribuição) encontra dificuldades e é incapaz de calcular a quadratura que vai representar o conjunto de momentos (SILVA, 2008). No caso mais específico do DQMOM, o sistema linear de equações criado torna-se mal condicionado, gerando uma matriz singular. Outra dificuldade é que a aproximação das integrais do termo fonte da Equação 55 é realizada por meio de quadraturas de poucos pontos e existem casos nos quais as funções de quebra e agregação são complexas, levando a grandes erros nas aproximações das integrais (FAVERO, 2014).

Com o intuito de contornar as dificuldades de mau condicionamento da matriz do sistema de equações do DQMOM, foram desenvolvidos dois métodos: o MQMOM (Modified QMOM) (SU *et al*., 2007) e o ADQMOM (Adjustable Direct Quadrarure Method of Moments) (SU *et al*., 2008). Esses métodos são variações do QMOM e do DQMOM, respectivamente, e evitam problemas com instabilidades numéricas por meio do cálculo dos momentos com ordens variáveis e fracionados.

ATTARAKIH *et al*. (2009) desenvolveram uma metodologia para solucionar os momentos da equação de balanço populacional com acurácia, conseguindo, ao mesmo tempo, uma representação da distribuição. O método SQMOM (Sectional Quadrature Method of Moments) consiste em discretizar o domínio das variáveis internas e, posteriormente, aplicar o método QMOM para cada sub-intervalo, empregando o algoritmo PD. A melhoria na reprodução da função de distribuição é diretamente proporcional à quantidade de sub-intervalos empregados. Da mesma forma, a acurácia da resolução dos momentos será cada vez melhor quanto maior a quantidade de momentos resolvidos em cada sub-intervalo (ATTARAKIH *et al*., 2009; FAVERO, 2014).

O método DuQMoGeM (Dual Quadrature Method of Generalized Moments), desenvolvido por LAGE (2011), emprega duas regras de quadraturas, sendo uma de alta acurácia para o cálculo das integrais do termo fonte da PBE e uma quadratura de Gauss-Christoffel com a finalidade de discretizar o domínio das variáveis internas. O método foi aplicado para resolver os seguintes sistemas: crescimento puro, agregação pura, quebra pura e

quebra e agregação simultâneas, apresentando resultados com excelente performance. Este método também apresentou acurácia nos resultados quando aplicado em problemas nos quais a frequência de quebra não era descrita de forma correta por uma base polinomial, onde o QMOM e o DQMOM apresentam sérios problemas de acúmulo de erros.

O método EQMOM (Extended Quadrature Method of Moments) (YUAN *et al*., 2012) também emprega duas quadraturas para calcular as integrais do termo fonte da equação de balanço populacional com acurácia. A principal diferença é que este método utiliza as chamadas KDFs (*Kernel Density Function*) ao invés de polinômios para aproximar a distribuição. As KDFs podem ter diferentes distribuições, tais como: Beta, Gamma, Gaussiana etc.

Problemas relacionados à difusão numérica e à falta de conservação dos momentos do método do DQMOM foram evidenciados por BUFFO *et al*. (2012). Os autores aplicaram o método em um sistema de escoamento gás-líquido em tanque agitado, admitindo uma PBE multivariada. A velocidade, o tamanho e a composição das partículas foram empregadas como variáveis internas da PBE. Em um trabalho posterior, BUFFO *et al*. (2013), desenvolveram o método DQMOM-FC (*Direct Quadrature Method of Moments Fully Conservative*), que solucionou os problemas de falta de conservação de momentos e de difusão numérica apresentados pelo DQMOM, que ocorrem em simulações de balanço populacional heterogêneo. Segundo BUFFO *et al*. [2012], o emprego de pesos e abscissas, que são variáveis primitivas, em equações de transporte não pode garantir uma solução na qual os momentos sejam conservados. Nos casos em que os pesos e abscissas apresentem descontinuidades no espaço, mesmo que o conjunto de momentos seja realizável em ambos os lados, o comportamento não conservativo dos momentos se fará presente (MAZZEI *et al.*, 2011; FAVERO, 2014) A idéia por trás do DQMOM-FC é reescrever a forma como os fluxos são calculados, de maneira a garantir a conservação dos momentos. Tratando os fluxos advectivos e difusivos como termos fonte da EBP, é possível obter a conservação dos momentos. A principal diferença para o método DQMOM é exatamente isso, no DQMOM esses termos (advectivo e difusivo) entram implicitamente nas equações de transporte da abscissa e peso ao passo que na metodologia DQMOM-FC isso não ocorre. Desta maneira, o balanço de momentos é satisfeito para um dado volume de controle que tenha entrada e saída de fase dispersa. O procedimento de VIKAS *et al*. (2011) é referenciado por BUFFO *et al.* (2012) para ser empregado nos cálculos dos fluxos advectivos de maneira a garantir momentos realizáveis. Neste método, a difusão e a advecção dos momentos no espaço físico

correspondem aos fluxos dos mesmos pelas faces das células, podendo ser interpretado como um processo de injeção ou extração de partículas em um volume controle definido (FAVERO, 2014).

Todavia, o método do DQMOM continua sendo extensamente empregado na resolução da EBP (SWIDERSKY *et al.*, 2016; BHUTANI *et al.*, 2016; LINÉ & FRANCES, 2016; METZGER & KIND, 2017), justificando o seu emprego na elaboração desta Tese de Doutorado.

2.4.2.4 Formulação de Quebra e Coalescência de McCOY & MADRAS (2003)

A literatura científica traz outras soluções analíticas para a equação de balanço populacional, entre as quais se destacam: a solução analítica para a coagulação de partículas submetidas ao movimento Browniano (MINGLIANG & QING, 2013; YU *et al.*, 2015; HE *et al.*, 2015) empregando o método de resolução TEMOM (*Taylor Series Expansion Method of Moment*); a solução analítica para a coagulação fractal, também para movimento Browniano das partículas (YU *et al.*, 2016); a solução analítica para o fenômeno de quebra da partícula em sistemas contínuos e em batelada empregando o método de decomposição Adomian e o método de iteração variável (HASSEINE *et al.*, 2011; HASSEINE *et al.*, 2015). Apesar disto, a escolha da solução analítica de MCCOY & MADRAS (2003), no presente trabalho, justifica-se pelos seguintes motivos: as soluções analíticas descritas acima são orientadas a partículas regidas pelo movimento Browniano e, além disso, não modelam paralelamente os fenômenos de quebra e agregação.

MCCOY & MADRAS (2003) desenvolveram uma solução analítica para a Equação de Balanço Populacional monovariada e homogênea, definida pela Equação 58:

$$\frac{df(v,t)}{dt} = \frac{1}{2}\int_0^v a(v-v',v')f(v-v',t)dv'$$

$$-\int_0^\infty a(v,v')f(v,t)f(v',t)dv' + \int_v^\infty \vartheta(v')b(v')P(v\,|\,v')f(v',t)dv' - b(v)f(v,t) \qquad (58)$$

As condições iniciais e parâmetros dos modelos de quebra e coalescência definidos foram:

$$f(v,0) = \frac{\mu_0(0)^2}{\mu_1(0)} e^{-\frac{\mu_0(0)}{\mu_1(0)}v} \tag{59}$$

$$\vartheta(v) = 2 \tag{60}$$

$$b(v) = Sv \tag{61}$$

tal que S é uma constante definida pela Equação 59:

$$S = \frac{1}{2}\frac{\Phi(\infty)^2 \mu_0(0)^2 C}{\mu_1} \tag{62}$$

tal que C é uma constante definida pelo modelo de agregação utilizado.

$$a(v - v', v') = C \tag{63}$$

$\Phi(\infty)$ é um parâmetro que controla o efeito de quebra ou agregação dominante e é calculado pela Equação 64:

$$\Phi(\infty) = \frac{N_T(\infty)}{N_T(0)} \tag{64}$$

tal que: $N_T(\infty)$ e $N_T(0)$ representam o número total de partículas nos domínios final e inicial do processo, respectivamente.

Logo, para um processo de quebra dominante, tem-se $\Phi(\infty) > 1$ e para processos com coalescência dominante, $\Phi(\infty) < 1$.

A probabilidade de distribuição de tamanho para as partículas filhas (P(v|v') é expressa pela Equação 65:

$$P(v \mid v') = \frac{1}{v'} \tag{65}$$

MCCOY & MADRAS (2003) empregaram o número inicial e o volume total de partículas no processo definidos pelas Equações 66 e 67. Vale lembrar que no modelo proposto pelos autores não foi estabelecida a troca de massa entre as fases dispersa e contínua.

Desta forma, o volume total da fase dispersa é constante ao longo do processo de quebra e coalescência.

$$\mu_0(0) = \int_0^\infty f(x,v,t)dv \tag{66}$$

$$\mu_1 = \int_0^\infty vf(x,v,t)dv \tag{67}$$

Define-se, então, uma série de variáveis adimensionais que serão empregadas para obtenção da nova equação de balanço populacional, da solução analítica transiente e da função de distribuição dos momentos, em termos adimensionais. As variáveis adimensionais são expressas pelas Equações 68-71:

$$\tau = \mu_0(0)Ct \tag{68}$$

$$\phi(\eta,\tau) = \frac{f(v,t)\mu_1}{\left(\mu_0(0)\right)^2} \tag{69}$$

$$\eta = \frac{v\mu_0(0)}{\mu_1} \tag{70}$$

$$\Phi(\tau) = \mu_0(0)Ct \tag{71}$$

Empregando-se estas variáveis descritas acima, a equação de balanço populacional (Equação 58) se torna:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\phi(\eta,\tau)}{\partial t} &= \frac{1}{2}\int_0^\eta \phi(\eta-x,\tau)\phi(x,\tau)dx - \phi(\eta,\tau)\Phi(\tau) + \\ &\left[\Phi(\infty)\right]^2\int_\eta^\infty \phi(x,\tau)dx - \frac{\eta}{2}\left[\Phi(\infty)\right]^2\phi(\eta,\tau)\end{aligned} \tag{72}$$

Utilizando-se a seguinte condição inicial

$$\phi(\eta,0) = e^{-\eta} \tag{73}$$

chega-se à solução analítica transiente de McCOY & MADRAS (2003):

$$\phi(\eta,\tau) = \Phi(\tau)^2 e^{-\eta\Phi(\tau)} \tag{74}$$

tal que:

$$\Phi(\tau) = \Phi(\infty)\left[\frac{1+\Phi(\infty)\tanh(\Phi(\infty)\tau/2)}{\Phi(\infty)+\Phi(\infty)\tanh(\Phi(\infty)\tau/2)}\right] \tag{75}$$

$\Phi(\infty)$ é a solução adimensional, no estado estacionário, para a densidade numérica de partículas.

O cálculo dos momentos de distribuição adimensionais é expresso pela Equação 76:

$$\mu_k^{(a)}(\tau) = \left[\frac{\Phi(\infty)+\tanh\left(\frac{\Phi(\infty)\tau}{2}\right)}{\Phi(\infty)(1+\Phi(\infty))\tanh\left(\frac{\Phi(\infty)\tau}{2}\right)}\right]^{k-1}\Gamma(k+1) \tag{76}$$

tal que a condição inicial para a distribuição adimensional dos momentos é dada pela Equação 77:

$$\mu_k^{(a)}(0) = \Gamma(k+1) \tag{77}$$

A Equação 76 foi empregada nesta Tese de Doutorado para verificação da implementação do método do *DQMOM* realizada no *software* CFD *OpenFOAM*. Maiores detalhes do procedimento de verificação serão descritos na seção de Metodologia.

2.5 O *OpenFOAM*

O *software* empregado no desenvolvimento e nas simulações desta Tese de Doutorado foi o *OpenFOAM* (*Open Field Operation and Manipulation*). Este é um *software* de código aberto, de domínio público por meio da licença GPL (*Gnu Public Licence*).

O *software OpenFOAM* apresenta algumas características que se traduzem em vantagens para a sua aplicação, quais sejam (FAVERO, 2014):

• Apresentar código aberto, com licenças gratuitas e permitir ao usuário desenvolver, verificar e manipular o código.

• Programação em Linguagem C++, orientada a objetos, que facilita a criação de novos códigos, uma vez que propriedades como abstração e encapsulamento de dados, herança e polimorfismo, facilitam a usabilidade e a expansão do *software*.

• Possuir um gerador de malhas e um visualizador de resultados.

• Permitir o uso de processamento paralelo, ferramenta útil no caso de grandes simulações.

• Empregar malhas poliédricas e adaptativas ou móveis.

• Apresentar a possibilidade de exportação e importação de dados.

• Possuir uma grande quantidade de *solvers* disponíveis, conferindo flexibilidade ao usuário.

Como desvantagens do *software OpenFOAM* pode-se citar a ausência de uma interface gráfica e a falta de uma boa documentação, ou seja, uma descrição detalhada da modelagem e das metodologias disponíveis. A seguir aboradaremos as etapas para a criação de uma simulação no *OpenFOAM*: Estrutura dos casos, pré-processamento, resolução numérica e pós-processamento.

2.5.1 Estrutura dos Casos

Cada caso a ser simulado no *OpenFOAM* obedece uma estrutura básica de diretórios onde são depositados os arquivos que irão configurar o caso. Estes arquivos contém as informações necessárias para simular o caso, desde a configuração geométrica, detalhes da malha empregada, condições de contorno, parâmetros dos métodos numéricos utilizados bem como as propriedades físicas dos fluidos ou matérias empregados no problema. A Figura 2 ilustra a estrutura dos diretórios, representada para um caso genérico (OpenCFD, 2017).

O diretório principal, com o nome do caso, é a raiz do caso estudado e dentro dele estão incluídos os demais diretórios e arquivos empregados na configuração do caso. Segue uma descrição resumida sobre cada um deles (FAVERO, 2009; OpenCFD, 2017).

- *System*: este diretório possui os arquivos associados ao procedimento de resolução do caso. Nele estão contidos pelo menos três arquivos essenciais: *controlDict*,

onde estão inseridos os parâmetros de controle da simulação (lembrar que estes parâmetros não dizem respeito aos parâmetros dos controladores que serão abordados mais a frente) tais como, o tempo de inicio e fim da simulação, passo de tempo, controle de escrita de dados, pontos de monitoramento etc. *fvSchemes* que relaciona as aproximações de discretização por volumes finitos empregadas na solução do problema; *fvSolution*, no qual os métodos empregados para a resolução do sistema de equações lineares e suas tolerâncias são relacionados, bem os parâmetros de controle do algoritmo de solução.

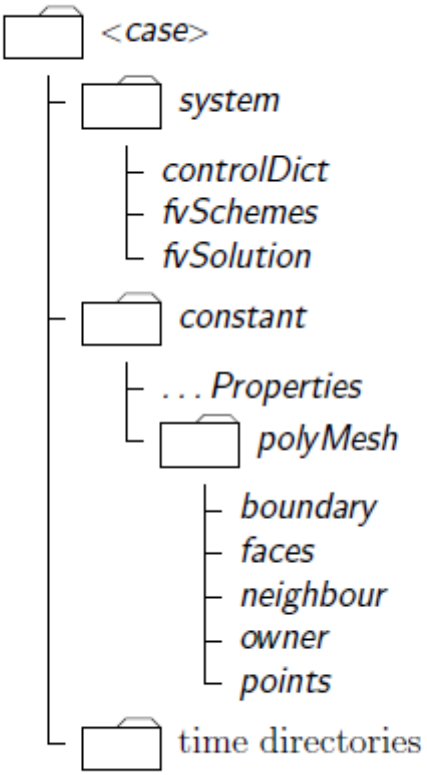

Figura 2. Estrutura de diretórios de um caso genérico (OpenCFD, 2017);

- *Constant*: contém os arquivos de propriedades físicas referentes ao caso, tais como: *transportProperties*, *turbulenceProperties*. A descrição completa e detalhada da malha deve estar presente no diretório *polyMesh* (sub-diretório do diretório *constant*), nos arquivos *boundary*, *faces*, *neighbour*, *owner* e *points*, que podem

ser criados e importados a partir de *softwares* geradores de malha ou por meio do comando *blockMesh*, que irá gera-los a partir do arquivo *blockMeshDict* (que também contém a descrição detalhada da malha);

- *Time Directories*: contêm os arquivos individuais de dados para os campos das variáveis tratadas no caso, por exemplo, campos de velocidade, temperatura, pressão etc. Estes dados são os valores iniciais e as condições de contorno especificadas pelo usuário, obrigatoriamente, no instante inicial da simulação e também os resultados transientes da simulação, escritos em arquivo pelo *OpenFOAM*, de acordo com o tempo de escrita (*writeInterval*) definido no arquivo *controlDict*. Para todos os casos simulados, o *OpenFOAM* precisa que o usuário forneça os campos iniciais das variáveis de simulação, mesmo para simulações estacionárias. Durante a simulação, pastas referentes ao instante simulado em que os dados são escritos são geradas. Por exemplo, ao escrever os dados referentes ao instante t = 2.0 s de uma simulação qualquer, o *OpenFOAM* cria um diretório intitulado 2.0 e escreve os resultados pertinentes ao caso dentro deste diretório.

2.5.2 Pré-Processamento

O pré-processamento no *OpenFOAM* consiste na definição dos arquivos contendo o controle das condições de simulação e as propriedades físicas, além dos modelos adicionais do problema. As informações inseridas no arquivo *controlDict* permitem o controle do: tempo de simulação, passo de tempo, intervalo de escrita de resultados etc. Contudo, outros arquivos de controle de simulação podem ser adicionados ao diretório system, como por exemplo arquivo de controle das simulações em paralelo, o *decomposeParDict*. Outro fato de grande relevância é a especificação das condições iniciais e de contorno, que é realizado em arquivos com o mesmo nome da variável (U para o caso da velocidade, por exemplo) dentro do diretório de tempo, para o tempo inicial 1000, tem-se o diretório 1000. Para as condições iniciais, o *OpenFOAM* permite a entrada tanto de um campo uniforme como não uniforme (FAVERO, 2009). Estão implementadas no *OpenFOAM*, as principais condições de contorno, tais como: *inlet* (entrada de massa), outlet (saída de massa), *wall* (parede fixa ou móvel), *simetry* (simetria) entre outras (OpenCFD, 2017). No entanto, é permitido ao usuário criar a sua própria condição de contorno, caso deseje. As condições de contorno também

podem ser uniformes ou não uniformes. Deve-se também, se o caso exigir, definir as propriedades físicas e os modelos adicionais empregados na simulação em arquivos específicos, tais como o *viscoelasticProperties*.

2.5.3 Etapa de Resolução Numérica

Nesta etapa é realizada a solução numérica das equações desenvolvidas no modelo. O arquivo *solver* de um pacote de CFD é a parte responsável pela resolução numérica do problema. O *solver* possui algoritmos de linearização e de resolução do sistema de equações, de acordo com parâmetros pré-definidos nos arquivos do caso e especificados na etapa de pré-processamento. Em resumo, os *solvers* lêem as informações da simulação, solucionam as equações por meio de metodologias de resolução específicas para cada caso e geram arquivos de resultados para pós-processamento (FAVERO, 2009; OpenCFD, 2017). O *OpenFOAM* permite que o usuário acompanhe os resíduos das equações e também o número de *Courant* que é um parâmetro de estabilidade importante da simulação, este parâmetro será explicado com mais detalhes mais adiante. A saída dos valores pode ser em tela ou em arquivo (log). O tempo computacional do cálculo também é retornado ao usuário, tanto o tempo de máquina (*executionTime*) e o tempo de relógio, cronologia normal, definido como *ClockTime* (OpenCFD, 2017).

O *OpenFOAM* apresenta uma vasta diversidade de *solvers* que já estão incluídos no pacote original. Se o usuário optar por empregar um modelo que não se encontra na versão original é permitido a ele criar um novo *solver* para seu caso específico.

2.5.4 Pós-Processamento

O *OpenFOAM* possui uma ferramenta para o pós-processamento dos resultados denominada de *paraFoam* que foi adaptada do *software Paraview* (*KITWARE*, 2017).

As ferramentas básicas necessárias para a visualização dos resultados estão inseridas no *paraFoam*, tais como a criação de gráficos de contorno, vetores e linhas de fluxo. Pode-se ainda criar animações para a análise do transiente dos resultados.

Se algum usuário necessitar empregar outros *softwares* de visualização devido aos recursos mais avançados que estes dispõem ou mesmo por comodidade, é possível converter os resultados fornecidos pelo *OpenFOAM* para formatos lidos por outros *softwares*, como por

exemplo: **FLUENT**, **Fieldview**, **Ensight**, entre outros. Esta conversão é possível devido ao uso de ferramentas fornecidas pelo *OpenFOAM*. Existe ainda uma utilidade de mudança dos resultados do *OpenFOAM* para o formato VTK, que é um *software* livre para o processamento de dados e renderização de imagens, possibilitando a leitura dos dados em qualquer visualizador que use VTK, como por exemplo o próprio *software Paraview* (FAVERO, 2009; OpenCFD, 2017).

2.5.5 OpenFOAM – Desenvolvimento e Metodologia Numérica

O *OpenFOAM* permite a construção de *solvers* e bibliotecas, desde que o usuário tenha conhecimento em linguagem C++, CFD e uma noção básica da estrutura do *software* (operadores, classes e funções importantes). O trabalho de JASAK (1996) apresenta detalhes de vários aspectos sobre a metodologia numérica, tais como a discretização, condições de contorno e teoria dos algoritmos implementados, como o acoplamento pressão-velocidade, correção dos fluxos em malhas não estruturadas etc.

A filosofia de orientação a objetos empregada no *OpenFOAM* possibilitou a criação de tipos de dados próximos aos utilizados na mecânica do contínuo. As equações da mecânica do contínuo e os conceitos de tensores, vetores, escalares e seus respectivos campos são usados com uma sintaxe próxima à empregada na notação matemática usual. Este fato facilita não só a implementação, como também o desenvolvimento de novos *solvers*.

O *OpenFOAM* emprega o método dos volumes finitos para discretizar os campos geométricos, sendo as bibliotecas *fvm* (*finiteVolumeMethod*) e *fvc* (*finiteVolumeCalculus*) responsáveis pela definição das informações necessárias para tal procedimento. Cada parcela das equações diferenciais parciais é representada individualmente, empregando as classes *fvm* e *fvc* que definem funções estáticas para representar os operadores matemáticos diferenciais, como: gradiente, divergente e laplaciano.

As bibliotecas *fvm* e *fvc* possuem o mesmo propósito, mas suas aplicações são bastante diferentes. A biblioteca *fvc* agrupa funções que calculam operações explícitas de discretização, isto é, as operações realizadas com esta classe retornam explicitamente um campo geométrico (classe *geometricField* <*Type* >). Ao passo que, a classe *fvm* reúne funções que realizam operações implícitas de discretização pelo método dos volumes finitos, cujos resultados são armazenados em matrix definida pela classe *fvMatrix* < *Type* >. A Classe *geometricField* <*Type* > aloca as variáveis de campo e seus contornos em posições específicas da malha tais como centro, vértices ou faces dos volumes de controle. O sistema linear

construído pela classe *fvMatrix* < *Type* > é resolvido pela função de classe *solve.* Da mesma forma como os métodos e funções de interpolação usadas na discretização das equações, o método numérico escolhido para a solução do sistema linear é definido em tempo de execução. Desta forma, o usuário tem livre escolha sobre os métodos empregados por meio dos arquivos de configuração do caso simulado, ver Figura 2 (SILVA, 2008).

A próxima seção abordará o parâmetro de estabilidade: Número de Courant (Co).

2.5.6 O Número de Courant (Co)

Define-se o número de *Courant* (Co), que é um parâmetro importante para a avalição de simulações CFD. O número de *Courant* é definido pela Equação 78:

$$Co = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \tag{78}$$

tal que: u é a velocidade do fluido, Δt é o passo do tempo empregado na simulação e Δx é o intervalo no eixo entre as células.

Fisicamente, o número de Courant representa a razão entre o passo de tempo e o tempo de convecção característico ($u / \Delta x$), que é o tempo necessário para que uma perturbação seja transportada por convecção ao longo da distância Δx (FERZIGER & PERIC, 2011). Desta forma, é desejável que o número de *Courant* seja o menor possível, sendo imprescindível que seja menor que 1 (FERZIGER & PERIC, 2011; MOUKALLED *et al.*, 2016).

2.6 Controle de Processos

2.6.1 Introdução

Durante sua operação, na presença de perturbações externas, as plantas de processo precisam satisfazer a uma série de requisitos, quais sejam (BUCKLEY *et al.*, 1985; LUYBEN, 1992; STEPHANOPOULOS, 1984; MARLIN, 2000; SEBORG *et al.,* 2011; CAMACHO & BORDONS, 2007; CAMPOS *et al.,* 2013; RAWLINGS & MAYNE, 2015):

• Segurança - requisito primário de uma planta de processo.

• Especificação de produtos - a planta deve produzir os produtos desejados de acordo com as especificações projetadas.

• Normas ambientais - a planta precisa respeitar as legislações ambientais vigentes quanto à temperatura, concentração de contaminantes, e o fluxo dos seus efluentes etc.

• Restrições operacionais - vários equipamentos empregados em plantas químicas possuem restrições operacionais inerentes à sua operação, por exemplo, torres de destilação que não podem operar com vazões elevadas para não colapsar o seu esquema de separação.

• Econômicos - a planta deve operar de acordo com as condições de mercado, de acordo com a matéria-prima disponível e a demanda dos produtos finais.

Todos os critérios acima necessitam de monitoramento contínuo da operação e de uma atuação de controle de processos para mantê-los dentro dos parâmetros desejados. Esta seção aborda as técnicas clássicas de controle de processo de maneira sucinta e, de forma mais detalhada, o controle preditivo (MPC).

2.6.2 Leis de Controle Clássicas

As leis dos controladores *feedback*, discretizadas, podem ser vistas nas equações 79 a 82 (SEBORG *et al.*, 2011):

$$\Delta u_k = K_c\left[\left(e_k - e_{k-1}\right)\right] \tag{79}$$

$$\Delta u_k = K_c\left[\left(e_k - e_{k-1}\right) + \frac{\Delta t}{\tau_I} e_k\right] \tag{80}$$

$$\Delta u_k = K_c\left[\left(e_k - e_{k-1}\right) + \frac{\Delta t}{\tau_I} e_k + \frac{\tau_D}{\Delta t}\left(e_k - 2e_{k-1} + e_{k-2}\right)\right] \tag{81}$$

$$\Delta u_k = \frac{K_c}{\tau_I}\left[\left(\tau_I + \tau_D\right)\left(e_k - e_{k-1}\right) + \Delta t e_k + \frac{\tau_D \tau_I}{\Delta t}\left(e_k - 2e_{k-1} + e_{k-2}\right)\right] \tag{82}$$

tal que: Δu é o sinal de saída do controlador, K_C é a constante proporcional, τ_I é a constante de tempo integral, τ_D é a constante de tempo derivativa, e_k é o erro do *kth* instante de amostragem para k = 1, 2... da variável controlada e Δt é o período de amostragem.

As equações 79, 80, 81 e 82 representam as leis de controle, , na forma de velocidade para os controladores Proporcional (P), Proporcional Integral (PI) e PID paralelo e em série, respectivamente. As Equações 79, 80 e 81 já se encontravam previamente implementadas no *software OpenFOAM*. A Equação 82 (PID–Série) foi implementada para esta Tese de Doutorado.

2.6.3 Lei de Controle Preditivo (MPC)

2.6.3.1 Introdução

A manutenção da boa qualidade dos produtos em uma unidade produtiva depende de uma rápida adaptação às perturbações do processo. Por esta consideração, a solução comumente empregada para minimizar a operação transiente de uma unidade de processo é a implementação de técnicas avançadas de controle.

O controle preditivo designa métodos de controle no qual se emprega (SEBORG *et al.,* 2011; CAMACHO & BORDONS, 2007; CAMPOS *et al.,* 2013):

- O uso explicito de um modelo para predizer a saída do processo a instantes de tempo futuros (horizonte de predição), daí a denominação de *Model Predictice Control* (MPC) (MARANGONI & MACHADO, 2007; WERLE *et al.*, 2009)
- Cálculo de uma sequência de controle que minimiza uma função objetivo;
- Com atualização *feedback* o valor medido é realimentado.

2.6.3.2 Histórico

A primeira geração de sistemas MPC, *Dynamic Matrix Control* (DMC), foi desenvolvida de maneira independente na década de 1970 por dois grupos pioneiros de pesquisa industrial: uma divisão da Shell composta por CUTLER & RAMAKER (1980) que desenvolveram o DMC propriamente dito e outra por RICHALET *et al.* (1978) que

elaboraram o MAC (*Model Algorithmic Control*), esses algoritmos de controle possuem capacidades e estruturas similares.

Posteriormente, uma técnica adaptativa MPC, denominada de *Generalized Predictive Control* (GPC), foi desenvolvida por CLARKE *et al.* (1987) e recebeu uma considerável atenção da comunidade científica (SEBORG *et al.*, 2011).

A técnica do MPC tem sido objeto de estudo tanto industrial quanto acadêmico resultando em muitas extensões da metodologia inicial e analises teóricas com visões sobre as suas virtudes e fraquezas (SEBORG *et al.*, 2011; RICHALET & O'DONOVAN, 2009; KANO & OGAWA, 2009; DARBY & NIKOLAOU, 2012; ELLIS *et al.*, 2014; CAMACHO & BORDONS, 2007; PISTIKOPOULOS & DIANGELAKIS, 2016).

O MPC teve um grande impacto prático na indústria. QIN & BADGWELL (2003) reportaram um número total de aplicações práticas em refinarias e plantas químicas superior a 4500, no fim do ano de 1999, com real tendência de crescimento acentuado em aplicações industriais em geral na última década (CAMACHO & BORDONS, 2007; DARBY & NIKOLAOU, 2012; LU, 2015). Em unidades de processos petro-químicos, tem sido largamente escolhido e aplicado para lidar com o difícil problema de controle multivariável e com restrições de desigualdade e de igualdade (SEBORG *et al.*, 2011; ELLIS *et al.*, 2014). Dentre as principais aplicações industriais pode-se citar (LUYBEN, 1992; MACIEJOWSKI, 2002; SEBORG *et al.,* 2011; CAMACHO & BORDONS, 2007; CAMPOS *et al.,* 2013) :

- Unidades de FCC ("fluid catalytic cracking");
- Reator de hidrocraqueamento;
- Colunas de destilação;
- Reatores tipo batelada;
- Extrusores de polímeros plantas de olefinas;
- Processos na indústria de popa e papel;
- Geradores de vapor etc.

Esta técnica provê uma solução integrada para controlar sistemas, podendo promover a interação com variáveis dinâmicas e complexas, dotadas ou não de restrições. O aspecto importante é a sua habilidade para lidar com graus de liberdade que podem surgir quando existem mais ou menos entradas (variáveis manipuladas) que saídas (variáveis controladas), ou quando zonas limite para as variáveis controladas são empregadas, situação típica.

(DOMA *et al.*, 1996; CAMACHO & BORDONS, 2007; ASSANDRI *et al.*, 2013; DARBY & NIKOLAOU, 2012; DARBY & NIKOLAOU, 2014; RAWLINGS & MAYNE, 2015).

O MPC oferece as seguintes vantagens em relação às demais técnicas: o modelo do processo captura as interações estáticas e dinâmicas entre as variáveis de entrada, saída e perturbações do processo; restrições nas variáveis de entrada e saída são consideradas de maneira sistemática; os cálculos dos incrementos de controle podem ser coordenados de acordo com os cálculos dos *set-points* ótimos e predições acuradas do modelo podem prover alarmes de advertência para eventuais problemas e frente a eventuais falhas e manter o melhor controle possível (SEBORG *et al.*, 2011; DARBY & NIKOLAOU, 2012; MACIEJOWSKI, 2002; RAWLINGS & MAYNE, 2015).

A Figura 3 ilustra a estratégia de controle do MPC, com horizonte de predição P e horizonte de controle M. Verificam-se as informações passadas das ações de controle (u) e dos valores medidos da variável controlada y e os valores preditos, nos instantes futuros, pelo modelo.

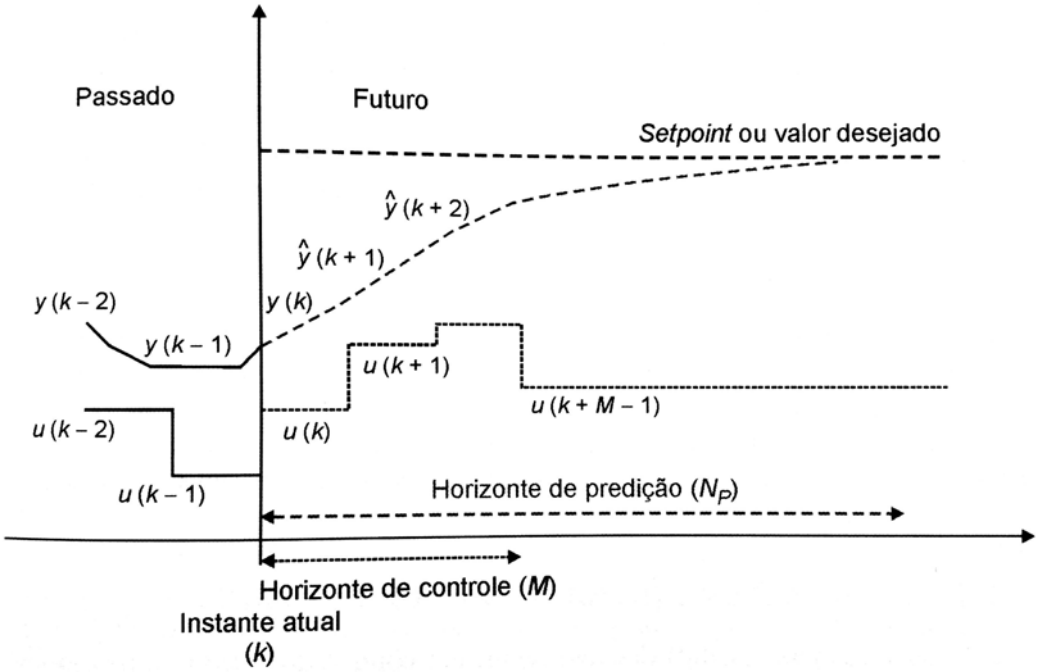

Figura 3. Ação do controlador MPC com horizonte de controle (M) e de predição (P) (CAMPOS *et al.*, 2013).

Pode-se resumir a estratégia do controle preditivo nos passos a seguir (SOETERBOEK, 1992 LUYBEN, 1992; MACIEJOWSKI, 2002; SEBORG *et al.,* 2011; CAMACHO & BORDONS, 2007; CAMPOS *et al.*, 2013; RAWLINGS & MAYNE, 2015):

1. Com base em informações passadas de u e y (ver Figura 3) e em uma projeção para as ações de controle futuras, a saída de um modelo de processo é predita ao longo do horizonte de predição (P);
2. Uma sequência de "*set-points*" futuros, também denominada de trajetória de referência, é calculada;
3. Uma função objetivo quadrática apropriada de erros futuros e ações de controle é minimizada para fornecer uma sequência de ações de controle futuras;
4. Apenas a primeira ação de controle é implementada, metodologia denominada de horizonte descendente.

A Figura 4 representa um esquema da estrutura básica do cálculo do controle preditivo. As entradas e saídas passadas alimentam o modelo do processo que calcula a predição das variáveis. Os erros futuros calculados a partir do valor predito e da trajetória de referência alimenta o otimizador conjuntamente com as restrições e a função objetivo que tem por finalidade minimizar os erros calculados. Por fim o otimizador calcula as entradas futuras (ação de controle) para o modelo, o procedimento é repetido até a convergência, que deve ocorrer dentro do tempo de amostragem, quando a primeira ação de controle é implementada no processo.

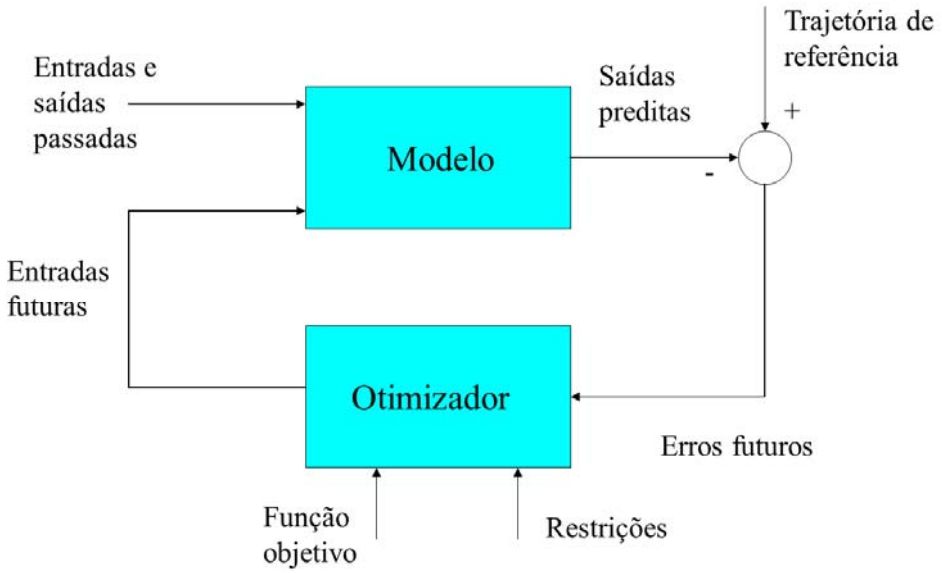

Figura 4. Estrutura básica dos cálculos no MPC (CAMACHO & BORDONS, 2007)

Um dos modelos de processo empregados para a predição da variável controlada utilizada no controlador MPC é o modelo de resposta ao impulso, também conhecida como modelo de sequência ponderada (*Weighting Sequence Model*) ou modelo de Convolução. A função de transferência de um processo, ver Figura 5, é um modelo linear do mesmo que correlaciona as entradas com as saídas medidas ou inferidas da unidade de processo (CAMPOS *et al.,* 2013).

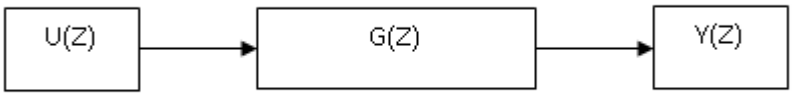

Figura 5. Representação da Função de Transferência do Processo

A função de transferência de um processo em malha aberta pode ser representada no domínio z, pela Equação 83 (DESHPANDE, 1985; CAMPOS *et al.*, 2013):

$$G(z) = \frac{Y(z)}{U(z)} \tag{83}$$

tal que Y(z) e U(z) são as variáveis de saída e entrada do processo, respectivamente, no domínio z.

Para uma função degrau unitário:

$$U(z) = 1 + z^{-1} + z^{-2} + z^{-3} + \ldots = \frac{1}{1 - z^{-1}} \qquad \left|z^{-1}\right| < 1 \tag{84}$$

Pela substituição da Equação 84 na Equação 83, chega-se à Equação 85:

$$G(z) = Y(z)_{Degrau}(1 - z^{-1}) \tag{85}$$

Se a entrada fosse uma função de impulso unitário:

$$U(z) = 1 \tag{86}$$

A função de transferência do processo (Equação 83) seria:

$$G(z) = Y(z)_{\text{Im}\,pulso} \tag{87}$$

Igualando as equações 85 e 87, obtém-se que:

$$Y(z)_{\text{Im}\,plulso} = (1 - z^{-1})Y(z)_{Degrau} \tag{88}$$

A resposta discreta de um processo a um degrau unitário na entrada pode ser representada por meio das suas ordenadas s_j (Ver Figura 6):

$$Y(z)_{Degrau} = s(1)z^{-1} + s(2)z^{-2} + \ldots \tag{89}$$

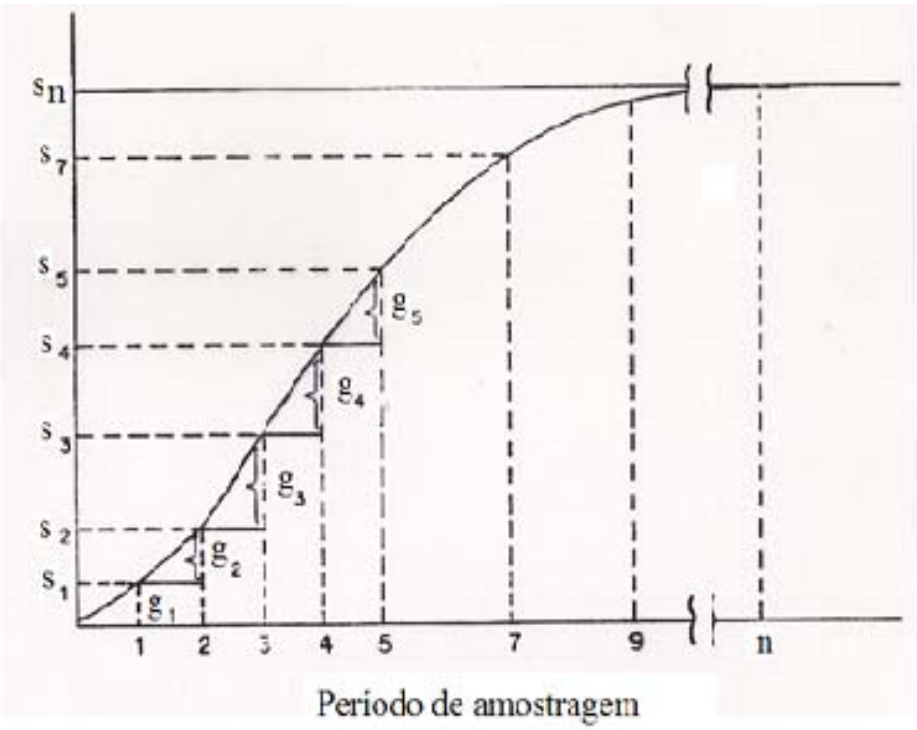

Figura 6. Resposta do processo frente a uma perturbação em degrau unitário na entrada (DESHPANDE, 1985).

