

**UFRRJ**

**INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
ENGENHARIA QUÍMICA**

**DISSERTAÇÃO**

**Controle de Temperatura em Reatores de  
Polimerização Baseado em Modelos Simplificados  
do Balanço de Energia com Estimação de  
Parâmetros em Tempo Real**

**Ivan Delduga**

**2013**



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**CONTROLE DE TEMPERATURA EM REATORES DE  
POLIMERIZAÇÃO BASEADO EM MODELOS SIMPLIFICADOS DO  
BALANÇO DE ENERGIA COM ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS EM  
TEMPO REAL**

**IVAN DELDUGA**

*Sob a Orientação do Professor*  
**Luiz Augusto da Cruz Meleiro**

*e Co-orientação do Professor*  
**André de Almeida**

Dissertação submetida como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Ciências**, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Área de Concentração em Engenharia Química.

Seropédica, RJ  
Fevereiro de 2013

660.2832

D345c

T

Delduga, Ivan, 1979-

Controle de temperatura em reatores de polimerização baseado em modelos simplificados do balanço de energia com estimação de parâmetros em tempo real / Ivan Delduga - 2013. 194 f. : il.

Orientador: Luiz Augusto da Cruz Meleiro.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Bibliografia: f. 139-145.

1. Reatores químicos - Teses. 2. Kalman, Filtragem de - Teses. 3. Processo estocástico - Teses. 4. Engenharia química - Teses. I. Meleiro, Luiz Augusto da Cruz, 1965-. II. Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química. III. Título.

**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**IVAN DELDUGA**

Dissertação submetida como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Ciências** no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, área de Concentração em Engenharia Química.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_

---

Luiz Augusto da Cruz Meleiro. Prof. D.Sc. DEQ/IT/UFRRJ  
(Orientador)

---

Maurício Bezerra de Souza Jr. Prof. D.Sc. DEQ/EQ/UFRRJ  
(Membro Titular)

---

Anderson Wilson da Silva Henriques. Prof. D.Sc. IFRJ  
(Membro Titular)

---

Márcia Peixoto Vega Domiciano. Prof. D.Sc. DEQ/IT/UFRRJ  
(Membro Suplente)

---

Marisa Fernandes Mendes. Prof. D.Sc. DEQ/IT/UFRRJ  
(Membro Suplente)

## AGRADECIMENTOS

*“Se um dia aconteceu um fenômeno chamado Big Bang (a origem do cosmos), é (sic) porque determinadas forças se juntaram numa determinada proporção matemática capaz de produzir esse efeito. Se isso aconteceu num determinado momento, é porque essa proporção matemática já era válida para produzir esse efeito, desde muito antes que ela se produzisse.*

*Todos os fenômenos da natureza expressam proporções matemáticas que são válidas antes de os fenômenos se manifestarem. A totalidade das proporções matemáticas que regem (sic) o cosmos existem (sic) eternamente, muito antes da existência do cosmos, inclusive as proporções matemáticas que permitem que um animal dotado de um cérebro pense e tenha consciência. Se você tomar a totalidade dessas proporções e dessas relações, você obtém o Logos Divino. O Logos Divino preexiste ao Universo. Ponto. Isto é um dado científico. Não há ninguém que possa responder a isso.*

*Agora, se um sujeito disser: “Não, as proporções não eram válidas na esfera das possibilidades, elas só se tornaram válidas na esfera da realidade.”, aquilo que é real é, por definição, possível. O esquema total das possibilidades realizáveis é o Logos Divino, e ele necessariamente preexiste à existência da própria realidade cósmica (Olavo de Carvalho).”*

Em um debate, Peter Atkins, renomado cientista ateu, pergunta a William Lane Craig, reconhecido filósofo cristão, se ele negaria que a ciência poderia explicar tudo. Craig diz: *“Eu penso que há muitas coisas que não podem ser provadas cientificamente. Deixe-me listar cinco: 1) Verdades lógicas e matemáticas não podem ser provadas pela ciência, a ciência pressupõe e tentar prová-las seria argumentar em círculos; 2) Verdades metafísicas, como: há outras mentes além da minha, o mundo externo é real, o passado foi criado há 5 min aparentando ser velho; 3) Crenças éticas sobre declarações de valor não são acessíveis pelo método científico. Você não pode mostrar, pela ciência, se o que os nazistas fizeram nos campos de concentração é algo mau; 4) Julgamentos estéticos não podem ser avaliados pelo método científico, pois o belo, como o bom, não pode ser provado cientificamente; 5) O mais notável seria a própria ciência que não pode ser justificada pelo método científico, pois é permeada por suposições. Por exemplo, a teoria especial da relatividade depende da suposição de que a velocidade da luz é constante, mas isso estritamente não pode ser provado. Nenhuma dessas crenças pode ser provada cientificamente, porém, são aceitas por todos nós”.*

Diante de um mundo cada vez mais apoiado nos ombros da ciência, vejo a miopia na crença do incontestável método científico como fonte única de conhecimento e obtenção das verdades do mundo. A ciência é, assim como os conhecimentos religioso, filosófico e vulgar, apenas um modo de explicar a realidade e tão válido como os demais. Sendo assim, como forma de destoar desse “modismo” agradeço primeiramente àquele que a ciência não pode sequer opinar: o Alfa e o Ômega. Aquele que aprendi com meus pais como sendo “Papai do Céu”, que a minha religião (católica) me ensinou a amá-lo sobre todas as coisas e que a filosofia definiu como sendo ato puro.

Realizo um sonho cujo início data de março de 2003, mas que por razões diversas precisou ser postergado por alguns anos. Minha caminhada até aqui não seria possível sem o apoio irrestrito e o amor incomensurável dos meus pais Ivan (*in memoriam*) e Fátima que não mediram esforços para assegurar tudo que precisava (e preciso) para alcançar todos os meus objetivos de modo digno. Também preciso acrescentar que ao longo desse tempo tive sempre a torcida e o amor da minha irmã Patrícia, que tinha nas minhas vitórias suas próprias conquistas. No mesmo sentido os avós Zimar (*in memoriam*) e Irys (*in memoriam*) e Conceição que contribuíram (contribuí) na minha formação enquanto pessoa. Com isso tenho como exemplo prático o que S. Paulo fala aos coríntios (1Cor13,1-2) “*Ainda que eu falasse línguas, as dos homens e dos anjos, (...) tivesse (...) o conhecimento de toda a ciência; (...) se não tivesse o amor (ágape; l.: agape; g.: αγάπη), eu nada seria*”. Certamente, se não fossem circunstâncias da vida, essa lista de agradecimentos à minha família deveria ser ainda maior.

Outro grupo de pessoas essencialmente importante em toda a minha caminhada e também na minha formação enquanto pessoa são os meus muitos amigos. Talvez nem tantos assim. Não! Realmente poucos; mas os melhores que alguém pode desejar. Não citarei seus nomes para não cometer nenhuma injustiça, mas certamente eles saberão que falo deles. Preciso agradecê-los por todo apoio e estímulo que tive, principalmente em momentos, deveras, muito difíceis e por todas as vezes que me corrigiram quando errei. Realmente é difícil “*(...) ser amigo para todas as horas e dizer sempre a verdade quando for preciso. E com confiança no que diz*” (Carlos Drummond de Andrade). Isso demonstra o verdadeiro amor (filia; l.: *philia*; g.: *φιλία*) que existe nas verdadeiras amizades que foram, não conquistadas, mas construídas ao longo dos anos através do respeito e confiança mútuos.

Evidente que não poderia deixar passar o público acadêmico que teve nessa empreitada uma atuação direta na formação do meu conhecimento formal e que viabilizou a realização desse trabalho. Preciso agradecer ao Meleiro pela paciência, apoio e compreensão por todas as dificuldades que se impuseram ao longo do desenvolvimento desse trabalho; ao André por me dar força e atenção desde 2003 respeitando e apoiando minhas decisões e me estimulando a cada etapa; ao Jansen pelo esforço em garantir minha matrícula na retomada em 2010 e em me ajudar nas questões administrativas; a todos os professores do Departamento e aos ex-companheiros de mestrado Jônatas, Adelson e Anelisa que me apoiaram em um dos momentos mais difíceis que passei em 2003 e tive neles o amparo e compreensão necessários.

Por todas as experiências maravilhosas, mesmo as mais duras, que tenho vivido, pela minha família e por todas as pessoas únicas que conheci e convivo reconheço que Deus me condenou à felicidade e tenho cumprido essa pena imposta por Ele plenamente e se eu puder escolher não quero nenhuma redução desse primoroso castigo.

# RESUMO

DELDUGA, Ivan. **Controle de Temperatura em Reatores de Polimerização Baseado em Modelos Simplificados do Balanço de Energia com Estimação de Parâmetros em Tempo Real**. 2013. (Dissertação Mestrado em Ciências, Engenharia Química). Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2013.

Este trabalho propôs-se a desenvolver uma estratégia de controle através da estimação de parâmetros em tempo real baseada na técnica de filtragem de sinais com o Filtro de Kalman, que apresenta potencial para o desenvolvimento de estratégias de controle mais eficientes para reatores de polimerização descontínuos. Procurou-se desenvolver, através da utilização do filtro de Kalman estendido, a estimação simultânea dos valores do calor de reação ( $Q_r$ ) e do coeficiente global de transferência de calor e a área de troca térmica ( $UA$ ), a partir de modelos simplificados de balanço de energia no reator e na jaqueta utilizando apenas as medidas das temperaturas do processo. O modelo estocástico do processo, definido no filtro de Kalman estendido, utilizou a estratégia de passo aleatório (*random walk*) e foi desenvolvido o projeto de um controlador por antecipação (*feedforward*), que através das estimativas de  $Q_r$  e  $UA$ , determina o novo *setpoint* para o controlador escravo (PI) em uma malha em cascata. A fim de testar a estratégia de controle proposta nesta dissertação e devido à indisponibilidade de um reator de polimerização real, utilizou-se a técnica de simulação computacional para descrever o comportamento dinâmico de um reator real. Para tanto, optou-se pelo reator de polimerização *benchmark* proposto por Chylla e Haase (1993) para teste de estratégias de controle, cujo modelo matemático foi validado pelos autores em uma planta de polimerização real. Ao término do trabalho, concluiu-se que a estratégia de controle baseada na estimação de parâmetros em tempo real foi capaz de manter a temperatura de reação adequadamente controlada diante de diversas perturbações, como variação das condições ambientais, físicas e químicas, incrustações e parâmetros mal sintonizados. A estratégia de controle proposta mostrou-se robusta e generalista, visto que é capaz de estimar parâmetros de processo com base em modelos simplificados do balanço de energia tendo como variáveis medidas apenas as temperaturas do reator e da jaqueta, mostrando que o controlador é adequado para aplicações multipropósitos.

**Palavras-chave:** Filtro de Kalman; Reatores em batelada; Controle em cascata.

## ABSTRACT

DELDUGA, Ivan. **Temperature Control of Polymerization Reactors Based on Simplified Models of Energy Balance and Real Time Parameter Estimation.** 2013. (Dissertation Master of Science, Chemical Engineering). Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, RJ, 2013.

This work aimed to develop a control strategy through the estimating parameters based on the real-time signal filtering technique with the Kalman Filter, which has potential for the development of more effective control strategies for batch polymerization reactors. This study sought to develop, using the extended Kalman filter, the simultaneous estimation of values of the heat of reaction ( $Q_r$ ) and the overall coefficient of heat transfer and heat exchange area ( $UA$ ) through the simplified models of the energy balance in reactor and in jacket using only measurements of process temperatures. The stochastic process defined in extended Kalman filter, used the strategy of random walk and was developed to design a *feedforward* controller, through which the estimates of  $Q_r$  and  $UA$  determines the new setpoint for the slave controller (PI) in a loop cascade. In order to test the control strategy proposed in this dissertation and due to the unavailability of a real reactor polymerization, we used the technique of computer simulation to describe the dynamic behavior of a real reactor. Therefore, we opted to use the benchmark polymerization reactor proposed by Chylla e Haase (1993) to test control strategies, whose mathematical model was validated by the authors in a real polymerization plant. After completion of this study, it was concluded that the control strategy based on the estimation of parameters in real-time is capable of maintaining the reaction temperature properly controlled against various disturbances, such as varying environmental conditions, physical and chemical and parameters barely tuned. The proposed control strategy proved to be robust and general since it is able to estimate process parameters based on simplified models of energy balance, with the only variables measured the temperatures of the reactor and jacket, showing that the controller is suitable for multipurpose applications.

**Keywords:** Kalman filter; Batch reactors; Cascade control.

## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 – Sistema de unidades utilizadas nesta dissertação.	43
Tabela 4.2 – Parâmetros utilizados na simulação do controle em cascata original.	46
Tabela 4.3 – Parâmetros para simulação e estimação com Filtro de Kalman Estendido.	58
Tabela 4.4 – Parâmetros para simulação com os produtos A e B para FFTJ.	66
Tabela 4.5 – Parâmetros para simulação com mudança do $UA$ inicial para FFTJ.	76
Tabela 4.6 – Parâmetros para simulação com mudança da incrustação para FFTJ.	83
Tabela 4.7 – Parâmetros para simulação com mudança climática para FFTJ.	87
Tabela 4.8 – Parâmetros para simulação com mudança climática para FFTJ.	92
Tabela 4.9 – Parâmetros para simulação com os produtos A e B para FFTM.	97
Tabela 4.10 – Parâmetros para simulação com mudança do $UA$ inicial para FFTM.	106
Tabela 4.11 – Parâmetros para simulação com mudança da incrustação para FFTM.	114
Tabela 4.12 – Parâmetros para simulação com mudança climática para FFTM.	118
Tabela 4.13 – Parâmetros para simulação com mudança nos tempos mortos.	122
Tabela 4.14 – Parâmetros para simulação com incerteza no calor específico.	127
Tabela 4.15 – Parâmetros para simulação com $UA_{loss}$ nulo.	131
Tabela 4.16 – Índices de qualidade das estratégias de controle.	135
Tabela 4.17 – Erros médios absoluto e relativo de QR e UA.	136
Tabela 7.1 – Dados para o produto A conforme Chylla e Haase (1993).	175
Tabela 7.2 – Dados para o produto B conforme Chylla e Haase (1993).	175
Tabela 7.3 – Dados do Reator, sistemas e processo conforme Chylla e Haase (1993).	176

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1: Reator de polimerização (CHYLLA e HAASE, 1993).	26
Figura 3.2: Digrama de blocos para a estrutura de controle proposta pelo trabalho.	37
Figura 3.3: Estrutura de controle proposta para o reator de polimerização.	38
Figura 4.1: Temperatura do meio reacional para o produto A no verão com 10 pontos de amostragem.	44
Figura 4.2: Vazão de alimentação de monômero com 10 pontos de amostragem.	44
Figura 4.3: Conversão de polímero – vazão de alimentação de monômero com 10 pontos de amostragem.	44
Figura 4.4: Temperatura do meio reacional para o produto A no verão com 100 pontos de amostragem.	44
Figura 4.5: Vazão de alimentação de monômero com 100 pontos de amostragem.	45
Figura 4.6: Conversão de polímero – vazão de alimentação de monômero com 100 pontos de amostragem.	45
Figura 4.7: Temperatura do reator (PA-B1-VE-PI-0).	47
Figura 4.8: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-VE-PI-0).	47
Figura 4.9: Dinâmica de alimentação do monômero (PA-B1-VE-PI-0).	47
Figura 4.10: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-PI-0).	48
Figura 4.11: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta após o período de reação (PA-B1-VE-PI-0).	48
Figura 4.12: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-PI-0).	49
Figura 4.13: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-PI-0).	49
Figura 4.14: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-PI-0).	50
Figura 4.15: Coef. global de transferência de calor (PA-B1-VE-PI-0).	50
Figura 4.16: Área de troca térmica do meio reacional (PA-B1-VE-PI-0).	51
Figura 4.17: Conversão do polímero (PA-B1-VE-PI-0).	51
Figura 4.18: Temperatura do reator (PB-B1-IN-PI-0).	52
Figura 4.19: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-IN-PI-0).	52
Figura 4.20: Dinâmica de alimentação do monômero (PB-B1-IN-PI-0).	52
Figura 4.21: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-PI-0).	53
Figura 4.22: Temperaturas de entrada e na saída da jaqueta após período de reação (PB-B1-IN-PI-0).	53
Figura 4.23: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-PI-0).	54
Figura 4.24: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-PI-0).	54
Figura 4.25: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-PI-0).	55
Figura 4.26: Coef. global de transferência de calor (PB-B1-IN-PI-0).	55
Figura 4.27: Área de troca térmica do meio reacional (PB-B1-IN-PI-0).	56
Figura 4.28: Conversão do polímero (PB-B1-IN-PI-0).	56
Figura 4.29: Calor de reação real e estimado (PA-B1-VE-PI-FK-80).	59
Figura 4.30: Coef. global de troca térmica e área real e estimado (PA-B1-VE-PI-FK-80).	60
Figura 4.31: Conversão real e estimada (PA-B1-VE-PI-FK-80).	60
Figura 4.32: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-PI-FK-80).	61
Figura 4.33: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-PI-FK-80).	61
Figura 4.34: Calor de reação real e estimado (PB-B1-IN-PI-FK-30).	62
Figura 4.35: Coef. global de troca térmica e área real e estimado (PB-B1-IN-PI-FK-30).	62
Figura 4.36: Conversão real e estimada (PB-B1-IN-PI-FK-30).	62
Figura 4.37: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-IN-PI-FK-30).	63
Figura 4.38: Erros abs. e relat. do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-PI-FK-30).	63
Figura 4.39: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-80).	67
Figura 4.40: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-VE-FFTJ-80).	67
Figura 4.41: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTJ-80).	67
Figura 4.42: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTJ-80).	68
Figura 4.43: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80).	68
Figura 4.44: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-80).	69
Figura 4.45: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-80).	69
Figura 4.46: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80).	70
Figura 4.47: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTJ-80).	70
Figura 4.48: Temperatura do reator (PB-B1-VE-FFTJ-80).	71
Figura 4.49: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-VE-FFTJ-80).	71
Figura 4.50: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-VE-FFTJ-80).	72
Figura 4.51: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-VE-FFTJ-80).	72
Figura 4.52: Evolução do calor de reação (PB-B1-VE-FFTJ-80).	72
Figura 4.53: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-VE-FFTJ-80).	73
Figura 4.54: Conversão do polímero (PB-B1-VE-FFTJ-80).	73
Figura 4.55: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-VE-FFTJ-80).	73

Figura 4.56: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-VE-FFTJ-80).....	74
Figura 4.57: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	76
Figura 4.58: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	77
Figura 4.59: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	77
Figura 4.60: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	78
Figura 4.61: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	78
Figura 4.62: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	78
Figura 4.63: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	79
Figura 4.64: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	79
Figura 4.65: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTJ-30).....	79
Figura 4.66: Temperatura do reator (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	80
Figura 4.67: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	80
Figura 4.68: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	81
Figura 4.69: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	81
Figura 4.70: Evolução do calor de reação (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	81
Figura 4.71: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	81
Figura 4.72: Conversão do polímero (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	82
Figura 4.73: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	82
Figura 4.74: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-VE-FFTJ-30).....	82
Figura 4.75: Temperatura do reator (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	84
Figura 4.76: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	84
Figura 4.77: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	84
Figura 4.78: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	85
Figura 4.79: Evolução do calor de reação (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	85
Figura 4.80: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	85
Figura 4.81: Conversão do polímero (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	85
Figura 4.82: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	86
Figura 4.83: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B5-VE-FFTJ-30).....	86
Figura 4.84: Temperatura do reator (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	88
Figura 4.85: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	88
Figura 4.86: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	89
Figura 4.87: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	89
Figura 4.88: Evolução do calor de reação (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	89
Figura 4.89: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	90
Figura 4.90: Conversão do polímero (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	90
Figura 4.91: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	90
Figura 4.92: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-IN-FFTJ-80).....	91
Figura 4.93: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	93
Figura 4.94: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	93
Figura 4.95: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	93
Figura 4.96: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	93
Figura 4.97: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	94
Figura 4.98: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	94
Figura 4.99: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	94
Figura 4.100: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	94
Figura 4.101: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).....	95
Figura 4.102: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTM-80).....	98
Figura 4.103: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-VE-FFTM-80).....	98
Figura 4.104: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTM-80).....	99
Figura 4.105: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTM-80).....	99
Figura 4.106: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-80).....	99
Figura 4.107: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTM-80).....	100
Figura 4.108: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTM-80).....	100
Figura 4.109: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação.....	101
Figura 4.110: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTM-80).....	101
Figura 4.111: Temperatura do reator (PB-B1-VE-FFTM-80).....	102
Figura 4.112: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-VE-FFTM-80).....	102
Figura 4.113: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-VE-FFTM-80).....	103
Figura 4.114: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-VE-FFTM-80).....	103
Figura 4.115: Evolução do calor de reação (PB-B1-VE-FFTM-80).....	103