A partir das Equações 87, 88 e 89, chega-se à Equação 90 (DESHPANDE, 1985):

$$\begin{aligned} G(z) = Y(z)_{\text{Im}\,pulso} &= (1 - z^{-1})(s(1)z^{-1} + s(2)z^{-2} + \ldots) \\ &= s(1)z^{-1} + (s(2) - s(1))z^{-2} + \ldots \\ &= g(1)z^{-1} + g(2)z^{-2} + \ldots \end{aligned} \tag{90}$$

A sequência de números (g_i i=1,2…N) é chamada de coeficientes da resposta ao impulso. Por outro lado, a sequência de números (s_i, i=1,2…N) é chamada de coeficientes da resposta ao degrau.

A Equação 90 mostra que, a partir da diferença dos coeficientes obtidos pela resposta do processo frente a uma perturbação em degrau unitário na alimentação, pode-se obter os coeficientes da resposta do processo frente a um distúrbio tipo impulso unitário na entrada. Assim, a Equação 91 pode ser escrita (LUYBEN, 1992; SEBORG *et al.,* 2011):

$$g(j) = s(j) - s(j-1) \tag{91}$$

As ordenadas de respostas ao impulso e degrau unitários, g e s respectivamente, podem ser observadas na Figura 6.

Pela própria definição da Transformada z, é possível obter a resposta de um processo a um conjunto de perturbações em degrau simplesmente pelo princípio de superposição, que afirma que a resposta a uma soma de várias funções é igual à soma das respostas às funções individuais agindo separadamente. Um conjunto de mudanças em degrau pode ser modelado pela Equação 92 (DESHPANDE, 1985):

$$U(z) = \sum_{i=0}^{\infty} u(i)z^{i} = u_0 z^0 + u_1 z^{-1} + u_2 z^{-2} + \ldots \tag{92}$$

tal que: u_0 é a magnitude do degrau na entrada do sistema, que ocorre no instante t=0; u_1 é a magnitude do degrau na entrada, que ocorre no instante t=T, onde T é o período de amostragem (DESHPANDE, 1985; CAMPOS *et al.,*2013).

Pode-se reescrever a Equação 83 da seguinte forma (STEPHANOPOULOS, 1984; MACIEJOWSKI, 2002):

$$Y(z) = G(z) \cdot U(z) \tag{93}$$

Substituindo-se G(z) e U(z) a partir das Equações 90 e 92, respectivamente, na Equação 93, obtém-se a Equação 94:

$$\begin{aligned} Y(z) &= \left(g(1)z^{-1} + g(2)z^{-2} + \ldots\right)\left(u_0 z^0 + u_1 z^{-1} + u_2 z^{-2} + \ldots\right) \\ &= g(1)u_0 z^{-1} + \left(g(2)u_0 + g(1)u_1\right)z^{-2} + \ldots + \left(g(n)u_0 + g(n-1)u_1 + \ldots + g(1)u_{n-1}\right)z^{-n} + \ldots \end{aligned} \tag{94}$$

De maneira equivalente, Y(z) pode ser escrito da seguinte forma:

$$Y(z) = \hat{y}_1 z^{-1} + \hat{y}_2 z^{-2} + \hat{y}_3 z^{-3} + \ldots \tag{95}$$

Tal que $\hat{y}$ é o valor predito.

A comparação entre as Equações 94 e 95, revela que:

$$\hat{y}_{k+1} = g(1)u_k + g(2)u_{k-1} + \ldots + g(k)u_1 + g(k+1)u_0 \tag{96}$$

Pode-se reescrever a Equação 96, em uma forma alternativa (CAMPOS *et al.,* 2013):

$$\hat{y}_{k+1} = \sum_{i=1}^{n} g(i)u_{k+1-i} \tag{97}$$

tal que: $u_{k+1-i}=0$ para i>k+1. A Equação 94 permite que se proceda a predição de y para um trem de degraus passados.

Reescrevendo para y(k), tem-se que:

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^{n} g(i)u_{k-i} \tag{98}$$

A representação entrada/saída descrita pela Equação 98 é chamada de modelo FIR (*Finite Impulse Response*) , modelo de Sequência Ponderada (*Weighting Sequence Model*) ou modelo de Convolução (SOETERBOEK, 1992; SEBORG *et al.,* 2011; CAMACHO & BORDONS, 2007).

Substituindo na Equação 98, o vínculo entre os coeficiente da resposta ao degrau unitário e os coeficientes da resposta ao impulso, representada pela Equação 91. obtêm-se a Equação 99:

$$\hat{y}_{k+1} = \sum_{i=1}^{n} \left(s(i) - s(i-1)\right) u_{k+1-i} \tag{99}$$

Desenvolvendo o somatório, têm-se que:

$$\begin{aligned} y_{k+1} = \sum_{i=1}^{n} \left(s(i) - s(i-1)\right) u_{k+1-i} = s(1)u_k - s(0)u_k + s(2)u_{k-1} - \\ - s(1)u_{k-1} + \ldots + s(n-1)u_{k+2-n} - s(n-2)u_{k+2-n} - s(n-1)u_{k+1-n} \end{aligned} \tag{100}$$

Como s(0)=0 e $\Delta u(i) = u(i) - u(i-1)$, a Equação 100 pode ser reescrita como:

$$\hat{y}_{k+1} = \sum_{i=1}^{n} s(i) \Delta u_{k+1-i} + s(n) u_{k+1-n} \tag{101}$$

O modelo de resposta ao degrau, representado pela Equação 101, também chamado de *Finite Step Response Model* (FSR), tem grande aceitação pela facilidade para implementação de degraus na prática (SOETERBOEK, 1992; SEBORG *et al.,* 2011; CAMACHO & BORDONS, 2007).

De posse do modelo de predição a ser utilizado no controle preditivo, duas abordagens de controle MPC serão apresentadas: o algoritmo simplificado de DESHPANDE (1985) e o controle DMC com horizonte P de predição.

DESHPANDE (1985) desenvolveu um dos algoritmos de controle MPC implementados na presente Tese no *OpenFOAM*. Esse algoritmo simplificado possui um único passo de predição. A escolha desta metodologia se justifica pela sua facilidade de implementação e pelo esperado baixo custo computacional requerido para o cálculo do incremento de controle.

2.6.3.3 Algoritmo Simplificado do MPC

Inicialmente, apresenta-se as expressões para o cálculo dos valores alvo e corrigido da variável de saída (y) frente à uma perturbação em degrau na entrada realizada em um instante futuro.

Primeiramente, faz-se necessário reescrever a Equação 101 para $\hat{y}_k$ (DESHPANDE, 1985):

$$\hat{y}_k = \sum_{i=1}^{n} s(i)_i u_{k-i} \tag{102}$$

Subtraindo a Equação 102 da Equação 101, obtém-se:

$$\hat{y}_{k+1} - \hat{y}_k = \sum_{i=1}^{n} s(i) u_{k+1-i} - \sum_{i=1}^{n} s(i) u_{k-i} = \sum_{i=1}^{n} s(i)\left(u_{k+1-i} - u_{k-i}\right) \tag{103}$$

Considerando a seguinte definição (SEBORG *et al.*, 2011):

$$\Delta u_k = u_k - u_{k-1} \tag{104}$$

E, substituindo a Equação 104 na Equação 103, chega-se à Equação 105 (DESHPANDE, 1985):

$$\hat{y}_{k+1} = \hat{y}_k + \sum_{i=1}^{n} s(i) \Delta u_{k+1-i} \tag{105}$$

Para obtenção de uma estimativa acurada para a variável de saída em um instante futuro, o valor predito precisa ser corrigido nos instantes de amostragem. Uma correção empregada e largamente aceita é descrita pela Equação 106 (MEHRA *et al.*, 1980):

$$y^c{}_{k+1} = \hat{y}_{k+1} + (y_k - \hat{y}_k) \tag{106}$$

Na Equação 106, o sobrescrito "c" representa o valor corrigido. O termo y_k indica o valor atual da variável de saída.

Para calcular u_k, que representa a ação de controle a ser aplicada no instante de tempo corrente, o valor desejável da variável controlada no próximo instante de tempo precisa ser calculado. Uma expressão aceitável para esta finalidade é representada pela Equação 107 (DESHPANDE, 1985):

$$y_{k+1}^{r} = \alpha y_k + (1-\alpha)w \tag{107}$$

Tal que: α é um filtro constante (0< α<1) e w é o *set-point*.

O valor desejado e o valor corrigido da variável controlada, de maneira ideal, deveriam ser iguais no próximo instante de tempo. Esta afirmação está representada na Equação 108:

$$y_{k+1}^{c} = y_{k=1}^{r} \tag{108}$$

Substituindo as Equações 106 e 107 na Equação 108, obtém-se a Equação 109:

$$\begin{aligned} \hat{y}_{k+1} + y_k - \hat{y}_k &= \alpha y_k + (1-\alpha)w \\ \hat{y}_{k+1} - \hat{y}_k &= \alpha y_k + (1-\alpha)(w - y_k) \\ &= (1-\alpha)E_k \end{aligned} \tag{109}$$

Tal que: $E_k = w - y_k$, é definido como o erro no instante corrente.

Substituindo $\hat{y}_{k+1} - \hat{y}_k$ da Equação 104 na Equação 109, resulta na Equação 110 (DESHPANDE, 1985):

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{N} s(i)\Delta u_{k+1-i} = (1-\alpha)E_k \\ &s(1)\Delta u_k + \sum_{i=2}^{n} s(i)\Delta u_{k+1-i} = (1-\alpha)E_k \end{aligned} \tag{110}$$

Rearranjando-se a Equação 110, obtém-se a Equação 111, que fornece a ação de controle no instante corrente (DESHPANDE, 1985):

$$\Delta u_k = \frac{(1-\alpha)}{s(1)} E_k - \frac{1}{s(1)} \sum_{i=2}^{n} s(i)\Delta u_{k+1-i} \tag{111}$$

tal que: s_1 é o primeiro valor da função convolução da resposta do sistema frente a uma perturbação em degrau unitário.

2.6.3.4 Algoritmo DMC com Horizonte de Predição P

Primeiramente, faz-se necessário corrigir o modelo de predição descrito pela Equação 98, acrescentando o efeito de perturbações d (SEBORG *et al.*, 2011). Considerando as perturbações futuras iguais à inferida no tempo k, d(k), e separando os termos conhecidos dos desconhecidos, pode-se realizar predições ao longo de um horizonte de Predição P, (k+1, k+2,...,k+P) e escrevê-las empregando notação matricial (LUYBEN, 1992; SEBORG *et al.,* 2011; CAMACHO & BORDONS, 2007).

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_{k+1} \\ \hat{y}_{k+2} \\ \vdots \\ \hat{y}_{k+P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{y}^*_{k+1} \\ \hat{y}^*_{k+2} \\ \vdots \\ \hat{y}^*_{k+P} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} s(1) & 0 & \cdots & 0 \\ s(2) & s(1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ s(P) & s(P-1) & \cdots & s(1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+P-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{d}(k) \\ \hat{d}(k) \\ \vdots \\ \hat{d}(k) \end{bmatrix} \tag{112}$$

onde as predições em malha aberta ($\hat{y}$*) são calculadas segundo a seguinte equação (SEBORG *et al.,* 2011; LUYBEN, 1992; CAMACHO & BORDONS, 2007):

$$\hat{y}^*_{k+j} = \sum_{i=j+1}^{n-1} s(i)\Delta u_{k+j-i} + s(n)u_{k+j-n} \tag{113}$$

e a correção do modelo pelo efeito das perturbações (d) pode ser calculada pela Equação 114 (SEBORG *et al.,* 2011):

$$\hat{d}(k) = y_{med}(k) - y_{\text{mod}} = y_{med}(k) - \left[\sum_{i=1}^{n} s(i)\Delta u_{k-i} + s(n)u_{k-n} \right] \tag{114}$$

Pode-se escrever o conjunto de equações descritas na Equação 112 na forma matricial, que resulta em:

$$\underline{\hat{y}}_k = \underline{\hat{y}}^*_k + \underline{\underline{S}} \cdot \Delta \underline{u}_k + \underline{\hat{d}}(k) \tag{115}$$

Nestas P equações estão envolvidas as P incógnitas: Δu(k), Δu(k+1)....Δu(k+P-1).

Se for exigido que as predições sejam iguais aos valores desejados $(\hat{y}^r)$ ao longo de todo o horizonte de predição P, têm-se que:

$$\underline{\hat{y}}^r{}_k = \underline{\hat{y}}^*{}_k + \underline{\underline{S}} \cdot \Delta \underline{u}_k + \underline{\hat{d}}(k) \tag{116}$$

Pode-se então calcular as P ações de controle futuras por meio da solução do seguinte sistema com P equações (SEBORG *et al.,* 2011*)*:

$$\Delta \underline{u}_k = \underline{\underline{S}}^{-1} \left[\underline{\hat{y}}^r{}_k - \underline{\hat{y}}^*{}_k - \underline{\hat{d}}(k) \right] = \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\hat{e}}_k \tag{117}$$

A Equação 117 representa uma lei de controle proporcional ao erro predito (SEBORG *et al.,* 2011) As ações de controle calculadas desta maneira seriam muito fortes, como acontece na lei de controle de protótipo mínimo, não sendo apropriadas para situações práticas.

Para resolver este problema, dois caminhos distintos foram sugeridos:

1-Reduzir o número de incógnitas de P para M<P. Isto é, só permitir variações das ações de controle futuras ao longo de um horizonte de controle M: Δu(k), Δu(k+1),...Δu(k+M-1) (CAMPOS *et al.,* 2013):

$$\begin{bmatrix} \hat{y}_{k+1} \\ \hat{y}_{k+2} \\ \vdots \\ \hat{y}_{k+P} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{y}^*{}_{k+1} \\ \hat{y}^*{}_{k+2} \\ \vdots \\ \hat{y}^*{}_{k+P} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} s(1) & 0 & \cdots & 0 \\ s(2) & s(1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ s(P) & s(P-1) & \cdots & s(P-M+1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta u_k \\ \Delta u_{k+1} \\ \vdots \\ \Delta u_{k+M-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{d}(k) \\ \hat{d}(k) \\ \vdots \\ \hat{d}(k) \end{bmatrix} \tag{118}$$

Neste caso a $\underline{\underline{S}}$ é a chamada matriz dinâmica. Desta forma, tem-se um sistema com mais equações (P) do que incógnitas (M), que não tem solução única, mas que pode ser aproximadamente resolvido como solução de um problema de otimização que visa a minimizar a soma dos quadrados das diferenças entre as predições do modelo e o valor desejado, ao longo do horizonte P, de acordo com a Equação 119 (LUYBEN, 1992; CAMPOS *et al.,* 2013):

$$\min_{\Delta \underline{u}_k} \left[\underline{y}^r{}_k - \underline{\hat{y}}_k\right]^T \left[\underline{y}^r{}_k - \underline{\hat{y}}_k\right] \tag{119}$$

O resultado é a pseudo-inversa da matriz dinâmica, segundo a Equação 120 (CAMPOS *et al.,* 2013; LUYBEN, 1992; SEGORG *et al.,* 2004):

$$\Delta \underline{u}_k = \left[\left(\underline{\underline{S}}^T \underline{\underline{S}}\right)^{-1} \underline{\underline{S}}^T\right] \cdot \underline{\hat{e}}_k \tag{120}$$

2- A outra forma é definir uma trajetória que leve suavemente ao valor desejado. Uma opção é a definida pela Equação 121 (DESHPANDE, 1985; SOETERBOEK, 1992; CAMACHO & BORDONS, 2007):

$$\begin{aligned} & y^r(k) = y_{med}(k) \\ & y^r(k+j) = \alpha \cdot y^r(k+j-1) + (1-\alpha) \cdot y^d(k+j) \\ & j = 1,2...P \end{aligned} \tag{121}$$

tal que y_{med} é o valor medido da variável no instante k e y^d é o valor desejado (*set-point*).

Também podem ser introduzidas ponderações na variável controlada e nas variações da variável de controle (fatores de supressão de movimento ou de penalização). Considerando que também foi empregada uma trajetória de referência, obtêm-se a Equação 122 (LUYBEN, 1992; SEBORG *et al.,* 2011; CAMPOS *et al.,* 2013):

$$\min_{\Delta \underline{u}(k)} \left\{\left[\underline{y}^r(k) - \underline{\hat{y}}(k)\right]^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}} \cdot \left[\underline{y}^r(k) - \underline{\hat{y}}(k)\right] + \Delta \underline{u}^T(k) \cdot \underline{\underline{\Lambda}}^T \cdot \underline{\underline{\Lambda}} \cdot \Delta \underline{u}(k)\right\}$$

$$\underline{\underline{\Gamma}} = \begin{bmatrix} \gamma(1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \gamma(2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \gamma(P) \end{bmatrix} \qquad \underline{\underline{\Lambda}} = \begin{bmatrix} \lambda(1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda(2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & \dots & \lambda(M) \end{bmatrix} \tag{122}$$

Este problema, proposto pela Equação 122, tem solução analítica, resultando na Equação 123 (SEBORG *et al.,* 2011; CAMPOS *et al.,* 2013):

$$\Delta \underline{u}(k) = \left[\left(\underline{\underline{S}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}} \cdot \underline{\underline{S}} + \underline{\underline{\Lambda}}^T \cdot \underline{\underline{\Lambda}}\right)^{-1} \underline{\underline{S}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}}\right] \cdot \underline{\hat{e}}(k) \tag{123}$$

tal que o erro predito $\underline{\hat{e}}(k)$ é calculado por meio da Equação 124:

$$\underline{\hat{e}}(k) = \left[\underline{y}^r(k) - \underline{\hat{y}}^*(k) - \underline{\hat{d}}(k)\right] \tag{124}$$

sendo aplicada apenas a primeira ação de controle, Δu_k (método do horizonte descendente). No próximo tempo de amostragem, k+1, repete-se a operação, em função do novo valor medido, $y_{med}(k+1)$, calculando a predição em malha aberta, $y^*(k+1)$, descartando a ação de controle mais antiga e incorporando a implementada no passo anterior, Δu_k. (SEBORG *et al.,* 2011; CAMACHO & BORDONS, 2007; RAWLINGS & MAYNE, 2015).

O algoritmo de controle preditivo DMC implementado no *OpenFOAM* empregou a técnica do horizonte descendente. Fez-se uso de uma trajetória de referência suavizada (ver Equação 121) e dos fatores de supressão de movimento, evidenciados na Equação 122.

2.6.3.5 Critérios de Performance dos Controladores

Os critérios de performance dos controladores são empregados para se estabelecer qual controlador apresentou melhor desempenho de controle frente a mudanças no *set-point* ou à perturbações na entrada do processo (STEPHANOPOULOS, 1984; SEBORG *et al*., 2011). Dentre os diversos critérios de desempenho, destacam-se: o ISE (*Integral Square Error*), o tempo de assentamento ou de estabilização (Te), o tempo de subida (Trise), o Overshoot (Os) e o Esforço de Manipulação (EM) (STEPHANOPOULOS, 1984, ISERMANN, 1989; SEBORG *et al.,* 2011; LYU & GAO, 2012). Aborda-se, de maneira sucinta, cada um desses critérios em seguida.

<u>ISE</u>

Pode-se afirmar que o critério de erro integral é a avaliação de desempenho mais importante a ser observada. As técnicas de sintonia são desenvolvidas, na grande maioria das

vezes, de forma a se minimizar a resposta do controlador em malha fechada frente a mudanças no *set-point* ou à distúrbios na entrada do processo (SEBORG *et al.,* 2011). O ISE pode ser calculado segundo a Equação 125 (STEPHANOPOULOS, 1984; SEBORG *et al.,* 2011; LIU & GAO, 2012):

$$ISE = \int_0^{\infty} (e(t))^2 \, dt = \sum_{i=0}^{N} e(i)^2 \tag{125}$$

tal que e(t) é o erro definido entre o *set-point* e o valor medido e N é o número de pontos de amostragem utilizados.

Tempo de Assentamento ou Estabilização

O tempo de assentamento (Te) é o tempo necessário para que a resposta do sistema atinja e permaneça dentro de uma banda de 2 a 5 % em torno do valor desejado (*set-point*) (STEPHANOPOULOS, 1984; SEBORG *et al.,* 2004). Quanto menor o tempo de assentamento, com maior agilidade o controlador apresenta uma resposta estável, indicando uma melhor performance.

Tempo de Subida

O tempo de subida (T_{Rise}) é o tempo necessário para que a resposta do sistema atinja pela primeira vez o valor alvo. Quanto menor este tempo, mais rápida é a resposta do controlador. Entretanto, essa maior agressividade do controlador pode torná-lo menos estável, com possibilidade de apresentar uma resposta oscilatória (STEPHANOPOULOS, 1984; SEBORG *et al.,* 2011; LIU & GAO, 2012).

Overshoot (OS)

O overshoot é definido pela razão entre A e B. No qual B é o *set-point* desejado e A é o máximo valor atingido pela resposta subtraído do valor desejado. A Figura 7 ilustra os valores de A e B. Quanto menor o *overshoot* mais estável é a resposta de controle (SEBORG *et al.,*

2011). A Equação 126 mostra o cálculo do overshoot, que pode ser percentual ou não. Para a representação do Os em termos percentuais basta multiplicar a Equação 126 por 100.

$$Os = \frac{A}{B} \tag{126}$$

A Figura 7 ilustra os critérios de desempenho dos controladores. Pode-se observar o tempo de subida, de assentamento e os valores de A e B empregados no cálculo do *overshoot*.

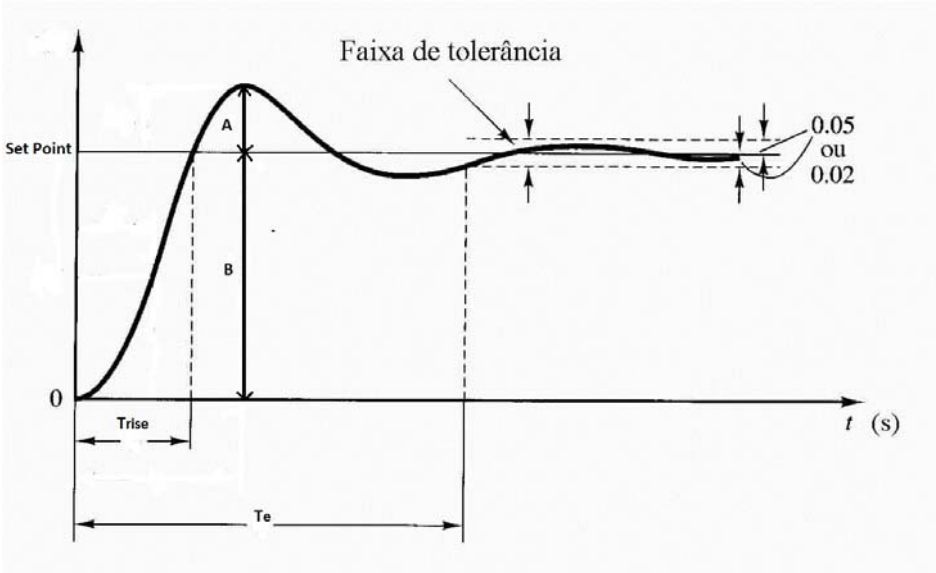

Figura 7. Critérios de Desempenho dos Controladores

Esforço de Manipulação (EM)

O esforço de manipulação define a trajetória imposta à variável manipulada. Quanto menor o esforço computacional, mais suaves serão as mudanças gradativas na variável manipulada e, na grande maioria dos casos, o *set-point* será obtido de forma menos oscilatória. A Equação 127 mostra o cálculo do esforço computacional (ISERMANN, 1989; DE SOUZA JR., 1989):

$$\begin{aligned} EM &= \sum_{i=1}^{N} \Delta u_i^2 \\ \Delta u_i &= u_i - u_{i-1} \end{aligned} \tag{127}$$

tal que u(i) é a ação de controle no instante i.

Elucidados os critérios de desempenho empregados para avaliar os controladores, a próxima seção envolve os resultados obtidos com a revisão bibliográfica envolvendo a aplicação de controle de processos em simulações CFD.

2.7 Aplicação de Controle de Processos a Simulações CFD

Realizou-se ampla pesquisa bibliográfica no início do ano de 2017, com os termos "Process Control" e "CFD" na base de dados Science Direct, que abrangeu livros e periódicos, compreendendo não só o título, como também o corpo do trabalho. Foram encontrados apenas 20 trabalhos científicos (artigos). Vale ressaltar que em nenhum deles o controle avançado preditivo foi aplicado ou implementado diretamente no código fonte do *software* de CFD. Os principais trabalhos são descritos a seguir.

LAO *et al.* (2016) demandaram esforços para o desenvolvimento de um modelo de fluido dinâmica computacional (CFD) para um reator de reformulação de metano a vapor, de escala industrial (tubo de reforma), usado para produzir hidrogênio, empregando o *software* CFD comercial ANSYS Fluent. Os estudos em CFD foram realizadas em uma malha 2D assimétrica de 1 único tubo reformador, de um total de 48 tubos existentes no reator estudado. Os autores projetaram e avaliaram três esquemas de controle feedback diferentes para controlar a fração molar de hidrogênio média ponderada por área medida na saída do tubo de reforma considerando um *set-point* designado sob a influência de uma perturbação de alimentação do tubo de reforma. Em seguida, para realizar a regulação em tempo real da produção de hidrogênio, a entrada manipulada e a saída controlada escolhidas foram: o perfil de temperatura exterior da parede do tubo de reforma e a fracção molar de hidrogênio da parte externa do reator ($\bar{x}_{H_2}^{OUTLET}$).

Ainda no trabalho de LAO *et al.* (2016), para o problema do controle *feedback*, foram projetados e integrados em uma simulação CFD, em tempo real, do tubo de reforma, esquemas de controle proporcional (P), proporcional-integral (PI) e um controle combinando otimização dinâmica e controle de *feedback* integral para gerar e acompanhar o perfil de temperatura exterior da parede do tubo de reforma com base em $\bar{x}_{H_2}^{OUTLET}$.

No estudo de LAO *et al.* (2016), os resultados da simulação de CFD demonstraram que os esquemas de controle de feedback atingiram o *set-point* desejado na presença de um distúrbio de alimentação do tubo e puderam melhorar significativamente a dinâmica do processo em comparação com a dinâmica sob controle de malha aberta. Os autores empregaram a simulação CFD realizada no ANSYS apenas para gerar os dados que alimentaram um algoritmo MPC implementado no MATLAB. Desta forma a cada passo calculado pela simulação CFD, os dados eram enviados ao MATLAB para o processamento da otimização de cálculo da nova trajetória de referência do controlador MPC. Apesar de não estar explicito no texto, deve-se levar em conta o grande esforço computacional para a simulação do controle MPC no Matlab além do tempo decorrido para a troca de informações entre os *softwares* a cada passo de tempo.

De acordo com LISOWSKI & FILO (2016), o emprego de métodos de CFD em conjunto com Matlab \ Simulink permitiram uma simulação altamente precisa da válvula de controle de fluxo. Uma versão especial da válvula de controle de fluxo acoplada a um controlador PID integrado operando em um loop de realimentação foi usada no MATLAB. Isto permitiu que as posições assumidas pelo carretel fixo da válvula fossem obtidas com precisão suficiente. Os testes de simulação de contole foram realizados em um modelo construído em Matlab \ Simulink. Neste estudo, os dados gerados pelo simulador CFD (ANSYS) foram empregados para gerar um modelo para o controle da válvula de fluxo. Este modelo implementado no Matlab foi empregado em testes experimentais envolvendo uma bomba e uma válvula para controle de fluxo. As perturbações no sistema eram impostas manualmente e o sistema de controle desenvolvido no Matlab propiciava o retorno do sistema ao estado estacionário inicial. Neste trabalho não foram realizadas integrações entre os *softwares* CFD e Matlab em cada passo de tempo. O *software* CFD gerou dados precisos que propiciaram a criação de um modelo para válvula mais fidedigno melhorando assim a ação de controle.

OUSEGUI *et al.* (2012) desenvolveram um sistema de controle ótimo combinado com um *software* comercial de CFD (*COMSOL Multiphysics*) para otimizar o fluxo de calor durante um processo de cozimento. As variáveis de controle empregadas foram a temperatura final e a umidade do produto. O método proposto consistiu em resolver três sistemas PDE's (*Partial Diferencial Equations*) empregando ferramentas de CFD e um algoritmo de gradiente conjugado para minimizar a função objetivo, definida em termos do fluxo de calor transiente,

da temperatura e da umidade do produto de cozimento. A metodologia proposta foi validada com dados experimentais extraídos de um processo de cozimento de pão. O controle ótimo foi obtido pelo emprego do método do gradiente conjugado. Foi estimado o consumo de energia mínimo para uma temperatura e umidade de produto de cozimento final desejadas. Este estudo confirmou a relação entre o fluxo de calor e os atributos de qualidade do produto de cozimento e mostrou que os modelos de controle ótimos são ferramentas confiáveis para apoiar a tomada de decisões em processos complexos, como o cozimento.

Essa proposta, segundo os autores, constitui-se numa aproximação promissora a ser empregada em diferentes tipos de processos, tais como: secagem, cozimento e refrigeração. Todavia, OUSEGUI *et al.* (2012) apenas exportaram os resultados obtidos com as simulações de CFD para MATLAB e, desta forma, o controle do processo não foi implementado diretamente no *software* CFD. Os autores testaram duas formas de resolução para integração do Matlab com o programa CFD: uma forma acoplada na qual as equações de balanço e o sistema de otimização do controle foram calculados simultaneamente no Matlab por meio da exportação dos modelos de balanço do COMSOL para o Matlab e a forma desacoplada na qual as equações de balanço foram calculadas no programa CFD e o sistema de controle foi realizado no Matlab. O sistema desacoplado funcionou por meio da transferência de dados entre o CFD e o Matlab, apresentando os mesmos incovenientes comentados no trabalho de LAO *et al.* (2016). Os autores reportam que o sistema acoplado exigiu um alto custo computacional com grande alocação de memória, ocorrendo a parada da simulação por espaço insuficiente para alocação de dados. Este fato demonstra a dificuldade em se implementar em uma mesma plataforma de cálculo as equações de balanço e sistemas avançados de controle.

KIM *et al.* (2015) discutem um método para acoplar modelos CFD com uma ferramenta BES (Building Energy Simulation) empregada para estimar picos de demanda de aquecimento e resfriamento, além do consumo anual de energia para a manutenção do conforto térmico do local. O modelo de CFD empregado foi de ordem reduzida, isto é, foi identificado um modelo simplificado do processo simulado pelo CFD que foi empregado no controle avançado no Matlab. Os autores afirmaram que para este tipo de estudo, o emprego de modelos CFD robustos não é viável, devido ao grande esforço computacional requerido e pelo tempo de simulação que pode levar semanas ou meses. O modelo reduzido foi construído por meio de um modelo de tempo invariante (*LTI model*) (LIU *et al.,* 2015), por exemplo uma

função de transferência representativa do processo, que reproduz o comportamento de uma simulação CFD padrão. As medições de temperatura estavam disponíveis no site (edifício) para validar os modelos. O ANSYS FLUENT 14.5 foi usado para os cálculos CFD. A malha CFD consistiu de 311.000 nós e 1.680.000 de células tetraédricas. Um único caso com um alto nível de refinamento de malha foi executado mas os resultados apresentaram pouca alteração nas variáveis de interesse na saída. Uma aplicação do modelo acoplado CFD de ordem reduzida foi realizada para uma análise de *retrofit* em relação à mudança das posições do termostato, tanto para o conforto térmico (temperaturas), como para o consumo de energia, que não pode ser investigada por nenhuma outra ferramenta tradicional de simulação de construção. O estudo foi possível pela capacidade do modelo em capturar variações espaciais do conforto térmico. Para avaliar o desempenho numérico do modelo de CFD acoplado de ordem reduzida, foi determinado o tempo de simulação para o modelo implementado no ambiente Simulink, onde se prosseguiu com a etapa de controle do processo. Neste estudo, os autores também não implementaram uma metodologia de controle diretamente no *software* CFD. A estratégia de controle foi construida no ambiente simulink do MATLAB e a modelagem CFD foi representada por um modelo LTI, desta forma conclui-se que a simulação CFD apenas gerou dados a seram utilizados no Matlab. A desvantagem desta abordagem está no fato de que a cada nova condição testada o modelo LTI empregado necessita de atualização, de forma a representar a simulação CFD de maneira fidedigna.

YANG *et al.* (2003) desenvolveram um sistema de monitoramento para um incinerador de lixo químico com o uso de resultados de simulações CFD realizadas por meio do *software* PHOENICS. Devido à falta de informação a respeito do processo, à grande variabilidade dos componentes da carga do processo e pela impossibilidade de realizar amostragens no interior do processo produtivo, o modelo CFD foi empregado como uma ferramenta *off-line* para descrever a dinâmica do processo de incineração. Os autores empregaram as simulações em CFD para produzir os resultados de tempo de residência, distribuição de temperatura, composição de gás de saída, carga térmica requerida etc, para várias configurações de entrada. Esses resultados foram utilizados para criar um banco de dados com o intuito de correlacionar os parâmetros e as correntes de entrada com as necessidades do processo produtivo. O banco de dados foi empregado, posteriormente, para desenvolver um sistema de controle *feedforward*, com o objetivo de controlar e otimizar o processo de incineração.

GERBER *et al.* (2006) desenvolveram um método para a elaboração de um MPC (*Model Predictive Control*) para controlar a temperatura de fusão em uma unidade de injeção de material plástico em moldes. A metodologia desenvolvida empregava simulações em CFD para estudar, em malha aberta, a resposta do processo frente uma perturbação em degrau na temperatura de derretimento do plástico. O estudo desta perturbação em degrau permitiu realizar a identificação do processo de injeção. Com o modelo do processo identificado, os autores propuseram o modelo de um controlador MPC do tipo MIMO (*Multiple Input Multiple Output*) para o controle de um injetor com três cabeçotes. O controle preditivo desenvolvido não foi implementado diretamente no *software* CFD, sendo que as simulações de computação fluido dinâmica apenas forneceram os dados *off-line* para a criação do sistema de controle. Neste trabalho, não houve a tentativa de se empregar técnicas de controle de processo agindo diretamente na simulação CFD, desta forma perde-se um conjunto de informações importantes, tais como o comportamento transiente das variáveis e a visão e acompanhamento global dos fenômenos de transferência que ocorrem dentro do volume de controle.

SUN & WANG (2010) e D'AGOSTINHO *et al.* (2013) realizaram estudos de métodos de controle de temperatura, umidade e ventilação de ambientes internos empregando simulações em CFD. A principal contribuição de SUN & WANG (2010) foi não considerar o ar interno por meio de um modelo de mistura perfeita. Desta forma, foi possível considerar as variações espaciais da variável controlada, no sistema considerado. A vazão de ar de entrada é a variável manipulada com o intuito de controlar a temperatura do ambiente interno. Os autores empregaram dados experimentais para validar a metodologias propostas. Os autores empregaram um controlador PID que não estava implementado no *software* CFD e o controle fez uso dos dados gerados pelo modelo CFD por meio de uma interface.

D'AGOSTINHO *et al.* (2013) mostraram como um modelo CFD pode contribuir para a melhoria das condições ambientais no interior de construções históricas. As simulações realizadas mostraram como o modelo CFD poderia prever a temperatura, a distribuição de umidade e a movimentação de ar quando imposta uma mudança nas condições de fluxo de entrada na corrente de ar. Os autores estudaram um modelo de microclima da cripta da Catedral de Lecce, localizada no sul da Itália. Neste artigo, não houve acoplamento de técnicas de controle de processo à simulação CFD. As simulações CFD foram realizadas apenas para estudar diferentes cenários de ventilação quanto à velocidade e direção do ar.

Tendo como base a revisão bibliográfica realizada na literatura científica, pode-se afirmar que não existem trabalhos publicados acerca da implementação de técnicas avançadas de controle de processos, mais precisamente uma abordagem MPC, diretamente em um *software* CFD. Os estudos realizados ou empregaram um acoplamento de uma ferramenta de simulação CFD com um *software* de controle, no caso o Matlab, ou o sistema CFD foi empregado para gerar dados para a identificação de um modelo para o processo. As desvantagens do primeiro caso reside no fato de se empregar dois simuladores de alto custo computacional e a necessidade de se implementar a comunicação entre as ferramentas para o transporte de dados, aumentando o tempo de simulação. Para a segunda abordagem perde-se a principal característica das simulações em CFD que é a elucidação dos detalhes locais do escoamento, de forma transiente e por vezes, tridimensional. Portanto, configura-se em uma grande contribuição para a comunidade científica a implementação desta estratégia de controle em um *software* aberto de CFD. Com esta implementação, é possível não só atingir a condição de controle para o escoamento proposto, para problemas servo e regulador, como também acompanhar o transiente das simulações para qualquer posição do espaço que se deseje. Além disso, as bibliotecas de controle desenvolvidas para a elaboração desta Tese de Doutorado serão disponibilizadas para uso.

O próximo Capítulo traz a metodologia empregada para a obtenção dos resultados obtidos neste estudo.

3. Metodologia

3.1 Introdução

Este capítulo traz os *solvers* empregados na resolução dos problemas, os volumes de controle para cada um dos casos abordados (monofásico e polidisperso) e as configurações das simulações empregadas. Também estão descritos os algoritmos para a implementação dos controles clássicos, do controle avançado simplificado (S-DMC), com um único passo de predição e do controle clássico DMC, com horizonte de predição P.

3.2 Regra de Controle Aplicada no *OpenFOAM*

A metodologia numérica empregada para a resolução das equações discretizadas em cada passo de tempo calcula as variáveis em cada volume de controle. A partir das variáveis calculadas nos centros dos volumes, estas também são obtidas nas superfícies dos volumes de controle. Desta forma, torna-se possível calcular os valores das variáveis em qualquer ponto discreto no domínio, em todos os tempos simulados (NOGUEIRA & MEDEIROS, 2012).

Ao aplicar uma estratégia de controle do tipo *feedback* ou preditivo, o *set-point* de uma variável escolhida será atingido em um ponto ou região de controle do domínio do espaço. O ponto de controle da variável de interesse durante uma simulação é mostrado na Figura 8, sendo seu valor calculado para o instante t e representado por $V_{med}(t)$.

O desenho esquemático mostrado pela Figura 8 representa o volume de controle empregado para as simulações do caso polidisperso, envolvendo a equação de balanço populacional com os fenômenos de quebra e agregação. A metodologia para a resolução do caso será abordada mais adiante. A condição de contorno da entrada possui as informações necessárias, tais como, a variável manipulada u, o tipo de controle empregado e o tempo de amostragem do controlador. Apesar de não ser usual uma condição de contorno definir as regras de controle, esta foi a forma na qual as informações foram organizadas para a implementação do controle. Isso gera um inconveniente de que apenas variáveis que apresentem condições de contorno podem ser objeto de manipulação a partir do sistema de controle implementado. Modificações posteriores podem ser realizadas a fim de se permitir que uma variável interna possa também ser manipulada no futuro. O desvio da variável $(e(k))$ é calculado no tempo por meio da seguinte equação (SEBORG *et al.*, 2011):

$$e(k) = w - V_{med}(k) \tag{128}$$

tal que w é o *set-point* da variável controlada.

Desta forma, a variável manipulada u receberá um incremento que é função do desvio calculado e do tipo de controle utilizado. O incremento também dependerá do tipo da variável manipulada, isto é, se escalar, temperatura, concentração etc; ou vetorial, velocidade etc.