Figura 4.116: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-VE-FFTM-80).....	104
Figura 4.117: Conversão do polímero (PB-B1-VE-FFTM-80). .....	104
Figura 4.118: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação .....	104
Figura 4.119: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-VE-FFTM-80).....	105
Figura 4.120: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTM-30).....	106
Figura 4.121: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-VE-FFTM-30).....	107
Figura 4.122: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTM-30).....	107
Figura 4.123: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTM-30). .....	108
Figura 4.124: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-30). .....	108
Figura 4.125: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTM-30). .....	108
Figura 4.126: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTM-30).....	109
Figura 4.127: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação .....	109
Figura 4.128: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTM-30).....	109
Figura 4.129: Temperatura do reator (PB-B1-VE-FFTM-30).....	110
Figura 4.130: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-VE-FFTM-30).....	110
Figura 4.131: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-VE-FFTM-30).....	111
Figura 4.132: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-VE-FFTM-30). .....	111
Figura 4.133: Evolução do calor de reação (PB-B1-VE-FFTM-30). .....	111
Figura 4.134: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-VE-FFTM-30).....	112
Figura 4.135: Conversão do polímero (PB-B1-VE-FFTM-30). .....	112
Figura 4.136: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação .....	112
Figura 4.137: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-VE-FFTM-30).....	113
Figura 4.138: Temperatura do reator (PA-B5-VE-FFTM-30).....	114
Figura 4.139: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B5-VE-FFTM-30).....	115
Figura 4.140: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B5-VE-FFTM-30).....	115
Figura 4.141: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B5-VE-FFTM-30).....	115
Figura 4.142: Evolução do calor de reação (PA-B5-VE-FFTM-30). .....	115
Figura 4.143: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B5-VE-FFTM-30). .....	116
Figura 4.144: Conversão do polímero (PA-B5-VE-FFTM-30).....	116
Figura 4.145: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação .....	116
Figura 4.146: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B5-VE-FFTM-30).....	116
Figura 4.147: Temperatura do reator (PA-B1-IN-FFTM-80).....	118
Figura 4.148: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-IN-FFTM-80).....	119
Figura 4.149: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-IN-FFTM-80).....	119
Figura 4.150: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-IN-FFTM-80). .....	119
Figura 4.151: Evolução do calor de reação (PA-B1-IN-FFTM-80). .....	120
Figura 4.152: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-IN-FFTM-80). .....	120
Figura 4.153: Conversão do polímero (PA-B1-IN-FFTM-80).....	120
Figura 4.154: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação .....	121
Figura 4.155: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-IN-FFTM-80).....	121
Figura 4.156: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTM-80-TM). .....	123
Figura 4.157: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> .....	123
Figura 4.158: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).....	124
Figura 4.159: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).....	124
Figura 4.160: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-80-TM). .....	124
Figura 4.161: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTM-80-TM). .....	124
Figura 4.162: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).....	125
Figura 4.164: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTM-80-TM). ..	125
Figura 4.163: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação .....	125
Figura 4.165: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+). .....	128
Figura 4.166: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+). .....	128
Figura 4.167: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+). .....	128
Figura 4.168: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).....	128
Figura 4.169: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).....	129
Figura 4.170: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).....	129
Figura 4.171: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).....	129
Figura 4.172: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).....	129
Figura 4.173: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+)..	130
Figura 4.174: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlO). .....	132
Figura 4.175: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlO). .....	132

Figura 4.176: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlo).....	132
Figura 4.177: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlo).....	133
Figura 7.1: Temperatura do reator (PA-B5-VE-PI-0).....	146
Figura 7.2: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PA-B5-VE-PI-0).....	146
Figura 7.3: Dinâmica de alimentação do monômero (PA-B5-VE-PI-0).....	146
Figura 7.4: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-PI-0).....	147
Figura 7.5: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta após período de reação (PA-B1-VE-PI-0).....	147
Figura 7.6: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-PI-0).....	147
Figura 7.7: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-PI-0).....	147
Figura 7.8: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-PI-0).....	148
Figura 7.9: Coef. global de transferência de calor (PA-B1-VE-PI-0).....	148
Figura 7.10: Área de troca térmica do meio reacional (PA-B1-VE-PI-0).....	148
Figura 7.11: Conversão do polímero (PA-B1-VE-PI-0).....	148
Figura 7.12: Temperatura do reator (PB-B1-IN-PI-0).....	149
Figura 7.13: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-IN-PI-0).....	149
Figura 7.14: Dinâmica de alimentação do monômero (PB-B1-IN-PI-0).....	149
Figura 7.15: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-PI-0).....	149
Figura 7.16: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta após período de reação (PB-B1-IN-PI-0).....	150
Figura 7.17: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-PI-0).....	150
Figura 7.18: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-PI-0).....	150
Figura 7.19: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-PI-0).....	150
Figura 7.20: Coef. global de transferência de calor (PB-B1-IN-PI-0).....	151
Figura 7.21: Área de troca térmica do meio reacional (PB-B1-IN-PI-0).....	151
Figura 7.22: Conversão do polímero (PB-B1-IN-PI-0).....	151
Figura 7.23: Calor de reação real e estimado (PA-B1-VE-PI-FK-80).....	151
Figura 7.24: Coef. global de troca térmica e área real e estimado (PA-B1-VE-PI-FK-80).....	152
Figura 7.25: Conversão real e estimada (PA-B1-VE-PI-FK-80).....	152
Figura 7.26: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-PI-FK-80).....	152
Figura 7.27: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-PI-FK-80).....	152
Figura 7.28: Calor de reação real e estimado (PB-B1-IN-PI-FK-30).....	153
Figura 7.29: Coef. global de troca térmica e área real e estimado (PB-B1-IN-PI-FK-30).....	153
Figura 7.30: Conversão real e estimada (PB-B1-IN-PI-FK-30).....	153
Figura 7.31: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-IN-PI-FK-30).....	153
Figura 7.32: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-PI-FK-30).....	154
Figura 7.33: Temperatura do reator (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	155
Figura 7.34: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	155
Figura 7.35: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	155
Figura 7.36: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	156
Figura 7.37: Evolução do calor de reação (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	156
Figura 7.38: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	156
Figura 7.39: Conversão do polímero (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	156
Figura 7.40: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	157
Figura 7.41: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B5-VE-FFTJ-30).....	157
Figura 7.42: Temperatura do reator (PB-B5-VE-FFTM-30).....	157
Figura 7.43: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B5-VE-FFTM-30).....	158
Figura 7.44: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B5-VE-FFTM-30).....	158
Figura 7.45: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B5-VE-FFTM-30).....	158
Figura 7.46: Evolução do calor de reação (PB-B5-VE-FFTM-30).....	158
Figura 7.47: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B5-VE-FFTM-30).....	158
Figura 7.48: Conversão do polímero (PB-B5-VE-FFTM-30).....	159
Figura 7.49: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B5-VE-FFTM-30).....	159
Figura 7.50: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B5-VE-FFTM-30).....	159
Figura 7.51: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTJ-30).....	160
Figura 7.52: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-IN-FFTJ-30).....	160
Figura 7.53: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTJ-30).....	160
Figura 7.54: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTJ-30).....	161
Figura 7.55: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30).....	161
Figura 7.56: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTJ-30).....	161
Figura 7.57: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTJ-30).....	161
Figura 7.58: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30).....	162

Figura 7.59: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTJ-30).	162
Figura 7.60: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTM-30).	162
Figura 7.61: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-IN-FFTM-30).	163
Figura 7.62: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTM-30).	163
Figura 7.63: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTM-30).	163
Figura 7.64: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTM-30).	163
Figura 7.65: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTM-30).	163
Figura 7.66: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTM-30).	164
Figura 7.67: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação	164
Figura 7.68: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTM-30).	164
Figura 7.69: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	165
Figura 7.70: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	165
Figura 7.71: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	165
Figura 7.72: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	166
Figura 7.73: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	166
Figura 7.74: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	166
Figura 7.75: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	166
Figura 7.76: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	167
Figura 7.77: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).	167
Figura 7.78: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).	167
Figura 7.79: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).	168
Figura 7.80: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).	168
Figura 7.81: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).	168
Figura 7.82: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).	168
Figura 7.83: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).	169
Figura 7.84: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).	169
Figura 7.85: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação	169
Figura 7.86: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).	169
Figura 7.87: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	170
Figura 7.88: Erro da temperatura do reator em relação ao <i>setpoint</i> (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	170
Figura 7.89: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	170
Figura 7.90: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	171
Figura 7.91: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	171
Figura 7.92: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	171
Figura 7.93: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	171
Figura 7.94: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	172
Figura 7.95: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).	172
Figura 7.96: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTJ-30-UAlO).	173
Figura 7.97: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlO).	173
Figura 7.98: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-UAlO).	173
Figura 7.99: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTJ-30-UAlO).	174

## NOMENCLATURA

$/_A$  = índice indicando produto A;  
 $/_B$  = índice indicando produto B;  
 $/^d$  = estado determinístico;  
 $/_k$  = caésimo ponto;  
 $/_M$  = mestre;  
 $/_n$  = enésimo ponto;  
 $/_S$  = escravo;  
 $/^S$  = estado estocástico;  
 $A$  = área de transferência de calor na jaqueta (ft<sup>2</sup>);  
 $\underline{A}$  = corresponde aos termos determinísticos na equação diferencial;  
 $\underline{B}$  = corresponde aos termos estocásticos na equação diferencial;  
 $C$  = saída do controlador escravo (%);  
 $c(t)$  = saída do controlador (%);  
 $Cp_i$  = calor específico do componente  $i$  (BTU/lb°F);  
 $Cp_M$  = calor específico do monômero (BTU/lb°F);  
 $Cp_W$  = calor específico do fluido de arrefecimento na jaqueta (BTU/lb°F);  
 $C_R$  = calor específico médio dos componentes do meio reacional (BTU/lb°F);  
 $\underline{d}$  = corresponde ao vetor dos termos independentes;  
 $e_i$  = erro do valor real em relação ao valor esperado do sub-índice  $i$ ;  
 $f$  = fração de sólidos;  
 $F_M$  = vazão molar de monômeros no reator (lbmol/min);  
 $F_W$  = vazão mássica do fluido de arrefecimento na jaqueta (lb/min);  
 $h$  = coeficiente do filme de transferência de calor (BTU/h.ft<sup>2</sup>.°F);  
 $h_f$  = inverso do fator de incrustação (h.ft<sup>2</sup>.°F/BTU);  
 $h_t$  = tempo de amostragem (min);  
 $i$  = fator de impureza (adimensional);  
 $k$  = constante cinética de primeira ordem (min<sup>-1</sup>);  
 $k_0$  = fator pré exponencial (min<sup>-1</sup>);  
 $K_P$  = ganho do processo (°F);  
 $Kp_i$  = ganho do controlador do sub-índice  $i$  (°F);  
 $m_i$  = massa do componente  $i$  (lb);  
 $m_M$  = vazão mássica de alimentação de monômero (lb/min);  
 $M_{MT}$  = massa total de monômeros adicionada ao reator (lb);  
 $m_R$  = massa do meio reacional (lb);  
 $MW_M$  = peso molecular da mistura de monômero (lb/lbmol);  
 $n_M$  = número de moles de monômeros no reator (lbmol);  
 $N_{MT}$  = número de moles de monômeros totais adicionados no reator (lbmol);  
 $\underline{P}$  = matriz de covariância para as estimativas;  
 $Q_R$  = Calor de reação;  
 $Rp$  = taxa de polimerização (lbmol/min);  
 $S(0)$  = massa de sólidos no reator no instante inicial (lb);

$S(t)$  = massa de sólidos no reator função do tempo (lb);  
 $T$  = temperatura de(o) reator/reação (°F);  
 $T_{amb}$  = temperatura ambiente (°F);  
 $T_{inlet}$  = temperatura da água no fluido de arrefecimento (°F);  
 $\bar{T}_J$  = temperatura média da jaqueta (°F);  
 $\bar{T}_{J_{ref}}$  = valor de referência para a temperatura média da jaqueta (°F);  
 $T_{J=}$  = temperatura de saída da jaqueta (°F);  
 $T_{JI\_SET}$  = *setpoint* da temperatura de entrada da jaqueta (°F);  
 $T_{JI=}$  = temperatura de entrada da jaqueta (°F);  
 $T_J^{in}$  = temperatura de entrada da jaqueta (°F);  
 $T_{jiset}$  = saída do controlador mestre e setpoint do controlador escravo (°F);  
 $T_{jiset(k)}$  = saída do controlador no instante  $k$  (°F);  
 $T_J^{out}$  = temperatura de saída da jaqueta (°F);  
 $t_k$  = discretização para o instante  $k$ ;  
 $T_R$  = temperatura do reator (°F);  
 $T_{R\_SET}$  = *setpoint* da temperatura de reação (°F);  
 $T_{steam}$  = temperatura do vapor no fluido de arrefecimento (°F);  
 $T_{wall}$  = temperatura da parede do reator;  
 $U$  = coeficiente global de transferência de calor;  
 $UA_{loss}$  = taxa de troca de calor para o ambiente por unidade de temperatura (BTU/min.°F);  
 $W$  = massa de água constante durante a reação (lb);  
 $W(0)$  = massa de água do meio reacional no instante inicial (lb);  
 $wc_J$  = produto da massa do fluido de arrefecimento e seu calor específico (lbBTU/lb°F);  
 $x(t)$  = conversão em qualquer instante;  
 $\underline{x}^i$  = vetor de estado para o respectivo estado  $i$ ;  
 $\underline{\hat{y}}$  = vetor com os valores efetivamente medidos;  
 $\Delta H_p$  = calor de polimerização (BTU/lbmol);  
 $\mu_i$  = viscosidade do produto (cP);  
 $\mu_{wall}$  = viscosidade do produto na parede do reator (cP);  
 $\mu$  = viscosidade da batelada (cP);  
 $\theta_1$  = tempo morto para a jaqueta (min);  
 $\theta_2$  = tempo morto para o circuito de arrefecimento (min);  
 $\tau_p$  = constante de tempo (min);  
 $\tau_I$  = constante de tempo da ação integral (min);  
 $\omega_p$  = ruído gaussiano que descreve a natureza estocástica de um parâmetro associado;  
 $\underline{\omega}_k^s$  = ruído gaussiano do estado estocástico no instante  $k$ ;

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>2</b>
1.1	Contextualização: Motivação para o Desenvolvimento do Trabalho .....	2
1.2	Escopo e Organização do Presente Trabalho .....	3
<b>2</b>	<b>REVISÃO DA LITERATURA .....</b>	<b>5</b>
2.1	Aspectos Históricos do Desenvolvimento da Teoria de Controle.....	5
2.2	Teoria de Controle Moderno .....	6
2.3	Sistemas de Controle.....	8
2.3.1	Controle em Cascata.....	8
2.3.2	Controle Adaptativo .....	10
2.3.3	Controle Preditivo .....	11
2.3.4	Controle Ótimo.....	13
2.3.5	Controle com Geometria Diferencial .....	13
2.4	Métodos para o Monitoramento e Controle .....	14
2.4.1	Métodos de Controle Estatístico de Processo (CEP).....	14
2.4.2	Métodos de Inteligência Computacional .....	15
2.4.3	Métodos de Estimação.....	17
2.4.3.1	Observadores de Estado.....	17
2.4.3.2	Estimadores de estado: Filtro de Kalman.....	18
2.4.3.3	Filtro de Kalman Estendido .....	18
2.4.3.4	Filtro de Kalman Unscented (Sigma-point) .....	19
2.4.3.5	Estimação em tempo real com base no Filtro de Kalman .....	19
2.5	Reação de Polimerização .....	21
2.5.1	Polimerização em Emulsão .....	21
2.5.2	Efeito Gel .....	21
2.6	Balço de Energia com Estimação de Parâmetros em Tempo Real .....	22
2.6.1	Problemas encontrados na Literatura com o Reator de Chylla e Haase .....	22
2.6.2	Considerações acerca da Temperatura da Jaqueta.....	23
2.6.3	Análise do Modo de Alimentação do Monômero no Processo .....	24
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA.....</b>	<b>25</b>
3.1	Estudo de Caso: Reator de Polimerização em Batelada .....	25
3.1.1	Configuração do Reator.....	26
3.1.2	Cinética de Reação .....	26
3.1.3	Transferência de Calor .....	28
3.1.4	Balço de Energia no Reator .....	29
3.1.5	Balço de Energia na Jaqueta .....	30
3.1.6	Sistema de Controle.....	31
3.2	Estrutura de Estimação com Filtro de Kalman.....	32
3.2.1	Modelos para o Filtro de Kalman .....	32
3.2.2	Formulação dos Modelos para os Balços de Energia .....	34
3.2.2.1	Balço de Energia: Hipótese da Média da Temperatura da Jaqueta .....	35
3.2.2.2	Cálculo da Conversão .....	36
3.2.3	Estrutura para os Modelos Estocásticos .....	36

<b>3.3</b>	<b>Estrutura do Controlador <i>Feedforward</i> .....</b>	<b>37</b>
3.3.1	Modelo para o Balanço de Energia no Reator .....	38
3.3.2	Modelo para o Balanço de Energia na Jaqueta para $T_J$ .....	39
3.3.3	Modelo para o Balanço de Energia na Jaqueta para $T_J$ .....	40
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>42</b>
<b>4.1</b>	<b>Considerações Iniciais .....</b>	<b>42</b>
<b>4.2</b>	<b>Influência do Modo de Alimentação do Monômero na Dinâmica do Processo .....</b>	<b>43</b>
<b>4.3</b>	<b>Simulação do Caso Base: Reator com Controle em Cascata Utilizando Controladores PI.....</b>	<b>45</b>
4.3.1	Simulação dos produtos A e B .....	45
4.3.1.1	Resultados para o Produto A.....	46
4.3.1.2	Resultados para o Produto B.....	51
4.3.2	Considerações sobre a Credibilidade do Modelo de Chylla e Haase (1993) .....	56
<b>4.4</b>	<b>Simulação do Processo com Controlador Mestre PI e Estimação de Parâmetros com Filtro de Kalman .....</b>	<b>58</b>
4.4.1	Simulação dos produtos A e B com estimação de parâmetros pelo FKE .....	58
4.4.1.1	Resultados para o Produto A e estimação de parâmetros através do FKE .....	59
4.4.1.2	Resultados para o Produto B e estimação de parâmetros através do FKE .....	61
4.4.2	Considerações sobre a Estimação de $Q_R$ e $UA$ .....	64
<b>4.5</b>	<b>Simulação do Processo com Controlador Mestre <i>Feedforward</i> Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para <math>T_J</math> .....</b>	<b>65</b>
4.5.1	Desempenho do controlador de temperatura para os produtos A e B.....	65
4.5.1.1	Resultados para o produto A.....	66
4.5.1.2	Resultados para o produto B .....	70
4.5.1.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$ .....	74
4.5.2	Desempenho do controlador frente a mudanças na estimativa inicial de $UA$ .....	75
4.5.2.1	Resultados para o produto A.....	76
4.5.2.2	Resultados para o produto B.....	80
4.5.2.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$ .....	83
4.5.3	Desempenho do controlador frente a mudanças no fator de incrustação.....	83
4.5.3.1	Resultados para o produto A.....	84
4.5.3.2	Resultados para o produto B .....	86
4.5.3.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$ .....	86
4.5.4	Desempenho do controlador frente a mudanças climáticas .....	87
4.5.4.1	Resultados para o produto A.....	88
4.5.4.2	Resultados para o produto B .....	91
4.5.4.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$ .....	91
4.5.5	Desempenho do controlador frente a mudanças nos tempos mortos do processo .....	91
4.5.5.1	Resultados para o produto A.....	92
4.5.5.2	Resultados para o produto B .....	95
4.5.5.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$ .....	95
<b>4.6</b>	<b>Simulação do Processo com Controlador Mestre <i>Feedforward</i> Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para <math>T_{médio}</math>.....</b>	<b>96</b>
4.6.1	Desempenho do controlador de temperatura para os produtos A e B.....	96
4.6.1.1	Resultados para o Produto A.....	97
4.6.1.2	Resultados para o Produto B.....	101
4.6.1.3	Considerações sobre o Controlador Mestre <i>Feedforward</i> Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para $T_{médio}$ .....	105

4.6.2	Desempenho do controlador frente a mudanças na estimativa inicial de $UA$ .....	105
4.6.2.1	Resultados para o produto A.....	106
4.6.2.2	Resultados para o Produto B.....	110
4.6.2.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_{Jmédio}$ .....	113
4.6.3	Desempenho do controlador frente a mudanças no fator de incrustação.....	113
4.6.3.1	Resultados para o Produto A.....	114
4.6.3.2	Resultados para o Produto B.....	117
4.6.3.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_{Jmédio}$ .....	117
4.6.4	Desempenho do controlador frente a mudanças climáticas .....	117
4.6.4.1	Resultados para o Produto A.....	118
4.6.4.2	Resultados para o produto B.....	121
4.6.4.3	Considerações sobre o Controlador Mestre <i>Feedforward</i> Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para $T_{Jmédio}$ .....	121
4.6.5	Desempenho do controlador frente a mudanças dos tempos mortos do processo .....	122
4.6.5.1	Resultados para o Produto A.....	123
4.6.5.2	Resultados para o produto B.....	125
4.6.5.3	Considerações sobre o Controlador Mestre <i>Feedforward</i> Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para $T_{Jmédio}$ .....	126
<b>4.7</b>	<b>Desempenho da Estratégia de Estimação e Controle Mediante Incerteza no Calor Específico.....</b>	<b>126</b>
4.7.1	Desempenho do controlador de temperatura dos produtos A e B .....	127
4.7.1.1	Resultados para o produto A.....	127
4.7.1.2	Resultados para o produto B.....	130
4.7.1.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$ .....	130
<b>4.8</b>	<b>Desempenho da Estratégia de Estimação e Controle Mediante Incerteza no Calor Perdido .....</b>	<b>130</b>
4.8.1	Simulação dos produtos A e B .....	131
4.8.1.1	Resultados para o produto A.....	131
4.8.1.2	Resultados para o produto B.....	133
4.8.1.3	Considerações sobre o controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$ .....	133
<b>4.9</b>	<b>Considerações Sobre as Estratégias de Controle Implementadas .....</b>	<b>134</b>
4.9.1	Índices de qualidade para as estratégias de controle.....	134
4.9.2	Índices de qualidade para as estimações de $Q_R$ e $UA$ .....	135
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E SUGESTÕES .....</b>	<b>137</b>
<b>5.1</b>	<b>Conclusão e Aprendizado do Trabalho.....</b>	<b>137</b>
<b>5.2</b>	<b>Perspectivas para a Estimação em Tempo Real Através do FKE .....</b>	<b>138</b>
<b>6</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>139</b>
<b>7</b>	<b>ANEXOS .....</b>	<b>146</b>
<b>7.1</b>	<b>Anexo 1 – Resultados Complementares para o Caso Base .....</b>	<b>146</b>
7.1.1	Caso Base, Produto A, Verão, 5ª Batelada, Controlador Mestre PI .....	146
7.1.2	Caso Base, Produto B, Inverno, 5ª Batelada, Controlador Mestre PI.....	149
7.1.3	Estimação com FKE, Produto A, Verão, 5ª Batelada, Controlador Mestre PI.....	151
7.1.4	Estimação com FKE, Produto B, Inverno, 5ª Batelada, Controlador Mestre PI.....	153
<b>7.2</b>	<b>Anexo 2 – Resultados Complementares para o Problema da Incrustação .....</b>	<b>155</b>
7.2.1	Controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_J$ .....	155
7.2.2	Controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_{Jmédio}$ .....	157