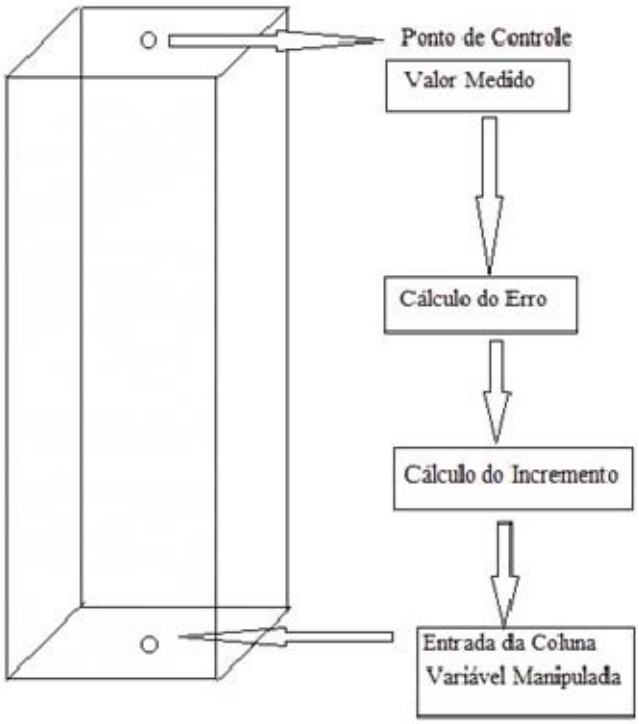

Figura 8. Posicionamento do ponto de monitoramento e de entrada da coluna de bolhas.

3.2.1 Manipulação de um Escalar no *OpenFOAM*

A manipulação de uma variável escalar a partir do desvio calculado é realizada por meio de um incremento também escalar ao valor da variável. O incremento será calculado de acordo com os parâmetros do controlador, segundo as equações discretizadas representadas pelas Equações 79-82 (Leis de Controle Clássicas) e 104 e 123 (Controles Preditivos):

$$\Delta p_k = K_c[(e_k - e_{k-1})]$$

$$\Delta u_k = K_c\left[\left(e_k - e_{k-1}\right) + \frac{\Delta t}{\tau_I} e_k\right]$$

$$\Delta u_k = K_c\left[\left(e_k - e_{k-1}\right) + \frac{\Delta t}{\tau_I} e_k + \frac{\tau_D}{\Delta t}\left(e_k - 2e_{k-1} + e_{k-2}\right)\right]$$

$$\Delta u_k = \frac{K_c}{\tau_I}\left[\left(\tau_I + \tau_D\right)\left(e_k - e_{k-1}\right) + \Delta t e_k + \frac{\tau_D \tau_I}{\Delta t}\left(e_k - 2e_{k-1} + e_{k-2}\right)\right]$$

$$\Delta u_k = \frac{(1-\alpha)}{h_1} e_k - \frac{1}{h_1}\sum_{i=2}^{N} h_i \Delta p_{k+1-i}$$

$$\Delta u_k = \left[\left(\underline{\underline{S}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}} \cdot \underline{\underline{S}} + \underline{\underline{\Lambda}}^T \cdot \underline{\underline{\Lambda}}\right)^{-1} \underline{\underline{S}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}}^T \cdot \underline{\underline{\Gamma}}\right] \cdot e_k$$

Tal que: Δu é o sinal de saída do controlador, K_C é a constante proporcional, τ_I é a constante de tempo integral, τ_D é a constante de tempo derivativa, e_k é o erro do *kth* instante de amostragem para k = 1, 2... da variável controlada e Δt é o período de amostragem.

As quatro primeiras equações representam os controles proporcional (P), proporcional-integral (PI) e proporcional-integral-derivativo paralelo (P-PID), proporcional-integral-derivativo série (S-PID) e Preditivos MPC Simplificado (S-DMC) e Completo (DMC), respectivamente. A cada passo definido para a ação de controle, o incremento calculado será adicionado à variável manipulada no próximo passo de tempo. No caso em questão, como não existe válvula modelada para atuar na manipulação da velocidade de entrada da partícula, a saída do controlador será a própria variável manipulada. Ressalta-se que as Equações 79, 80 e 81 já eram implementações disponíveis no *OpenFOAM* (NOGUEIRA & MEDEIROS, 2012). Entretanto, a implementação das Equações 82, 104 e 123 foi realizada no desenvolvimento desta Tese.

3.2.2 Condição de Contorno para Controle no *OpenFOAM*

A condição de contorno utilizada, definida como *manipulatedValue* (seja para as leis de controle clássicas ou para lei de controle preditivo - MPC) baseia-se na aplicação de uma regra de controle, podendo ser empregada para o controle de diversos parâmetros. A *manipulatedValue* representa a condição de contorno empregada para a variável a ser manipulada. O código principal da condição de contorno, escrito em linguagem de programação C++, encontra-se no arquivo *manipuledValueFvPatchField*.C e o seu cabeçalho está descrito em *manipuledValueFvPatchField*.H. O dicionário para esta condição de

contorno encontra-se no arquivo *controlProperties* que é inserido no diretório System, descrito anteriormente.

O primeiro parâmetro a ser definido no arquivo mencionado acima é o *controlType*. Este parâmetro pode ser do tipo *manipuledAngle* ou *constantAngle*. Se o objetivo for manipular apenas a magnitude, deixando a direção constante, deve-se escolher a opção *constantAngle*. Todavia, caso deseje-se manipular apenas a direção do vetor, deixando o módulo inalterado, deve-se optar por *manipuledAngle*. Outros dois parâmetros importantes são: o *controllerDeltaT*, que corresponde ao passo de tempo que o controlador atuará e o *setPoint,* que será o valor de referência almejado para a variável controlada, isto é, seu *set-point*. Ressalta-se que o passo de tempo de atuação do controlador não é, necessariamente, o mesmo passo de tempo empregado para o desenvolvimento da simulação. Caso estes passos de tempo sejam iguais, tem-se o que se chama de controle *on-line*, ou controle contínuo. Neste estudo, aborda-se o denominado controle discreto, no qual o passo de tempo de amostragem do controlador é maior que o passo de tempo da simulação. No parâmetro *probeType* deve-se optar por *points* ou *field*. A opção *points* permite que o valor da variável controlada seja lida nos pontos definidos pelo usuário, no campo *controlledPoint*. O tipo do valor lido da variável controlada deverá ser definido por meio do campo *calcType*. O campo pode assumir o valor *max*, *min* ou *average*, para o valor máximo, mínimo ou médio lido da variável controlada, respectivamente.

Quando a variável é controlada por apenas 1 ponto, a opção escolhida para o *calcType* não terá efeito prático algum. Uma vez que para um único ponto os valores máximo, mínimo e a média serão iguais. A variável que se deseja controlar deve ser informada no campo *controlledField*. Para os controladores clássicos, os parâmetros do controlador devem ser definidos logo a seguir. A constante de proporcionalidade K_C é definida no campo *proportionalGain*. O campo *integralGain* é o quociente entre o parâmetro K_C e a constante de tempo integral τ_I. O *derivativeGain* é o valor do produto entre K_C e a constante de tempo derivativa τ_D. Os parâmetros K_C, τ_I e τ_D estão presentes nas Equações 79 a 82. Para os controles preditivos, deve-se inserir os valores referentes à função de convolução no campo *S* e, no campo *AlphaP,* deve-se inserir o valor referente à constante de filtro (α) do controlador preditivo DMC simplificado (S-DMC). Bem como os valores das constantes de penalização ou supressão de movimento, λ e γ, além do horizonte de predição P, para o controlador DMC.

No arquivo *controlDict* define-se os parâmetros de controle da simulação, tais como o tempo de início e fim, o passo de tempo, os pontos de monitoramento e etc. Os pontos de monitoramento são um conjunto de coordenadas (x, y, z) introduzido pelo usuário em um ponto específico da geometria, com a finalidade de obtenção do valor de uma determinada variável ao longo do tempo. A colocação de pontos de monitoramento é possível por meio da biblioteca *probes*. Os dados acerca das variáveis de simulação devem ser fornecidas no diretório de tempo 0, caso a mesma se inicie no tempo 0.

Nas próximas seções serão apresentados os algoritmos de controle implementados.

3.2.3 Algoritmo de Cálculo do Incremento de controle para os controladores clássicos

Esta seção ilustra o algoritmo de controle implementados para os controladores clássicos Proporcional (P), Proporcional-Integral (PI) e Proporcional-Integral-Derivativo (PID).

1. Início da simulação (t=0);
2. Leitura das configurações e parâmetros de controle (*set-point*, constantes de controle etc)
3. Leitura da variável controlada no instante k (inicio da simulação);

4. Armazenamento dos cálculos dos erros passados (e_{k-1} e e_{k-2}). Caso esteja no primeiro ou segundos instantes de cálculo (k=1 ou 2), será atribuído o valor zero para um ou ambos.

5. Cálculo do erro (e) no instante k:

   $e(k) = V_{med}(k) - \textit{Set-point}$;

6. Cálculo do Incremento de controle:

   a) A equação a ser empregada dependerá de qual controle clássico está sendo calculado P, P ou PID (paralelo ou serial). Equações 79 a 82.

7. Retorno ao item 3 para k=k+1, de acordo com o Δt escolhido para amostragem;

8. Fim da simulação quando t = fim.

3.2.4 Algoritmo de Cálculo do Incremento de controle para o controlador DMC simplificado (P=1 e M=1):

Descreve-se, nesta seção, o algoritmo de controle avançado simplificado (S-DMC), desenvolvido por DESHPANDE (1985) implementado no *OpenFOAM.*

1. Início da simulação (t=0);

2. Leitura das configurações e parâmetros de controle (*set-point*, função de convolução, α etc)

3. Leitura da variável controlada no instante k (inicio da simulação);

4. Cálculo do valor predito da variável controlada em malha aberta (y), para o instante k (ver Equação 105), para o instante k;

5. Cálculo da Correção entre o valor predito de y pela Equação 105 e o valor que a variável deveria ter (Valor medido), ver Equação 106, para o instante k;

6. Cálculo da trajetória de referência pela Equação 107, para o instante k;

7. Cálculo do incremento de controle por meio da Equação 111, para o instante k;

8. Retorno ao item 3 para k=k+1, de acordo com o Δt escolhido para amostragem e e atualização dos valores de $\underline{u}$ e $\Delta\underline{u}$ nos cálculos;

9. Fim da simulação quando t = fim.

3.2.5 Algoritmo de Cálculo do Incremento de controle para o controlador DMC.

Apresenta-se o algoritmo de controle avançado DMC implementado no *OpenFOAM*. O controle DMC implementado com horizonte de predição P, apresenta horizonte de controle igual a 1 (M=1), técnica do horizonte descendente. Este fato traz algumas simplificações aos cálculos implementados. A matriz dinâmica $\underline{\underline{S}}$ torna-se um vetor:

$$\begin{bmatrix} \hat{y}(k+1) \\ \hat{y}(k+2) \\ \vdots \\ \hat{y}(k+P) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{y}*(k+1) \\ \hat{y}*(k+2) \\ \vdots \\ \hat{y}*(k+P) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} s(1) & 0 & \cdots & 0 \\ s(2) & s(1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ s(P) & s(P-1) & \cdots & \boxed{s(P-1+1)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta u(k) \\ \Delta u(k+1) \\ \vdots \\ \Delta u(k+M-1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{d}(k) \\ \hat{d}(k) \\ \vdots \\ \hat{d}(k) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \hat{y}(k+1) \\ \hat{y}(k+2) \\ \vdots \\ \hat{y}(k+P) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{y}*(k+1) \\ \hat{y}*(k+2) \\ \vdots \\ \hat{y}*(k+P) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} s(1) \\ s(2) \\ \vdots \\ s(P) \end{bmatrix} \cdot \left[\Delta u(k)\right] + \begin{bmatrix} \hat{d}(k) \\ \hat{d}(k) \\ \vdots \\ \hat{d}(k) \end{bmatrix} \tag{129}$$

Da mesma forma, a matriz $\underline{\underline{\Lambda}}$ supressora de movimento das ações de controle se simplifica a um escalar:

$$\underline{\underline{\Lambda}} = \begin{bmatrix} \lambda(1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda(2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & \ldots & \lambda(M=1) \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{\Lambda}} = \left[\lambda(1)\right] \tag{130}$$

E a matriz supressora de movimento $\underline{\underline{\Gamma}}$ pode ser representada por um vetor:

$$\underline{\Gamma} = \begin{bmatrix} \gamma(1) \\ \gamma(2) \\ \vdots \\ \gamma(P) \end{bmatrix} \tag{131}$$

O algoritmo de cálculo do incremento do controlador DMC, com horizonte descendente e horizonte de predição P é:

Início da simulação (t=0);

1. Leitura das configurações e parâmetros de controle (*set-point*, função de convolução, α , horizonte de predição etc)

2. Leitura da variável controlada no instante k (inicio da simulação);

Cálculo o vetor dos valores preditos (P valores) da variável controlada em malha aberta ($\hat{y}^*$), para o instante k (ver Equação 113), para os instantes k=1 ... P;

3. Cálculo do vetor dos efeitos de perturbação d (dimensão P), para o instante k (ver Equação 114);

4. Cálculo do vetor da trajetória de referência $\underline{y^r}$ para os instantes k=1...P, por meio da Equação 121;

5. Cálculo do vetor erro predito (e_k) para os instantes k=1....P, através da Equação 124:

6. Cálculo do incremento do controle DMC por meio da equação implementada abaixo que envolve apenas cálculos vetoriais não mais matriciais (ver Equação 132). Calcula-se apenas a primeira linha Matriz K, que na verdade se transformará em um vetor de tamanho P, e posterior cálculo da ação de controle (Δu) :

$$\underline{K} = \left[\left(\underline{S}^T \cdot \underline{\Gamma}^T \cdot \underline{\Gamma} \cdot \underline{S} + \Lambda^T \cdot \Lambda\right)^{-1} \underline{S}^T \cdot \underline{\Gamma}^T \cdot \underline{\Gamma}\right]$$

$$\Delta \underline{u}(k) = \underline{K} \cdot \underline{e}_k \qquad (132)$$

7. Retorno ao item 3 para k=k+1, de acordo com o Δt escolhido para amostragem e atualização dos valores de $\underline{u}$ e $\Delta\underline{u}$ nos cálculos;

8. Fim da simulação quando t = fim.

Para a sintonia do controlador DMC, com horizonte de predição P e de controle M =1, o número de parâmetros a serem variados são 4 (SEBORG *et al.*, 2011):

- horizonte de predição (P) - um aumento têm-se um controle mais conservativo, com efeito estabilizante, entretanto, exige um esforço computacional maior;
- constante de filtro (α) – um aumento desta variável leva a uma trajetória de controle mais suave, diminuindo agressividade do controlador, entretanto a uma resposta do sistema mais lenta;
- constantes de penalização (γ e λ) - diminuem a agressividade do controlador, deixando a ação de controle mais conservadora.

A seguir serão apresentados os casos empregados para os testes das leis de controle implementadas.

3.3 Metodologia para a Resolução do Caso Monofásico (CASO 1)

A Figura 9 representa a malha usada na simulação CFD para o caso monofásico que representa uma região de troca térmica sem mudança de fase. Ressalta-se que a geometria empregada é simétrica. As paredes indicadas na figura recebem um fluxo de calor assumido constante no valor de 15 W/m^2. A temperatura e a velocidade de entrada do fluido (ar) foram de 300,00 K e 0,75 m/s, respectivamente. O ponto de controle da variável controlada (T) e o ponto onde a variável de manipulação (velocidade de entrada) foi manipulada também são mostrados. Essas condições de entrada do fluido e do calor trocado pelas paredes do sistema foram empregadas para a realização de uma simulação inicial denominada como simulação base. A partir desta, perturbações de ± 0,25 m/s na velocidade de entrada do ar foram introduzidas para análise da linearidade do processo. Após a identificação da função de transferência representativas do processo, foi realizada a sintonia dos controladores clássicos e calculada a função de convolução a ser empregada no controlador preditivo. Em seguida,

foram propostos problemas para o estudo da performance dos controladores: dois problemas *set-point* (problema servo), com variações de 5,8 % para cima e para baixo do estado estacionário encontrado pela simulação base, configurando-se os *set-points* das simulações; duas classes de problemas reguladores. Na primeira classe foram introduzidas perturbações positiva e negativa na temperatura de alimentação do ar. As variações foram de ± 10,00 K. A segunda classe de estudo de problema regulador consistiu em aplicar perturbações na carga térmica transmitida pelas paredes com magnitude de 1,5 W/m^2 para mais e para menos. Para avaliar a performance dos controladores, foram calculados os seguintes índices: ISE (*integral of the squared error*), tempo de subida (Trise), tempo de assentamento (Te), *overshoot* (Os) e Esforço de Manipulação (EM), descritos anteriormente.

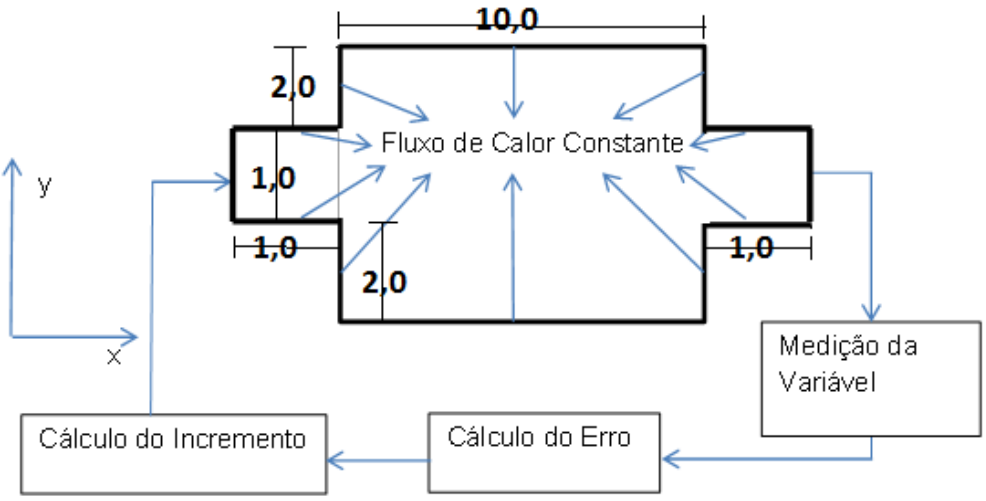

Figura 9. Volume de contrrole empregado na simulação CFD e ponto de monitoramento.

O *solver* empregado nas simulações do caso monofásico (CASO 1) foi o *buoyantBoussinesqPimpleFoam*. Este *solver* é transiente para escoamentos turbulentos com troca térmica de fluidos incompressiveis e newtonianos e emprega a aproximação de Boussinesq.

O modelo de turbulência utilizado foi o modelo $\kappa - \varepsilon$ (LAUNDER & SPALDING, 1974). A força gravitacional foi definida como sendo − 9,81 m/s^2 na direção y. As propriedades físicas do fluido utilizado em todas as simulações, o ar, encontram-se na Tabela 1, a seguir:

Tabela 1: Propriedades Físicas do ar

Propriedades Físicas	*Valor*
ν - Viscosidade cinemática (m^2/s)	$1{,}0 \times 10^{-5}$
β - Coeficiente de expansão térmica (K^{-1})	$3{,}0 \times 10^{-3}$
$\overline{T}$ - Temperatura de referência (K)	300,00
Pr – Número de Prandtl laminar	0,7
Prt – Número de Prandtl turbulento	0,9

Os parâmetros de simulação com os esquemas de discretização empregados nos termos temporal, advectivo e difusivo, além do método de acoplamento pressão-velocidade e o passo de tempo empregado no desenvolvimento da simulação estão descritos na Tabela 2:

Tabela 2 Parâmetros numéricos da simulação

Parâmetros da Simulação	*Valor*
Discretização: termo temporal	Euler implícito
Discretização: termo advectivo	Upwind
Discretização: termo difusivo	Diferenças centrais (Gauss linear)
Acoplamento pressão-velocidade	PIMPLE
Passo de tempo (s)	0,01

3.4 Metodologia para a Resolução do Caso Multifásico (CASO 2)

A Figura 8 representa a malha usada na simulação CFD para o caso multifásico, que representa uma simplificação de uma coluna de bolhas. O meio contínuo é a água, que não apresenta movimento. A fase dispersa é constituída de bolhas de ar. A solução da equação de balanço populacional que emprega o método do DQMOM, foi implementada por SILVA (2008) no *OpenFOAM* em um *solver* denominado *pbeFoam*.

Esta implementação foi realizada em uma versão antiga do *software*. Sendo assim, algumas modificações nas funções de cálculo do método precisaram ser atualizadas e por esta razão, a primeira parte do estudo foi a análise do desempenho desta atualização, empregando-se a formulação para os fenômenos de quebra e agregação de MCCOY & MADRAS (2003).

Por meio de uma mudança de variável descrita no tópico de resultados, foi possível comparar a solução unidimensional obtida com a simulação em *OpenFOAM* com a solução

analítica transiente proposta por MCCOY & MADRAS (2003). Em seguida, uma simulação base foi elaborada para o fenômeno de agregação dominante, com uma velocidade de entrada de partículas de 1,00 m/s. A partir do estado estacionário encontrado, foram impostas perturbações na velocidade de entrada da partícula de magnitude de ± 0,10 m / s. Esses distúrbios impostos foram utilizados para estudar a linearidade do processo e para a identificação da função de transferência representativa do fenômeno em estudo.

Uma vez identificado o processo, foi realizada a sintonia dos controladores clássicos e a perturbação negativa foi utilizada para o cálculo da função de convolução necessária para o cálculo do controle preditivo MPC. Para avaliar a performance dos controladores, foram calculados os seguintes índices: ISE *(integral of the squared error*), tempo de subida (Trise), tempo de assentamento (Te) *overshoot* (Os) e Esforço de Manipulação (EM).

O algoritmo de resolução do *solver pbeFoam* é descrito a seguir (SILVA, 2008):

1. Inicío da simulação;
2. Leitura dos dados da malha, campos de pesos, abscissas ponderadas e propriedades físicas;
3. Laço do passo de tempo t^n;

    3.1 Laço varrendo todos os volumes de controle da malha;

        3.1.1 Cálculo das funções de quebra e agregação. Cálculo do termo fonte, Equação 53;

        3.1.2 Solução do sistema linear, empregando a decomposição LU;

        3.1.3 Armazenamento de θ_N e κ_N em cada volume de controle;

    3.2 Reconstrução dos termos fonte, θ_N e κ_N, em todo o domínio, para cada ponto de quadratura.

    3.3 Discretização e solução das equações de transporte do DQMOM, para t^n

    3.4 Cálculo das abscissas $\xi_N = \varsigma_N / \omega_N$

    3.5 Retorno ao item 3 para n=n+1;

4. Fim da simulação quando $t^n = t^{fim}$.

O *solver pbeFoam* foi empregado para realizar testes preliminares verificando a eficácia de resolução do método do DQMOM para o caso de MCCOY e MADRAS (2003).

As propriedades físicas das fases e a condição inicial para a simulação do Modelo de quebra e coalescência de McCOY & MADRAS (2003) são descritas na Tabela 3.

Tabela 3. Propriedades físicas do ar e água e condições iniciais empregadas

Propriedades Físicas	*Ar*	*Água*
ρ (kg/m^3)	1,0	1000,0
ν (m^2/s)	1,0 x 10^{-5}	1,0 x 10^{-6}
Variável		
d_s (μm)	14,78	
α	0,1067	0,8933

A Tabela 4 mostra os parâmetros de simulação empregados para a discretização das equações e o passo de tempo empregado.

Tabela 4: Parâmetros de simulação empregados para o escoamento polidisperso;

Parâmetros da Simulação	*Valor*
Discretização: termo temporal	Euler implicito
Discretização: termo advectivo	Upwind
Discretização: termo difusivo	Diferenças centrais
Passo de tempo (s)	0,001

4. Resultados e Discussão para o Sistema Monofásico

4.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos com as simulações do sistema monofásico (Caso 1). Para o Caso 1 (escoamento monofásico), o procedimento inicia-se pelo estudo de refino de malha, posteriomente avalia-se a simulação base, segue-se com o estudo de linearidade do processo, identificação do processo representativo do fenômeno e aplicação da função de transferência para a sintonia dos controladores clássicos. Por fim, é mostrada a performance dos controladores por meio dos cálculos dos índices de performance, além do custo computacional requerido para cada controlador para estebelecer o valor alvo.

4.2 Refino de Malha

Foram realizadas simulações com quatro tamanhos de malha bidimensionais diferentes (tamanho do eixo z desprezível frente aos eixos x e y), utilizando-se os mesmos parâmetros de simulação. As malhas foram definidas como:

1. Malha 1 com 375 células.
2. Malha 2 com 965 células.
3. Malha 3 com 1803 células.
4. Malha 4 com 2941 células.

A velocidade e a temperatura de entrada do ar foram de 0,50 m/s e 300,00 K, respectivamente. A carga térmica transferida pelas paredes foi de 15,0 W/m^2.

Em todas as simulações realizadas para o CASO 1 (escoamento monofásico), o número de *Courant* calculado foi sempre menor que 1,0 e a ordem de grandeza dos resíduos inicial e final foi sempre menor que a ordem de grandeza de 10^{-9}, para todas as equações e simulações calculadas. Pode-se concluir, então, que as simulações convergiram de maneira satisfatória.

A Figura 10 mostra o resultado do estudo de refino de malha. Observa-se o perfil de temperatura tomado ao longo do eixo de coordenadas cartesianas "x", localizado no centro da malha (Posição média dos eixos y e z). O resultado na saída do aquecedor para a malha mais refinada foi de 371,25 K e para a malha escolhida foi de 374,63 K. Logo, o erro relativo percentual calculado foi de 0,91 %, para um aumento de aproximadamente 50 % no refino da malha. Considerando esta análise e a observação da Figura 10, pode-se concluir que a malha 3 mostrou resultados próximos dos obtidos com a malha mais refinada (Malha 4), porém com menor custo computacional, sendo por esta razão a escolhida para dar continuidade ao estudo.

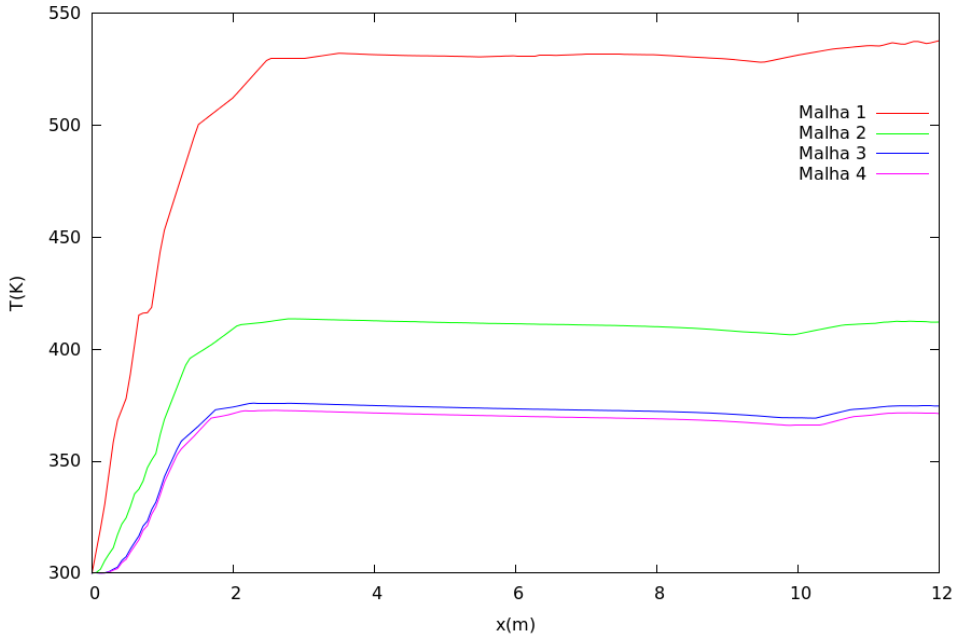

Figura 10. Estudo do refino de malha ao longo do Eixo x. Condições de entrada do fluido: U=0,5 m/s, T_{fluido}=300,00K q=15,0 W/m^2

Uma vez definida a malha a ser empregada, foi escolhida uma condição de entrada para a velocidade de ar visando à definição da simulação base. A partir desta, serão impostas as perturbações sobre o sistema, considerando como base o estado estacionário.

A condição para a simulação base foi de 0,75 m/s e 300,00 K para a velocidade e temperatura do ar na entrada, respectivamente. A troca térmica pelas paredes foi mantida em 15,0 W/m^2. A Figura 11 ilustra a variação de temperatura na saída do aquecedor de ar ao longo do tempo da simulação base, até o alcance do estado estacionário. Pode-se observar que o estado estacionário de 344,98 K foi atingido por volta do tempo de 1000 s.

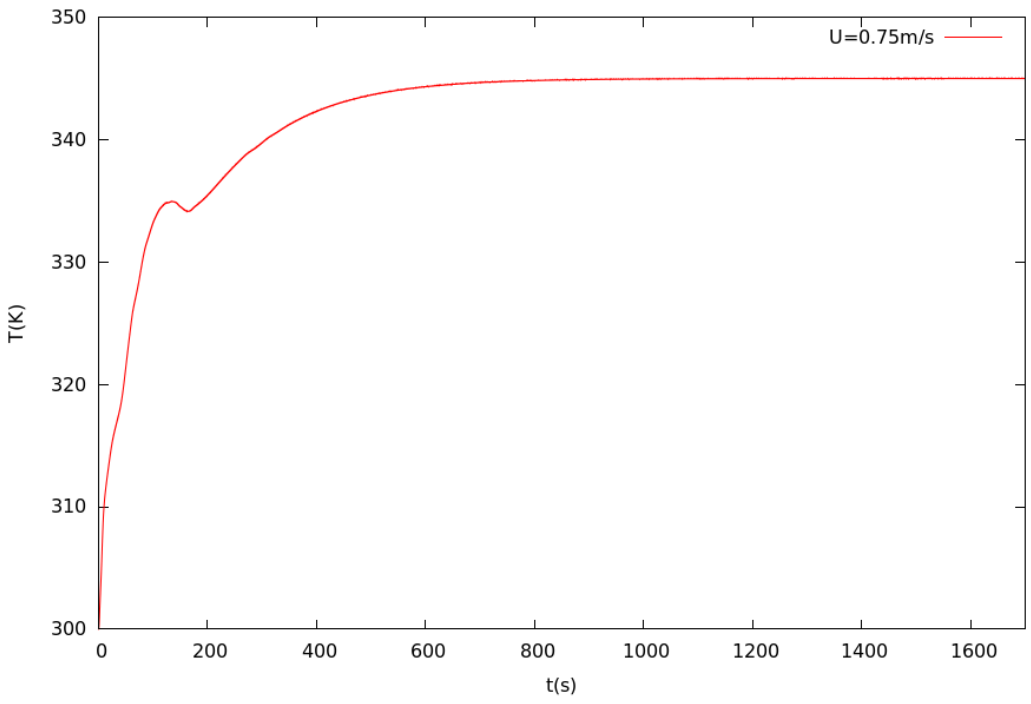

Figura 11. Perfil de temperatura ao longo do tempo na saída do aquecedor para a simulação base. U=0,75 m/s, T_{fluido} = 300,00 K e q=15,0 W/m^2.

Uma análise da Figura 12, perfil de temperatura ao longo do eixo de coordenadas x (centro da malha) na simulação base, ressalta a primeira evidência, neste estudo, que mostra a importância do uso de simulações CFD para a obtenção de detalhes locais do escoamento. Observa-se que, perto da entrada do aquecedor, o ar apresenta um *hot point*, evidenciado pela linha verde na figura, ponto mais quente que o obtido na saída do aquecedor. Este fenômeno pode ser evidenciado apenas pelo emprego de ferramentas de fluidodinâmica computacional, pois, na prática, não é possível o emprego de termopares para a identificação de pontos específicos de aquecimento em equipamentos. Similarmente, processos biotecnológicos ou poliméricos nos quais os pontos de aquecimento podem ocasionar a degradação do produto final ou impedir a sua síntese, justifica-se o emprego de simulações CFD acopladas a técnicas de controle de processo para a mitigação dos *hot points*.

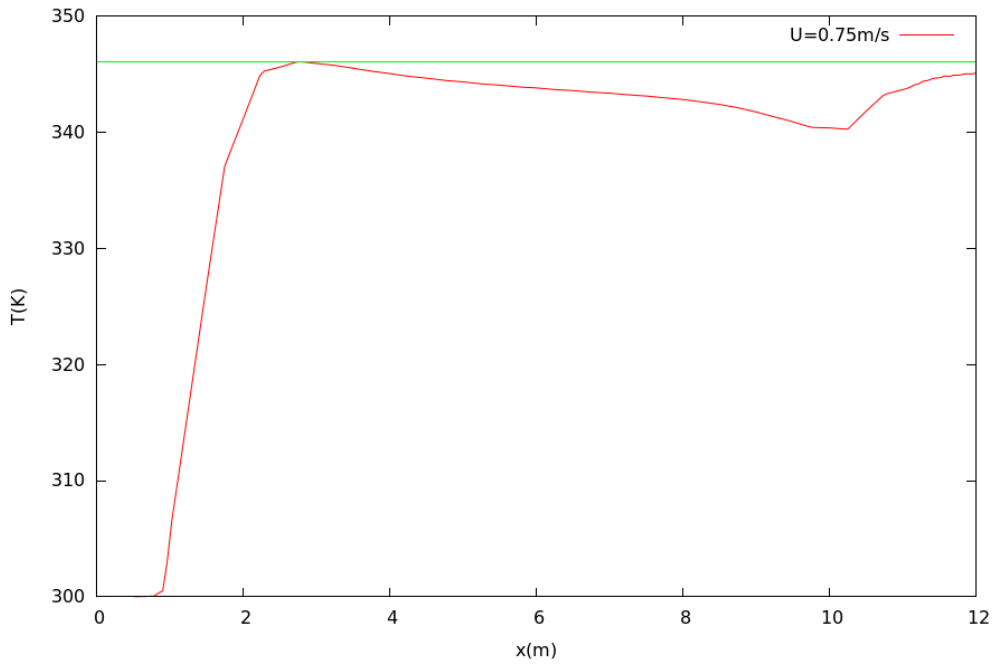

Figura 12. Perfil de temperatura ao longo do eixo x (centro da malha) para a simulação base.

Com a ferramenta de CFD, é possível não só o estudo espacial dos sistemas no seu estado estacionário, mas sobretudo o caminho transiente percorrido até que seja atingida a estabilidade. Na próxima seção faz-se uma análise do transiente do sistema monofásico em estudo.

4.3 Análise Fluidodinâmica do Comportamento em Malha Aberta

Conforme descrito na seção anterior, o estado estacionário da simulação base foi alcançado em 1000 s. As Figuras 13 e 14 ilustram o perfil de temperatura e o vetor velocidade para os tempos t=0, 50, 100, 200, 500 e 1000s, respectivamente. Quanto à tonalidade de cores empregadas nas Figuras 13 e 14 e nas demais que empreguem uma distribuição de temperatura no sistema, a cor azul escura representa a temperatura mais fria encontrada no sistema (300,00 K) quanto mais clara a tonalidade do azul mais quente a região estará. O vermelho escuro representa a região mais quente encontrada no sistema, quanto mais claro o vermelho mais fria é a região estudada.

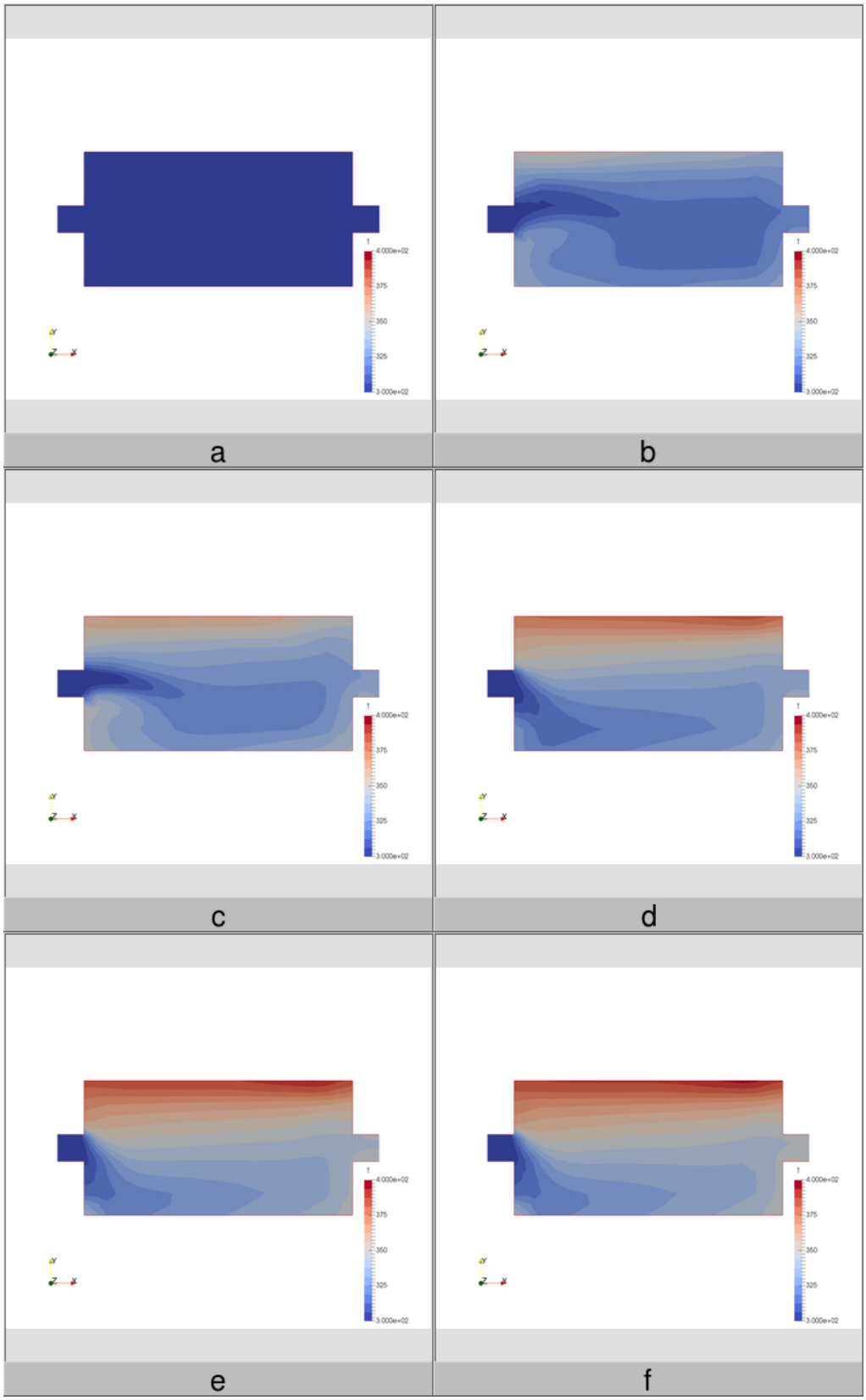

Figura 13. Perfil de temperatura do transiente para a simulação base do Caso 1, para os tempos: (a) 0s, (b) 50 s; (c) 100s; (d) 200s; (e) 500s e (f) 1000s**;** Escala de Temperatura : 300-400 K.