<b>7.3</b>	<b>Anexo 3 – Resultados Complementares para o Problema da Mudança Climática .....</b>	<b>160</b>
7.3.1	Controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_J$ .....	160
7.3.2	Controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_{J\text{médio}}$ .....	162
<b>7.4</b>	<b>Anexo 4 – Resultados Complementares para o Problema da Alteração dos Tempos Mortos .....</b>	<b>165</b>
7.4.1	Controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_J$ .....	165
7.4.2	Controlador mestre <i>feedforward</i> baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_{J\text{médio}}$ .....	167
<b>7.5</b>	<b>Anexo 5 – Resultados Complementares para o Problema da Incerteza no Calor Específico.....</b>	<b>170</b>
<b>7.6</b>	<b>Anexo 6 – Resultados Complementares para o Problema da Incerteza na Taxa de Calor Perdido.</b>	<b>173</b>
<b>7.7</b>	<b>Anexo 7 – Informações dos produtos e do reator .....</b>	<b>175</b>
7.7.1	Dados para o produto A.....	175
7.7.2	Dados para o produto B.....	175
7.7.3	Dados do Reator .....	175

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 Contextualização: Motivação para o Desenvolvimento do Trabalho

Os polímeros são macromoléculas constituídas pela ligação de um grande número de moléculas menores. Essas pequenas moléculas que se combinam umas com as outras para formar moléculas maiores (polímeros) são denominadas de monômeros e as reações são denominadas de polimerizações (ODIAN, 2004).

Os polímeros têm significativa importância no desenvolvimento tecnológico dos séculos XX e XXI e a cada ano observa-se sua participação cada vez mais efetiva no setor industrial, seja na produção, seja no produto final. Esta participação, além de apresentar uma grande variedade de produtos, também possui aplicações específicas com crescente importância tecnológica e econômica, principalmente pela capacidade de aumentar a produtividade através da redução de custo e da praticidade de aplicação.

De fato, a participação dos polímeros na sociedade moderna tem apresentado um deslocamento dos aspectos quantitativos para os qualitativos. Ou seja, no início, houve uma procura maior pela diversidade de aplicações intensivas desses produtos, porém, atualmente, as aplicações estão mais direcionadas, com uso de produtos com características mais particulares, obtendo, assim, maior importância sob uma ótica tecnológica e, sobretudo, econômica (ALMEIDA, 1997).

A busca efetiva por ganho de produtividade é inerente às atividades produtivas e é determinante na existência e longevidade de instituições com fins lucrativos. No entanto, a busca por ganhos de produção com redução de custos esbarra em premissas cada vez mais consolidadas na atualidade. A qualidade, que é uma dessas premissas, tem se tornado um dos mais importantes fatores de decisão dos consumidores e, muitas vezes, concorre com a necessidade de reduzir os recursos empregados no processo.

Essa nova conjuntura, de busca de produtos com alto valor agregado, foco na qualidade final do produto e na segurança, respeito ao meio ambiente e a preocupação com o aumento de produtividade, privilegia, conseqüentemente, a utilização da mesma instalação para a fabricação de diferentes produtos. Neste cenário, torna-se, portanto, cada vez mais necessária a busca por equipamentos multipropósitos associados a estratégias de controle mais eficientes.

Na indústria química este perfil não é diferente e os reatores de polimerização descontínuos (batelada ou semibatelada) surgem como alternativas viáveis e muitas vezes indispensáveis. Há grande oportunidade quando este tipo reator é operado de forma “robusta” e precisa, de modo a proporcionar flexibilidade para fabricar grande variedade de produtos sem comprometer a qualidade intrínseca de cada um, tampouco os aspectos de segurança da operação e das pessoas, assim como as exigências ambientais e legais.

A fim de satisfazer todas essas restrições, faz-se necessário um monitoramento permanente e eficaz do comportamento do processo e de suas principais variáveis, buscando a correção necessária diante de desvios inaceitáveis. Porém, a falta de instrumentos robustos para medição em tempo real de variáveis chaves de processo ou das características mais relevantes para os produtos caracteriza um desafio tecnológico a ser superado. Uma alternativa para superar as dificuldades de falta de instrumentação adequada seria a utilização de modelos

cinéticos, que também apresenta sérias restrições para sua aplicação. É intuitivo pensar que modelos matemáticos confiáveis para a cinética de reação devem estar intimamente relacionados às características das respectivas reações, ou seja, para cada tipo de reação um modelo cinético deveria ser desenvolvido. Vislumbrando-se a possibilidade de se contar com equipamentos multipropósitos é evidente que o uso de tais modelos em sua totalidade, por si só, torna a alternativa inviável na prática (ALMEIDA, 1997).

Sob esta perspectiva, os critérios tornam-se desafiantes para o controle de processos, uma vez que surge a necessidade de manter bem controlada a reação de polimerização e porque esses tipos de processos apresentam complicadores intrínsecos à sua natureza: operação multivariável com cinética de reação dinâmica, processo em regime transitório e de natureza não linear e existência de tempos mortos. Dessa forma, a busca de estratégias com base no modelo mostra grande potencial, porém, esbarra no problema de falta de medições de terminadas variáveis e isso também pode inviabilizar sua aplicação.

A utilização dos balanços de energia em tempo real, embora seja uma excelente alternativa para determinação de variáveis de interesse, apresenta parâmetros, tais como taxa de reação e coeficiente de transferência de calor, que são de difícil medição e, portanto, inviabilizam a sua aplicação direta em estratégias de controle de reatores de polimerização. No entanto, medições de temperatura e vazão são métodos consolidados e, de modo geral, essas variáveis podem ser utilizadas em estratégias de controle de reatores.

Por outro lado a obtenção de balanços de energia para reatores é uma tarefa exequível e bem estabelecida, além de ter a vantagem de não depender substancialmente do tipo de reação (ALMEIDA, 1997).

Dessa forma, as medidas de determinadas variáveis e a disponibilidade dos modelos dinâmicos das equações do balanço energético podem fornecer importantes informações a respeito do processo e permitem estabelecer inferências sobre o andamento da reação até a formação do produto. Deve-se ter em mente que essas informações, diretas ou inferenciais, podem ser obtidas em tempo real, sendo possível seu uso para fins de monitoramento e na estrutura de controle.

Nesse sentido, a estimação de parâmetros em tempo real baseada em técnicas como o Filtro de Kalman destaca-se como uma alternativa adequada para superar algumas das dificuldades apresentadas no monitoramento de reações de polimerização, além de contribuir para o desenvolvimento de estratégias de controle mais eficientes para este sistema reacional.

## 1.2 Escopo e Organização do Presente Trabalho

O presente trabalho trata do desenvolvimento de uma estratégia de controle de temperatura para reatores de polimerização em batelada através da estimação de parâmetros em tempo real baseada na técnica de filtragem de dados com o Filtro de Kalman. A estratégia proposta realiza a estimação simultânea do calor de reação ( $Q_r$ ) e do coeficiente de transferência de calor e a área ( $UA$ ) através do Filtro de Kalman Estendido (FKE), que utiliza modelos simplificados do balanço de energia do reator e da jaqueta e medidas das temperaturas. O modelo estocástico do FKE utiliza a estratégia de passo aleatório (*random walk*) e foi desenvolvido um controlador que, através das estimativas de  $Q_r$  e  $UA$ , determina o *setpoint* para o controlador escravo em uma malha de controle *feedback* em cascata.

Para testar a estratégia de controle proposta no presente trabalho, utilizou-se o reator de polimerização *benchmark* proposto por Chylla e Haase (1993), que apresenta um desafio para estratégias de controle de processo para reatores de polimerização em emulsão operando em modo semibatelada.

Reatores descontínuos têm sido empregados com frequência nas indústrias de química fina, de polímeros e farmacêutica. A produção geralmente é limitada a um procedimento específico para cada etapa do processo. O controle de temperatura para os reatores de polimerização descontínuos é um problema importante e muitas vezes não trivial, pois o processo tem comportamento não linear ao longo do tempo devido à natureza de sua reação.

No Capítulo II é feita a apresentação da revisão bibliográfica que embasa direta ou indiretamente esse trabalho. O capítulo apresenta uma análise da literatura que tange o escopo deste trabalho e mostra os principais sistemas de controle disponíveis na literatura para este processo. Descrevem-se, ainda, algumas técnicas de monitoramento que se mostraram úteis para o desenvolvimento deste trabalho. Também é abordado neste capítulo, ainda que de modo conciso, alguns aspectos das reações de polimerização e do balanço de energia em tempo real. É importante destacar que os trabalhos apresentados visaram ilustrar a pluralidade de técnicas disponíveis norteando o desenvolvimento do trabalho.

No Capítulo III foi feita a apresentação detalhada do estudo de caso deste trabalho, o reator de Chylla e Haase (1993), que é considerado um problema clássico para testes de estratégias de controle de processos de polimerização. Apresentam-se os balanços de energia do reator e da jaqueta, o balanço de massa, a cinética de reação e o sistema de controle original, além de algumas considerações sobre os modelos. Também é abordada a estratégia de controle utilizada para o desenvolvimento dessa dissertação.

O Capítulo IV apresenta a análise dos resultados obtidos com a implementação da estratégia de controle de temperatura proposta para o reator de polimerização operando em modo semibatelada.