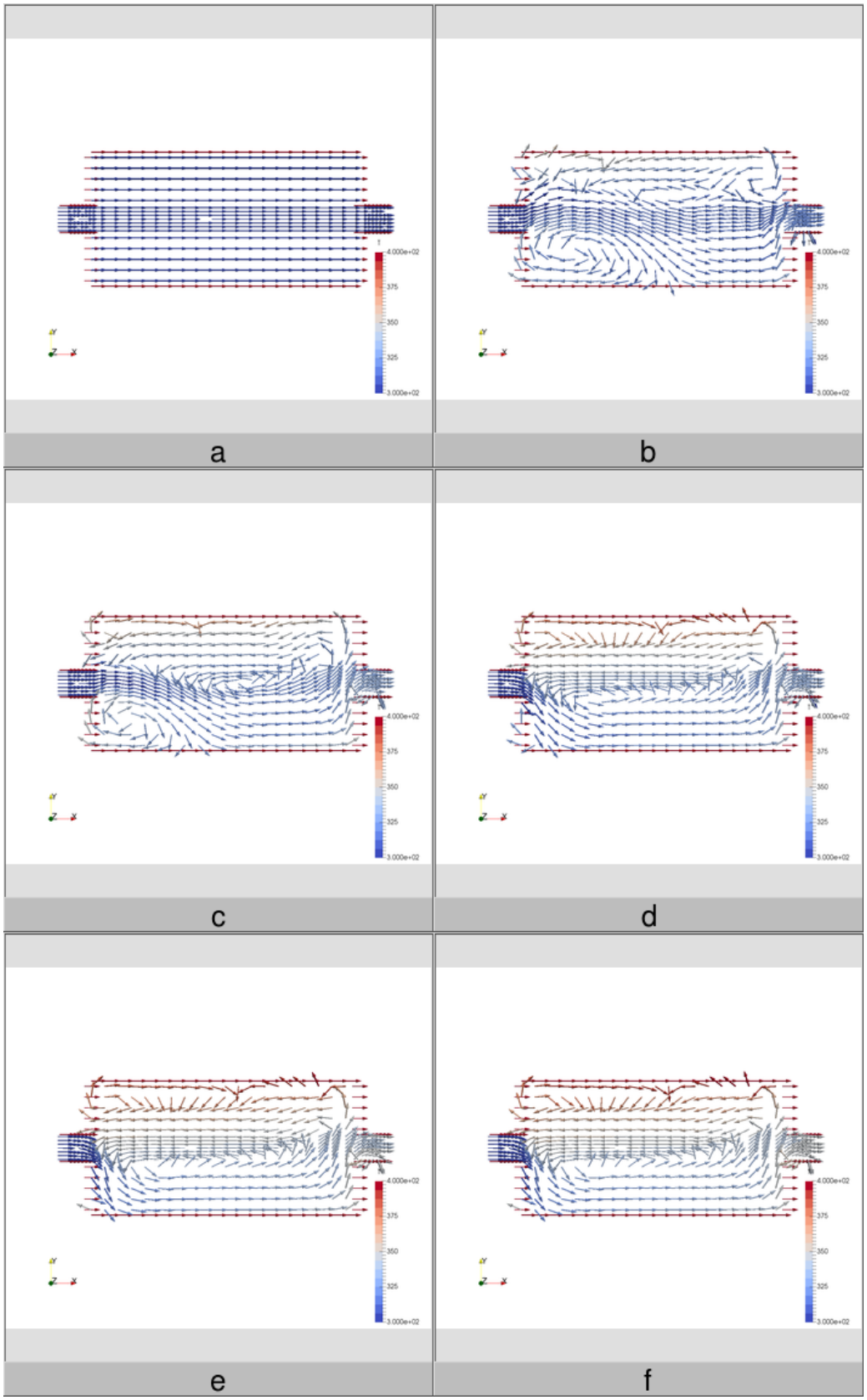

Figura 14 Perfil de velocidade do transiente para a simulação base do Caso 1, para os tempos: (a) 0s, ; (b) 50s; (c) 100s; (d) 200s; (e) 500s e (f) 1000s; Escala de Temperatura 300-440K.

Uma análise da Figura 13, mostra que ocorre um gradiente de temperatura ao longo do eixo y, apesar da carga térmica ao longo das paredes horizontais do volume de controle ser exatamente igual. O aquecimento do ar, ao longo do transiente, diminui a sua densidade, e por ser mais leve, tende a subir. Este fenômeno leva à formação de uma corrente de convecção internamente ao volume de controle. A análise da Figura 14 comprova esta afirmação. Pode-se observar a formação da corrente de convecção a partir do tempo t=50 s (Figura 14 b). Com o aquecimento crescente do ar, essa corrente ganha intensidade e mostra-se perfeitamente desenvolvida a partir do tempo t=200s (Figura 14 d). Esta corrente de convecção força todo o ar frio que entra no aquecedor a se direcionar para a parte inferior do volume de controle, formando o gradiente de temperatura indicado na Figura 13.

A Figura 15 foi elaborada de forma a propiciar uma melhor visualização do gradiente de temperatura formado no interior do volume de controle, a figura foi construída ao longo do eixo de coordenadas y, bem ao centro da geometria (posição x=6,0 m). Na Figura 15 pode-se observar o perfil de temperatura ao longo do eixo y para os tempos de simulação 0, 50, 100, 200, 500 e 1000s. Pela análise desta figura, conclui-se que os pontos mais aquecidos encontram-se mais próximos das paredes do aquecedor ($y<0.25$m e $y>4.75$), pois é sobre esta região que a troca térmica ocorre. Observa-se a formação do gradiente de temperatura ao longo do eixo y, onde a região inferior do aquecedor (y=0m) apresenta temperaturas inferiores a parte superior do volume de controle (y=5m). O gradiente de temperatura interno formada tende a aumentar com o tempo de simulação atingindo um máximo a partir dos 500s de simulação. A formação deste gradiente interno, como foi comentando anteriormente, deve-se a corrente de convecção formada pela variação da densidade do ar com o temperatura, fenômeno que pode ser considerado pela aplicação da aproximação de Boussinesq.

Uma vez definido o estado estacionário, que foi atingido em 1000 s, e estudado o comportamento transiente do sistema, foram impostas perturbações positiva e negativa de ± 0,25 m/s na velocidade de entrada do ar para o estudo da linearidade e sintonia dos controladores, conforme relatado na seção seguinte.

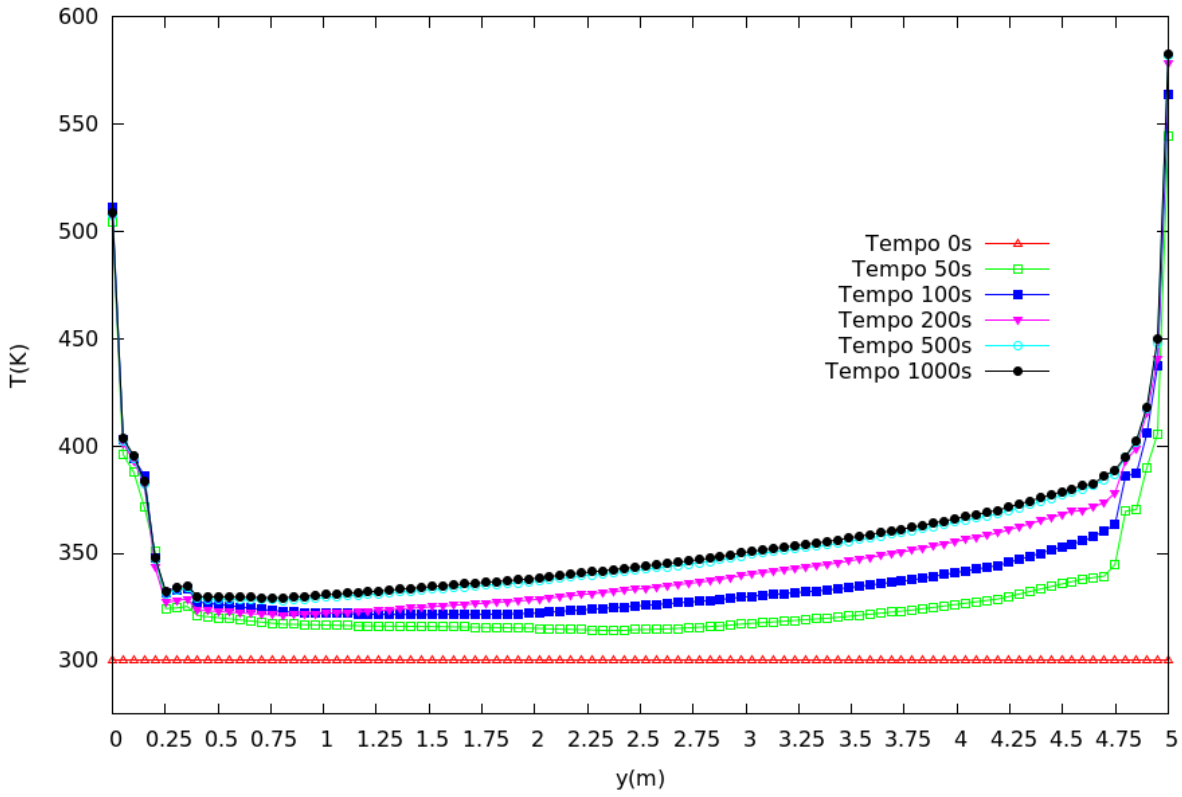

Figura 15. Perfis de Temperatura ao longo do eixo y no centro da geometria (x=6,0 m), para os tempos de simulação 0, 50, 100, 200, 500 e 1000s. U=0,75 m/s, T_{fluido} = 300,00 K e q=15,0 W/m^2.

4.4 Identificação do Sistema e Sintonia dos Controladores PIDs

A Figura 16 mostra o perfil de temperatura na saída do aquecedor para as perturbações impostas e o estado estacionário original. A análise da figura evidencia a não linearidade do processo em estudo, visto que os ganhos estáticos para as perturbações são diferentes, embora os valores absolutos das perturbações sejam os mesmos. Também pode-se notar uma pequena diferença na dinâmica do processo. Observa-se que o novo estado estacionário é alcançado um pouco mais cedo para o degrau positivo.

Considerando que processo é não linear, para fins de sintonia dos controladores clássicos (PID paralelo e serial), fez-se necessário a obtenção das funções de transferência representativas do processo para cada perturbação. A função de transferência do processo empregada para a sintonia foi a média das duas funções encontradas. Para realizar a

identificação da função de transferência do processo para as perturbações empregou-se o *toolbox ident* do Matlab 7.7.0 (R2008b).

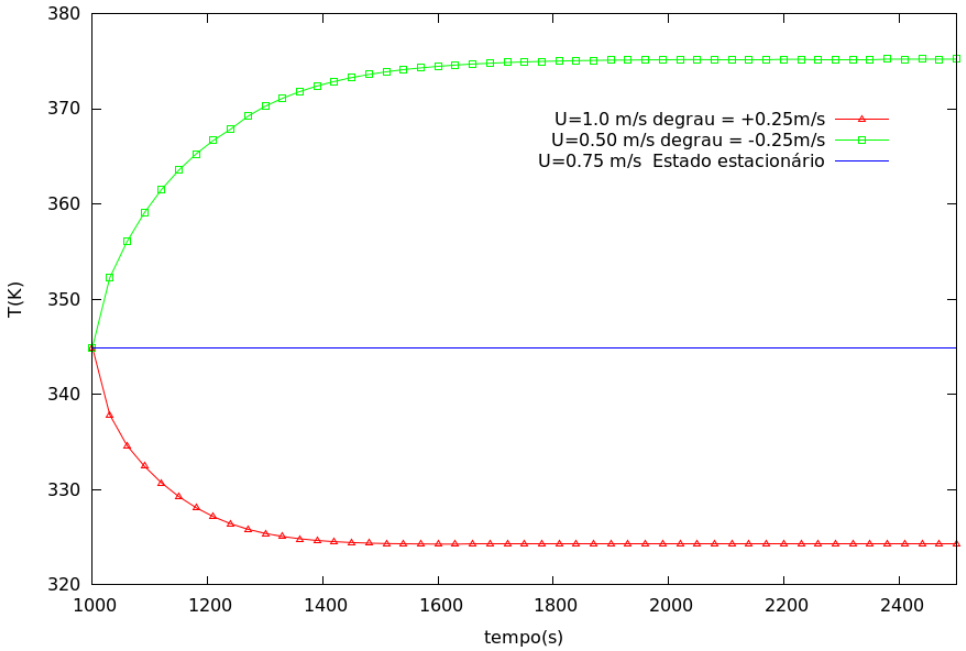

Figura 16. Simulação do processo de aquecimento de ar para as perturbações de ± 0,25 m/s impostas na velocidade de entrada do ar. Temperaturas medidas na saída do aquecedor.

A Figura 17 mostra a variação da temperatura na saída do aquecedor ao longo do tempo, resultado da identificação do processo para a perturbação negativa na velocidade de entrada do ar. Vale lembrar que o tempo foi transportado para a origem apenas por questão de visualização (o tempo 0 representa o tempo de inserção do distúrbio que foi 1000 s).

A função de transferência encontrada para a perturbação negativa é representada pela Equação 133.

$$G(s) = \frac{K_{p1}}{(1+\tau_1 s)(1+\tau_2 s)} \tag{133}$$

Tal que: K_{p1} = -121,41, τ_1=179,39 e τ_2=14,22.

A Figura 18 mostra o resultado da identificação do processo para a perturbação positiva na velocidade de entrada do ar, ilustrando a variação da temperatura na saída do aquecedor ao longo do tempo.

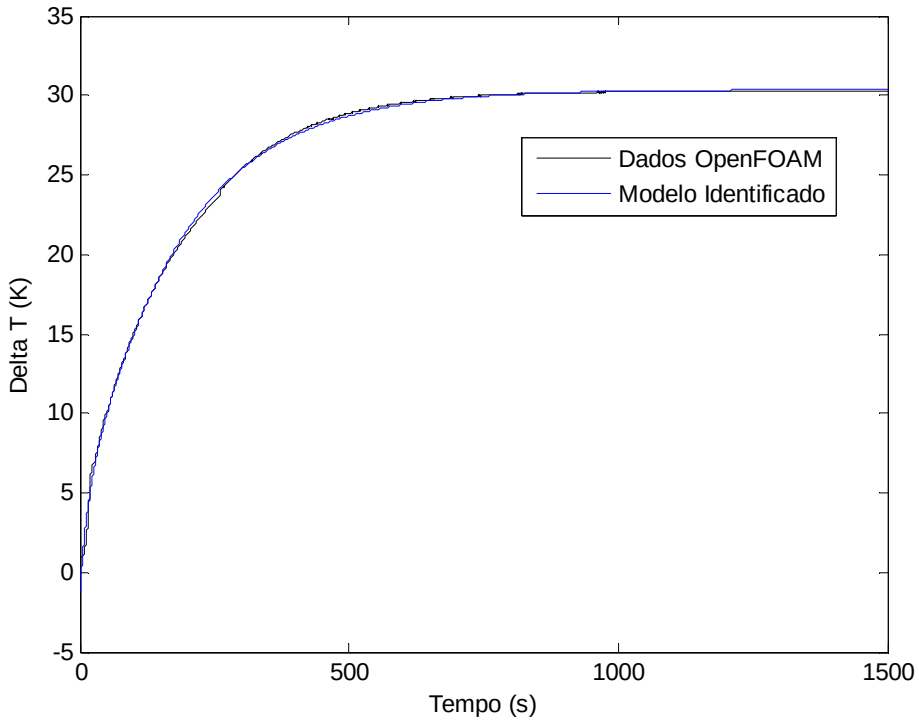

Figura 17. Resultado da identificação do processo frente a uma perturbação negativa de – 0,25 m/s em degrau na entrada do aquecedor.

A função de transferência encontrada para a perturbação positiva é representada pela Equação 134.

$$G(s) = \frac{K_{p2}}{(1+\tau_3 s)(1+\tau_4 s)} \tag{134}$$

Tal que: K_{p2} = -82,86, τ_3=116,53 e τ_4=10,90.

Os desvios dos resultados dos modelos de função de transferência, em relação aos dados obtidos a partir da simulação com degraus negativo e positivo no *OpenFOAM* foram

considerados aceitáveis, por meio de testes estatísticos mostrados na Tabela 5, de modo que o modelo pode ser empregado para fins de sintonia de controladores.

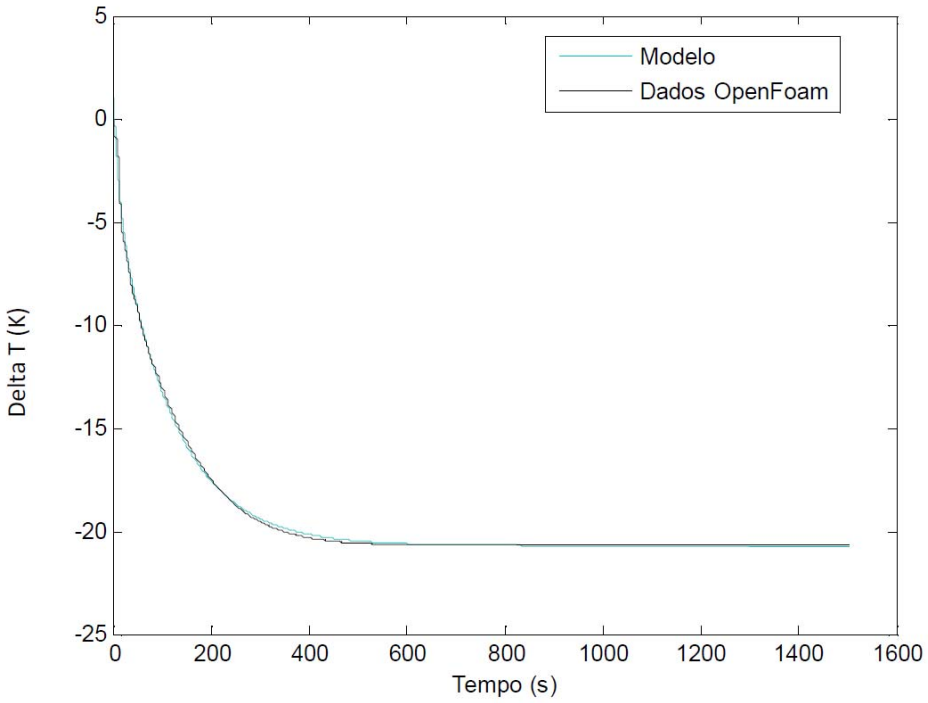

Figura 18. Resultado da identificação do processo frente a uma perturbação positiva de + 0,25 m/s em degrau na entrada do aquecedor.

Na estatística clássica, o valor-p é a probabilidade de se obter uma estatística de teste igual ou mais extrema que aquela observada em uma amostra, sob a hipótese nula. Por exemplo, em testes de hipótese, pode-se rejeitar a hipótese nula a 5 % caso o valor-p seja menor que 5 % (MONTGOMERY & RUNGER, 2001). Nos modelos propostos, a hipótese nula era que o modelo não conseguiria representar os dados, como o valor p é menor que 0,05 (95,0 % de confiança), rejeita-se a hipótese nula e os modelos propostos são capazes de descrever os fenômenos descritos pelos dados. Os valores dos parâmetros estatísticos do coeficiente de determinação (R^2), o coeficiente de correlação de Pearson (R), o valor da probabilidade (p) e o teste de hipótese nula, para ambos os modelos são mostrados na Tabela 5. Chama-se de modelo 1, a perturbação negativa e modelo 2, a perturbação positiva.

Tabela 5. Parâmetros Estatísticos de Correlação para os modelos 1 e 2

Parâmetros Estatísticos	Modelo 1	Modelo 2
R^2	0,9898	0,9910
R	0,9902	0,9945
Classificação da Correlação	Forte Positiva	Forte Positiva
p-value	$8{,}9 \times 10^{-4}$	$9{,}2 \times 10^{-4}$
Rejeição da Hipótese Nula	Sim	Sim

A Equação 135 mostra a função de transferência média, que representa os processos de perturbações positiva e negativa em degrau de ± 0,25 m/s, introduzidas na velocidade de entrada do ar no aquecedor. Os parâmetros da função de transferência foram empregados para a sintonia dos controladores PID paralelo e serial.

$$G(s) = \frac{K_{pm}}{(1+\tau_{1m}s)(1+\tau_{2m}s)} \tag{135}$$

Tal que: K_{pm} = -102,36, τ_{1m} = 147,96 e τ_{2m} = 12,60.

O método de sintonia empregado para os controladores PID paralelo e série foi o IMC *(Internal Model Control)*. Para a função de transferência identificada, os parâmetros do controlador PID paralelo podem ser calculados pelas expressões abaixo (SEBORG *et al.*, 2011; LIU & GAO, 2012):

$$K_c = \frac{\tau_{1m} + \tau_{2m}}{\tau_c K_{pm}} \tag{136}$$

$$\tau_I = \tau_{1m} + \tau_{2m} \tag{137}$$

$$\tau_D = \frac{\tau_{1m}\tau_{2m}}{\tau_{1m} + \tau_{2m}} \tag{138}$$

Tal que: $\tau_c \cong \tau_{dom}/3$ e τ_{dom} é definido como o maior valor entre as constantes de tempo identificadas na função de transferência representativa do processo (SEBORG *et al.*, 2011). A constante de tempo dominante para o processo em questão é τ_{1m} = 147,96 e $\tau_c = 60$.

Para o controlador PID série, os parâmetros podem ser calculados a partir daqueles obtidos para o controle PID em paralelo, por meio das equações abaixo (SEBORG *et al.*, 2011):

$$K_c^s = \frac{K_c}{2}\left(1 + \sqrt{1 - 4\tau_D / \tau_I}\right) \tag{139}$$

$$\tau_I^s = \frac{\tau_I}{2}\left(1 + \sqrt{1 - 4\tau_D / \tau_I}\right) \tag{140}$$

$$\tau_D^s = \frac{\tau_I}{2}\left(1 - \sqrt{1 - 4\tau_D / \tau_I}\right) \tag{141}$$

tal que: K_C^s, τ_I^s e τ_D^s representam, respectivamente, o ganho proporcional, a constante de tempo integral e a constante de tempo derivativa, para o controlador PID em Série, identificado pelo sobrescrito "s".

Os parâmetros do controlador sem sobrescrito representam os parâmetros para o controlador PID em paralelo. Os valores numéricos dos parâmetros dos controladores PID em paralelo e série podem ser vistos na Tabela 6.

Tabela 6. Valores numéricos da sintonia IMC para os Controladores PID (paralelo e série)

Controladores PID	K_C	τ_I	τ_D
Paralelo	-0,026142	160,522	6,86
Série	-0,024972	153,339	7,18

Para o controlador preditivo (MPC), a função de convolução foi obtida por meio de uma perturbação negativa de 0,25 m/s na velocidade de alimentação. Considerando que a perturbação não foi em degrau unitário, fez-se necessário dividir os valores obtidos para a função convolução pela magnitude da perturbação imposta, isto é, 0,25.

A Figura 19 mostra a resposta do processo frente a perturbação de -0,25 m/s na velocidade de entrada do ar no aquecedor. Pela análise da figura, pode-se concluir que o novo estado estacionário se estabelece por volta de 2100 s com um valor de temperatura de 375,20 K.

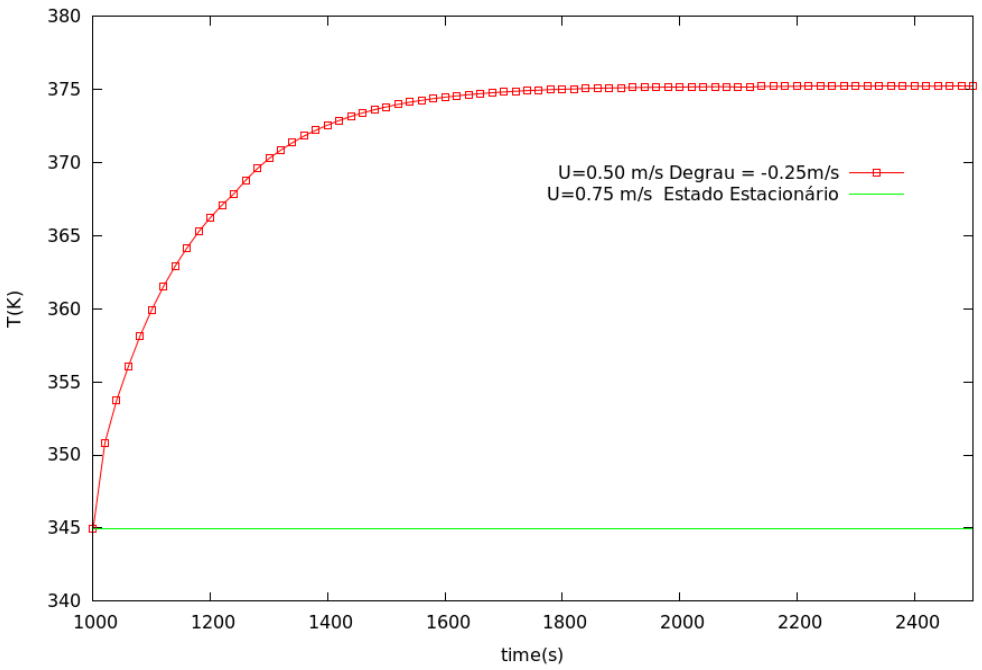

Figura 19. Resposta do sistema frente a uma perturbação negativa de 0,25 m/s na velocidade de alimentação do ar.

Para a configuração do controlador preditivo faz-se necessário definir o número de intervalos existentes na função de convolução (N) e o período de amostragem (Δt). A relação entre essas duas variáveis é estabelecida pela Equação 142 (SEBORG *et al.*, 2011):

$$N\Delta t = t_e \tag{142}$$

Tal que t_e é o tempo de estabilização da curva de resposta frente a perturbação.

No caso em estudo t_e = 1200 s. Os valores típicos para N são: $30 \leq N \leq 120$ (SEBORG *et al.*, 2011). Definiu-se N=120, logo, $\Delta t = 10s$.

Para a obtenção de uma mesma base comparativa, o mesmo período de amostragem (Δt) foi empregado para todos os controladores (preditivo S-DMC, DMC e PID´s paralelo e em série) e para todas as simulações. A próxima seção aborda os resultados obtidos com a comparação dos controladores em malha fechada.

4.5 Comparação de Controladores em Malha Fechada

4.5.1 Definição dos Problemas Servo e Regulador

Para o Problema Servo foram propostos dois casos. Em ambos, a mudança no *set-point* foi introduzida no tempo igual a 1000 s, a partir do estado estacionário de 344,98 K obtido com a simulação base, na qual os valores assumidos para a velocidade e a temperatura de entrada do ar foram iguais a 0,75 m/s e 300,00 K, respectivamente, e para a troca térmica através das paredes, 15,0 W/m^2 . Os dois casos foram definidos para a obtenção de uma variação de ± 5,8 % em torno do valor do estado estacionário, o que resulta em uma variação de temperatura de ± 20,00 K. Desta forma, tem-se os casos:

- Caso 1.1: *set-point* igual a 364,00 K – variação positiva de 20,00 K.
- Caso 1.2: *set-point* igual a 324,00 K – variação negativa de 20,00 K.

Para o primeiro problema regulador também foram propostos dois casos. Em ambos, a mudança na temperatura de entrada do ar foi introduzida no tempo igual a 1000 s, a partir do estado estacionário de 344,98 K, obtido com a simulação base, na qual velocidade e temperatura de entrada do ar foram iguais a 0,75 m/s e 300,00 K, respectivamente. A troca térmica através das paredes continuou igual a 15,0 W/m^2 . Os dois casos foram definidos para a obtenção de uma variação de temperatura de ± 10,00 K na temperatura de entrada do ar. O *set-point* foi mantido como o próprio valor do estado estacionário 344,98 K. Assim, tem-se os casos:

- Caso 1.3: Temperatura de entrada do ar: 310,00 K; *set-point* igual a 344,98 K;
- Caso 1.4: Temperatura de entrada do ar: 290,00 K; *set-point* igual a 344,98 K;

Para o segundo problema regulador também foram elaborados dois casos. Em ambos a mudança na carga térmica trocada pelas paredes da malha foi introduzida no tempo igual a 1000s, a partir do estado estacionário de 344,98 K, obtido com a simulação base, na qual velocidade e temperatura de entrada do ar foram iguais a 0,75 m/s e 300,00 K, respectivamente. A temperatura de entrada do ar foi mantida em 300,00 K. Os dois casos foram definidos para a obtenção de uma variação de carga térmica de ± 1,5 W/m^2. O *set-point* foi mantido como o próprio valor do estado estacionário 344,98 K. Assim, tem-se os casos:

- Caso 1.5: Carga térmica 16,5 W/m^2; *set-point* igual a 344,98 K;
- Caso 1.6: Carga térmica 13,5 W/m^2; *set-point* igual a 344,98 K;

4.5.2 Sintonia dos Controladores Preditivos

Sintonia do Controlador S-DMC

A sintonia do controlador MPC simplificado foi obtida por meio da variação do único parâmetro disponível, a constante de filtro α. Foram realizadas simulações com o intuito de estudar a sensibilidade e o efeito deste parâmetro sobre o desempenho de controle. Como a sintonia do controlador precisa ser única para todos os casos simulados, será empregado o valor médio de α obtido entre nos casos Servo e Regulador.

Um critério para a escolha do parâmetro α é de que produza pequenos valores para o índice de desempenho ISE. O primeiro estudo realizado com o controle preditivo simplificado foi para os casos do Problema *Set-point*, descrito no Capítulo de Metodologia.

A Figura 20 ilustra o comportamento do controle preditivo simplificado frente a alterações neste parâmetro, para os Casos 1.1 e 1.2. Pode-se concluir que o aumento do parâmetro α diminui a agressividade da ação de controle, o que deixa a resposta do sistema mais lenta. Entretanto, existe um aumento significativo do ISE com o aumento do parâmetro, conforme explícito na Tabela 7. Como α=0 apresentou o menor ISE, este valor foi adotado para o estudo de performance do controlador Preditivo frente aos controladores clássicos, para os casos do problema Servo proposto.

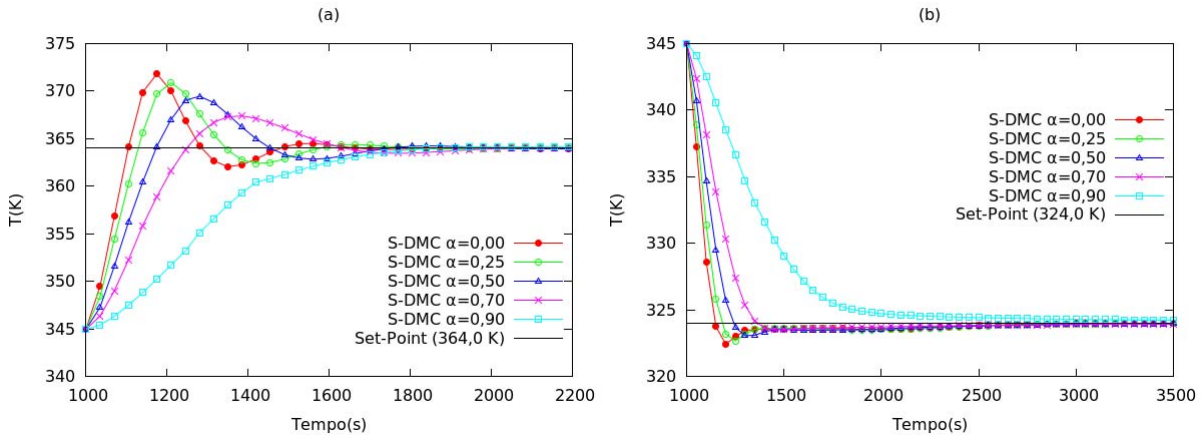

Figura 20. Performance do controlador Preditivo simplificado (S-DMC) frente a variações do parâmetro α. (a) *set-point* 364,00 K; (b) *set-point* 324,00 K.

Tabela 7. Índices de performance do controlador Preditivo simplificado frente a variações no parâmetro α para os Casos 1.1 e 1.2.

	Set-point 364,00 K (Caso 1.1)			Set-point 324,00 (Caso 1.2)		
α	ISE	Trise	Os (%)	ISE	Trise	Os (%)
0	**2059000**	**1104,4**	**2,15**	**1058100**	**1104,4**	**0,49**
0,25	2326898	1128,3	1,89	1485635	1178,6	0,40
0,50	2784278	1172.9	1,50	1741713	1239,8	0,29
0,70	3530550	1247,8	0,93	2542864	1362,4	0,14
0,90	7122923	1859,1	0,05	4896022	3300	0,00

Os valores de α também foram estudados para os dois problemas reguladores propostos. A Figura 21 mostra o desempenho do controle preditivo simplificado frente a mudanças neste parâmetro para o primeiro problema regulador proposto Casos 1.3 e 1.4 (variação na temperatura de entrada do ar). Conclui-se que, neste caso, o aumento do parâmetro α diminui a agressividade da variável manipulada sem, contudo, deixar a resposta do sistema mais lenta. Com a elevação do valor do parâmetro em estudo, houve uma melhora significativa dos índices de performance, com destaque para o ISE para ambos os casos (ver Tabela 8). Como α=0,90 apresentou o menor ISE, para um distúrbio na temperatura de alimentação do ar, este valor é considerado o melhor entre os estudados.

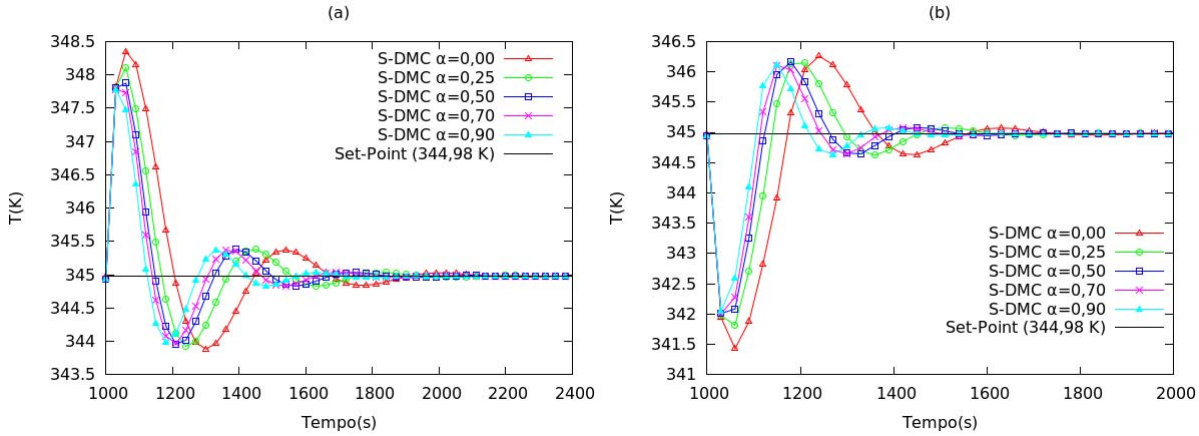

Figura 21. Performance do controlador Preditivo simplificado (S-DMC) frente a variações do parâmetro α. : (a) temperatura de entrada do ar 310,00 K – Caso 1.3; (b) temperatura de entrada do ar 290,00 K - Caso 1.4; *set-point* de 344,98 K para ambos os casos.

Tabela 8. Índices de performance do controlador Preditivo simplificado frente a variações no parâmetro α para os Casos 1.3 e 1.4

	Temperatura de Entrada	*310,00* K (Caso 1.3)	*Temperatura 290,00 K de Entrada (Caso 1.4)*	
α	ISE	Os (%)	ISE	Os (%)
0	132276	0,33	125513	0,37
0,25	91220	0,31	85551	0,35
0,50	73967	0,30	69161	0,34
0,70	65667	0,29	60951	0,34
0,90	**54978**	**0,28**	**50904**	**0,33**

Para o segundo problema regulador (variação na carga térmica trocada pelas paredes), o valor do parâmetro α = 0,90 também apresentou o menor ISE, logo performance de controle superior aos demais valores do parâmetros comparados.

A Figura 22 ilustra o comportamento do controle preditivo simplificado frente a alterações neste parâmetro para os Casos 1.5 e 1.6. Observa-se que o aumento do parâmetro α diminui a agressividade da ação de controle, mas sem deixar a resposta do sistema mais lenta. Houve uma melhora significativa dos índices de performance, com destaque para o ISE, com o aumento do parâmetro, conforme explicitado na Tabela 9.

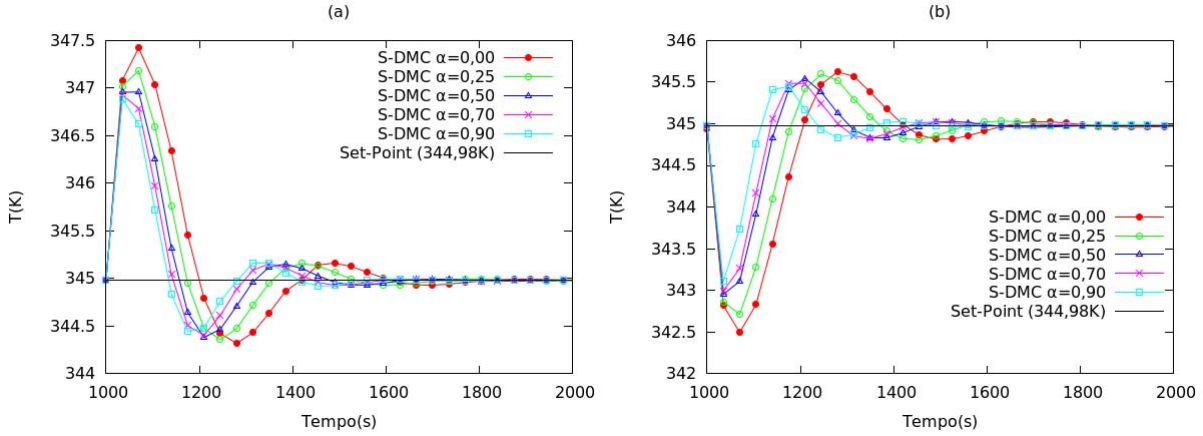

Figura 22. Performance do controlador Preditivo simplificado frente a variações do parâmetro α. : (a) carga térmica de 16,5 W/m^2 – Caso 1.5; (b) carga térmica de 13,5 W/m^2 - Caso 1.6 *set-point* de 344,980 K para ambos os casos.

Tabela 9. Índices de performance do controlador Preditivo simplificado frente a variações no parâmetro α para os Casos 1.5 e 1.6

	Carga Térmica 16,5 W/m^2(Caso 1.5)		*Carga Térmica 13,5 W/m^2(Caso 1.6)*	
α	ISE	Os (%)	ISE	Os (%)
0	64188	0,19	68690	0,19
0,25	48120	0,18	51660	0,18
0,50	38035	0,17	34724	0,16
0,70	32402	0,16	30145	0,16
0,90	**28088**	**0,16**	**21247**	**0,14**

Desta forma, como para o problema *Set-point* o melhor valor de α foi de 0,00 e para os Problemas Reguladores o valor otimizado foi de 0,90, optou-se por um valor intermediário entre ambos, α=0,50.

Sintonia do Controlador DMC

Foram realizadas várias simulações variando os quatro parâmetros definidos para a sintonia do controlador DMC (P, α, λ e γ), de maneira a se encontrar a configuração de sintonia mais estável (menos oscilatória) e com menor ISE. A Tabela 10 mostra as configurações de sintonia testadas. Variou-se principalmente o horizonte de predição, pois foi possível chegar-se a uma resposta rápida e estável, basicamente, por meio deste parâmetro.

Tabela 10. Configurações empregadas na sintonia do controlador DMC para os casos Set-point (324,00 K) e Regulador (Carga Térmica pelas paredes igual a 16,5 W/m^2)

Configuração	*Parâmetros*			
	P	α	λ	γ
A	30	0,0	1,00	1,00
B	40	0,0	1,00	1,00
C	40	0,25	1,00	1,00
D	55	0,00	1,00	1,00

A Figura 23 mostra os resultados obtidos com as simulações das configurações de sintonia testadas (ver Tabela 10) para os casos Servo 324,00 K (Figura 22b) e para o Caso Regulador com perturbação positiva de carga térmica pelas paredes (16,5 W/m^2), Figura 23a. Como teoricamente esperado, um aumento no horizonte de predição leva a uma resposta mais estável do sistema, entretanto, a mesma tende a ficar mais lenta. Esse fenômeno pode ser observado nos dois casos ilustrados na Figura 23. O parâmetro de sintonia α também contribuiu para uma resposta mais conservativa mas com um impacto menor quando comparada com o aumento do horizonte de predição. Por fim, a melhor configuração de sintonia indicada foi a que apresentou o menor valor para o índice de performance ISE, mostrado na Tabela 11. Pala análise da tabela, evidencia-se que o aumento do horizonte de predição levou a valores menores de ISE até um limite no qual a resposta mais lenta do sistema, apesar de não apresentar oscilações foi determinante para o aumento do ISE devido a demora em atingir o *set-point* estipulado.

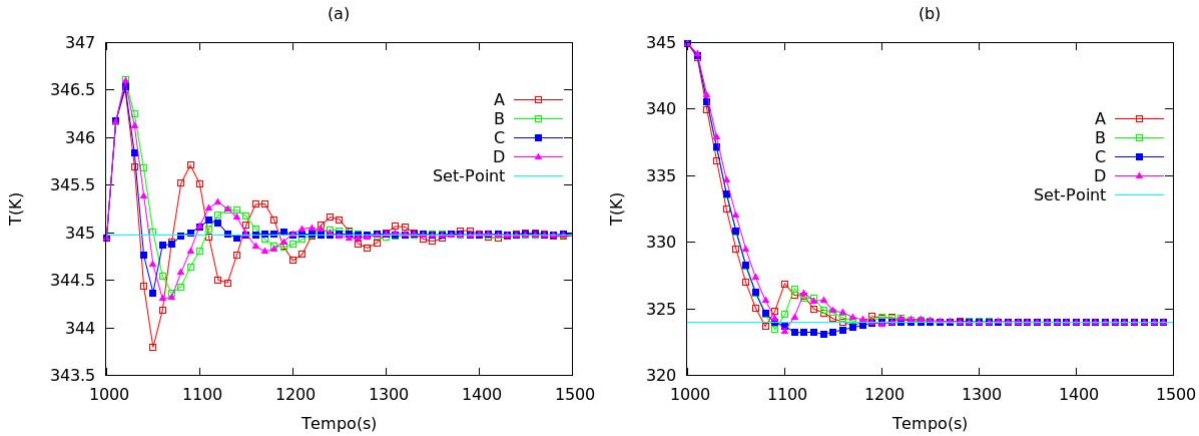

Figura 23. Simulações com as configurações de sintonia para os casos Servo (324,00 K) e Regulador (Carga térmica pelas paredes = 16,5 W/m^2). A: P=30; B: P=40; C: P=40 α=0,25; D: P=55;

Tabela 11. Índice de desempenho ISE para as configurações de sintonia testadas para os casos *set-point* (324,00 K) e regulador (Carga Térmica 16,5 W/m^2)

Casos	*Configurações de Sintonia*			
	ISE			
	A	B	C	D
Caso Servo	1198900	1104300	**690385**	900567
Caso Regulador	13456	11100	**9247**	10689

A melhor configuração encontrada foi a configuração C descrita como:

Horizonte de predição (P) – 40; constante de filtro - 0,25; λ – 1,00; γ- 1,00.