As conclusões do trabalho são apresentadas no Capítulo V, onde são destacados os principais resultados obtidos e propostas para trabalhos futuros.

## 2 REVISÃO DA LITERATURA

Para dar início ao desenvolvimento do presente trabalho, buscaram-se referências na literatura disponível, a fim de dar suporte teórico, embasamento técnico e que se criasse um ambiente de aprendizado com as experiências e resultados obtidos por diversos especialistas da área de controle e disciplinas afins.

A revisão de literatura para a realização deste trabalho foi feita em duas etapas. Em um primeiro momento foi feita uma análise dos conceitos de controle de processos com o objetivo de identificar as principais características das técnicas de controle e justificar a escolha da estratégia da estimação de parâmetros em tempo real para reatores de polimerização em batelada. Posteriormente, com os conceitos mais consolidados, realizou-se a busca na literatura por referências que contribuíssem diretamente para o desenvolvimento desse trabalho no que se refere às análises de resultados.

### 2.1 Aspectos Históricos do Desenvolvimento da Teoria de Controle

Controle automático de processos é o ramo do conhecimento com fortes contribuições das áreas de engenharia e matemática que estuda maneiras sistemáticas de descrever processos e sintetizar ações de tal modo que os processos tenham um comportamento previsível e, sobretudo, dentro dos limites esperados. Pode-se entender que o controle é, assim como a engenharia, teleológico por natureza, uma vez que seu desenvolvimento objetiva atingir determinados fins.

O controle de processos pode ser entendido como um conjunto de técnicas e tecnologias desenvolvidas com o objetivo de manter certas variáveis dentro de limites operacionais desejáveis. Esse controle pode exigir a intervenção humana ou ser automático (CAMPOS e TEIXEIRA, 2006).

O desenvolvimento da área de controle automático de processos, cujos conceitos e técnicas vêm se desenvolvendo ao longo de sua história, têm mostrado aplicabilidade na construção de modelos explicativos em diversas ciências, como por exemplo, a biologia e, indubitavelmente, como ferramenta nas áreas de engenharia. É evidente sua importância em setores diversos como eletroeletrônicos, automotivos, aeroespacial, logística, ambiental e processos metalúrgicos, têxteis, alimentícios e químicos.

Historicamente, o problema de controle mostra sua maior importância primeiramente durante a Revolução Industrial, no século XIX, com aplicações nos processos têxteis. As máquinas a vapor tinham grande importância no aspecto da qualidade e produtividade, uma vez que eram influenciados pela velocidade de rotação. Por sua vez, a velocidade de rotação da máquina sofria influência da pressão de vapor da caldeira, pela qualidade do carvão, pelo clima, pelo uso paralelo do vapor em outras aplicações, etc. O controle da velocidade era feito pelo regulador empírico desenvolvido por James Watt, em 1775. Com o tempo, foram implementadas melhorias no regulador como o desenvolvimento de novos materiais e acabamento. No entanto, os sistemas tinham suas velocidades oscilando em torno do valor esperado. Esse problema foi encarado por nomes importantes como Clerk Maxwell, que através do cálculo diferencial estabeleceu uma análise teórica do comportamento do regulador.

No ano de 1922, durante a primeira guerra mundial, N. Minorsky mostra como poderia ser determinada a estabilidade de um sistema a partir de equações diferenciais que o descrevem. O resultado de sua pesquisa é divulgado no artigo “Directional Stability of Automatically Steered Bodies” e desenvolve um servocontrole para a pilotagem automática de navios.

Nyquist, no ano de 1932, promove um salto extraordinário no aspecto teórico com seu trabalho de critério de estabilidade “Regeneration Theory”. Seu trabalho obteve sucesso com o uso da Transformada de Lapalace e do Teorema do argumento de Cauchy que permitia prever com segurança oscilações antes de fechar a malha. Seu procedimento era relativamente simples, pois através de entradas senoidais em regime permanente obtinha respostas em malhas abertas.

Hazen, que introduziu o termo servomecanismo para sistemas de controle de posição, publicou “Teoria dos Servomecanismos” em 1934. Seu trabalho foi utilizado durante a segunda guerra mundial para aprimorar a pontaria dos canhões cujos alvos eram os navios.

Os métodos de resposta de frequência e de colocação das raízes permitiram o desenvolvimento de projetos de sistemas de controle lineares em malha fechada que atendiam os requisitos de desempenho esperados. O trabalho de W. R. Evans, em 1948, praticamente encerra a discussão do método de lugar das raízes. Essas técnicas, que são o bojo da teoria de controle clássica, mantêm o sistema estável, com respostas aceitáveis, porém não podem ser considerados sistemas ótimos.

A partir da década de 1950, motivado principalmente por problemas do setor aeroespacial, o problema do controle ótimo passa a ter especial atenção. A ênfase do sistema de controle passa a estar focada em projetos de sistemas ótimos em relação a alguma função objetivo. Ou seja, o desempenho do controle era medido através de índices que deveriam ser minimizados. Essa mudança foi estimulada principalmente por questões econômicas, uma vez que grandes cortes de custos eram observados com pequenas melhorias no desempenho do sistema de controle.

A teoria de controle clássica trata, basicamente, de sistemas de entrada e saída simples (SISO – *Single-Input, Single-Output*), portanto, esse sistema de controle não é adequado para processos com múltiplas entradas e/ou múltiplas saídas (MIMO - *Multiple-Input, Multiple - Output*). Cada vez mais os processos (principalmente plantas químicas) possuem muitas entradas e saídas e com isso há a necessidade de implementação de muitas equações. Desse modo, com a disponibilidade de uso dos computadores a partir da década de 1960, a teoria de controle clássica abre espaço para o surgimento da teoria de controle moderno, onde fica possível a análise de sistemas multi-variáveis e a síntese no domínio do tempo com variáveis de estado.

Para um melhor entendimento sobre os aspectos históricos, recomenda-se a leitura dos trabalhos de Seborg *et al.* (1989), Coughanowr (1991), Assis (1996), Luyben (1996), Luyben e Luyben (1997), Oliveira *et al.* (1999), Ogata (2002) e principalmente Faccin (2004) e Aguirre *et al.* (2007). Essas obras auxiliaram a composição e a elaboração desse texto.

## 2.2 Teoria de Controle Moderno

A estratégia de controle que se busca estudar nesse trabalho, baseada na estimação de parâmetros em tempo real através do Filtro de Kalman, é uma alternativa que se insere na linha

da Teoria de Controle Moderno. Nesse sentido, buscou-se um melhor entendimento a respeito dos fundamentos do controle moderno, bem como da amplitude de sua aplicação. Isso se torna relevante na medida em que se busca posicionar o trabalho diante da variedade de alternativas disponíveis. Para Assis (1996), o uso do Controle Moderno em processos se justifica pelos seguintes argumentos:

- 1) A variação temporal de parâmetros em alguns processos químicos possui comportamento de difícil previsão, como fator de incrustação, fator de frequência da equação da taxa de reação, vazão de alimentação, etc.
- 2) Limitações instrumentais devido à ausência de equipamentos confiáveis para medição de concentração de reagentes e/ou produtos ou pelo alto custo para aquisição dos existentes.
- 3) Alguns processos químicos apresentam comportamento tipicamente não linear, o que dificulta o desempenho de controladores clássicos.
- 4) Alguns processos têm dinâmicas complexas, onde a resposta a uma perturbação ocorre de modo inverso por um determinado período. Esse comportamento, embora previsível, prejudica o desempenho do controlador clássico.

Segundo Ogata (2002), a Teoria de Controle Moderno difere da Teoria de Controle Clássico no sentido de que a primeira se aplica a sistemas de múltiplas entradas e múltiplas saídas, podendo ser lineares ou não lineares, invariantes ou variantes no tempo, enquanto que a segunda se aplica exclusivamente a sistemas lineares, invariantes no tempo e com apenas uma entrada e uma saída. Além disso, a teoria de controle moderno é fundamentalmente uma abordagem no domínio temporal, enquanto que a teoria de controle clássico é uma abordagem no domínio da frequência.

A ideia de controle moderno surge por volta da década de 60 quando os computadores começam a ficar disponíveis (OGATA, 2002). Desde esse período, a dependência do empirismo e do conhecimento de campo no desenvolvimento de projetos vem diminuindo, pois cada vez mais se chegam a resultados mais precisos e exatos, aumentando a amplitude de aplicação dos sistemas baseados na teoria de controle moderno (AGUIRRE *et al.*, 2007).

Em Aguirre *et al.* (2007), o controle moderno é definido como uma técnica baseada em conceitos de espaço de estado que tentam buscar maior precisão e aplicabilidade através do fornecimento de ferramentas analíticas. Essas técnicas normalmente são implementadas em computadores, facilitando o desenvolvimento do projeto de controle.

Cada vez mais os sistemas vêm aumentando o seu grau de complexidade. Esse movimento ocorre, principalmente, pelas necessidades de se atender com mais precisão resultados de diversas naturezas e de maiores complexidades. É nesse ambiente de diversidade, exigências cada vez mais rigorosas e acessibilidade à computação que a Teoria de Controle Moderno vem se desenvolvendo, cuja abordagem é feita para a análise e projeto de sistemas de controle complexos. Quando se fala de sistemas complexos, portanto, pode-se entender de um modo amplo como sistemas que apresentam várias entradas e/ou várias saídas e cujas variáveis são dependentes do tempo (AGUIRRE *et al.*, 2007).

As grandes mudanças ocorridas na teoria de controle e sua prática desde os anos 60 foram provocadas pelo controle linear quadrático, teoria da equação de Ricatti e o uso do filtro de Kalman, que foi introduzido na literatura no início dos anos 60. O filtro de Kalman se tornou

uma ferramenta muito útil em diversas áreas da engenharia devido a facilidade de se implementar, via computador, um algoritmo recursivo para estimação de uma variável de estado (AGUIRRE *et al.*, 2007).

Alguns trabalhos de controle moderno que usam o filtro de Kalman foram analisados e seus resultados ou detalhes peculiares serão mostrados e discutidos ao longo do texto, porém os trabalhos listados a seguir são representativos da amplitude do tema: MacGregor (1986) apresenta um trabalho teórico sobre balanço de energia em tempo real com base na estimação de parâmetros com Filtro de Kalman. Chylla e Haase (1993) ao apresentarem seu trabalho afirmaram que os controladores PID não atendem bem ao processo e sugeriram que fosse desenvolvido um sistema de controle com desempenho superior. Helbig *et al.* (1996) desenvolveu uma análise não linear e um controlador preditivo para o reator de Chylla e Haase (1993) utilizando em sua estrutura o Filtro de Kalman. MacGregor e Clarke-Pringle (1997) desenvolveram um controle adaptativo não linear de temperatura que faz uso do Filtro de Kalman. Beyer *et al.* (2008) desenvolveram um controle adaptativo de linearização exata usando o Filtro de Kalman “Sigma-Point” e avaliaram o seu desempenho em um reator similar ao de Chylla e Haase (1993).