Na próxima seção discutem-se os resultados obtidos com o problema servo proposto.

4.5.3 Resultados do Problema *Servo*

A Figura 24 mostra a performance dos controladores PID (paralelo e em série) e preditivos (versões simplificada e completa) para os Casos 1.1 (Figura 24a) e 1.2 (Figura 24b). Observa-se que todos os controladores conseguiram atingir o *set-point* desejado, para ambos os casos. Verifica-se o comportamento mais suave e conservador dos controladores preditivos, comportamento característico desta classe de controladores, para o controlador DMC. Vale lembrar que o α empregado para o controlador preditivo simplificado (S-DMC) foi igual a 0,50. Visualmente, o controlador DMC com a formulação completa apresentou a melhor performance de controle. Os índices de performance de controladores ISE, Te, Os, Tr e EM foram calculados e estão listados na Tabela 12.

Pela análise das Figuras 24 (a) e (b), pode-se afirmar que o controlador DMC apresenta sensibilidade semelhantes para ambos os casos, apesar do fato de que a função de convolução foi obtida com um degrau negativo (mesma direção do *set-point* do Caso 1 – 364,000 K). Para os controladores clássicos, a sensibilidade também foi a mesma, pois a sintonia foi realizada pelo emprego da média das funções de transferência dos dois degraus (positivo e

negativo) de perturbação impostos na velocidade de entrada do ar. As seguintes simplificações de legenda serão adotadas: P-PID – PID em paralelo; S-PID – PID em série; S-DMC – controlador preditivo formulação simplificada; DMC- controle preditivo formulação completa.

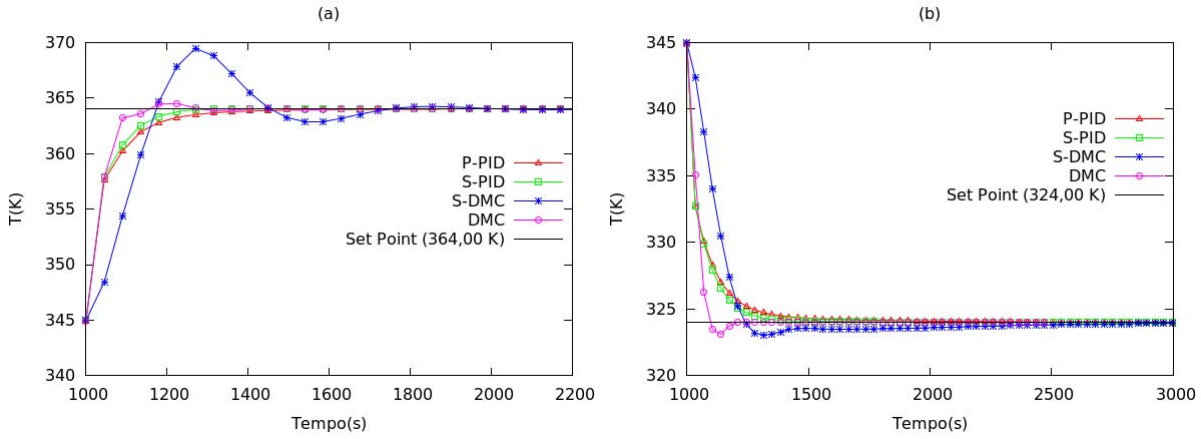

Figura 24. Simulação dos controladores PID e Preditivos para casos do Problema Servo: (a) *set-point* 364,00 K-Caso 1.1; (b) *set-point* 324,00 K-Caso 1.2.

A Figura 25 mostra o comportamento da variável manipulada, velocidade de entrada do ar, ao longo da simulação para os controladores PID (série e paralelo) e preditivos, para os dois casos do Problema Servo propostos. A análise da figura confirma que o comportamento mais conservador e suave do controlador preditivo que suavizou e estabilizou a resposta do sistema, efeito mais evidenciado na formulação DMC com horizonte descendente, em ambos os casos. Verifica-se uma diferença entre os valores finais da variável manipulada para o controlador DMC simplificado e os demais controladores para o Caso 1.1. Essa diferença foi de 0,0090 m/s ou em erro percentual 1,58 %. Os PID´s e o controlador DMC atingiram um valor final de velocidade de 0,5690 m/s, enquanto que no controle preditivo simplificado (S-DMC), o valor final foi de 0,5780 m/s, acerca do controlador S-DMC pode-se afirmar que o mesmo apresentou o pior desempenho de controle dentre os controles testados. Entretanto, esta divergência não impede que o *set-point* seja atingido pois a variação é praticamente imperceptível para o cálculo da temperatura de saída do aquecedor. Para o Caso 1.2, todos os controladores atingiram o mesmo valor para a variável manipulada (1,0170 m/s).

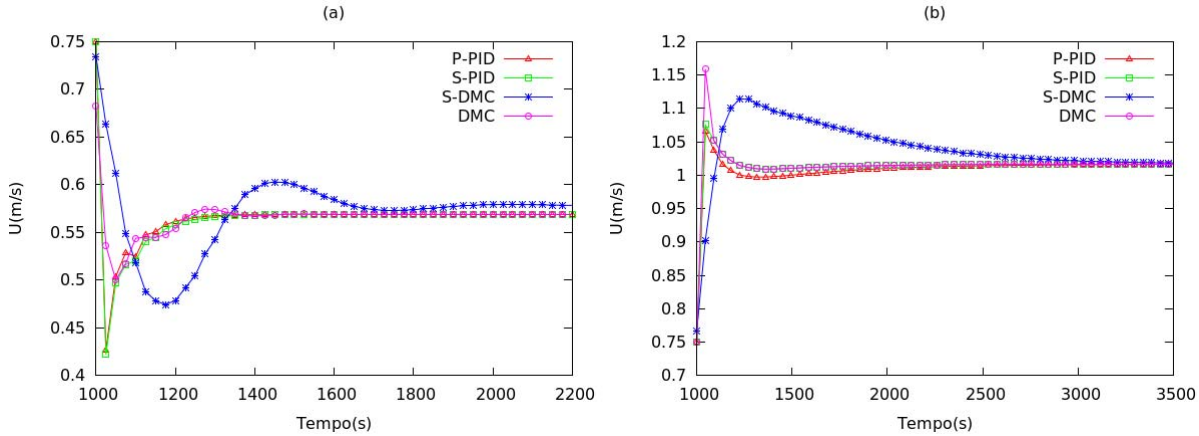

Figura 25. Comportamento da variável manipulada para os controladores PID e Preditivo para os casos proposto para o Problema Servo: (a) *set-point* de 364,00 K- Caso 1.1; (b) *set-point* de 324,00 K – Caso 1.2.

Tabela 12. Índices de performance dos controladores para os Casos 1.1 e 1.2

	Set-point 364,000 K (Caso 1.1)					*Set-point* 324,000 K (Caso 1.2)				
Controle	ISE	Trise	Te	EM	Os(%)	ISE	Trise	Te	EM	Os(%)
P-PID	772110	1488,5	1042,1	0,4820	-	1023100	1697,4	1069,3	0,3520	
S-PID	743060	1275,2	1041,5	0,4590	-	983430	1498,2	1068,5	0,3222	
S-DMC	2784278	1172,9	1109,2	0,5320	1,50	1741713	1239,8	1140,0	0,4240	0,29
DMC	**528343**	**1153,1**	**1041,2**	**0,3740**	**0,13**	**690385**	**1090.1**	**1053.3**	**0,2248**	**0,21**

Pela análise dos índices de desempenho dos controladores, conclui-se que o controlador DMC apresentou melhor performance que os demais para ambos os casos propostos. Mostrou o menor ISE (principal critério de desempenho), menor tempo de subida e de estabilização menor esforço de manipulação também, este critério mostra que a ação de controle do DMC é realizada de forma mais suave que os demais. Apesar do controle DMC ter apresentado *overshoot* , nota-se que o mesmo pode ser considerado desprezível.

Na próxima seção, os resultados do primeiro problema regulador proposto serão mostrados.

4.5.4 Resultados do Primeiro Problema Regulador

A Figura 26 ilustra a performance dos controladores PID (paralelo P-PID e em série S-PID) e preditivos, formulação DMC completa e simplificada (S-DMC) para os Casos 1.3 e 1.4. Nota-se que todos os controladores conseguiram manter o processo no *set-point* desejado para ambos os casos. O comportamento mais agressivo do controlador S-DMC é evidenciado. Ressalta-se que o α empregado no controle preditivo simplificado foi igual a 0,50. O controlador Preditivo DMC apresentou a melhor performance de controle, para os dois casos. Os índices de performance de controladores, ISE, Te, Os e EM, foram calculados e estão listados na Tabela 13.

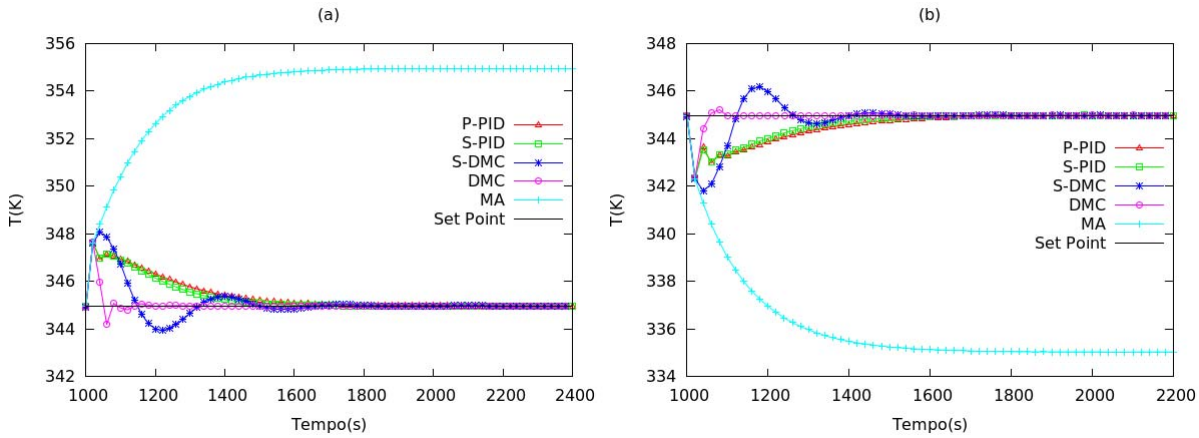

Figura 26. Simulação dos controladores PID e Preditivos para o primeiro problema regulador, Casos 1.3 e 1.4: (a) temperatura de entrada do ar 310,00 K e *set-point* de 344,98 K; (b) temperatura de entrada do ar 290,00 K e *set-point* de 344,98 K, respectivamente. MA-Resposta do sistema em malha aberta.

A Figura 27 mostra o comportamento da variável manipulada, velocidade de entrada do ar, ao longo da simulação para os controladores PID (série e paralelo) e preditivo (S-DMC e DMC), para os Casos 1.3 e 1.4. Um estudo da figura confirma o comportamento mais agressivo dos controlador S-DMC. O DMC, com horizonte descente mostrou-se mais eficiente e estabilizou a resposta do sistema mais rapidamente, atingindo o *set-point* de forma suave (Figura 25). Pode-se afirmar que todos os controladores atingiram o mesmo valor para a variável manipulada para o Caso 1.3: 0,85 m/s e o valor de 0,67 m/s para o Caso 1.4.

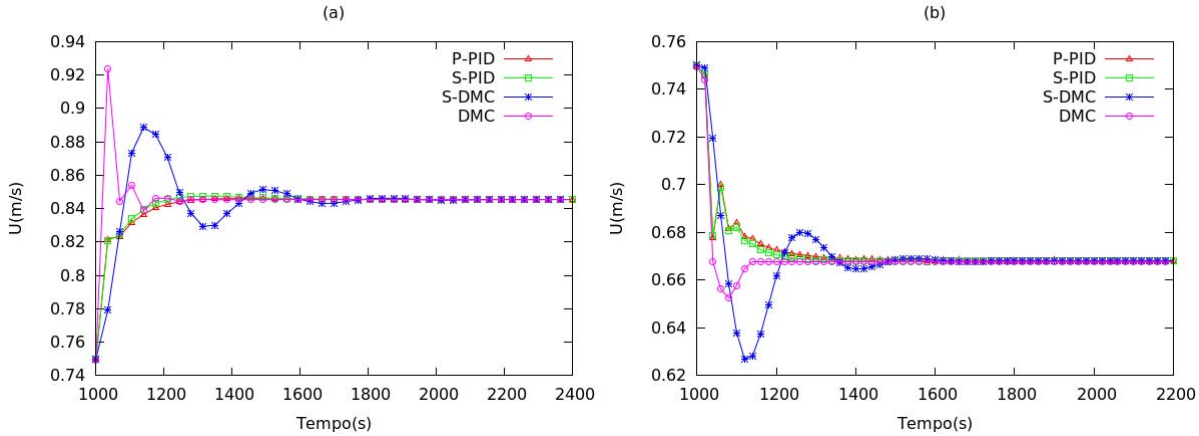

Figura 27. Comportamento da variável manipulada para os controladores PID e preditivos para o primeiro problema regulador Casos 1.3 e 1.4 e *set-point* de 344,98 K. (a) temperatura de entrada do ar 310,00 K e *set-point* de 344,98 K; (b) temperatura de entrada do ar 290,00 K e *set-point* de 344,98 K.

Pela análise da Tabela 13, conclui-se que o controle preditivo DMC, com horizonte descendente, apresentou melhor performance de controle para os casos 1.3 e 1.4. O DMC mostrou um melhor desempenho para os critérios ISE, EM, Te. Apesar de ter apresentado Os, em ambos os casos, pode-se considerar o mesmo como desprezível.

Na próxima seção, os resultados para o segundo problema regulador proposto serão mostrados.

Tabela 13. Índices de Performance para os controles PID e Preditivo para os Casos 1.3 e 1.4

Critérios	*Casos*							
	Caso 1.3				Caso 1.4			
	Temperatura de entrada 310,00 K				Temperatura de entrada 290,00 K			
	P-PID	S-PID	S-DMC	**DMC**	P-PID	S-PID	S-DMC	**DMC**
ISE	83599	73257	73967	**11616**	62048	54200	69161	**12302**
EM	0,3398	0,3245	0,5234	**0,1780**	0,2876	0,2760	0,4589	**0,1530**
Te (0,5%)	1142,5	1125,3	1101,2	**1031,0**	1034,1	1035,0	1089,7	**1028,8**
Os (%)	0	0	0,30	**0,25**	0	0	0,34	**0,09**

4.5.5 Resultados do Segundo Problema Regulador

As Figuras 28 (a) e (b) ilustram o desempenho dos controladores PID (paralelo e em série) e preditivos S-DMC e DMC para as perturbações negativa (Caso 1.5) e positiva (Caso 1.6) na carga térmica trocada pelas paredes do aquecedor. Observa-se que todos os controladores conseguiram manter o processo no *set-point* desejado. O comportamento mais agressivo do controlador preditivo simplificado é evidenciado em ambos os casos. O α empregado para o controle preditivo simplificado foi igual a 0,50. Para evidenciar qual controlador apresentou a melhor performance de controle foram calculados os índices de performance de controladores, ISE, Te, Os e EM, que estão listados na Tabela 14.

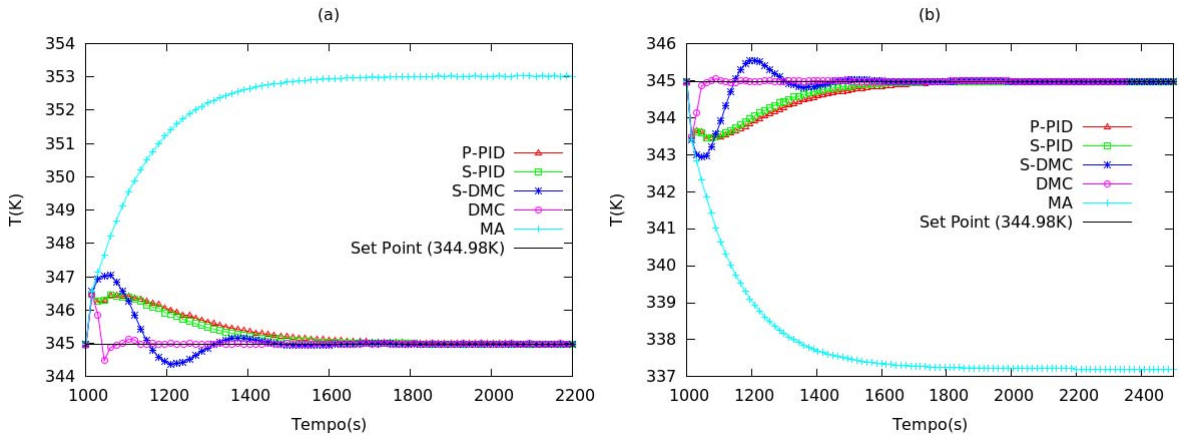

Figura 28. Simulação dos controladores PID e preditivos (SDMC e DMC) para o segundo problema regulador: (a) carga térmica de 16,5 W/m^2 – Caso 1.5; (b) carga térmica de 13,5 W/m^2 - Caso 1.6 *set-point* de 344,98 K para ambos os casos. MA- Resposta do sistema em malha aberta.

A Figura 29 mostra a variação da variável manipulada, velocidade de entrada do ar, ao longo da simulação para os controladores PID (série e paralelo) e preditivos (S-DMC e DMC). A análise da figura confirma a análise do comportamento mais agressivo do controlador preditivo simplificado (S-DMC). Para o Caso 1.5 (Figura 28a), todos os controladores atingiram o mesmo valor para a variável manipulada (0,83 m/s). Para o Caso 1.6 (Figura 28b), todos controladores convergiram a variável manipulada para o valor de 0,67 m/s.

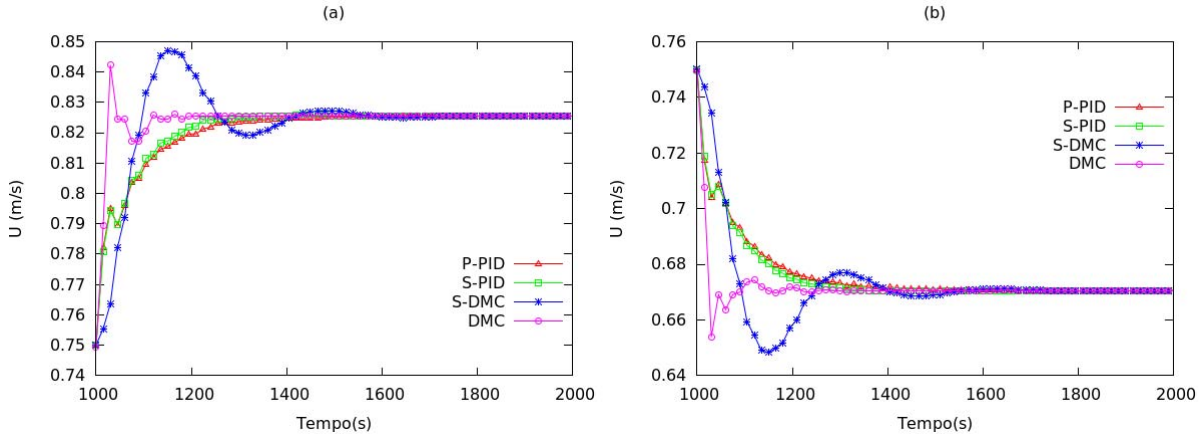

Figura 29. Comportamento da variável manipulada para os controladores PID e preditivo para o segundo problema regulador, *set-point* de 344,98 K: (a) carga térmica de 16,5 W/m^2 – Caso 1.5; (b) carga térmica de 13,5 W/m^2 - Caso 1.6.

Pela análise da Tabela 14, conclui-se que o controle preditivo DMC apresentou o melhor desempenho de controle para ambos os casos. Destaca-se que o controlador preditivo simplificado (S-DMC) apresentou, apesar do pior desempenho, um comportamento ainda estável para ambos os casos em estudo. O DMC apresentou os melhores valores de performance para todos os critérios estudados, a exceção de um pequeno *overshoot*, para ambos os casos simulados. Para o índice tempo de estabilização (Te), a faixa empregada para se estabelecer a estabilidade da resposta do sistema para o controlador empregado foi de ±0,25% em torno do *set-point*.

Na próxima seção o estudo do transiente da resposta do sistema submetido ao controle será abordado bem como o tempo computacional consumido para cada lei de controle.

Tabela 14. Índices de Performance dos Controladores para o Caso 1.5 e 1.6

Critérios	*Casos*							
	Caso 1.5 Carga Térmica 16,5 W/m^2				Caso 1.6 Carga Térmica 13,5 W/m^2			
	P-PID	S-PID	S-DMC	**DMC**	P-PID	S-PID	S-DMC	**DMC**
ISE	46181	39573	38035	**9247**	50760,6	43625,2	34724	**4490**
EM	0,2451	0,2347	0,3954	**0,1346**	0,2238	0,2131	0,3732	**0,1261**
Te (0,25%)	1239,0	1217,3	1120,0	**1030,1**	1255,0	1225,0	1112,5	**1030,1**
Os (%)	0,00	0,00	0,17	**0,14**	0	0,00	0,16	**0,00**

4.6 *Análise Fluidodinâmica do Comportamento em Malha Fechada*

Para fins de controle de processo e para os equipamentos ou instalações industriais, na maioria dos casos, tão importante quanto atingir o *set-point* desejado ou mitigar uma perturbação imposta é saber qual o transiente ou comportamento global do sistema até o controle efetivo. Para isso, a ferramenta CFD se apresenta como uma solução atraente. Para o estudo do transiente dos controladores foram escolhidos dois casos propostos anteriormente: um caso set-point (324,0 K) e um caso regulador (perturbação positiva na carga térmica troca pelas paredes 16,5 W/m^2).

4.6.1 Estudo do Transiente – Caso Servo – 324,00K

A Figura 30 mostra o perfil de temperatura global do sistema para o estado estacionário (t=1000s) Figura 30(a) e para o transiente em t=1100s para os controladores: PID paralelo (P-PID) Figura 30(b), PID serial (S-PID) Figura 30(c), preditivo DMC simplificado (S-DMC) Figura 30(d) e preditivo DMC, com horizonte descendente (DMC) Figura 30(e), para um problema cujo novo *set-point* foi de 324,00 K. Pela análise da Figura 30, pode-se perceber que já no tempo t=1100 s, o controlador DMC já demonstra um perfil de temperaturas mais frio que os demais controladores. Essa afirmação se comprova pela coloração menos avermelhada na parte superior da Figura 30(e) e mais azulada na parte inferior quando comparada com os demais controladores. De fato, esse fenômeno já era esperado, teoricamente, pois verificou-se que o controlador DMC atinge e permanece no *set-point* 324 com maior rapidez e estabilidade, ver Figura 24(b).

A Figura 31 também ilustra o perfil de temperatura para os controladores empregados, mas agora para o tempo t=1200 s. Nota-se que o perfil de temperatura do sistema sob a influência do controlador DMC continua se mostrando mais frio na parte superior do volume de controle quando comparado com os outros controladores. O jato de entrada de ar para o controlador DMC se mostra mais penetrante, ver alongamento do perfil azulado centro da Figura 31(e), pois para este tempo de simulação a velocidade de entrada do ar para o controlador DMC era maior que a dos demais.

As Figuras 32 e 33 mostram o perfil de temperaturas para os tempos 1300 e 1500 s, respectivamente. Os índices das figuras representam respectivamente: (a) P-PID, (b) S-PID, (c) S-DMC e (d) DMC. Observa-se que o controlador DMC apresenta um perfil de temperatura discretamente mais frio que o demonstrado para os demais controladores. Observa-se, ainda, o permanência do jato de entrada do ar um pouco mais proeminente que o

constatado nos demais controles. Deve-se ressaltar que aparentemente, em 1500s todos os controladores, à exceção do S-DMC, já tinham atingido e permanecido no estado estacionário estabelecido para a saída do sistema (324,0 K).

Uma vez que foram constatadas diferenças nos perfis de temperatura ao longo do transiente para as leis de controle implementadas, foram propostos mais 4 pontos de monitoramento para o sistema. Esses pontos podem ser visualizados na Figura 34. Foram escolhidos dois pontos na saída do sistemas, um acima (T1) e outra abaixo (T2) do ponto de monitoramento empregado no controle. Os dois pontos adicionais foram indicados devido à formação do gradiente de temperatura formado ao longo do eixo y. Um na parte superior (T3) e o outro na parte inferior (T4). Os pontos cartesianos dos quatro pontos de monitoramento podem ser vistos na Tabela 15.

Tabela 15. Pontos de Monitoramento e de Controle empregados no estudo.

Pontos	*Eixo Cartesiano*		
	x	y	z
T (Ponto de Controle)	12,00	2,50	0,00
T1	12,00	2,65	0,00
T2	12,00	2,35	0,00
T3	6,00	4,75	0,00
T4	6,00	0,25	0,00

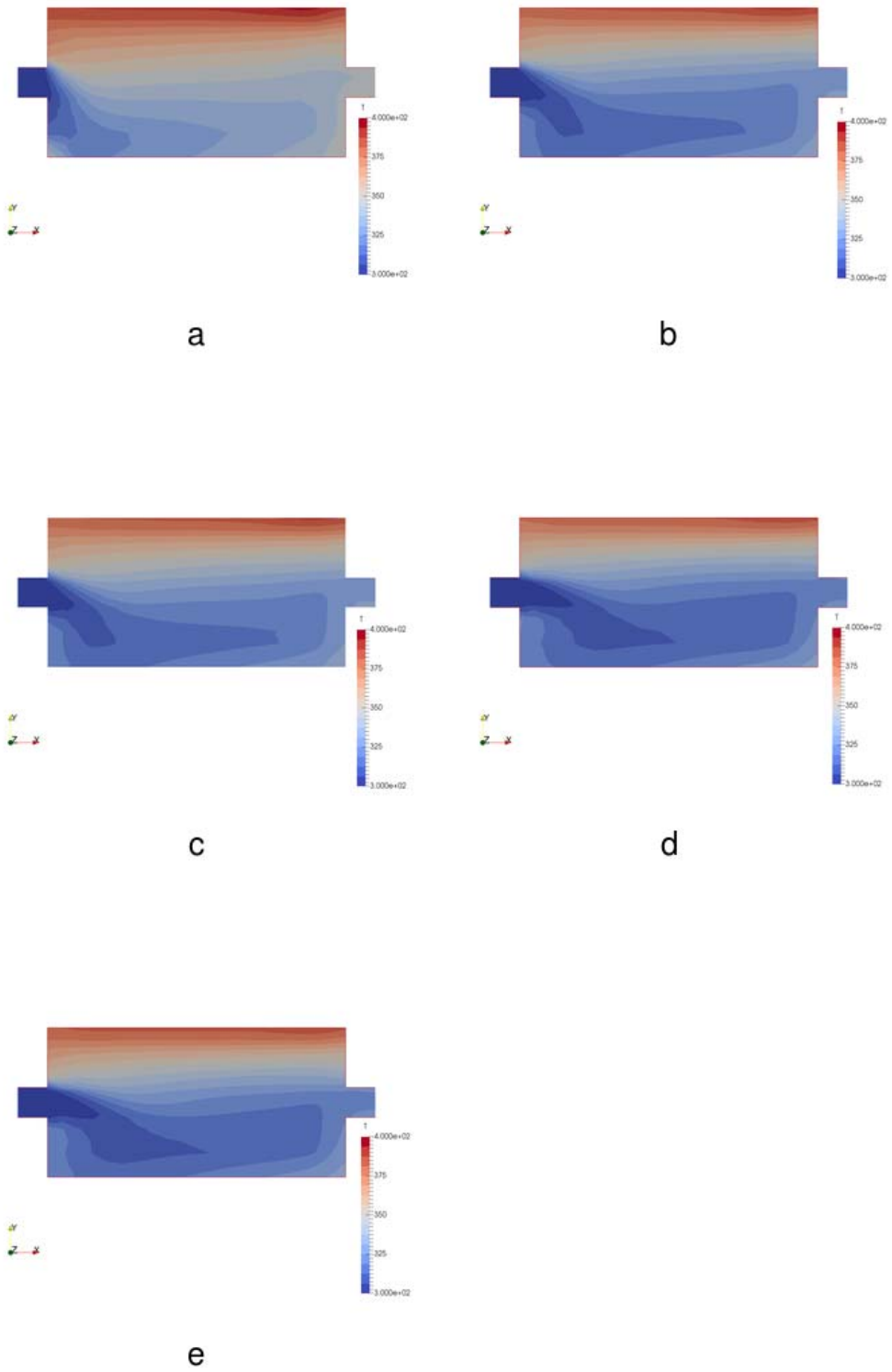

Figura 30. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1100s. (a) Estado Estacionário (t=1000s). (b) Controle PID Paralelo; (c) Controle PID Serial; (d) DMC simplificado; (e) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K.

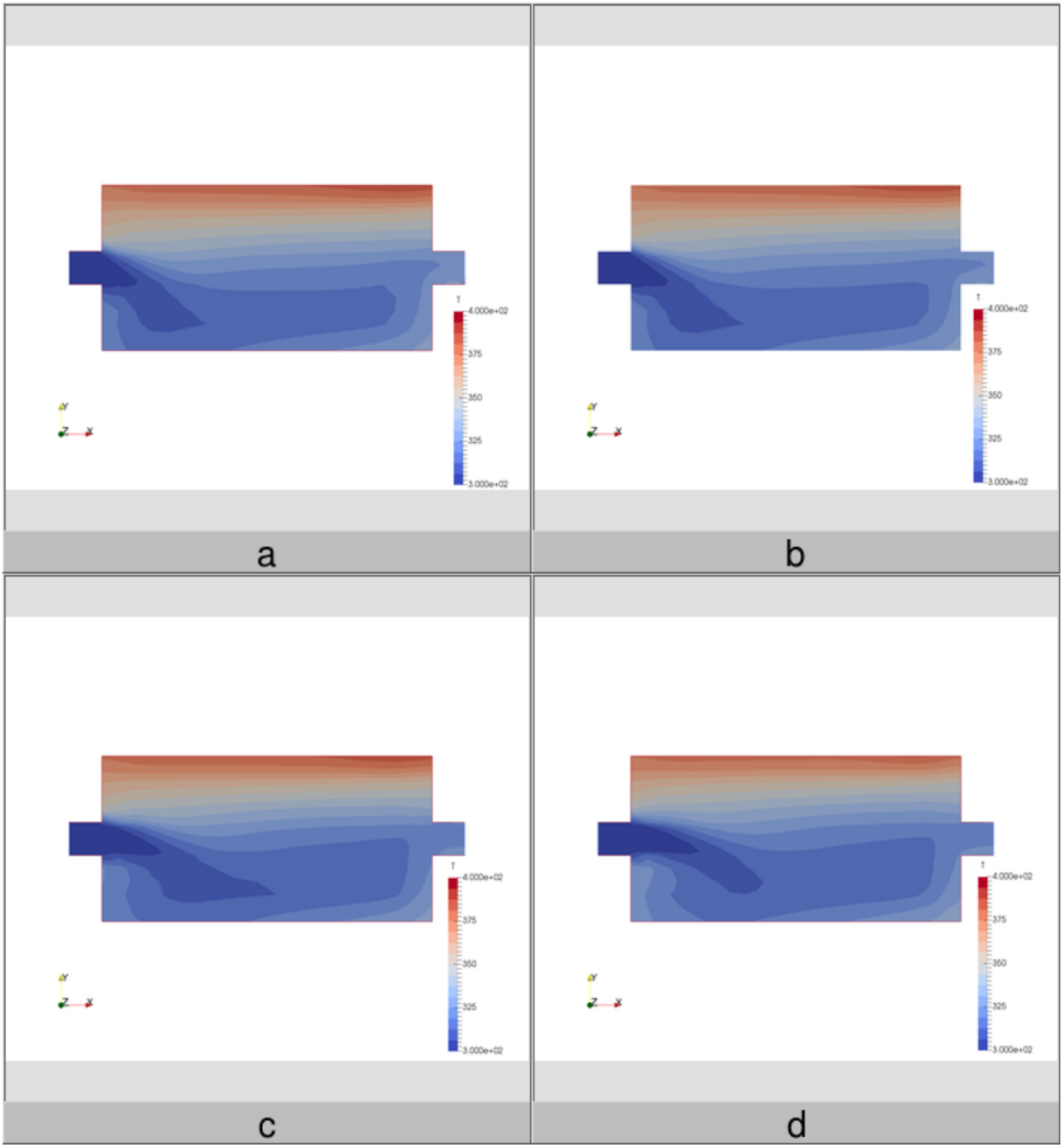

Figura 31. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1200s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K.

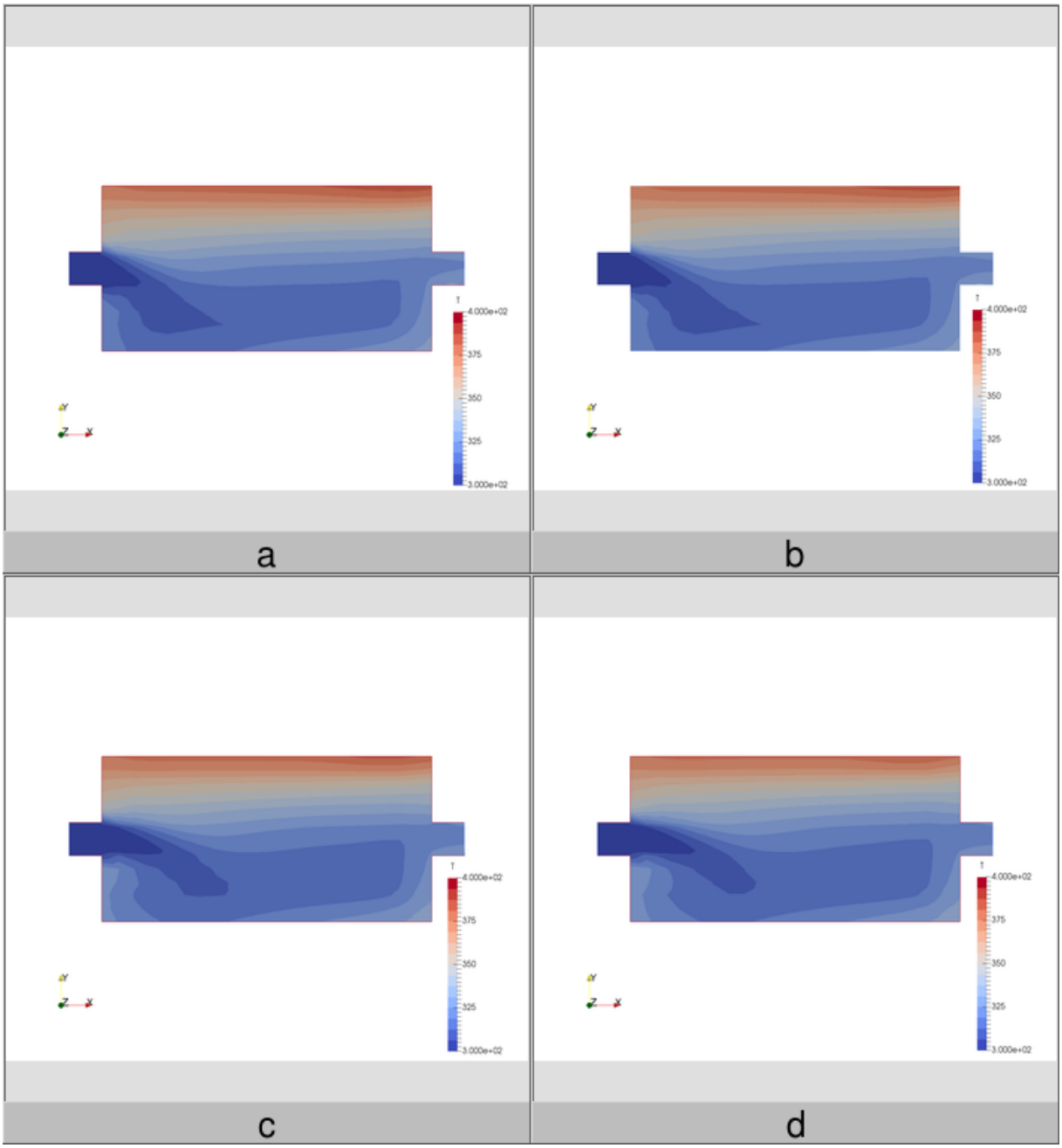

Figura 32. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1300s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K.

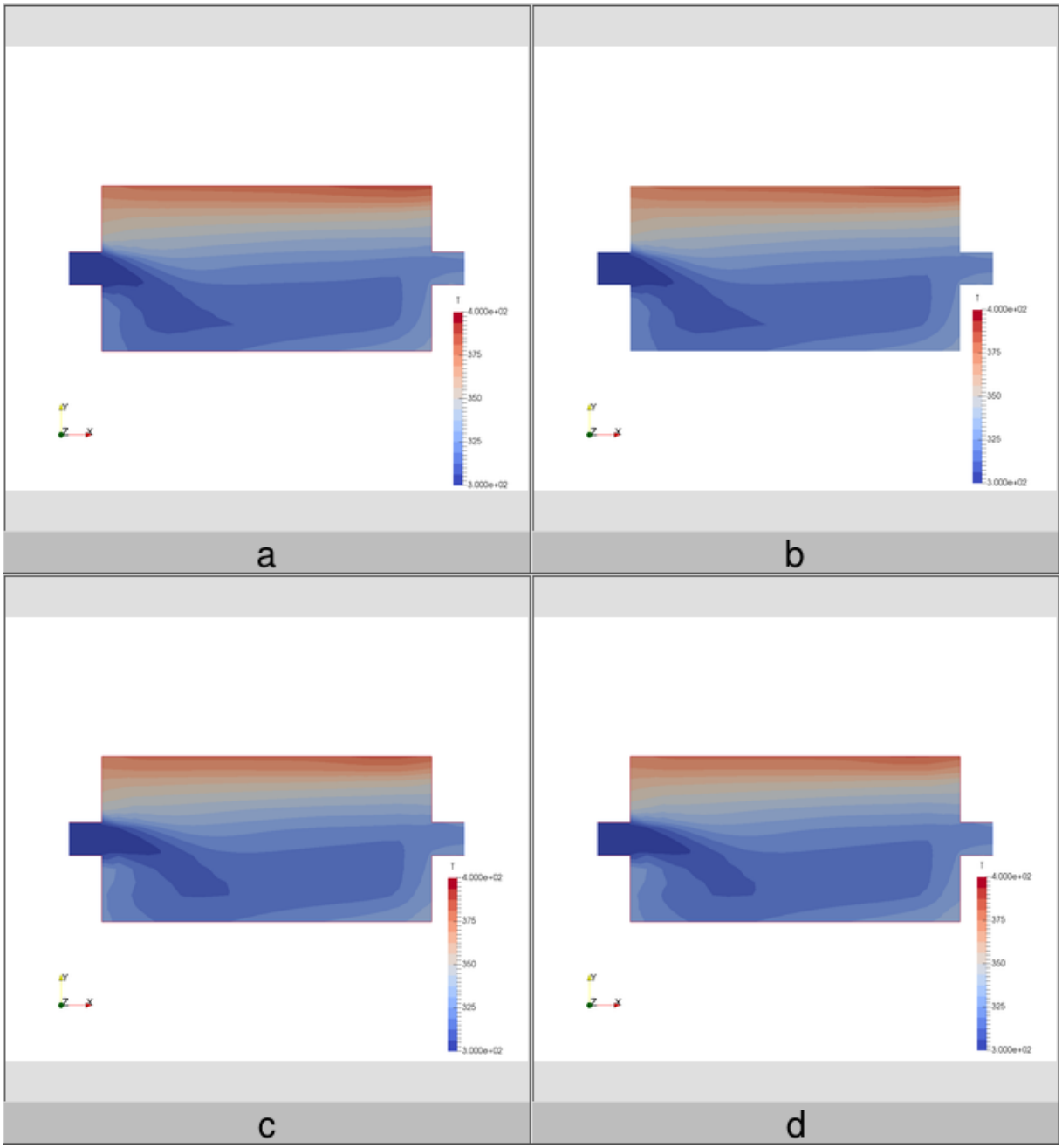

Figura 33. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1500s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K.

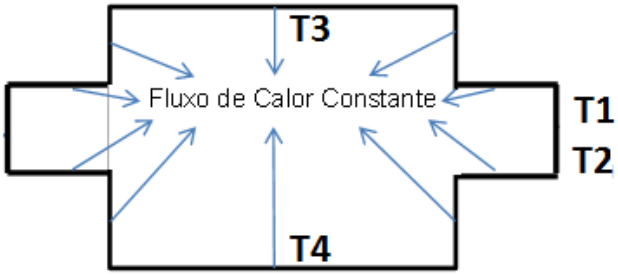

Figura 34. Pontos de Monitoramentos extras inseridos na geometria para estudar o transiente da temperatura interna do volume de controle

As Figura 35 e 36 mostram o perfil de temperatura para os controladores PID e preditivos para o ponto de monitoramento T1 e T2, respectivamente. Apesar destes pontos não terem sido empregados de maneira direta nas leis de controle, pode-se observar que os controladores praticamente atingem o valor imposto para o *set-point,* principalmente para o Ponto T1, com uma discreta vantagem para o controlador DMC. Os perfis apresentados pelos controladores condizem com os obtidos com a Figura 24(b). O DMC atinge e permanece um valor estável de forma mais rápida que os demais. Pela análise destas duas Figuras, pode-se afirmar que o controlador DMC apresenta um perfil de saída, quanto à temperatura, mais estável e próximo do valor desejado (*set-point*), mesmo para os pontos de monitoramento não empregados no controle. Este fato ressalta a superioridade do controle DMC não só pelo desempenho de controle demonstrado pelos critérios de controle, mas também pelo perfil da resposta produzida, para este caso em questão.

As Figura 37 e 38 ilustram o perfil de temperatura para os controladores PID e preditivos para o ponto de monitoramento T3 e T4, respectivamente. O novo estado estacionário alcançado, como era esperado na teoria, foi mais baixo que o ponto inicial, pois o problema simulado alterava o estacionário (344,98 K) na saída do sistema para um *set-point* menor (324,00 K). Entretanto, pode-se observar que em ambas as figuras o controlador DMC se estabiliza de forma mais rápida e em um valor um pouco inferior que os demais. Isso demonstra que apesar de todos os controladores atingirem o alvo desejado na saída do volume controle, o transiente de cada um deles percorre caminhos diferentes e isso afeta o perfil da saída (Figuras 34 e 35) bem como o perfil interno de temperaturas, ainda que de maneira sutil.

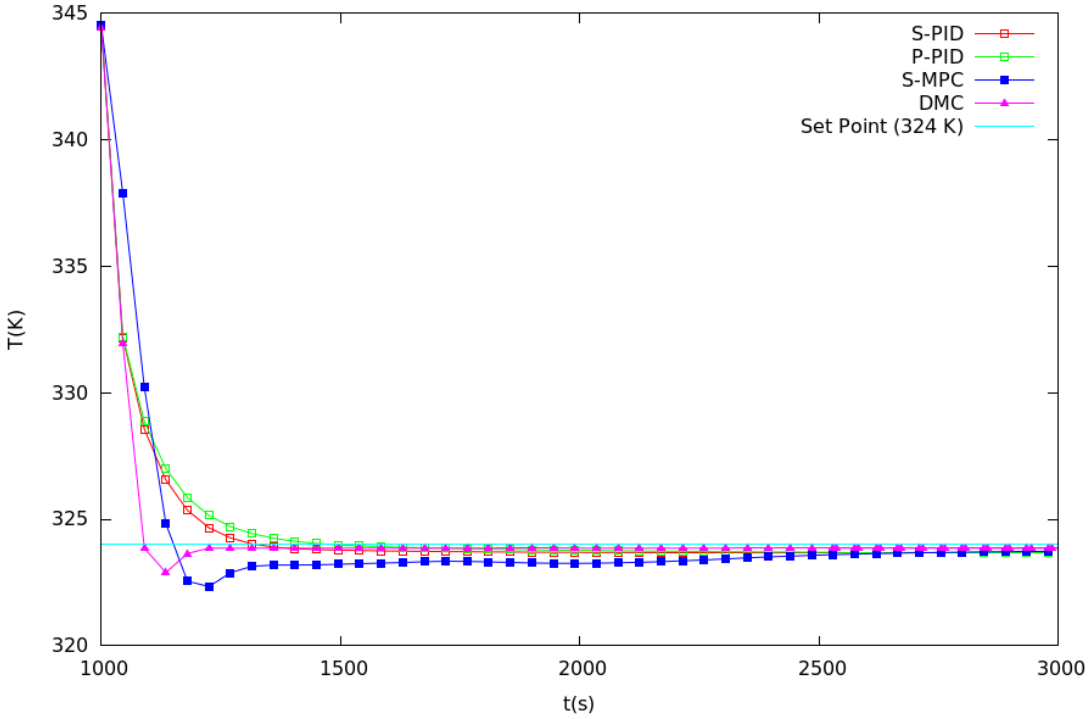

Figura 35. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e formulação completa (DMC) para o ponto de monitoramento T1.

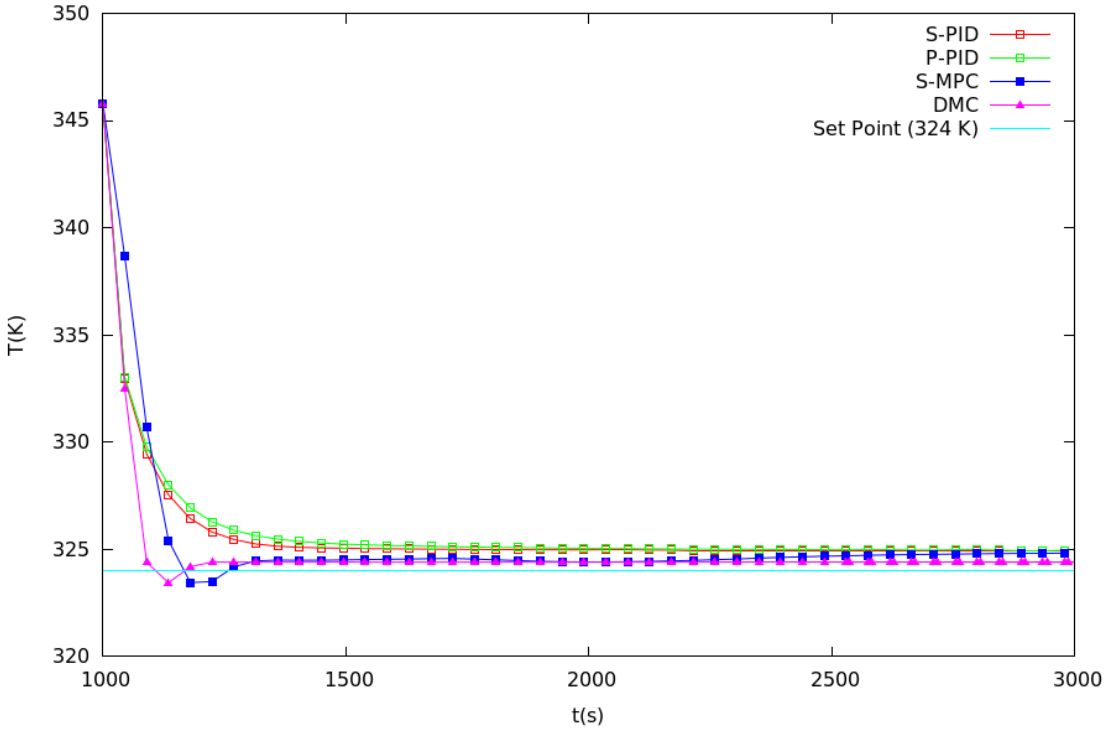

Figura 36. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e formulação completa (DMC) para o ponto de monitoramento T2.

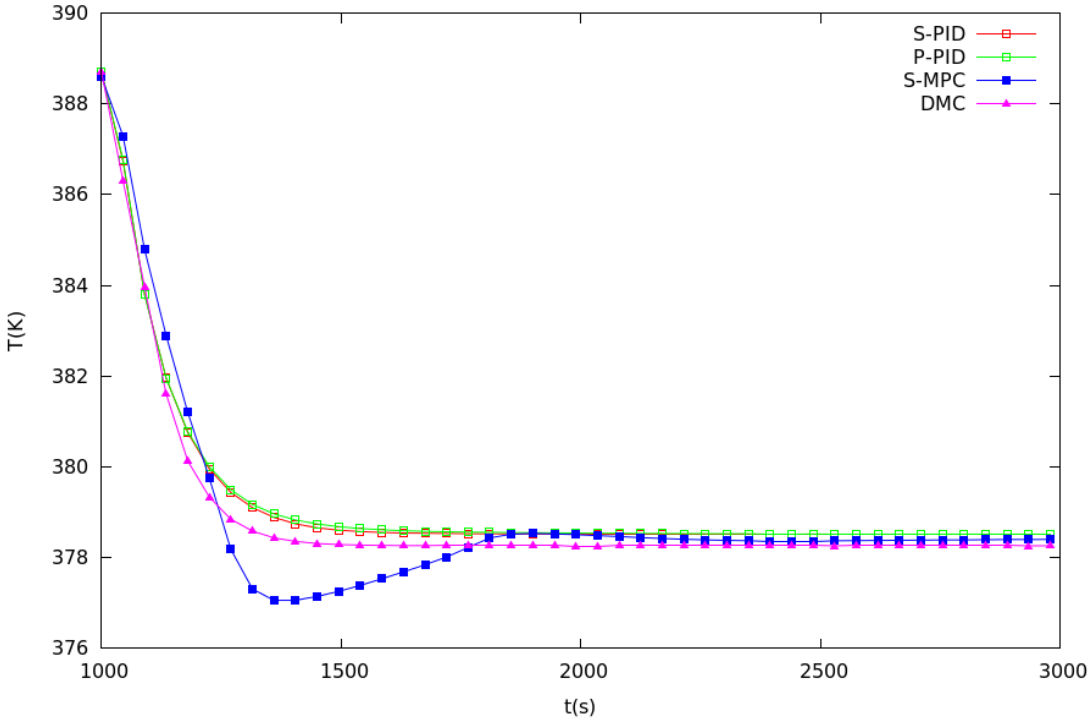

Figura 37. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e formulação completa (DMC) para o ponto de monitoramento T3

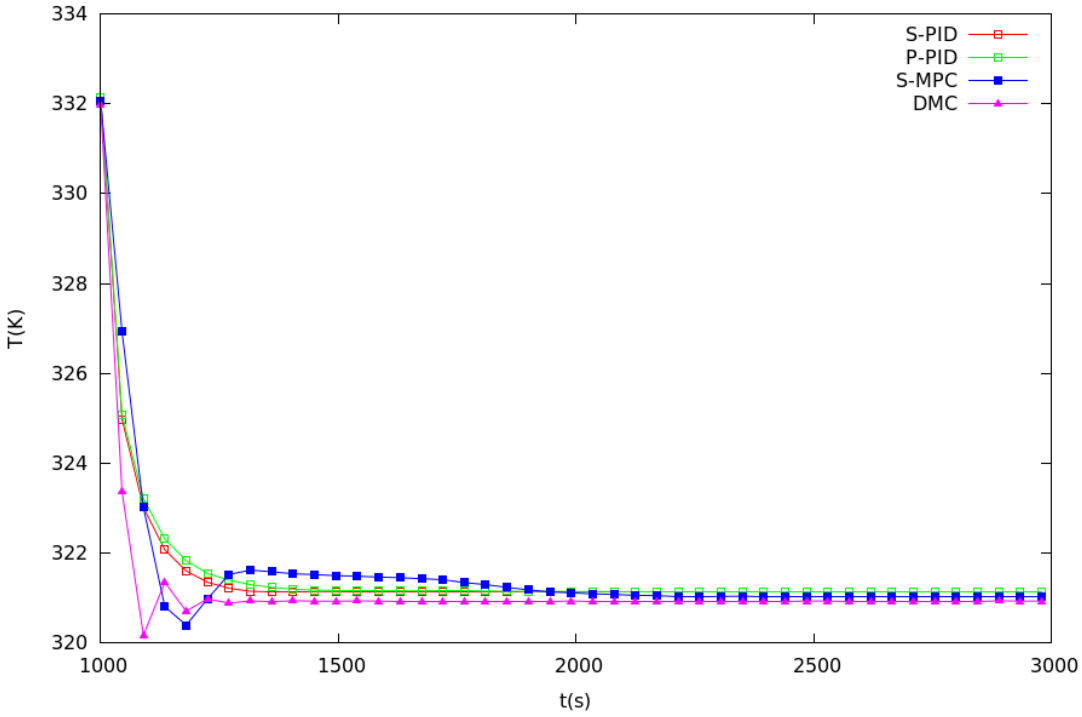

Figura 38. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e formulação completa (DMC) para o ponto de monitoramento T4.

A próxima seção mostra os resultados obtidos com o estudo do transiente de um problema regulador simulado.

4.6.2 Estudo do Transiente – Caso Regulador – Perturbação Positiva na Carga Térmica – 16,5 W/m^2

A Figura 39 mostra o perfil de temperatura global do sistema para o estado estacionário (t=1000s) - Figura 39(a) e para o transiente em t=1100s para os controladores: PID paralelo (P-PID) Figura 39(b), PID serial (S-PID) Figura 39(c), preditivo DMC simplificado (S-DMC) Figura 39(d) e preditivo DMC, com horizonte descendente (DMC) Figura 39(e), para uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes do sistema. Pela análise da Figura 39, pode-se perceber a formação de um ponto de aquecimento mais pronunciado na parte superior (à direita) do sistema para todos os controladores estudados (região mais avermelhada da Figura 39). Entretanto, verifica-se que o controle DMC apresenta um aquecimento menos intenso que os demais controles, fato justificado pela qualidade intrínsica deste controlador em responder mais adequadamente a perturbações e mudanças no *set-point* que os demais controladores estudados.

A Figura 40 também ilustra o perfil de temperatura para os controladores empregados, mas agora para o tempo t=1200 s. Observa-se que o perfil de temperatura do sistema sob a influência do controlador DMC mostra-se mais frio na parte superior do volume de controle quando comparado com os demais controladores, mas ainda assim apresenta-se mais quente que o ilustrado pelo estado estacionário de partida (Figura 39a). Ressalta-se que o jato de entrada de ar mostra o mesmo perfil para todos os controladores simulados.

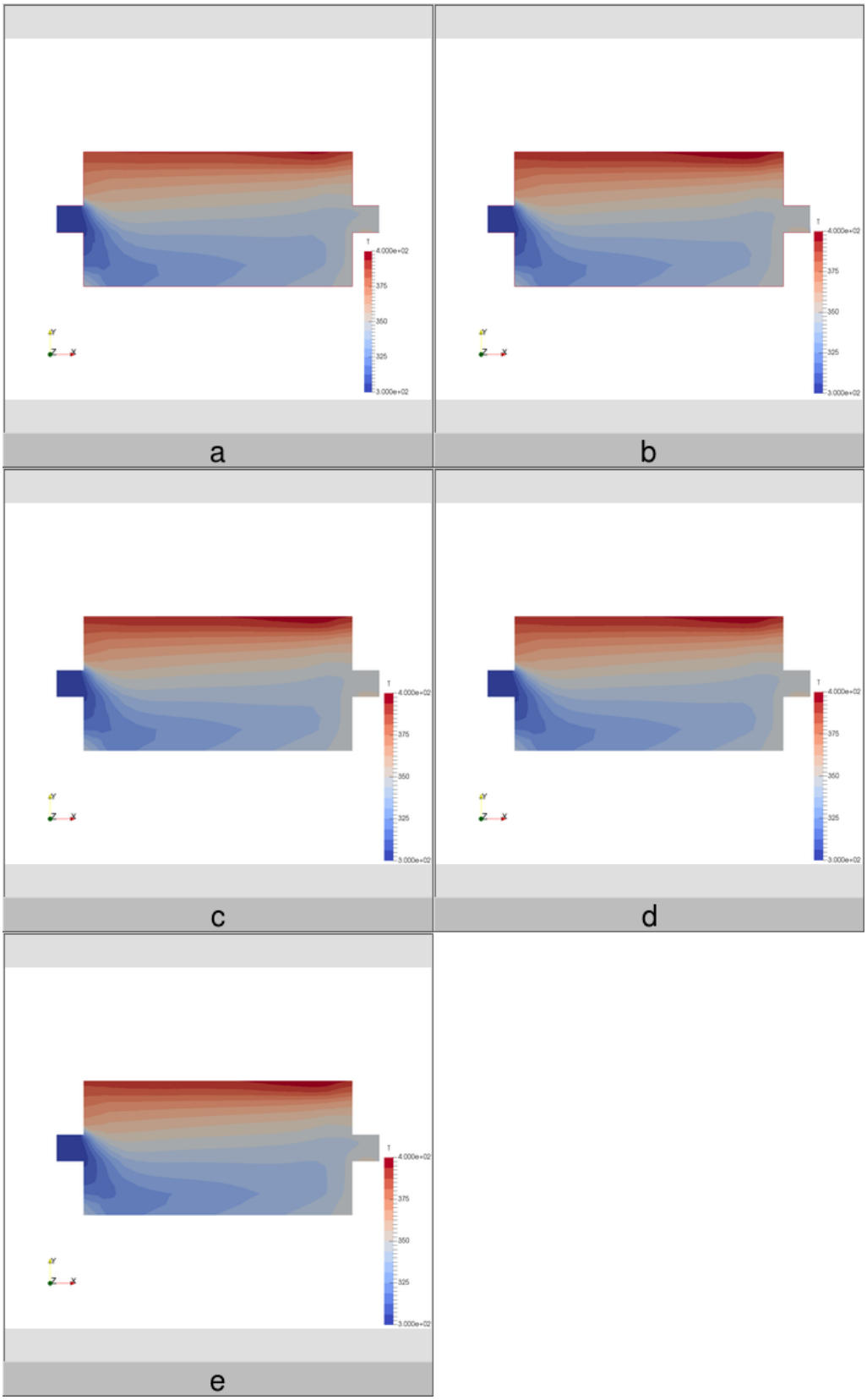

Figura 39. Estudo do transiente para o tempo de simulação t=1100s para problema regulador. (a) Estado Estacionário (t=1000s). (b) Controle PID Paralelo; (c) Controle PID Serial; (e) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K.

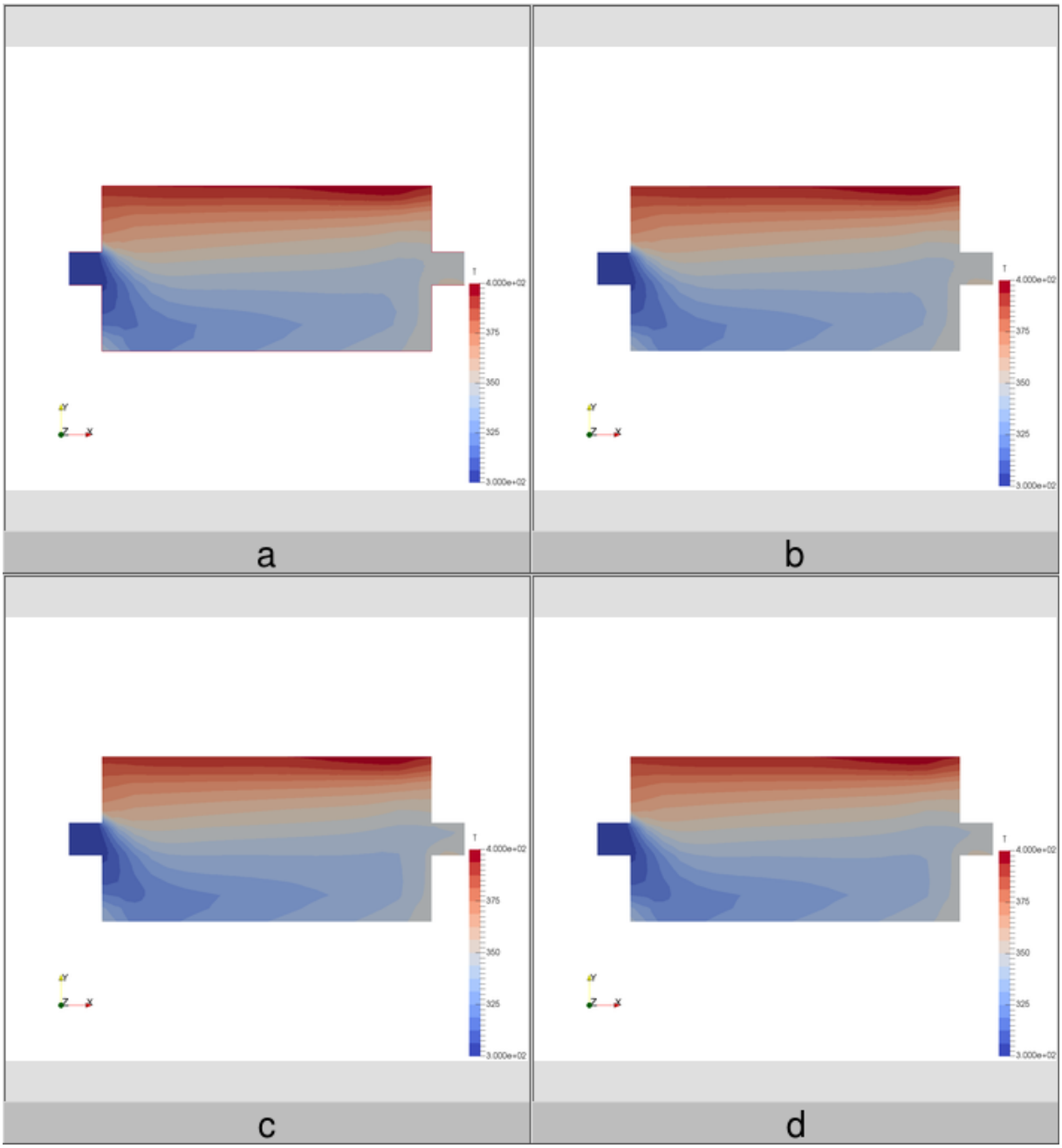

Figura 40. Estudo do transiente frente a uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes para o tempo de simulação t=1200s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K.

As Figuras 41 e 42 mostram o perfil de temperaturas para os tempos 1300 e 1600 s, respectivamente. Os índices das figuras representam respectivamente: (a) P-PID, (b) S-PID, (c) S-DMC e (d) DMC. Observa-se que todos os controladores, aparentemente, apresentam o mesmo perfil de temperatura. Observa-se, contudo, que estes perfis de temperatura aparentam ser maiores que o perfil de temperatura inicial (estado estacionário). Uma vez que este

problema trata-se de um caso regulador, o esperado teoricamente era que as temperaturas tanto de controle quanto as internas retornassem para seus valores de origem.

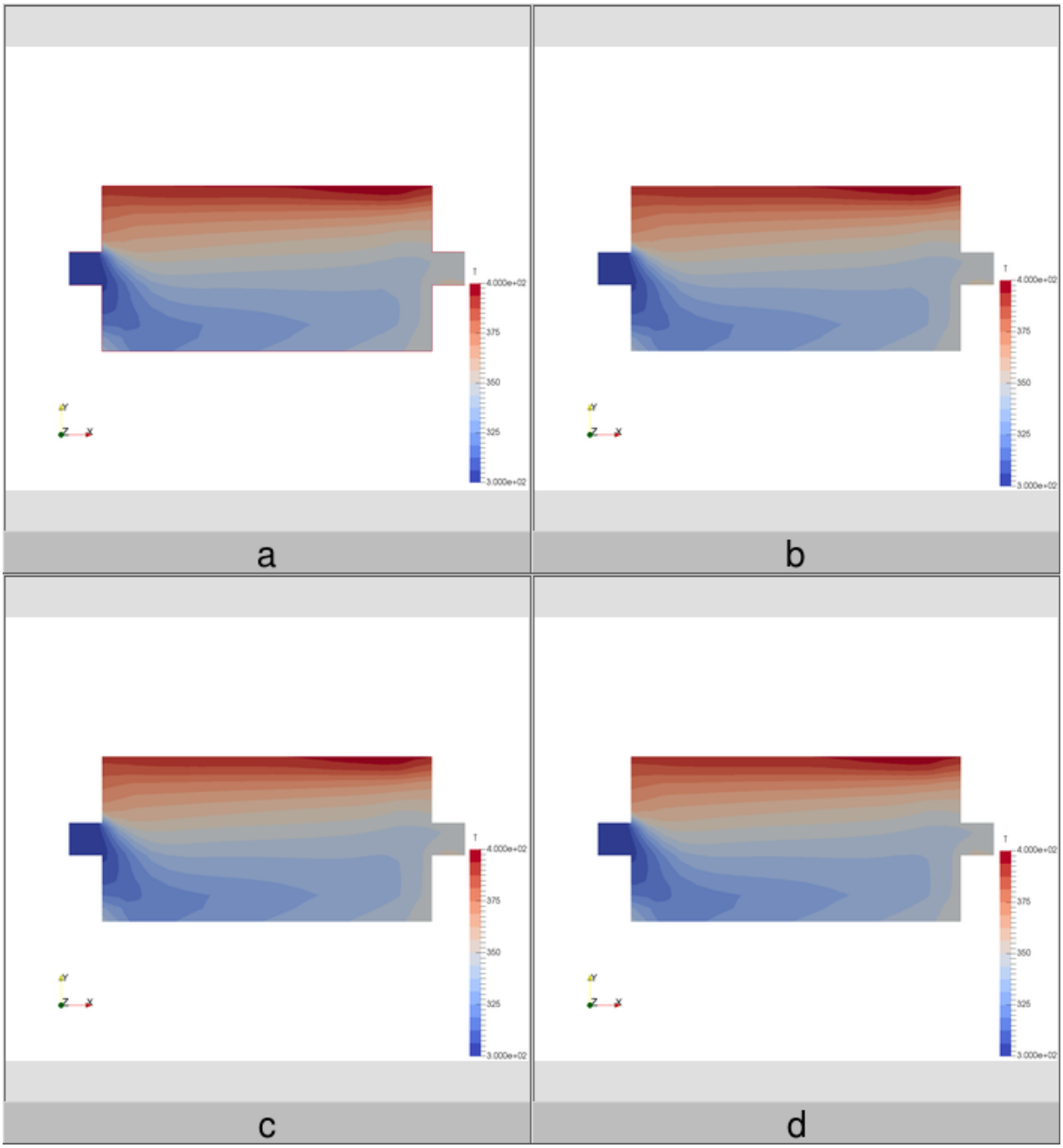

Figura 41. Estudo do transiente frente a uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes para o tempo de simulação t=1300s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K.

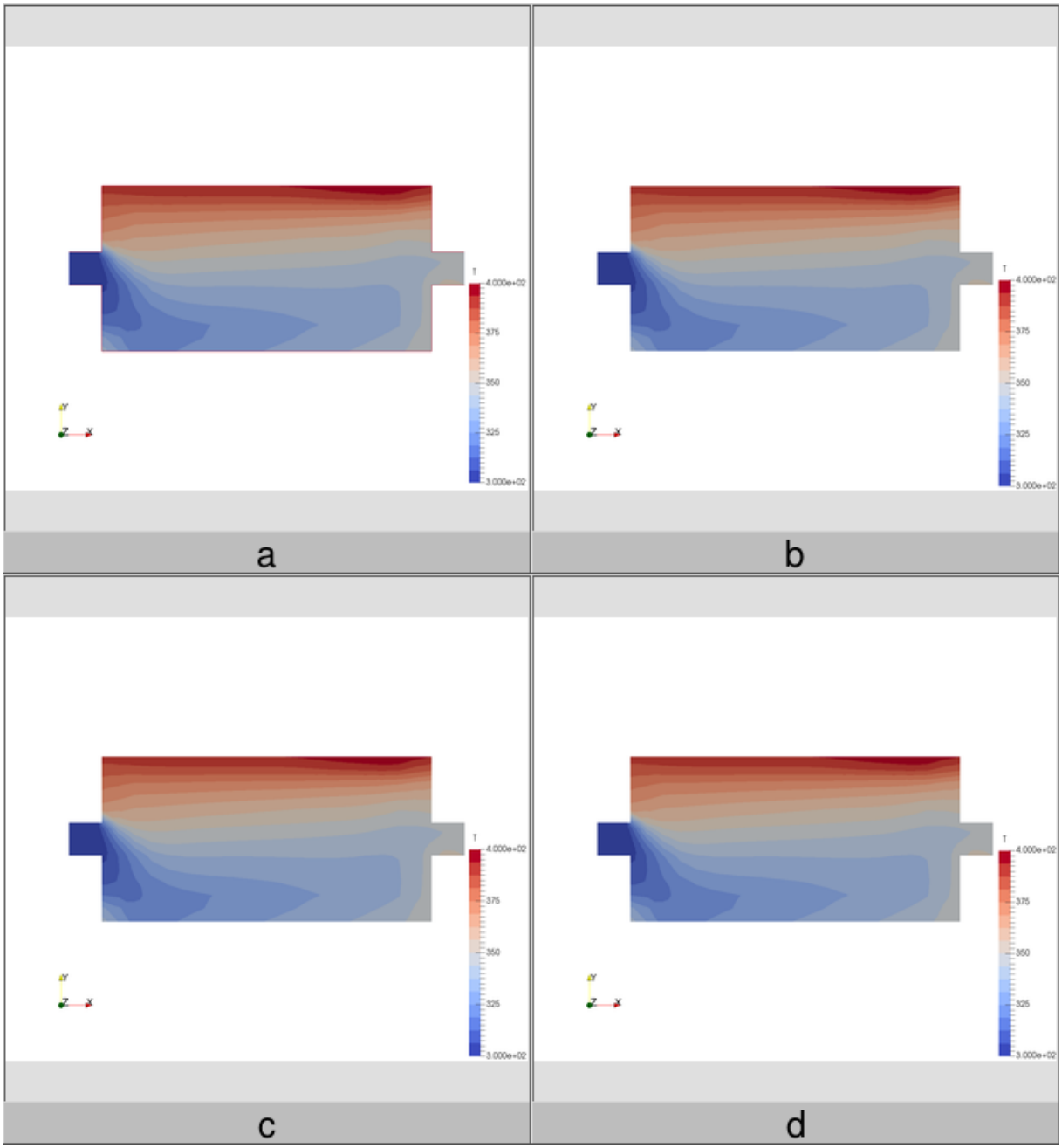

Figura 42. Estudo do transiente frente a uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes para o tempo de simulação t=1600s: (a) Controle PID Paralelo; (b) Controle PID Serial; (c) DMC simplificado; (d) DMC. Escala de Temperatura: 300-400 K.

Para elucidar esta questão, fez-se uso dos 4 pontos de monitoramento descritos na Tabela 15, e os resultados para estes pontos são discutidos a seguir.

As Figura 43 e 44 mostram o perfil de temperatura para os controladores PID e preditivos para o ponto de monitoramento T1 e T2, respectivamente. Apesar destes pontos não terem

sido empregados de maneira direta nas leis de controle, pode-se observar que para o ponto T1, praticamente todos os controladores conseguem fazer o valor de saída retornar ao seu estado original (344,50 K). Entretanto para o ponto de monitoramento T2 apenas o controlador DMC conseguiu se aproximar do valor original de 345,80K, os demais controladores atingem um valor aproximado de 346,00 K, representando um erro relativo de 0,05%, o que na prática pode ser considerado desprezível. Mais uma vez, o DMC atinge e permanece um valor estável de forma mais rápida que os demais. Pelo estudo destas duas Figuras, conclui-se que o controlador DMC apresenta um perfil de saída, quanto a temperatura, mais estável e próximo do valor alvo (*set-point*), mesmo para os pontos de monitoramento não empregados no controle. Da mesma maneira que ocorreu com o estudo do transiente para o caso servo, confirma-se a superioridade do controle DMC com horizonte descendente não só pela performance de controle demonstrada pelos critérios de controle mas também pelo perfil da resposta produzida.

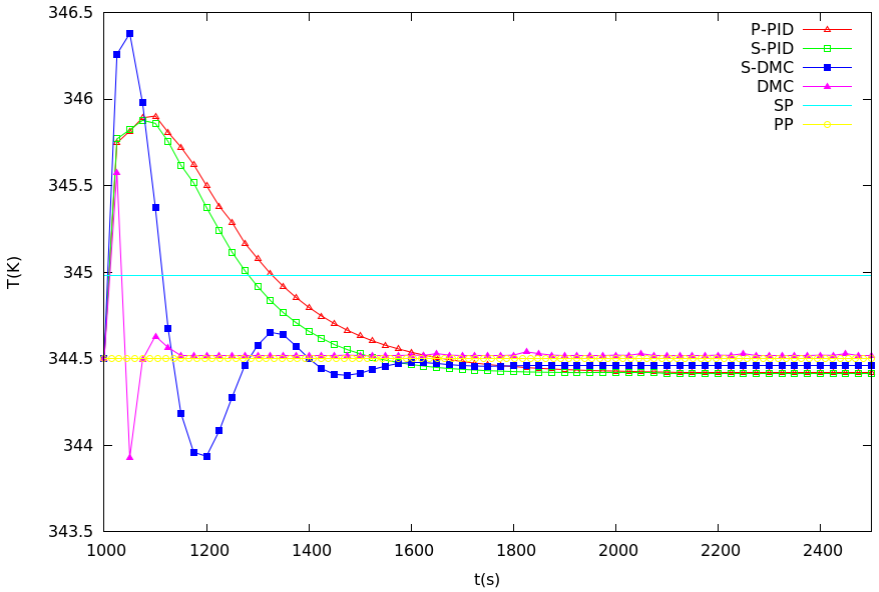

Figura 43. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e horizonte descendente (DMC) para o ponto de monitoramento T1, para o problema regulador- 16,5 W/m^2 trocados pelas paredes do sistema; PP – ponto de partida do estado estacionário; SP- *Set-point* da saída do sistema

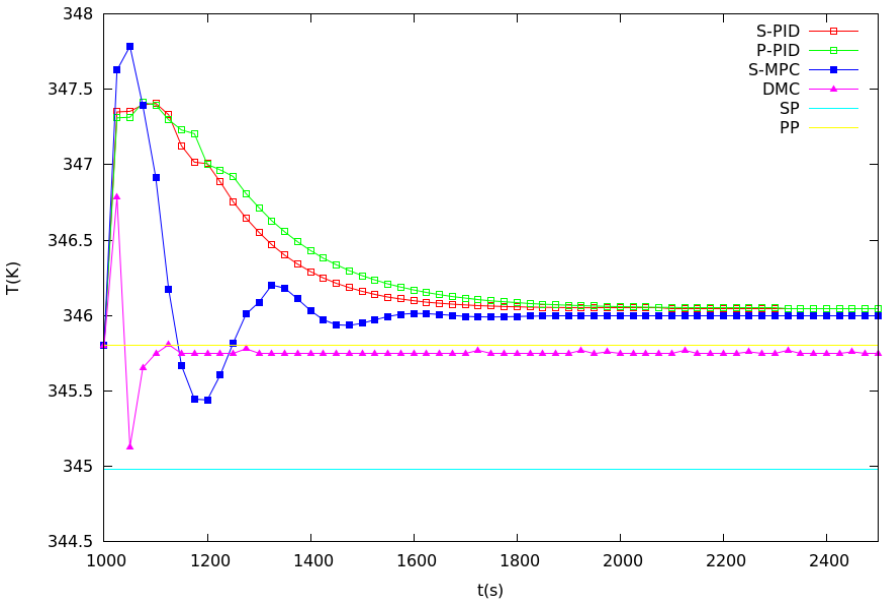

Figura 44. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e horizonte descendente (DMC) para o ponto de monitoramento T2, para o problema regulador- 16,5 W/m^2 trocados pelas paredes do sistema; PP – ponto de partida do estado estacionário; SP- *Set-point* da saída do sistema

As Figura 45 e 46 ilustram o perfil de temperatura para os controladores PID e preditivos para o ponto de monitoramento T3 e T4, respectivamente, para o caso regulador estudado nesta seção. Para o ponto de monitoramento T4, todos os controladores conseguem fazer a temperatura retornar para valores próximos do estado de partida (332,20 K), com uma discreta vantagem para o controle DMC. Mesmo assim, observa-se que o novo estado estacionário alcançado já se mostra distinto do original. No entanto, para o ponto de monitoramento T3, ocorre uma disparada de temperatura, na qual nem mesmo o controle DMC foi capaz de impedir. Este fato mostra a importância do estudo acoplado de escoamentos em CFD com as técnicas de controle de processos. A ferramenta CFD é a mais indicada para se observar e explicar o fato de que mesmo com a variável controlada atingindo o valor desejado na saída do sistema, o comportamento interno dos perfis de temperatura mostram-se completamente diferentes. Dependendo do fluido e da aplicação desejada, esta alteração do comportamento da temperatura no interior do sistema pode inviabilizar o processo ou mesmo forçar a parada em uma unidade, como exemplo, pode-se citar o superaquecimento de um feixe de um forno tubular.

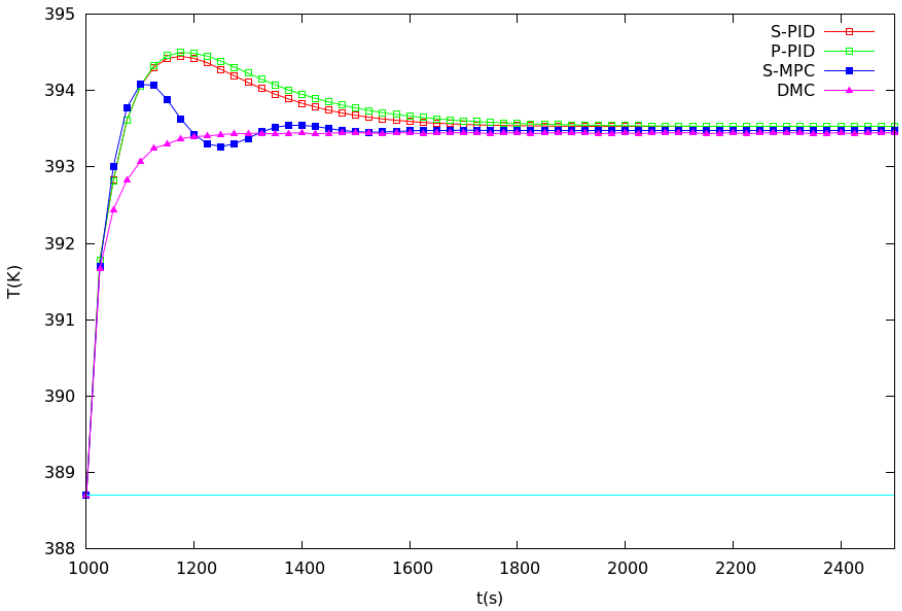

Figura 45. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e horizonte descendente (DMC) para o ponto de monitoramento T3, para o problema regulador- 16,5 W/m^2 trocados pelas paredes do sistema;

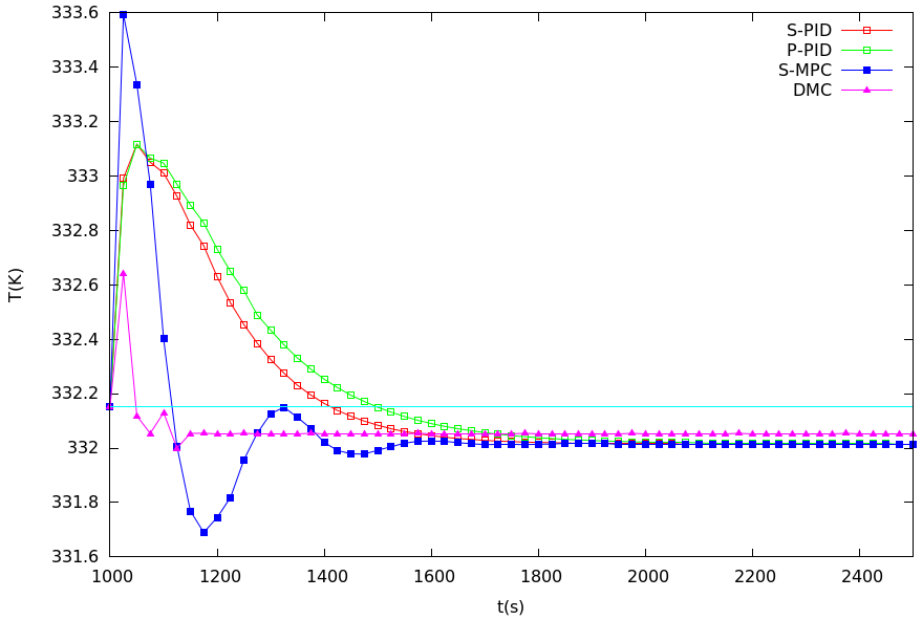

Figura 46. Simulação dos controladores PID paralelo (P-PID) e serial (S-PID) e preditivo simplificado (S-DMC) e horizonte descendente (DMC) para o ponto de monitoramento T4, para o problema regulador- 16,5 W/m^2 trocados pelas paredes do sistema;

A Figura 47 ajuda a entender o fenômeno ocorrido, mostrando os perfis de velocidade para os tempos t=1000s (Figura 47a), t=1100s (Figura 47b), t=1200s (Figura 47c), t=1300s (Figura 47d), t=1400s (Figura 47e) e t=1500s (Figura 47f), para o controlador DMC. O perfil de velocidade do controlador DMC foi escolhido para esta análise por ter sido o controle de melhor performance. A análise desta Figura mostra que todo o ar novo que entra no sistema é forçado para a parte inferior pela corrente de recirculação (convecção) formada. Parte deste ar, encaminha-se para a saída e uma menor parcela é capturada pela corrente de convecção. Desta forma, o ar que é empregado para o suposto resfriamento da parte superior do volume de controle já está aquecido e assim não consegue remover o excedente de calor proveniente da perturbação imposta. Essa é a razão pela qual os controladores não conseguirem fazer o valor de temperatura retornar para o estado original no ponto de monitoramento T3.