## 2.3 Sistemas de Controle

### 2.3.1 Controle em Cascata

O reator de Chylla e Haase (1993) utilizado para validar as estratégias de controle propostas neste trabalho é constituído de um sistema de controle em cascata que utiliza originalmente dois controladores PID em sua malha. No entanto, no artigo original os autores sustentam que essa estratégia não é adequada para o processo, visto que apresenta diversos problemas como oscilações grosseiras na temperatura do reator, que é a variável controlada do processo.

Embora o objetivo principal desse trabalho não seja resolver o problema proposto no artigo de Chylla e Haase (1993), é importante conhecer a estrutura de controle original e o seu desempenho para permitir a comparação de desempenho com as estratégias propostas nesta dissertação. Neste sentido, é igualmente importante conhecer o conceito da estrutura de controle em cascata, suas peculiaridades, vantagens e desvantagens.

Analisando a atuação de um controlador *feedback* convencional, segundo Seborg *et al.* (1989), observa-se que sua desvantagem é que a ação corretiva para perturbações não inicia até que a variável controlada se afaste do valor desejado (*setpoint*). Nesse sentido, a estratégia de controle *feedforward* oferece uma melhoria significativa em comparação com a estratégia de controle *feedback* para processos com constantes de tempo elevadas ou atrasos de transporte e tempos mortos. No entanto, a estratégia de controle *feedforward* requer que as perturbações sejam medidas e um modelo que descreva o efeito dessas variáveis sobre o processo deve ser implementado para que se possa calcular a ação de controle.

Uma abordagem alternativa para os dois casos acima e que provê melhor desempenho na resposta de um processo dinâmico é utilizar uma medição secundária e um controlador *feedback* também secundário. Uma estrutura de controle em cascata tem dois controladores *feedback*, com a saída do controlador primário (ou mestre) atuando para mudar o *setpoint* do

controlador secundário (ou escravo). A saída do controlador escravo é então enviada para o elemento final de controle (SEBORG *et al.*, 1989).

A medição secundária deverá ter seu ponto localizado de forma a reconhecer a condição de desvio mais cedo do que a variável controlada, porém a perturbação sofrida pelo processo não é necessariamente um dado medido. Esta abordagem utiliza múltiplos laços de realimentação e é chamado de controle em cascata. Um dos conceitos mais úteis no controle avançado é o controle em cascata. É particularmente útil quando os distúrbios estão associados à variável manipulada ou quando o elemento de controle último apresenta um comportamento não linear (SEBORG *et al.*, 1989).

Conforme se vê em Luyben (1996) e em Luyben e Luyben (1997), há dois propósitos para a estrutura de controle em cascata:

- 1) Eliminar os efeitos de alguns distúrbios;
- 2) Melhorar o desempenho dinâmico da malha de controle.

Luyben e Marroquin (1972) fizeram uma avaliação experimental de quatro controladores não lineares em cascata para reatores em batelada. Um sistema de controle adequado, variando o ganho do controlador escravo em função do erro da malha do controlador mestre, foi encontrado de modo que apresentasse um desempenho melhor que a apresentado por controladores lineares padrão.

O trabalho feito por Jutan e Uppal (1984) para controle de temperatura de uma reação exotérmica em batelada utilizou um esquema combinado *feedforward-feedback* para o controle escravo. O acompanhamento de duas variáveis manipuladas foi monitorado através de uma parametrização e os resultados mostraram um desempenho superior quando comparado ao PID, com respostas mais estáveis e ajustes menos sensíveis aos erros do da modelagem.

Cabassud *et al.* (1999) em seu trabalho apresentaram uma nova estratégia para o controle de temperatura dos reatores em batelada multipropósitos usando um controle baseado em modelo em cascata. Seus resultados, de modo geral, mostraram bom desempenho e eficiência para a estratégia desenvolvida.

Campos e Teixeira (2006) afirmaram que estruturas em cascata têm a vantagem de perturbações na malha escrava serem detectadas antes de afetar a malha mestra. Para tanto, a constante de tempo da malha escrava deve ser menor do que a da malha mestra para acelerar a sua resposta e permitir que não linearidades detectadas pela malha mestra sejam compensadas pela malha escrava. Esta estratégia de controle geralmente apresenta resultados satisfatórios quando implementada. No entanto, há certa dificuldade no ajuste dos parâmetros e requer que as malhas sejam ajustas separadamente, ou seja, primeiro ajusta-se a malha escrava com parâmetros que a tornem rápida, evitando *overshoot* e, com essa malha no modo automático, ajusta-se a malha mestra.

Outros trabalhos mais recentes como os de Helbig *et al.* (1996), MacGregor e Clarke-Pringle (1997), Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008), Vasanthi *et al.* (2011) avaliam o desempenho de estratégias mais sofisticadas com malhas em cascata. De modo geral suas propostas mostram melhor desempenho do que a estrutura original.

### 2.3.2 Controle Adaptativo

Diversos trabalhos vêm sendo desenvolvidos com base na avaliação de desempenho do controle de temperatura do reator de Chylla e Haase (1993) utilizando a estratégia de controle adaptativo. Além disso, várias técnicas de controle adaptativo vêm sendo desenvolvidas nas últimas décadas com o objetivo de substituir os métodos clássicos de controle padrão na área industrial (CLARKE *et al.*, 1987).

Não obstante ser um tema amplo, a possibilidade de analisar o desempenho de controladores adaptativos aplicados ao reator *benchmark* é latente e não está descartada. Esse tipo de comparação permite avaliações mais abrangentes dos resultados alcançados. Dessa forma, faz-se necessário um embasamento teórico no tema no que tange seus aspectos gerais e resultados alcançados com a sua implementação.

Adaptar, na linguagem cotidiana, significa mudar um comportamento em conformidade com as novas circunstâncias. Podemos intuir, portanto, que um controlador adaptativo é, assim, um sistema que pode modificar o seu comportamento em resposta a alterações na dinâmica do processo e da natureza das perturbações dadas (ÅSTROM E WITTENMARK, 1995).

A história dos controladores adaptativos remete à década de 1950, quando havia o interesse no desenvolvimento de pilotos automáticos, pois os voos passam por condições muito diferentes e, nesse sentido, o controle adaptativo seria uma alternativa interessante. Porém a época não desfrutava de muitos computadores e os controladores adaptativos não alcançaram o sucesso esperado. Já na década de 1960, grandes desenvolvimentos ocorreram na teoria de identificação e de controle o que propiciou um melhor entendimento do problema de controle adaptativo de modo geral. Nas décadas seguintes, de 1970 e 1980, o controle adaptativo ganhou um novo impulso com o desenvolvimento dos microprocessadores. O desenvolvimento de controle adaptativo para sistemas não lineares ocorreu principalmente na década de 1990, assim como estudos abordando a robustez de controladores adaptativos (ÅSTROM E WITTENMARK, 1995 e AGUIRRE *et al.*, 2007).

Os desenvolvimentos na teoria de controle adaptativo, conforme dito anteriormente, devem-se em grande parte à teoria de controle moderno e à teoria de estabilidade. A capacidade em manter o desempenho do sistema de controle adaptativo em malha fechada quando há variações na dinâmica da planta tem motivado a crescente experimentação em diversas aplicações práticas. Controladores adaptativos são particularmente interessantes para sistemas cujos parâmetros da planta são desconhecidos ou variam com o tempo. Ou seja, de certa forma, assume-se que a planta possua uma estrutura conhecida, porém os parâmetros não possuem valores conhecidos a priori. Usualmente, o enfoque adotado é o de combinar técnicas de projeto de sistemas de controle com técnicas de estimação *on-line* de parâmetros. Dessa forma, pode-se pensar em diferentes estratégias de controle adaptativo através da combinação de cada uma das técnicas de estimação de parâmetros possíveis com cada uma das técnicas de projeto de controladores, o que daria uma infinidade de alternativas (AGUIRRE *et al.*, 2007).

MacGregor e Clarke-Pringle (1997) utilizam um controlador adaptativo não linear com base em geometria diferencial e uso do Filtro de Kalman. A simulação utilizou o modelo do reator de Chylla e Haase (1993) e seus resultados mostraram que diante de mudanças de temperatura, múltiplos produtos, efeito gel e outras variedades do processo, o algoritmo foi

capaz de manter o controle de temperatura do reator dentro de uma faixa aceitável para o processo.

O trabalho de Binder *et al.* (2000) foca a otimização dinâmica através de uma estratégia de vetor de parametrização para o controlador adaptativo. O autor aplica sua estratégia no reator *benchmark* de Chylla e Haase (1993) e obtém bons resultados em relação ao controle de temperatura da reação.

Um estudo realizado por Zeybek *et al.* (2003) analisa a implementação de uma estrutura de controle adaptativo para temperatura de um reator de polimerização em batelada utilizando uma rede neuronal artificial de três camadas. Os resultados apresentados são satisfatórios para a reação do estireno, pois manteve a temperatura de reação dentro de uma faixa aceitável, inclusive durante a adição do monômero.

Graichen *et al.* (2006) desenvolveu um controlador adaptativo *feedforward* para o reator CSTR *benchmark* e seus resultados mostraram que o controlador demonstrou robustez mesmo diante de incertezas em seu modelo.

Beyer *et al.* (2008) utiliza uma estrutura de controle adaptativo por linearização exata com Filtro de Kalman Sigma-Point. Essa estratégia é utilizada em um reator de Chylla e Haase (1993) modificado para o controle da temperatura de polimerização. Seus resultados mostram que a estratégia obtém estimativas precisas, o que contribui para a estratégia de controle aplicada.

### 2.3.3 Controle Preditivo

Dando continuidade à etapa de avaliação da literatura disponível, verificou-se que há muitos trabalhos baseados na estrutura de controle preditivo. De fato, o desafio do controle da temperatura de polimerização proposto por Chylla e Haase (1993) foi enfrentado por muitos especialistas usando como estratégia as técnicas baseadas no controle preditivo. Dessa forma, faz-se igualmente importante que se tenha conhecimento sobre esta abordagem de controle, pois parte dos resultados obtidos nesta dissertação será comparado com trabalhos que usaram esse tipo de controlador.

As estratégias de controle preditivo (com horizonte estendido) surgiram no ambiente industrial na década de 1970. Seu desenvolvimento ocorreu a partir do trabalho de diferentes grupos industriais em países distintos, a saber: nos Estados Unidos da América surgia o DMC “Dynamic Matrix Control”, uma estratégia bem conhecida e desenvolvida na Shell Oil Company, e na França o MAC “Model Algorithm Control”; ambas utilizaram um modelo baseado na resposta a um impulso de entrada. A necessidade de se controlar processos multivariáveis cujas saídas e entradas possuíam restrições fomentou o desenvolvimento dessa abordagem de controle. Como os resultados de implementação foram bastante representativos, embora não acompanhados de estudos de estabilidade, e como a implementação advinha de uma simplicidade computacional, o algoritmo encontrou sucesso em suas aplicações (COELHO *et al.*, 1997; LUYBEN e LUYBEN, 1997 e AGUIRRE *et al.*, 2007).