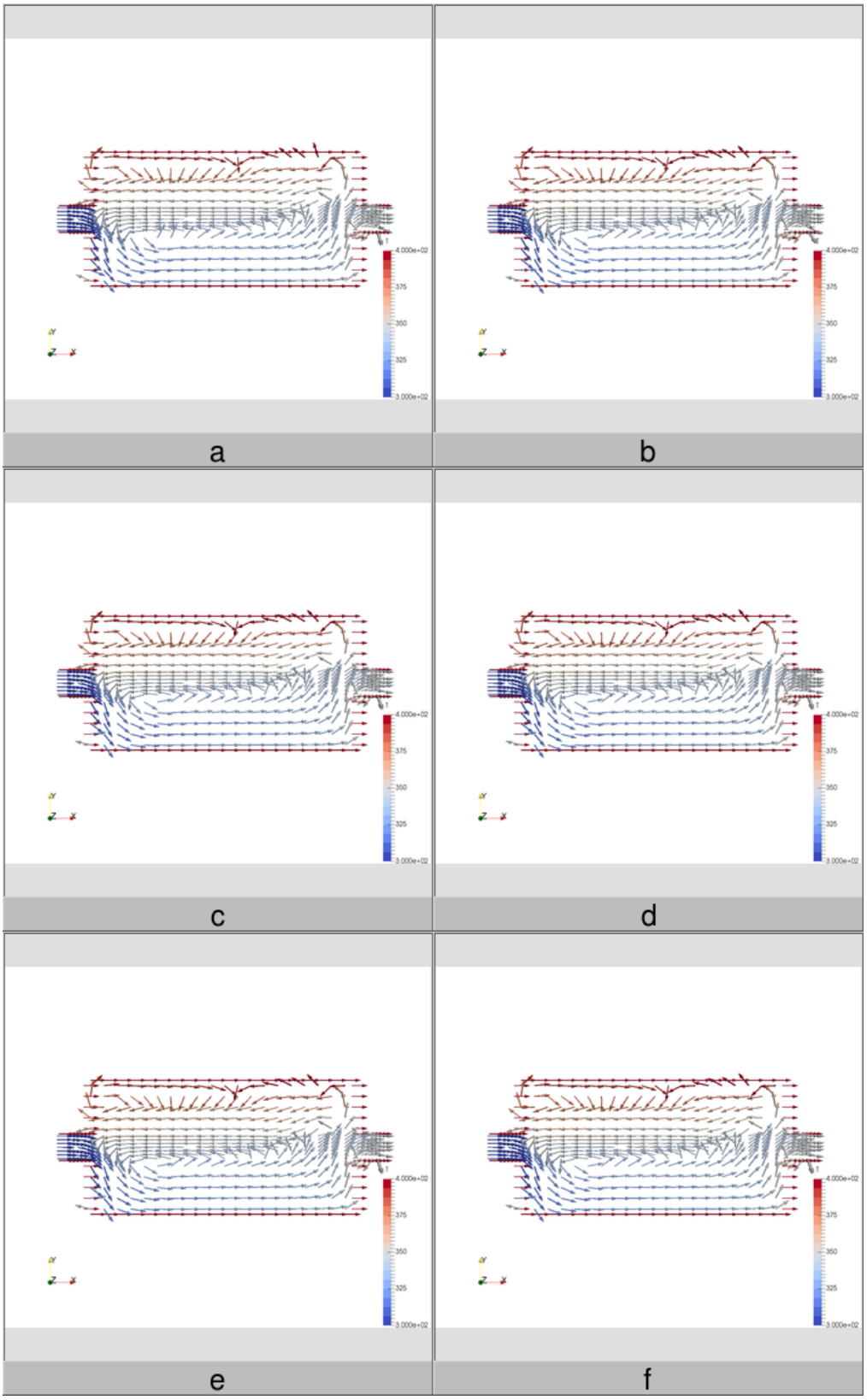

Figura 47. Perfis de velocidade para os tempos t=1000s (a); 1100s(b) 1200s (c); 1300s (d); 1400 s (e) e 1500s (f), para o controlador DMC frente à uma perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes.

4.7 Estudo do Custo Computacional

Para o estudo do custo computacional foi utilizada uma máquina com a seguinte configuração: Memória RAM de 62,7 Gigabytes, processador Intel Xeon CPU E5-268W, com 8 (oito) processadores de 3,4GHz, empregando o sistema operacional Linux. A máquina ficou dedicada para cada simulação sem nenhuma outra atividade paralela a ser desenvolvida. A Tabela 16 mostra os resultados obtidos para cada problema proposto, lembrando que cada caso foi simulado em duplicata e o resultado mostrada na tabela é a média deles. O tempo simulado para cada caso foi de 3000s.

Tabela 16. Tempo de execução para cada caso simulado para os controladores PID e preditivos

Caso Simulado	Tempo de Execução (s)			
Problema Servo	DMC	S-DMC	P-PID	S-PID
Caso 1.1 (*Set-point* – 364,00 K)	4989,29	4907,44	4898,45	4896,76
Caso 1.2 (*Set-point* – 324,00 K)	5094,89	4984,8	4977,70	4976,80
Problema Regulador 1				
Caso 1.3 (Temperatura entrada 310,00 K)	4921,77	4838,56	4828,54	4827,89
Caso 1.4 (Temperatura entrada 290,00 K)	4869,73	4799,67	4789,09	4788,76
Problema Regulador 2				
Caso 1.5 (Carga Térmica 13,5 W/m^2)	5199,21	5148,24	5141,34	5139,89
Caso 1.6 (Carga Térmica 16,5 W/m^2)	5205,49	5156,80	5153,45	5149,66

De acordo com a análise dos tempos de execução mostrados na Tabela 16, pode-se concluir, como já esperado teoricamente, que o controlador DMC apresentou os maiores valores, pois apresenta um maior número de cálculos que os demais controladores, desta forma, demanda maior esforço computacional. Vale lembrar que a sintonia empregada tem um horizonte de predição igual a 40 ao passo que o S-DMC tem apenas um passo de predição e os controladores clássicos calculam, praticamente, a ação de controle em apenas 1 cálculo. No entanto, este maior esforço computacional não é expressivo, no pior dos casos (Caso 1.3)

o controle DMC foi 93,88 s mais lento, em termos percentuais seria 1,94 % menos rápido que os demais, todavia, oferece um desempenho de controle extremamente superior.

Dessa forma, considera-se bem sucedida a implementação de um controle avançado no *OpenFOAM* em termos de desempenho, com praticamente o mesmo custo computacional de um PID.

5. Resultados e Discussão para o Sistema Polidisperso

5.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos com as simulações do sistema polidisperso (Caso 2). Para o escoamento polidisperso, o procedimento inicia-se pela avaliação da simulação base, segue-se com o estudo de linearidade do processo, identificação do processo representativo do fenômeno e aplicação da função de transferência para a sintonia dos controladores clássicos. Por fim, é mostrada a performance dos controladores por meio dos cálculos dos índices de performance, além do custo computacional requerido para cada controlador para estabelecer o valor alvo.

5.2 Estudo da Implementação do DQMOM

Para todas as simulações realizadas para o caso multifásico, o número de *Courant* máximo obtido foi de 0,2 e os erros residuais inicial e final, na ordem de grandeza de 10^{-9}, para todas as equações.

Com o intuito de constatar a correta implementação das atualizações realizadas no método do DQMOM no *OpenFOAM,* foram realizadas simulações 0D transientes e 1D estacionárias, empregando-se 4 pontos de quadratura. Os resultados foram comparados com a solução analítica de MCCOY & MADRAS (2003) para os casos de agregação e quebra dominantes. Nestas simulações, os processos de quebra e coalescência entre as partículas foram caracterizados por um modelo fictício (MCCOY & MADRAS, 2003):

$$a(v,v') = 1 \tag{143}$$

$$b(v) = \frac{1}{2}\Phi(\infty)^2 v \tag{144}$$

$$P(v \mid v') = \frac{1}{v'} \tag{145}$$

$$\vartheta(v) = 2 \tag{146}$$

É importante lembrar que $\Phi(\infty)$ representa o efeito de quebra e coalescência dominante e que para processos com quebra dominante, $\Phi(\infty) > 1$ e, para processos com coalescência dominante, $\Phi(\infty) < 1$.

A solução unidimensional estacionária obtida com o uso do *OpenFOAM* foi comparada com a solução transiente obtida por MCCOY & MADRAS (2003) por meio de uma transformação de domínio, caracterizada pelas equação abaixo:

$$\frac{d\phi}{dt} = \varphi \Rightarrow u_y \frac{d\phi}{dy} = \varphi \tag{147}$$

O procedimento de transformação de domínio envolve a utilização de uma velocidade de propagação (u_y) das variáveis do domínio 1D com tamanho L=1m (tamanho do percurso do escoamento). Desta forma, L/u_y representa o tempo advectivo para a propagação da solução da EBP no domínio 1D. Por isso, u_y pode ser determinada de forma que as varáveis do *DQMOM* apresentem perfis estacionários ao longo da coordenada y iguais ao perfil da simulação transiente 0D. Uma vez que os valores estacionários para os pesos e abscissas na simulação transiente foram alcançados em 1s para o caso de quebra dominante ($\Phi(\infty) = 6$), foi possível calcular a velocidade de propagação por meio do tempo advectivo, L/u_y. Logo, $u_y = 1{,}0$ m/s, constante e definido para todo o domínio.

A Figura 48 representa os resultados obtidos com o *OpenFOAM,* considerando o emprego do *solver pbeFoam* para o caso 0D transiente com agregação dominante ($\Phi(\infty)$ =0,1), comparada com os resultados obtidos com a solução analítica transiente proposta por MCCOY & MADRAS (2003). A ilustração mostra que os momentos calculados pelo *OpenFOAM* apresentaram o mesmo perfil obtido com a solução analítica de MCCOY & MADRAS (2003).

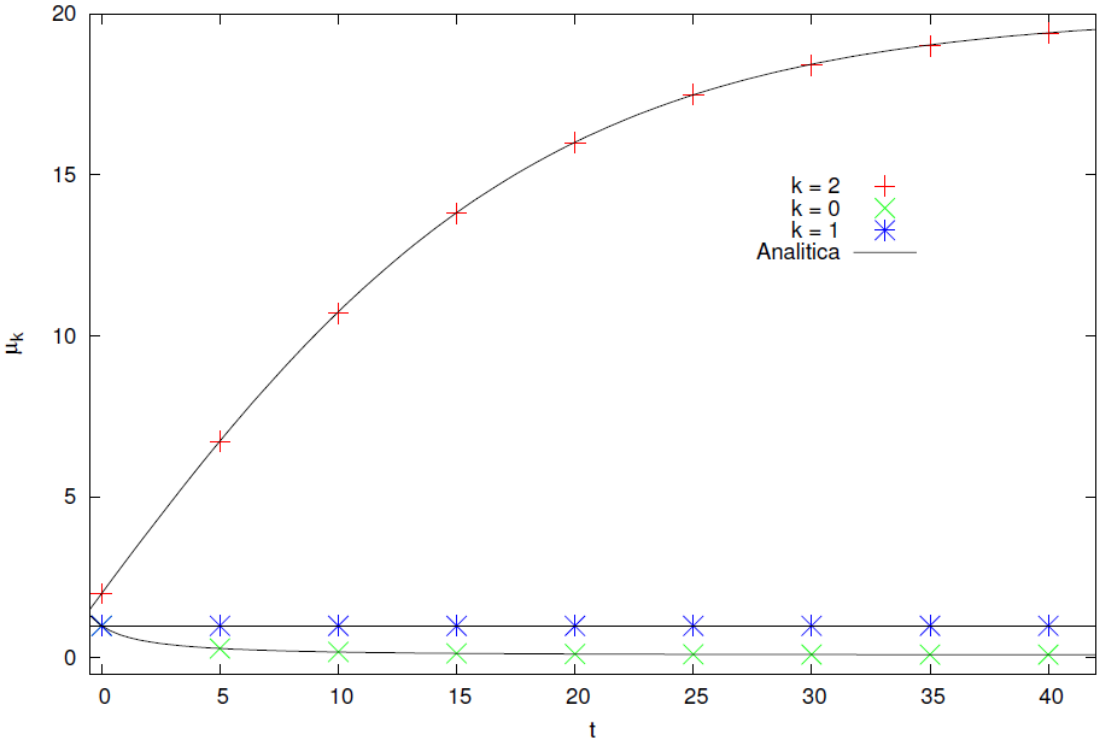

Figura 48. Resultado da Simulação 0D transiente para o caso de coalescência dominante.

A Figura 49 representa o Caso 1D estacionário para quebra dominante. Verifica-se que o procedimento de transformação de variáveis do domínio permitiu a comparação entre o perfil dos momentos obtidos com a simulação 1D estacionária realizada no *OpenFOAM* com a solução analítica de MCCOY & MADRAS (2003). Observa-se a boa performance dos perfis obtidos em ambos os gráficos. Este fato demonstra a capacidade do *solver pbeFoam* em resolver os problemas de EBP envolvendo os fenômenos de quebra e coalescência.

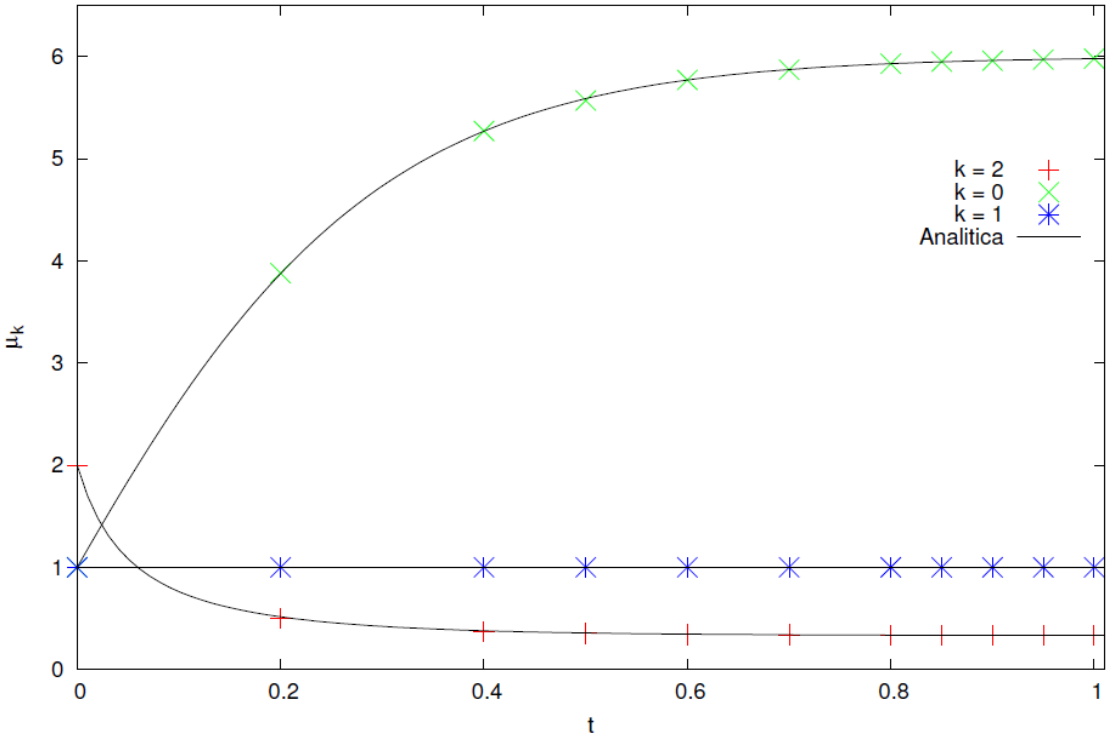

Figura 49. Resultado da Simulação 1D estacionária para o caso de quebra dominante.

5.3 Identificação do Sistema e Sintonia dos Controladores PIDs

A simulação base empregada para a análise do modelo de quebra e agregação de MCCOY & MADRAS (2003) é ilustrada na Figura 50. A velocidade de entrada da partícula no injetor de partículas foi 1,0000 m/s, para um processo de coalescência dominante ($\Phi(\infty)$ =0,1) e o estado estacionário foi atingido para o Diâmetro médio de Sauter (ds) em 16,64 µm, a partir de 1,5 s de simulação.

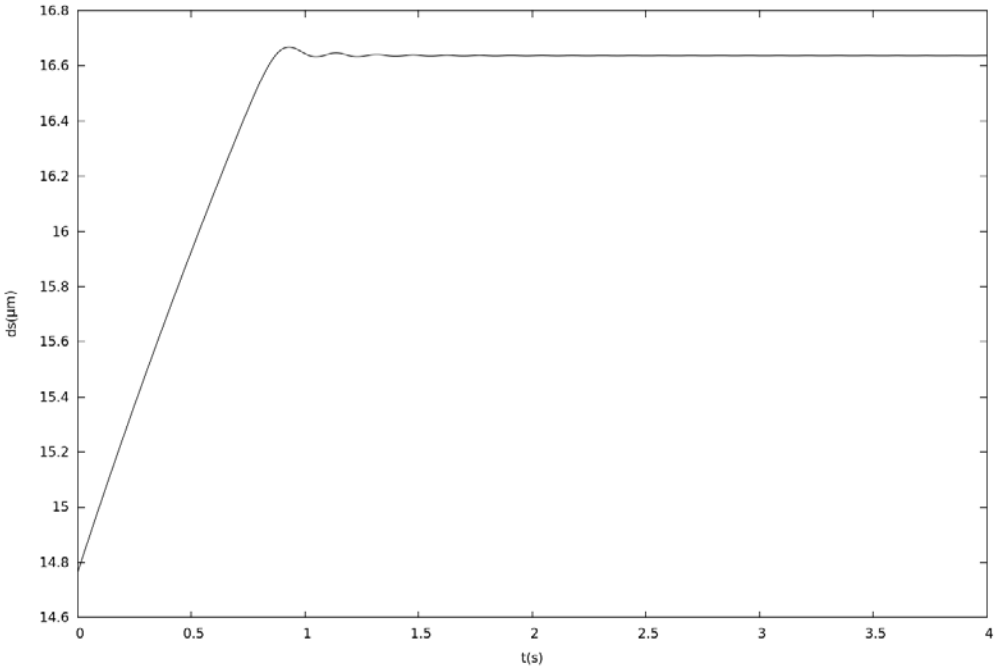

Figura 50. Simulação do processo de balanço populacional, para agregação dominante ($\Phi(\infty)$=0,1), com velocidade de entrada igual a 1m/s mostrando o estado estacionário atingido.

Para investigar se o processo modelado é ou não linear, duas simulações foram propostas. Partiu-se da simulação base mostrada na Figura 50 e foram realizadas perturbações degrau de ± 0,1000 m/s na velocidade de entrada da coluna a partir do estado estacionário, no tempo de simulação igual a 4 s. Os resultados podem ser visualizados na Figura 51.

A Figura 51 mostra que o processo modelado é não linear, visto que, para a mesma magnitude de perturbação acima e abaixo do estado estacionário, as curvas apresentam diferentes padrões dinâmicos e ganhos estáticos. As oscilações apresentadas em ambas as curvas (perturbações em degrau positiva e negativa) deve-se ao transiente do termo fonte, pois os processos de quebra e coalescência ocorrem de maneira simultânea até que o equilíbrio entre elas seja atingido, na simulação em questão foi empregada uma agregação dominante no equilíbrio.

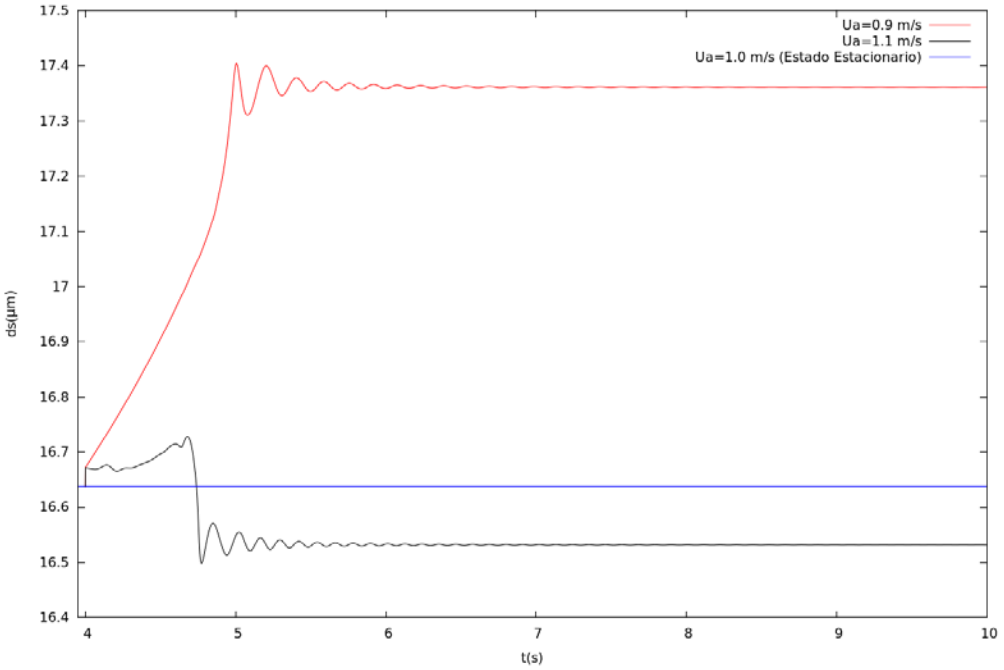

Figura 51. Simulação do processo de balanço populacional em estado estacionário e perturbações de ± 0,10 m/s na entrada da coluna a partir do tempo de 4,0 s.

Para realizar a sintonia dos controladores clássicos foi necessária a identificação de um modelo linear para o processo. O comportamento mostrado para o delta positivo mostrou-se de extrema dificuldade de reprodução a partir de modelos lineares mais simples. Assim, apenas os dados referentes ao delta negativo - 0,10 m/s aplicado à velocidade de entrada da coluna foram utilizados na identificação da função de transferência do processo com o emprego do *toolbox Ident* do Matlab (versão 7.7.0; R2008b).

A Figura 52 mostra o resultado da identificação do processo. Como era de se esperar, pelo perfil da resposta do processo frente a perturbação de - 0,10 m/s imposta na velocidade de entrada da partícula, a função de transferência identificada apresentou ordem superior (segunda ordem ou mais).

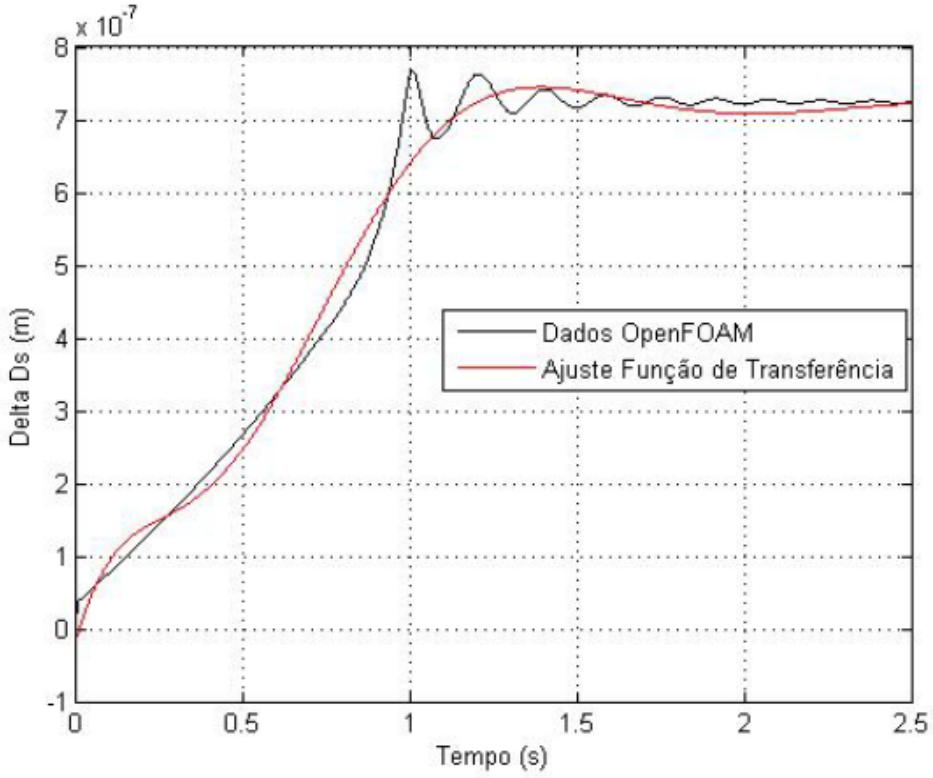

Figura 52. Resultado da identificação do processo frente a uma perturbação degrau de -0,1000 m/s na entrada do injetor de partículas.

A função de transferência encontrada é representada pela Equação 148:

$$G(s) = \frac{K_{PM}}{\left(1 + 2Z\tau_w s + (\tau_w s)^2\right)\left(1 + \tau_{PM} s\right)} \tag{148}$$

Tal que: K_{PM} =-7,2456x10^{-06}, Z=0,39399, τ_w=0,22188 e τ_{PM} =0,35399.

Os desvios dos resultados do modelo de função de transferência em relação aos dados obtidos a partir da simulação com degrau negativo no *OpenFOAM* foram considerados aceitáveis, de modo que o modelo pode ser empregado para fins de sintonia de controladores.

Conforme MONTGOMERY & RUNGER (2002) pode-se rejeitar a hipótese nula a 5 % caso o valor-p seja menor que 5%. No modelo proposto, como o valor p é menor que 0,05 (5,0 % de confiança), rejeita-se a hipótese nula e o modelo identificado é capaz de explicar o fenômeno descrito pelos dados do experimento numérico Os valores dos parâmetros

estatísticos do coeficiente de determinação (R^2), o coeficiente de correlação de Pearson (R), o valor da propabilidade (p) e o teste de hipótese nula são mostrados na Tabela 17.

Tabela 17. Verificação estatística do modelo de função de transferência identificado

Parâmetros Estatísticos	*Valores*
R^2	0,9124
R	0,9524
Classificação da Correlação	Forte Positiva
Valor-p	$8{,}2 \times 10^{-3}$
Rejeição da Hipótese Nula	Sim

Realizou-se o procedimento de cálculo do período e dos ganhos críticos, por meio da solução da equação característica da função G(s) do processo, conforme a Equação 149:

$$1 + G(s)K_{Crit} = 0 \tag{149}$$

Tal que K_{Crit} é o ganho crítico de um controlador P.

O ganho crítico e o período crítico (P_{Crit}) calculados foram: $K_{Crit} = -331274{,}53$ e $P_{Crit} = 1{,}1389$. O ganho proporcional e as constantes de tempo integral e derivativa foram calculados segundo a Tabela 18 e os valores numéricos podem ser vistos na Tabela 19.

Tabela 18. Sintonia de ZIEGLER & NICHOLS (1942) para os controladores P, PI e PID (SEBORG *et al.,* 2011).

Controlador	K_c	τ_I	τ_D
P	$0{,}50\,K_{Crit}$		
PI	$0{,}45\,K_{Crit}$	$P_{Crit}/1{,}2$	
PID	$0{,}60\,K_{Crit}$	$P_{Crit}/2{,}0$	$P_{Crit}/8{,}0$

Empregando-se os valores numéricos de K_{Crit} e P_{Crit} calculados, obteve-se o resultado para a sintonia dos controladores pelo método de ZIEGLER & NICHOLS (1942) explicitado na Tabela 19.

Tabela 19. Valores numéricos para a sintonia de ZIEGLER & NICHOLS (1942) para os controladores clássicos P, PI e PID Paralelo e em Série

Controlador	K_c	τ_I	τ_D
P	-165637,26		
PI	-149073,53	0,9490	
P-PID	-198764,71	0,5694	0,1423
S-PID	-84370,78	0,2900	0,2793

5.4 Comparação de Controladores em Malha Fechada

5.4.1 Definição dos Problemas Servo

Foram propostas duas simulações para o teste de performance. Tomando-se como base o estado estacionário inicial (16,64 μm) variou-se o *set-point em* ± 0,60 μm (3,6 % de variação em torno do estado estacionário), com a finalidade de verificação do desempenho dos controladores. Intencionalmente, os novos *set-points* estão posicionados acima e abaixo do estado estacionário inicial. Logo os dois casos propostos são:

Caso 2.1 – *set-point* – 17,20 μm.

Caso 2.2 – *set-point* – 16,00 μm.

5.4.2 Sintonia dos Controladores Preditivos

Sintonia do Controlador S-DMC

Para o controlador preditivo (MPC), a função de convolução foi obtida por meio de uma perturbação negativa de 0,10m/s na velocidade de entrada da partícula, a partir do estado estacionário. Levando-se em conta que a perturbação não foi em degrau unitário, fez-se necessário dividir os valores obtidos para a função convolução pela magnitude da perturbação imposta, isto é, 0,10.

A Figura 53 mostra a resposta do processo frente a perturbação de - 0,10 m/s na velocidade de entrada das partículas. A ilustração mostra que o novo estado estacionário se estabelece por volta de 8 s, com um valor de 17,36 μm.

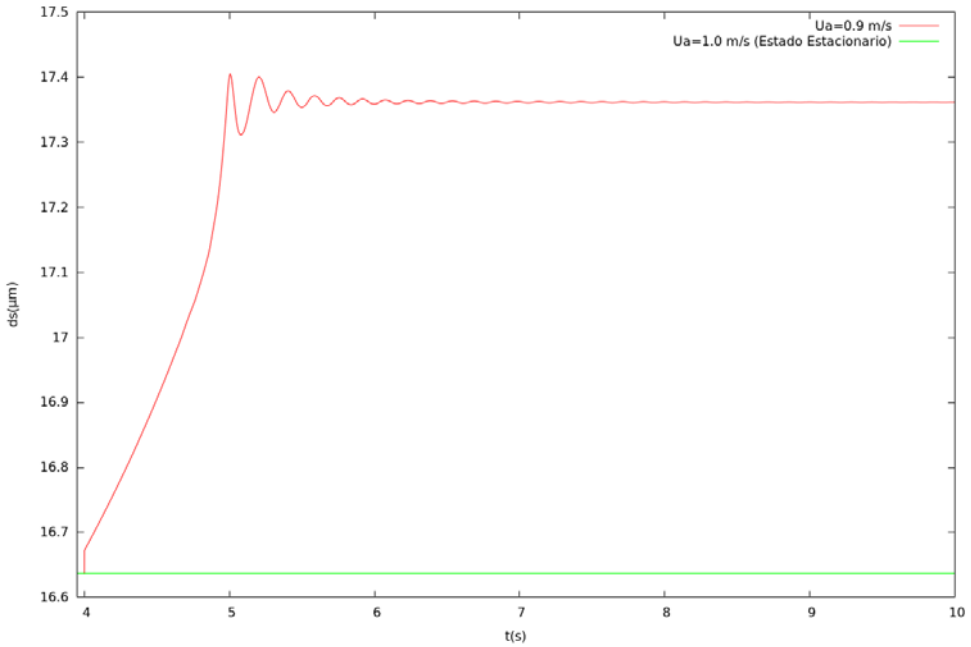

Figura 53. Resposta do sistema frente a uma perturbação negativa de 0,10 m/s na velocidade de entrada das partículas.

Para a configuração do controlador preditivo faz-se necessário definir o número de intervalos existentes na função de convolução (N) e o período de amostragem (Δt). A relação entre essas duas variáveis foi estabelecida pela Equação 150 (SEBORG *et al.*, 2011):

$$N\Delta t = t_e \qquad (150)$$

No caso em estudo, assumiu-se te = 5,0 s. Definiu-se N=100, logo Δt=0,05 s. Considerando a mesma base de comparação, o mesmo período de amostragem (Δt=0,05 s) foi empregado para todos os controladores preditivos (S-DMC e DMC) e controladores clássicos (S-PID, P-PID, PI e P) , em todas as simulações.

Para o controlador preditivo simplificado (S-DMC), como já foi comentado anteriormente, o único parâmetro de sintonia é o parâmetro α. A Figura 54 mostra o comportamento da resposta do controle S-DMC frente à mudanças neste parâmetro. Pode-se observar que, para ambos os casos simulados, o aumento do parâmetro α leva a um amortecimento da resposta do sistema, deixando-a mais lenta. No entanto, essa suavização da trajetória de controle, para este sistema, leva a um aumento do critério de performance ISE, ver Tabela 20. A sintonia escolhida para o controlador S-DMC foi a representada pelo parâmetro α = 0,00, por apresentar o menor ISE dentre os casos simulados, de acordo com a Tabela 20.

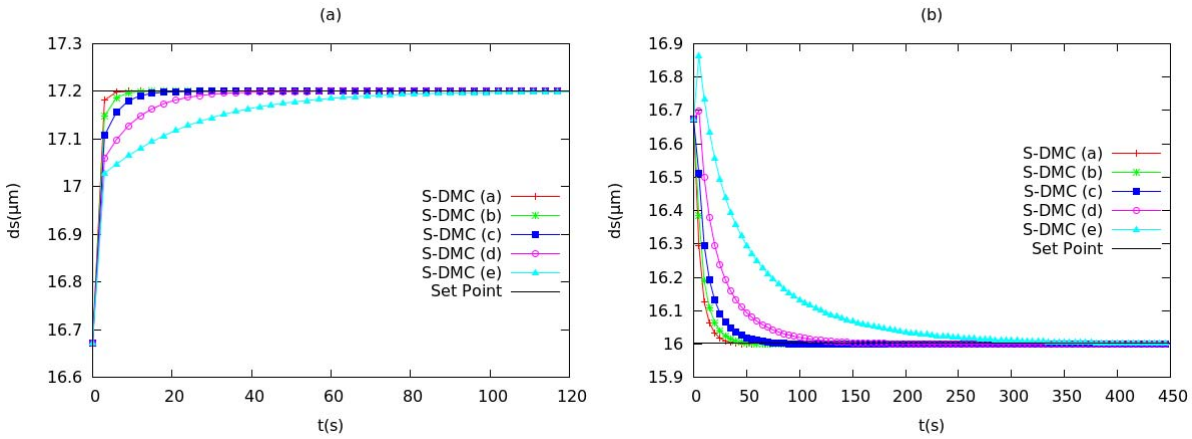

Figura 54. Perfil de resposta do controlador S-DMC frente à variações no parâmetro α para os *set-points* 16,0 μm (Figura 54b) e 17,2 μm (Figura54a).(a) α=0,00; (b) α=0,25; (c) α=0,50; (d) α=0,75; (e) α=0,90.

Tabela 20. Critério de desempenho ISE para sintonia do controlador S-DMC em função da variação do Parâmetro α.

Parâmetro α	*ISE*	
	Set-point 17,2 μm	*Set-point* 16,0 μm
0,00	**142,50**	**2109,10**
0,25	155,27	2748,80
0,50	184,19	4027,70
0,75	273,76	7862,40
0,90	559,17	19357,10

Sintonia do Controlador DMC

Para a sintonia do controle DMC, os parâmetros a serem variados foram: o horizonte de predição P, constante de filtro α para a trajetória de referencia e os pesos λ e γ, se necessário. Primeiramente, variaram-se os valores do horizonte de predição de maneira a se estabilizar a resposta, depois o valor de α e por último, os supressores de movimento. A Figura 55 mostra o perfil de resposta do controlador DMC frente a mudanças nos parâmetros de sintonia. A Tabela 21 mostra as configurações de sintonia empregados nas simulações. Pode-se observar que um aumento no valor do horizonte de predição leva a uma resposta mais estável do controle, entretanto deixa-a mais lenta. Para valores os menores valores de horizonte de predição testados, a resposta do controlador se mostrou oscilatória, ver Figuras 55a DMC(a,b) e Figura 55b DMC (a). O melhor valor do horizonte de controle testado foi P=45, para os dois casos testados. Para os demais parâmetros de sintonia (α e supressores de movimento) o seu aumento leva a um aumento do ISE, apesar de também ajudarem na estabilidade da resposta. Segundo os cálculos do critério de desempenho ISE, mostrados na Tabela 22, a configuração C obteve os melhores resultados de performance de controle. Apesar da configuração A ter apresentado um valor de ISE inferior que as demais configurações, para o *set-point* 16,0 μm, a mesma não foi levada em conta por apresentar um

comportamento oscilatório e, não menos importante, não ter sido a melhor opção para o *set-point* 17,2 µm, pois a sintonia empregada precisa ser única para os casos simulados nos testes frente aos demais tipos de controladores.

Tabela 21. Configurações de sintonia empregadas na simulação dos casos testados na Figura 55.

Configuração	Parâmetros de Sintonia			
	P	α	λ	γ
A	30	0	1,00	1,00
B	40	0	1,00	1,00
C	45	0	1,00	1,00
D	45	25	1,00	1,00
E	45	0	0,85	0,98
F	50	0	1,00	1,00

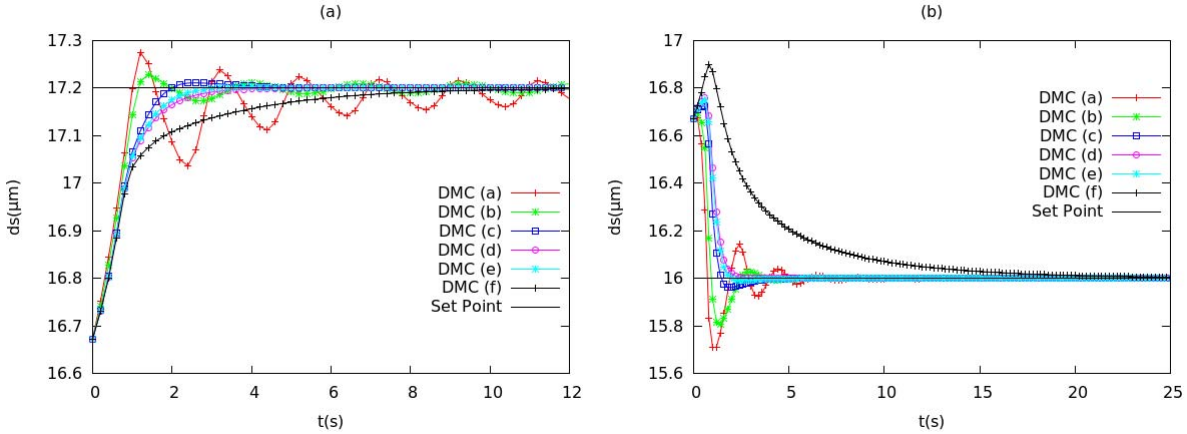

Figura 55. Perfil de resposta do controlador DMC frente à variações nos parâmetros de sintonia, para os *set-points* 16,0 µm (Figura 55b) e 17,2 µm (Figura 55a).

Tabela 22. Critério de desempenho ISE em função da sintonia do controlador DMC empregada, para os *set-points* 16,0 e 17,2 µm.

Sintonia	ISE	
	Set-point 17,2 µm	*Set-point* 16,0 µm
A	225,70	288,70
B	128.41	446,34
C	**98,00**	**440,52**
D	139,83	534,34
E	276,17	508,78
F	550,90	12785,00

Definidos os parâmetros dos controladores clássicos e dos preditivos, a próxima seção mostra os resultados obtidos para o Problema Servo proposto.

5.4.3 Resultados do Problema *Servo*

Na Figuras 56 (a) e (b), pode-se verificar o comportamento da resposta dos controladores P, PI, PID (paralelo e em série) e Preditivos (DMC e S-DMC) frente a uma perturbação no *set-point*. Os valores alvos foram de 17,20 µm (Caso 2.1) e 16,00 µm (Caso 2.2), respectivamente.

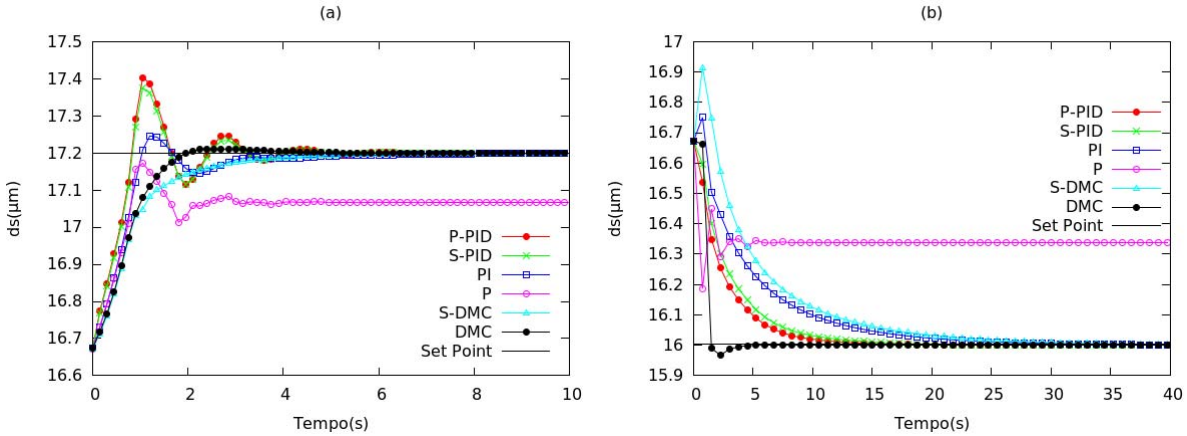

Figura 56. Performance dos Controladores P, PI, PID (paralelo e em série) e Preditivos frente a perturbações: positiva de 0,60 µm – *set-point* 17,20 µm (a) e negativa de 0,60 µm no Estado Estacionário - *set-point* 16,00 µm (b).

Pela análise das Figuras 56 (a) e (b), percebe-se que o controlador P não conseguiu se aproximar muito do *set-point* para ambos os casos, devido ao desvio característico apresentado por este tipo de controle. Este fenômeno foi mais acentuado para o Caso 2.2, Figura 56b, provavelmente devido ao fato de que a sintonia foi realizada com um degrau negativo na velocidade de entrada, além do processo ser não linear.

Conforme mostra a Figura 56, os controladores PI e Preditivos conseguiram atingir o *set-point* desejado, em ambos os casos. Para os dois casos, o controlador DMC conseguiu atingir e permanecer no *set-point* após, aproximadamente, 2,0s de simulação. Para os controladores PID, para o caso 2.1, apesar de atingirem o *set-point* mais rapidamente, eles apresentaram uma oscilação antes de estabilizar a resposta no valor alvo, fato que ocorreu após 5,0 s de simulação. Para o Caso 2.2, os PIDs, PI e S-DMC só conseguiram atingir o *set-point* após , aproximadamente, 35 s de simulação. Esta diferença entre os tempos para os controladores atingirem o *set-point* para os Casos 2.1 e 2.2, mostra que os controladores clássicos e o S-DMC revelaram a maior sensibilidade dos controladores a perturbações no sentido do distúrbio positivo e pode ser explicada devido a sintonia dos controladores clássicos e a função de convolução terem sido obtidas por meio de um degrau negativo na velocidade de entrada da partícula. O controle DMC com horizonte descendente se mostrou robusto, quanto a velocidade de resposta e estabilização, frente a ambas as perturbações.

As Figuras 57 (a) e (b) ilustram o comportamento da variável manipulada frente às perturbações positiva e negativa (± 0,60 μm) no estado estacionário.

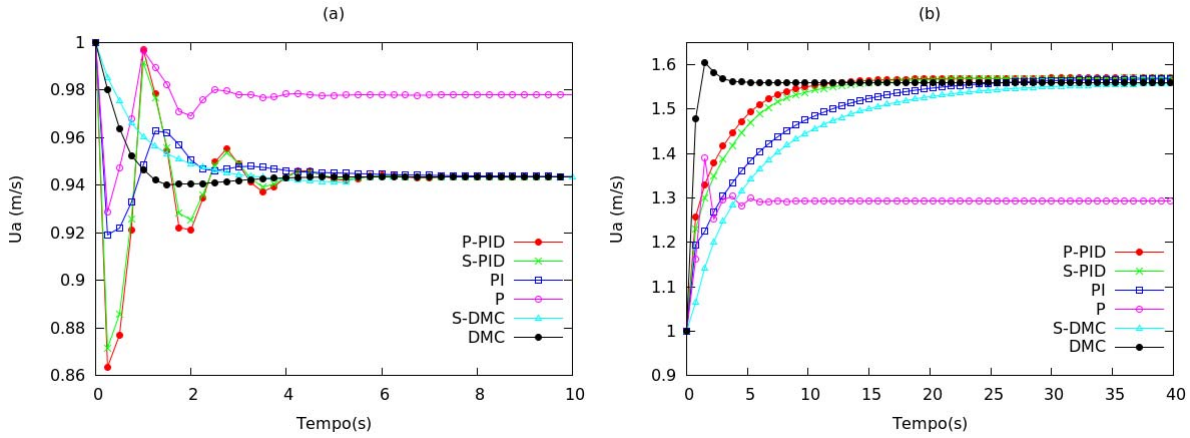

Figura 57. Perfil da variável manipulada (Ua – velocidade de entrada da partícula) para os Controladores P, PI, PID (paralelo e em série) e Preditivos (S-DMC e DMC) frente a perturbações: positiva de 0,60 μm – *set-point* 17,20 μm (a) e negativa de 0,60 μm no Estado Estacionário - *set-point* 16,00 μm (b).

Todos os controladores, à exceção do Proporcional, convergem para a mesma velocidade de entrada da partícula: 1,5590 m/s para o Caso 2.1 (Figura 57a) e 0,9405 m/s para o Caso 2.2 (Figura 57b). Para o controlador P, a velocidade se estabiliza em um valor discrepante do exigido para que o *set-point* seja atingido, justificando o *off set* característico.

A Tabela 23 e 24 mostra os índices de performance calculados para os controladores S-PID, P-PID, PI, S-DMC e DMC, para os casos 2.1 e 2.2, respectivamente. Uma vez que o controlador P apresenta o desvio característico não foram calculados os seus índices de desempenho, pois pode-se afirmar que para os casos simulados ele apresenta a pior performance.

Tabela 23. Índices de performance dos controladores clássicos e preditivos para o caso 2.1, *set-point* 17,2 µm.

Controle	*Índices de Desempenho*				
	ISE	Tr	Te	Os (%)	EM
P-PID	101,14	0,82	0,32	1,20	1,9700
S-PID	99,04	0,84	0,33	1,02	3,5400
PI	145,67	1,04	0,44	0,45	0,6200
S-DMC	118,45	6,90	0,53	0,00	0,0345
DMC	**98,04**	**1,92**	**0,51**	**0,06**	**0,0020**

Tabela 24. Índices de performance dos controladores clássicos e preditivos para o Caso 2.2, *set-point* 16,0 µm.

Controle	*Índices de Desempenho*				
	ISE	Tr (s)	Te (s)	Os (%)	EM
P-PID	608,15	15,35	1,70	0,00	3,1570
S-PID	738,18	15,50	2,10	0,00	2,1710
PI	1248,37	32,10	3,50	0,00	0,1230
S-DMC	1851,96	35,80	4,50	0,00	0,0236
DMC	**340,52**	**1,48**	**0,94**	**0,23**	**0,0011**

A Tabelas 23 e 24 mostram que o controlador DMC apresentou melhor performance de controle para os dois Casos. Em ambos os casos, para o índice de desempenho mais importante, o ISE, este controlador apresentou um critério de desempenho bem superior aos demais, também obteve performance extremamente superior quanto ao esforço de manipulação, também para os dois casos. O DMC apresentou um pequeno OS, mas o mesmo pode ser considerado desprezível, por ser bastante reduzido. Para o Caso 2.1, os PIDs apresentaram tempos de resposta e estabilização menores, mas ao custo de apresentarem oscilações na resposta do sistema frente às perturbações. Ao passo que o DMC apesar de perder nestes critérios, para este Caso 2.1, atingiu o *set-point* de forma estável e suave, sem apresentar grande esforço de manipulação. Desta forma, pode-se concluir que o controle DMC apresentou melhor performance de controle quando comparado com os demais controladores testados para os casos polidispersos simulados.

5.5 Estudo do Custo Computacional

Para o cálculo do custo computacional, a mesma máquina descrita nos Casos Monofásicos foi empregada, com dedicação exclusiva: Memória RAM de 62,7 Gigabytes, processador Intel Xeon CPU E5-268W, com 8 (oito) processadores de 3,4GHz, empregando o sistema operacional Linux. O tempo de simulação empregado em todos os casos foi de 40s. A Tabela 25 mostra o tempo de execução necessário para as simulações para todos os controladores empregados.

Tabela 25. Tempo de execução para cada caso simulado para os controladores clássicos (PIDs e PI) e preditivos (S-DMC e DMC).

Controlador	*Tempo de Execução (s)*	
	Caso Simulado	
	Caso 2.1 (*Set-point* – 17,2 µm)	Caso 2.2 (*Set-point* – 16,0 µm)
P-PID	122,43	122,91
S-PID	123.91	123,78
PI	122,30	122,32
S-DMC	125,43	125,35
DMC	128,96	128,71

Mais uma vez, pode-se observar que apesar dos maiores esforços computacionais exigidos pelo controlador DMC, o seu custo computacional não é impactado de maneira significativa. Apesar da sintonia empregada nestes casos para o DMC exigir, só para o horizonte de controle, P=45, ser necessário, no mínimo, 45 vezes mais cálculos que os demais controladores o aumento do tempo de execução chega, no pior das hipóteses a 5,45%, o que para o usuário é praticamente imperceptível. Assim, pode-se reafirmar que a implementação de um controle avançado no *OpenFOAM* foi bem sucedida em termos de desempenho computacional, uma vez que obteve-se, praticamente, o mesmo tempo de execução que um controlador PID.

Na próxima seção abordam-se as conclusões obtidas com o estudo desta Tese de Doutorado.

6. Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

6.1 Conclusões

O presente estudo mostra que é possível a implementação de controle Preditivo (MPC) diretamente em um *software* CFD, o *OpenFOAM.* Para um primeiro passo nessa área, considerou-se, primeiramente, um algoritmo simplificado, com um único passo de predição. Uma outra etapa também efetivada, foi a implementação de um DMC com a técnica do horizonte descendente, que se mostrou bem superior em performance quando comparado com os demais controladores implementados, para todos os casos testados.

O estudo em CFD de um processo hipotético de aquecimento de ar mostrou a importância do uso desta ferramenta para elucidar detalhes locais do escoamento. Mostra-se a formação de uma região de aquecimento interno que provavelmente só seria detectado pelo emprego deste tipo de técnica. Evidencia-se que mesmo empregando uma técnica de controle avançada, não foi possível retornar a condição inicial de simulação quando impostas perturbações positivas na carga térmica trocada pelas paredes do sistema em estudo. Estes pontos locais ou regiões de aquecimento podem ser nocivos em casos de reações poliméricas e biotecnológicas, onde a temperatura elevada pode levar a uma degradação dos produtos desejados ou impedir que sejam produzidos.

O processo de aquecimento de ar estudado neste trabalho também não mostrou comportamento linear e a metodologia desenvolvida para o processo de identificação foi capaz de fornecer um modelo linear para o processo em estudo com boa correlação estatística. O modelo linear final empregado para realizar a sintonia dos controladores clássicos foi constituído pela média dos parâmetros dos modelos identificados para as perturbações positiva e negativa em torno do estado estacionário original. Com isso, a metodologia de ajuste IMC (SEBORG *et al*., 2011) pôde ser aplicada para ajustar os controladores PID paralelos e em série. O controlador DMC apresentou o melhor desempenho de controle em perturbações positivas ou negativas para o *set-point* em relação ao estado estacionário original (344,980 K).

Quanto ao estudo do escoamento polidisperso, a metodologia de DQMOM implementada no *software OpenFOAM* foi capaz de resolver a equação de balanço

populacional envolvendo fenômenos de quebra e agregação. A sua eficácia foi testada comparando a resposta do *solver pbeFoam* com a resposta analítica transiente proposta por MCCOY & MADRAS (2003). Os fenômenos de quebra e coalescência não apresentaram comportamento linear e a metodologia desenvolvida para o processo de identificação foi capaz de fornecer um modelo linear aproximado para o processo em estudo com boa correlação estatística. Com isso, a metodologia de ajuste de ZIEGLER & NICHOLS (1942) pôde ser aplicada para ajustar os controladores P, PI e PID (paralelo e serial).

Perturbações positivas e negativas (± 0,60 μm) foram inseridas pelo *set-point* em relação ao estado estacionário original de 16,6370 μm. Os controladores PID (paralelo e serial) apresentaram oscilações constantes em torno do *set-point* para ambos os casos estudados. O proporcional apresentou o *off set* característico para o *set-point* de 17,20 μm e não conseguiu se aproximar do *set-point* de 16,00 μm, devido à sintonia ter sido realizada com uma perturbação apenas, no sentido da variação positiva do estado estacionário. O controlador DMC apresentou o melhor desempenho de controle para todas as perturbações impostas para o estudo do escoamento polidisperso. Ressalta-se que a performance do controle DMC foi extremamente superior, principalmente quanto aos critérios ISE e EM.

Apesar de exigir um maior número de cálculos, pode-se verificar que o tempo de execução exigido pelo controlador DMC não se revelou significativamente superior quando comparado com os demais controladores. Desta forma, pode-se um empregar uma lei de controle de desempenho extremamente superior sem que o tempo decorrido para a realização da simulação se tornasse impeditiva.

Acredita-se que a implementação inovadora des técnicas de controle avançado (MPC) diretamente no código fonte do *software OpenFOAM* e na disponibilização para o uso da comunidade científica abre um vasto caminho para estudos de controle avançado de processos fluidodinâmicos.

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Sugere-se as seguintes opções para a continuação da pesquisa:

- Aplicação do controle preditivo implementado a casos mais complexos, tais como a região de térmica do refluxo circulante de uma torre destilação a vácuo.
- Implementação do controle DMC com horizonte de controle maior que 1.
- A metodologia de sintonia empregada para os controladores preditivos foi baseada em tentativa e erro, comparando-se, basicamente, o critério de desempenho ISE e a oscilação entre os casos testados, de forma a se obter a melhor configuração. Pode-se implementar um algoritmo, mesmo que simplificado, de otimização, de forma a se obter a melhor configuração de sintonia para o controle avançado por meio da minimização do ISE.
- Implementação de restrições ao controlador DMC de forma a impedir a subida de temperatura identificada quando imposta a perturbação positiva na carga térmica trocada pelas paredes;

• Referências Bibliográficas

ASSANDRI, A. D., PRADA, C., RUEDA, A. *et al.* **Nonlinear Parametric Predictive Temperature Control of a Distillation Column**. Control Engineering Practice, v. 21, pp. 1795-1806. 2013.

ATTARAKIH, M. **Integral Formulation of the Population Balance Equation: Application to particulate systems with particle growth**. Computers and Chemical Engineering, v. 48, pp. 1-13. 2013.

ATTARAKIH, M. M., DRUMM, C., BART, H. J. **Solution of population balance equation using the sectional quadrature method of moments (SQMOM)**, Chemical Engineering Science, v. 64, n. 4, pp. 742-752. 2009.

AZIZI, F., TAWEEL, A. A. **Algorithm for the Accurate Numerical Solution of PBE for Drop Breakup and Coalescence under High Shear Rates**. Chemical Engineering Science, v. 65, pp. 6112-6127. 2010.

BAE, Y., KIM, E., KIM, M. **Assessment of Low-Reynolds number $\kappa-\varepsilon$ Turbulence Models against Highly Buoyant Flows.** International Journal of Mass and Heat Transfer, v. 108, pp. 529-536. 2017.

BATHIA, S. K., CHAKRABORTY, D. **Modelling Spray Fluidized Bed Aggregation Kinetics on the Basis of Monte-Carlo Simulations Results**. Chemical Engineering Science, v. 101, pp. 35-45. 2013.

BEHROOZSARAND, A., SHAFIEI, S. **Multiobjective Optmization of Reactive Distillation with Thermal Coupling using Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II**. Journal of Natural Gas Science and Engineering, v. 3, pp. 365-374. 2011.

BERGMAN, T. L., LAVINE, A. S., INCROPERA, F. P., *et al*. **Fundamentals of Heat and Mass Transfer.** 7 ed. Hoboken, John Wiley & Sons. 2011**.**

BHUTANI, G., BRITO-PARADA, P. R., CILLIERS, J. J. **Polydispersed Flow Modelling using Population Balances in an Adaptive mesh Finite Element Framework**. Computers and Chemical Engineering, v. 87, pp. 208-225. 2016.

BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N. **Transport Phenomena**, New Jersey, USA. 2004.

BOVE, S. **Computational Fluid Dynamics of Gas-Liquid Flows Including Bubble Population Balances**. Ph.D. Thesis, Esbjerg Institute of Engineering, Dinamarca. 2005.

BRENEN, C. E. **Fundamentals of Multiphase Flow**. 1ed. New York, Cambridge University Press. 2005.

BUCKLEY, P. S., LUYBEN, W. L., SHUNTA, J. P. **Design of Distillation Column Control Systems.** 1ed. New York, USA, Publishers Creative Services. 1985**.**

BUFFO, A., VANNI, M., MARCHISIO, D. L. **Multidimensional Population Balance Model for the Simulation of Turbulent Gas-Liquid Systems in Stirred Tank Reactors**, Chemical Engineering Science, v. 70, pp. 31-44. 2012.

BUFFO, A., VANNI, M. MARCHISIO, D. L. *et al.* **Multivariate Quadrature-Based Moments Method for Turbulent Polydisperse gas-liquid Systems**. International Journal of Mass and Heat Transfer, v. 50, pp. 41-57. 2013.

CAMACHO, E. F., BORDONS, C. **Model Predictive Control**. 2ed. London, UK. Springer. 2007.

CAMPOS, M. C. M. M., GOMES, V. C.,PEREZ, J. M. G. T. **Controle Avançado e Otimização na Indústria do Petróleo**. 1ed. Rio de Janeiro, Brasil. Editora Interciência. 2013.

CHESTERS, A. K. **The Modelling of Coalescence Process in Fluid Liquid Dispersions: A Review of Current Understand**. Trans IChemE, v. 69, pp. 259-270. 1991.

CLARKE, D.W., MOHTADI, C., TUFTS, P. S. **Generalized Predictive Control – Part I. The Basic Algorithm**. Automatica, v. 23, pp. 137. 1987.

CRISTINI, V., BLAWZDZIEWICZ, J., LOWEENBERG, M. *et al.* **Breakup in Stochastis Stokes Flows: sub-Kolgomorov Drops in Isotropic Turbulence**, Journal of Fluid Mechanics, v. 492, pp. 231-250. 2003.

CROWE, C., SOMMERFIELD, M., YUTAKA, T. **Multiphase Flow with Droplets and Particles**. 1ed, CRC Press. 1998.

CUTLER, C. R., RAMAKER, J. R. **Dynamic Matrix Control- A Computer Control Algorithm**. In: Proceedings of JAAC, San Francisco-USA. 1980.

D'AGOSTINHO, D., CONGEDO, P. M., CATALDO, R. **Ventilation Control using Computational fluid Dynamics (CFD) modelling for cultural buildings conservation**. Procedia Chemistry, v. 8, pp. 83-91. 2013.

DARBY, M., NIKOLAOU, M. **MPC: Current Practice and Challenges**. Control Engineering Practice, v. 20, pp. 328-342. 2012.

DARBY, M., NIKOLAOU, M. **Identification Test Design for Multivariable Model-Based Control: An Industrial Perspective**. Control Engineering Practice, v. 22, pp. 165-180. 2014.

DE ARAÚJO, J. F. M. **Modelos de Quebra e Coalescência de Gotas para o Escoamento de Emulsões.** Tese de Doutorado. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro. Brasil. 2010.

DE SOUZA JR. M. B. **Controle Preditivo de Longo Alcance: Uma Investigação.** Dissertação de Mestrado. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro. Brasil. 1989.

DESHPANDE, P. B. **Distillation Dynamics and Control**, Instrument Society of America. New York, USA. 1985.

DOMA, M., TAYLOR, P. A., VERMEER, P. J. **Closed Loop Identification of MPC Model for MIMO Process using Genetic Algorithms and Dithering One Variable at a Time: Application to an Industrial Distillation Tower**. Computers Chemical Engineering, v. 20, pp. 1035-1040. 1996.

DONES, I., MANENTI, F., PREISIG, H. A., BUZZI-FERRARIS, G. **Nonlinear Model Predictive Control: A Self-Adaptive Approach.** Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 49. 2010.

DORAO, C. A., JAKOBSEN, H. A. **A Least Squares Method for the Solution of Population Balance Equation Problems**. Computers and Chemical Engineering, v. 30, pp. 535-547. 2006.

DORAO, C. A., JAKOBSEN, H. A. **Least-Squares Spectral Method for Solving Advective of Population Balance Equation Problems**. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 201, pp. 247-257. 2007.

DORAO, C. A., JAKOBSEN, H. A. **HP-Adaptative Least Squares Spectral Element Method for Population Balance Equation Problems**. Applied Numerical Mathematics, v. 58, pp. 563-576. 2008.

DREW, D. A., PASSMAN, S. L. **Theory of Multicomponent Fluids**. 1ed. New York, Springer. 1999.

ELLIS, M., ZHANG, J., LIU, J., CHRISTOFIDES, P. D. **Robust moving horizon estimation based output feedback economic model predictive control**. System and Control Letters, v. 68, pp. 101-109. 2014.

FALOLA, A., BORISSOVA, A., WANG, X. Z. **Extended Method of Moment for General Population Balance Models Including Size Dependent Growth Rate, Aggregation and Breakage**. Computers and Chemical Engineering, v. 56, pp. 1-11. 2013.

FAVERO, J. L. **Simulação de Escoamentos Multifásicos Polidispersos Multivariados**. Tese de Doutorado, DEQ-COPPE, Rio de Janeiro. 2014.

FERZIGER, J. H., PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics.** 3 ed. Berlin, Springer. 2002.

FOX, R. O. **Optimal Moment Sets for Multivariate Direct Quadrature Method of Moments**. Industrial Enginnering Chemistry Research, v. 48, n. 21, pp. 9686-9696. 2009.

FOX, R. O. , LAURENT, F., MASSOT, M. **Numerical Simulation of Spray Coalescence in an Eulerian Framework: Direct Quadrature Method of Moments and Multi-Fluid Method.** Journal of Computational Physics, v. 227, pp 3058-3088. 2008**.**

FOX, R. W., MCDONALD, A. T., PRITCHARD, P. J. **Introduction to Fluid Mechanics**. 8 ed. Danvers, John Wiley & Sons. 2011.

FRIEDLANDER, S. K. **Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Dynamics**. New York, USA. Wiley. 1974**.**

GADALLA, M. A. **A New Graphical Method for Pinch Analisys Applications: Heat Exchanger Network Retrofit and Energy Integration.** Energy, v.81, pp. 159-174. 2015.

GERBER, A. G., DUBAY, R., HEALY, A. **CFD-based predictive control of a melt temperature in plastic injection molding.** Applied Mathematical Modelling, v. 30, pp. 884-903. 2006.

HAMIDIPOUR, M., CHEN, J., LARACHI, F. **CFD Study on hydrodynamics in three-phase fluidized beds- Application of Turbulence Models and Experimental Validation**. Chemical Engineering Science, v. 78, pp 167-180. 2012.

HAN, L., GONG, S., LI, Y., AI, Q., LUO, H., LIU, Z., LIU, Y. **A Novel Theorical model of Breakage Rate and Daughter Size Distribution for Droplets in Turbulent Dispersions**. Chemical Engineering Science, v. 102, pp. 186-199. 2013.

HASSEINE, A., BELLAGOUN, A., BART, H. **Analytical Solution of the Droplet Breakup Equation by the Adomian Decomposition Method,** Applied Mathematics and Computation, v. 218, pp. 2249-2258. 2011**.**

HASSEINE, A., BARHOUM, Z., ATTARAKIH, M., BART, H. **Analytical Solutions of the Particle Breakage Equation by the Adomian Decomposition and the Variational Iteration Methods,** Advanced Powder Technology, v. 26, pp. 105-112. 2011**.**

HAUKE, G. **An Introduction to Fluid Mechanics and Transport Phenomena.** New York, USA. 2008.

HE, Q., SHCHECKIN, A. K., XIE, M. **New Analytical TEMOM Solutions for a Class of Collision Kernels in the Theory of Brownian Coagulation**, Physica A, v. 428, pp. 435-442. 2015.

HINZE, J. O. **New Discretization Procedure for the Breakage Equation**. AIChE Journal, v. 41, n. 5, pp. 289-295. 1955.

HOHMANN, L., KOSSL, K., KOCKMANN, N., SCHEMBECKER, G., BRAMSIEPE, G. **Modules in Process Industry: A Life Cycle Definition**. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, v. 111, pp: 115-126. 2017.

HONSLOW, M. J., RYALL, R. L., MARSHALL, V. R. **A Discretized Population Balance for Nucleation, Growth and Aggregation**. AIChE Journal, v. 34, pp. 1821-1832. 1988.

HULBURT, H., KATZ, S. **Some Problems in Particle Technology. A Statistical Mechanical Formulation.** Chemical Engineering Science, v. 19, pp. 555-574. 1964.

HUSSAIN, M., KUMAR, J., PEGLOW, M. *et al.* **Modified MWR Approach: Application to Agglomerative Precipitation**. AIChE Journal, v. 38, pp. 868-878. 1992**.**

ISERMANN, R. **Digital Control Systems: Fundamentals, Deterministic Control.** 2 ed. Berlim. Springer-Verlag. 1989.

ISHII, M., HIBIKI, T. **Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow**. 2 ed. New York, Springer. 2011.

JASAK, H. **Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows**. Ph. D. Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London. 1996.

JATOBA, L. F. C., LAGE, P. L. C., SILVA, L. F. L. R., CAMPOS, F. B. **Simulation of the Compressible Flow with Mass Transfer of Semi-continuous Mixtures using the Direct Quadrature Method of Moments**, Computers and Chemical Engineering, v. 64, pp. 153-166. 2014.

KANO, M., OGAWA, M. **The State of the Art in Advanced Chemical Process Control in Japan**. Procedia IFAC International Symposium on Advanced Control of Chemical Process (ADCHEM 2009), Istambul, Turquia. 2009.

KAYODE-COKER, A. **Ludwig´s Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants**. 4ed. Vol 2. Oxford, UK. Elsevier. 2010.

KIM, D., BRAUN, J. E., CLIFF, E. M., BORGGAARD, J. T. **Development, Validation and application of a coupled reduced-order CFD model for building control applications.** Building and Environment, v. 93, pp. 97-111. 2015.

KITWARE INC. **The Paraview Guide Version 5.0**. http://paraview.org/ . 2017

KLEINSTREUER, C. **Modern Fluid Dynamics.** 1 ed. New York, Springer. 2010.

KOLGOMOROV, A. N. **On the Disintegration of Drops in a Turbulent Flow.** Doklady Akademii Nauk SSSR, v. 66, pp. 825-828. 1949.

KOSTOGLOU, M., KARABELAS, A. J. **Evaluation Zero Order Method for Simulating Particle Coagulation**. Journal of Colloid and Interface Science, v. 163, pp. 420-431. 1994.

KUMAR, R., KUMAR, J., WARNECKE, G. **Numerical Methods for Solving Two-Dimensional Aggregation Population Balance Equations**. Computers and Chemical Engineering, v. 35, pp. 999-1099. 2011.

LAGE, P. L. C. **On the representation of QMOM as a weighted-residual method - The dual-quadrature method of generalized moments**, Computers and Chemical Engineering, v. 35, pp. 2186-2203. 2011.

LAGE, P. L. C., PINTO, J. C. **Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química**. E-papers Editora. Rio de Janeiro, Brasil. 2001.

LAO, L., AGUIRRE, A., TRAN, A., WU, Z., DURAND, W. **CFD modeling and control of a steam methane reforming reactor.** Chemical Engineering Science, v. 148, pp. 78-92. 2016.

LAUNDER, B. E., SPALDING, D. B. **Mathematical Models of Turbulence**. Academic Press, Londres, Inglaterra. 1972.

LEGENDRE, D., MAGNAUDET, J. **The Lift Force on a Spherical Bubble in a Viscous Linear Shear Flow.** Physics of Fluids, v. 9, n. 1, pp 3572-3574. 1997.

LINÉ, A., FRANCES, C. **Discussion on DQMOM to solve a bivariate population balance equation applied to a grinding process.** Powder Technology, v. 295, pp. 234-244. 2016.

LISOWSKI, E., FILO, G. **CFD analysis of the characteristics of a proportional flow control valve with an innovative opening shape.** Energy Conversion and Management, v. 123, pp. 15-28. 2016.

LIU, T., GAO, F. **Industrial Process Identification and Control Design.** 1ed. New York, USA. Springer. 2012.

LU, J. Z. **Closing the gap between planning and control: A multiscale MPC cascade approach.** Annual Reviews in Control, v. 40, pp 3-13. 2015.

LUYBEN, W. L. **Practical Distillation Control**. 1ed. New York, USA. 1992.

MACIEJOWSKI, J. M. **Predictive Control with Constraints**. 1ed. Essex, UK. Prentice Hall. 2002.

MAITI, D., JANA, A. K., SAMANTHA, A. N. **Intensified Thermal Integration in Batch Reactive Distillation.** Applied Energy, v. 103, pp. 290-297. 2013.

MARANGONI, C., MACHADO, R. A. F. **Distillation Tower with Distributed Control Strategy: Feed Temperature Loads**. Chemical Engineering Technology, v. 30, pp. 1292-1297. 2007.

MARCHISIO, D., VIRGIL, R. D., FOX, R. O. **Quadrature Method of Moments for Aggregation-Breakage Processes**. Journal of Colloid and Interface Science, v. 258, pp. 322-334. 2003

MARCHISIO, D., FOX, R. O. **Solution of the Population Balance Equation Using Direct Quadrature Method of Moments.** Journal of Aerosol Science, v. 36, pp. 43-73. 2003.

MARLIN, T. **Processes Control: Designing Processes and Control Systems for Dynamic Performance**. 2ed. McGraw-Hill. New York, USA. 2000.

MAZZEI, L., MARCHISIO, D. L., LETTIERI, P. **Direct Quadrature Method of Moments for the Mixing of Inert Polydisperse Fluidized Powders and the Role of Numerical Diffusion**, Industrial Engineering Chemistry Research, v. 49, pp. 5141-5152. 2010.

MCCOY, B. J., MADRAS, G. **Analytical Solution for a Population Balance Equation with Aggregation and Fragmentation**, Chemical Engineering Science, v. 58, pp. 3049-3051. 2003.

MCGRAW, R. **Description of the Aerosol Dynamics by the Quadrature Method of Moments**. Aerosol Science and Technology, v. 27, pp. 255-265. 1997.

METZGER, L., KIND, M. **The influence of mixing on fast precipitation processes – A coupled3D CFD-PBE approach using the direct quadrature method of moments (DQMOM).** Chemical Engineering Science. Article in Press. 2017.

MINGLIANG, X., QUING, X. **Analytical Solution of TEMOM Model for Particle Population Balance Equation due to Brownian Coagulation**. Journal of Aerosol Science, v. 66, pp. 24-30. 2013.

MONTGOMERY, D. C., RUNGER, G. C. **Applied Statistics and Probability for Engineers**. New York, USA. 2002.

MOUKALLED, F., MANGANI, L., DARWISH, M. **The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics.** 1 ed. Cham, Springer. 2016.

NOGUEIRA, L. Z. D., MEDEIROS, N. G. **Desenvolvimento e Implementação de Técnicas de Controle de Processos Aplicadas à Fluidodinâmica Computacional utilizando o *Software OpenFOAM***. Projeto Final de Curso, EQ-UFRJ, Rio de Janeiro. 2012.

OPENCFD. OPENFOAM. **User Guide. The Open Source CFD Toolbox. 2** The Braccans Bracknell RG12 UK. www.openfoam.com. 2017.

OUSEGUI, A., MORESOLI, C., DOSTIE, M., MARCOS, B. **Optimal control and CFD modeling for heat flux estimation of a baking process.** Computers and Chemical Engineering, v. 38, pp. 139-150. 2012.

PARK, K. S., HEISTER, S. D. **Modelling Particle Collision Processes in High Reynolds Number Flow**. Journal of Aerosol Science, v. 66, pp. 123-138. 2013.

PISTIKOPOULOS, E. N., DIANGELAKIS, N. A. **Towards the integration of process design, control and scheduling: Are we getting closer?** Computers and Chemical Engineering, v. 91, pp. 85-92. 2016.

QIN, S. J., BADGWELL, T. A. **A Survey of Industrial Model Predictive Control Tecnology**. Control Eng. Practice, 11, 733. 2003.

RAHMAN, M. M., MERILAINEM, A., SADRUL, A. K. *et al*. **Evaluating $\kappa - \varepsilon$ with One-Equation Turbulence Model.** Procedia Engineering, v. 56, pp. 206-216. 2013.

RAMKRISHNA, D. **Population Balances – Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering**. 1ed. New York, Academic Press. 2000.

RAMKRISHNA, D., BORWANDER, J. D. **A Puristic Analisys of Population Balance I.** Chemical Engineering Science, v. 28, pp. 1423-1435. 1973.

RAMKRISHNA, D., BORWANDER, J. D. **A Puristic Analisys of Population Balance II**. Chemical Engineering Science, v. 29, pp. 1711-1721. 1974**.**

RAWLINGS, J. B., MAYNE, D. Q. **Model Predictive Control: Theory and Design**. 5ed. Madison, USA. Nob Hill Publishing. 2015.

RICHALET, J., RAULT, A., TESTUD, L., PAPON, J. **Model Predictive Heuristic Control: Applications to Industrial Processes**. Automatica, v. 14, pp. 413. 1978.

RICHALET, J., O'DONOVAN, D. **Predictive Functional Control: Principles and Industrial Applications**. Springer-Verlag, London, UK. 2009.

SEBORG, D. E., EDGAR, T. F., MELLICHAMP, D. A. **Process Dynamics and Control**, 3ed. Jonh Wiley & Sons, New Jersey, USA. 2011.

SILVA, L. F. L. R. **Desenvolvimento de Metodologias para Simulação de Escoamentos Polidispersos usando Código Livre**. Tese de Doutorado. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil. 2008.

SILVA, L. F. L. R., LAGE, P. L. C. **Development and Implementation of a Polydisperse Multiphase Flow Model in *OpenFOAM***. Computers and Chemical Engineering, v. 35, pp. 2653-2666. 2011.

SMITH, J. M., NESS, H. C. V., ABBOTT, M. M. **Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics.** 6 ed. New York, McGraw-Hill. 2001.

SOETERBOEK, R. **Predictive Control: A Unified Approach.** 1ed. London, UK. Prentice-Hall. 1992.

SOKOLICHIN, A., EIGENBERGER, G. **Applicability of the Standard $\kappa-\varepsilon$ Turbulence Model to the Dynamic Simulation of Bubble Columns: Part I. Detailed Numerical Simulation.** Chemical Engineering Science, v. 54, pp. 2273-2284. 1999.

SOLSVIK, J., TANGEN, S., JAKOBSEN, H. A. **Evaluation of Weighted Residual Methods for the Solution of the Pellet Equations: The Orthogonal Collocation, Galerkin, Tau and Least-Squares Methods**. Computers and Chemical Engineering, v. 58, pp. 223-259. 2013.

SOLSVIK, J., JAKOBSEN, H. A. **Solving the Population Balance Equation with the High-Order Least-Squares Method: Implementation Issues**. Procedia Engineering, v. 42, pp. 651-665. 2012.

STEPHANOPOULOS, G. **Chemical Process Control: An Introduction to Theory and Practice**. Prentice-Hall Inc, New Jersey, USA. 1989.

SU, J., GU, Z., LI, Y., *et al*. **Solution of population balance equation using quadrature method of moments with adjustable factor**, Industrial Engineering Chemistry Research, v. 62, pp. 5897-5911. 2007.

SU, J., GU, Z., FENG, S., *et al*. **An Adaptive Direct Quadrature Method of Moments for Population Balance Equation**, AIChE Journal, v. 54, pp. 2872-2887. 2008.

SUN, Z., WANG, S. **A CFD-based test method for control of indoor environment and space ventilation.** Building and Environment, v. 45, pp. 1441-1447. 2010.

SWIDERSKI, K., NARAYANAN, C., LAKEHAL, D. **Application of N-phase Algebraic Slip Model and Direct Quadrature Method of Moments to the Simulation of Air-Water Flow in Vertical Risers and Bubble Column Reactor**. Computers and Chemical Engineering, v. 90, pp. 151-160. 2016.

TAYLOR, G. I. **The Formation of Emulsions in Definable Fields of Flow**. Proceeding of Royal Society of London, v. 46, pp. 501-523. 1934.

TEIXEIRA, R. G. D. **Abordagem Algébrico-Diferencial na Simulação Unidimensional do Escoamento Bifásico em Dutos**. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. 2016.

VALENTAS, K. J., AMUNDSON, A. R. **Breakage and Coalescence in Dispersed Phase Systems.** Industrial and Engineering Chemistry: Fundamentals, v. 5, pp. 533-542. 1966.

VANNI, M. **Discretization Procedure for Breakage Equations**. AIChE Journal, v. 45, pp. 916-919. 1999.

VASCELLARI, M., ROBERTS, D. G., HLA, S. S. **From laboratory-scale experiments to industrial-scale CFD Simulations of entrained flow coal gaseification**, Fuel, 152, 58-73. 2015.

VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics.** 2 ed. Harlow, Pearson Education. 2007.

VIE, A., LAURENT, F., MASSOT, M. **Size-Velocity Correlations in Hybrid High Order Moment/Multi-Fluid Methods for Polydisperse Evaporating Sprays: Modelling and Numerical Issues,** Journal of Computational Physics, v. 237, pp. 177-210. 2013.

VIE, A., LAURENT, F., MASSOT, M. **A High Order Moment Method for the Simulation of Polydisperse Two-Phase Flows,** Comptes Rendus Mecanique, v. 341, pp. 55-64. 2013.

VIKAS, V., WANG, Z., PASSALACQUA, Z*., et al.* **Realizable high-order finite-volume schemes for quadrature-based moments methods**, Journal of Computational Physics, v. 230, n. 13, pp. 5328-5352. 2011.

WERLE, L., MARANGONI, C., TELEKEN, J. G. *et al.* **Control Strategy with Distributed Action for Minimization of Transients in Distillation Column**. In: 10th International Symposium on Process Systems Engineering, pp. 1527-1532, Mangaratiba-RJ. 2009.

WILCOX, D. C. **Turbulence Modeling for CFD**. 3 ed. La Canada, DCW Industries. 2006

XU, Z., ZHAO, H., CHENG, C. **Fast Monte-Carlo Simulation for Particle Coagulation in Population Balance**. Journal of Aerosol Science, v. 74, pp. 11-25. 2014.

YANG, Y., REUTER, M., HARTMAN, D. T. **CFD Modelling for Control of Hazardous Waste Incinerator**. Control Engineering Practice, v. 11, pp. 93-101. 2003.

YU, M., LIN, J., CAO, J., SEIPENBUSH, M. **An Analytical Solution for the Population Balance Equation using a Moment Method.** Particulogy, v. 18, pp. 194-200. 2015.

YU, M., LIU, Y., JIN, G., JIN, H. **A new Analytical Solution for Agglomerate Growth undergoing Brownian Coagulation.** Applied Mathematical Modelling, v. 40, pp. 5497-5509. 2016.

YUAN, C., LAURENT, F., FOX, R. O. **An Extended Quadrature Method of Moments for Population Balance Equations.** Journal of Aerosol Science, v. 51, pp. 1-23. 2012.

ZAO, C., ZHANG, Z. JIANG, P., BO, H. **Influence of various aspects of low Reynolds number $\kappa - \varepsilon$ turbulence models on predicting in-tube buoyancy affected heat transfer to supercritical pressure fluids.** Nuclear Engineering and Design, v. 313, pp. 401-413. 2017

ZHU, Z., DORAO, C. A., JAKOBSEN, H. A. **A Least-Squares Method with Direct Minimization for the Solution of the Breakage-Coalescence Population Balance Equation**. Mathematics and Computers in Simulation, v. 79, pp. 716-727. 2008

ZIEGLER, J. G., NICHOLS, N. B. **Optimum settings for automatic controllers.** Transactions of the A.S.M.E., v. 64, pp. 759, 1942