Na década de 1980 outras estruturas foram surgindo no ambiente acadêmico e Clarke (1987) denominou esta ação de controle para sistemas auto-ajustáveis de Controlador Preditivo Generalizado (GPC). O algoritmo de controle preditivo auto-ajustável com horizonte estendido é o mais recente controle adaptativo apresentado na literatura de controle de processos e

apresenta como características o fato de poder ser aplicado em processos de fase não-mínima; possuir propriedades de estabilidade e rastreamento que não são afetadas pelo cancelamento de pólos estáveis ou instáveis; e poder ser aplicado em processos multivariáveis e com atraso de transporte variável ou desconhecido; além de proporcionar um sistema de controle incremental, o que evita o problema de *offset* no controlador. O GPC tem recebido bastante atenção do meio acadêmico e industrial e é o mais popular algoritmo de controle com horizonte estendido (COELHO *et al.*, 1997 e AGUIRRE *et al.*, 2007).

A rigor, o controle preditivo não pode ser considerado como uma estratégia específica, mas deve ser entendido como uma designação utilizada a um conjunto de várias outras estratégias de controle que estão vêm desenvolvidas ao longo do tempo e que consideram e compartilham algumas ideias em comum baseadas no conceito de predição. Essas estratégias de controle se inserem em sistemas de controle multivariável e operam no que se pode chamar como um segundo nível de controle do processo, enviando, dentro de uma estrutura de controle em cascata, os sinais de referência para os *setpoints* dos controladores locais (AGUIRRE *et al.*, 2007).

Dentre as técnicas de controle moderno, a técnica de controle preditivo é, sem dúvida, uma das mais eficazes e, talvez, a técnica que mais obteve êxito nas aplicações industriais. O sucesso se deve ao fato das estratégias de controle preditivo poderem ser aplicadas tanto a sistemas monovariáveis quanto a sistemas multivariáveis, sejam lineares ou não lineares. Além disso, as restrições nas saídas das ações de controle podem ser consideradas no desenvolvimento do projeto do sistema de controle em tempo real e também podem ser usadas para controlar processos com atrasos (AGUIRRE *et al.*, 2007).

O elemento de predição é, em certo sentido, o elemento mais importante dentro do sistema de controle, dado que ele deve ser capaz de representar adequadamente a dinâmica do processo para permitir o cálculo das predições da sua saída, ser intuitivo e, ao mesmo tempo, possibilitar uma análise conceitual do sistema. Uma das muitas vantagens do controle preditivo é a possibilidade de utilizar o conhecimento dos valores futuros da referência (quando disponíveis) para o cálculo do sinal de controle, que permite, por exemplo, que o sistema atinja mais rapidamente ou de forma mais branda o novo valor desejado. Essa característica torna-se relevante em algumas aplicações como, por exemplo, em processos em batelada, onde as referências futuras são conhecidas *a priori* (AGUIRRE *et al.*, 2007).

Helbig *et al.* (1996), após corrigir algumas equações do artigo original reator de Chylla e Haase (1993), utilizou uma análise não linear e um controlador com modelo preditivo utilizando em sua estrutura o filtro de Kalman. Seus resultados foram comparados com um controlador PID típico e tiveram êxito em relação ao controle de temperatura dentro de uma faixa aceitável, mesmo com variação de tempos mortos.

Avaliando as aplicações do controle preditivo, Kothare *et al.* (2003) trabalharam no controle de solução de polimerização através de uma estratégia de controle preditivo de múltiplos modelos. O autor avaliou o efeito do número de modelos lineares utilizados para representar um sistema não linear e seu controlador rejeitou perturbações presentes durante a etapa transição e mudança operacional.

Nagy *et al.* (2007) estudaram uma estratégia de controle preditivo não linear para o controle de temperatura de uma reação em batelada. Embora os autores consigam obter

resultados positivos, sua conclusão é que sua técnica ainda não se justifica economicamente para ser aplicada no processo que foi avaliado.

#### 2.3.4 Controle Ótimo

O filtro de Kalman, que será a técnica utilizada para estimação de parâmetros em tempo real do presente trabalho, tem íntima relação com o desenvolvimento do conceito de controle ótimo. Dessa forma, é útil que se avalie o conceito de controle otimizando e suas peculiaridades. Os sistemas de controle ótimo possuem bastante suporte no desenvolvimento das técnicas de otimização. O fato de que um índice determinado de desempenho poder ser definido de tal modo que se consiga o melhor resultado possível do sistema é atrativo. A otimização consiste, de modo geral, na busca do espaço de parâmetros variáveis do controlador em função de algum índice de desempenho para determinar onde este resultado é maximizado ou minimizado (ASSIS, 1996).

Sob certo aspecto, a maior vantagem do método do controle ótimo é que não se tem restrições na planta, ainda que o processo seja não linear, de múltipla entrada e múltipla saída, variando no tempo etc. Por outro lado, a maior desvantagem deste método de otimização é que ainda não se determinou nenhum método satisfatório para discriminar extremos locais. Dessa forma, esta abordagem tem utilidade para qualquer que seja o processo cuja superfície de desempenho tenha um único ótimo e cujas mudanças sejam lentas o suficiente para que o sistema de controle se habitue a elas (OGATA, 2002).

Casamatta *et al.* (1999) avaliaram a operação de um reator operando em batelada, cujo objetivo cobre um amplo domínio de otimização das condições operacionais para controle *on-line* e monitoramento. O trabalho busca uma solução ótima para o controle de temperatura e, para tratar o problema de controle ótimo por programação não linear, define um determinado número de parâmetros. Os resultados mostram que sua metodologia consegue lidar bem com as trocas térmicas em um reator de planta piloto.

No trabalho de Binder *et al.* (2000), o problema de otimização é aproximado por um problema não linear através da parametrização das variáveis de controle. A abordagem foi aplicada a um problema simples de otimização dinâmica para o controle de temperatura de um reator de semibatelada, mas o autor afirma que essa metodologia pode ser aplicada a outros processos de otimização dinâmica.

#### 2.3.5 Controle com Geometria Diferencial

A modelagem apresentada por Chylla e Haase (1993) para o processo de polimerização mostra um conjunto de equações não lineares. Uma alternativa possível para se implementar um controle não linear é através do uso da geometria diferencial. Porém, não é objetivo desse tópico promover um detalhamento rigoroso e formal da geometria diferencial, mas apenas mostrar a relevância desse assunto na temática do presente trabalho. Maiores detalhes sobre geometria diferencial, bem como aspectos históricos do desenvolvimento do tema podem ser encontrados nas obras de Kreiszig (1991), Anzaldo-Meneses *et al.* (2002), e Monforte (2002), entre outras.

Dentro das técnicas de controle não linear, pode-se observar o uso da técnica de geometria diferencial como uma alternativa. Controladores não lineares com base na teoria de geometria diferencial são frequentemente aplicados ao controle de radicais livres de reações de polimerização (SOROUSH e KRAVARIS, 1992 e KOZUB e MACGREGOR, 1992b *apud* MACGREGOR e CLARKE-PRINGLE, 1997).

Segundo Almeida (1997), essa linha de pesquisa de geometria diferencial aplicada a reatores de polimerização é o ramo do cerne do controle de processo e remonta ao final dos anos 1980. Sua ideia principal consiste em usar os próprios modelos não lineares, que descrevem a dinâmica do processo, na estrutura do sistema de controle. Se sua aplicação estiver vinculada à necessidade de modelos que descrevam a cinética de reação e o balanço de massa, certamente se submeterá às dificuldades intrínsecas do processo, por outro lado, se seu uso estiver restrito ao balanço energético do reator encontrará suporte sólido para compor as estratégias de controle.

O trabalho realizado por MacGregor e Clarke-Pringle (1997) considera o controle de temperatura de reatores de polimerização em semibatelada com base no artigo do Chylla e Haase (1993) e destaca alguns pontos que devem ser relevantes, como a produção de vários produtos no mesmo reator, a mudança da taxa de transferência de calor durante a uma batelada e de corrida para corrida, a taxa de variação de tempo de reação – que é não linear devido à mudança de concentração de monômero – e reações de difusão controlada (efeito gel), além da ausência de modelos cinéticos para os reatores. Os resultados encontrados por esses autores com um controlador adaptativo não linear com base em geometria diferencial em conjunto com o filtro de Kalman estendido forneceu excelentes resultados quando comparados a um sistema tradicional de controle. As temperaturas foram controladas dentro da faixa esperada para o processo, mesmo diante de circunstâncias adversas. Deve-se destacar que a estimativa em tempo real é fundamental para o bom desempenho do controlador não linear.

## **2.4 Métodos para o Monitoramento e Controle**

Almeida (1997) cita que há dificuldades de medição direta de diversas variáveis do processo e que instrumentos robustos que propiciem tais medições não acompanham o avanço da ciência de controle de processo. As reações em batelada se caracterizam por apresentarem variações diretamente relacionadas com o tempo, ou seja, a ausência de estados estacionários e duração finita.

### **2.4.1 Métodos de Controle Estatístico de Processo (CEP)**

Um dos objetivos desse trabalho é garantir que a temperatura de reação opere dentro de uma faixa tolerável para o processo. Ou seja, deseja-se manter a temperatura controlada e com pequena variabilidade. Nesse sentido, o Controle Estatístico de Processo é bastante útil e, segundo Almeida (1997), essa técnica vem sendo aplicada com êxito a reatores de polimerização contínuos e descontínuos.

A característica geral dessa metodologia é baseada no estabelecimento de um padrão aceitável para o comportamento do processo, que será verificado através do conjunto de dados acumulados ao longo do tempo. O desempenho do processo poderá ser comparado com o

comportamento esperado através de cartas de controle (gráficos de controle) que apontam os limites de especificação do processo. Há diversos modelos de cartas de controle como Shewhart, CUSUM, MMEP dentre outros (ALMEIDA, 1997).

Em geral, há grande correlação entre as variáveis e uma grande quantidade de dados, dessa forma, as cartas de controle clássicas são insuficientes para extrair toda a informação contida, sendo assim, novas técnicas de estatística multivariável tomam espaço (MACGREGOR, 1987 *apud* ALMEIDA, 1997).

O controle estatístico de processos é uma coletânea de ferramentas poderosas com aplicação na resolução de problemas e útil na obtenção da estabilidade do processo e melhoria da capacidade através da redução de variabilidade e pode ser utilizado em qualquer processo (MONTGOMERY, 2004).

Em um processo, é comum haver a necessidade de monitoramento de um grande número de variáveis que na maioria das vezes não são totalmente independentes, pelo contrário, apresentam certo grau de correlação. Nessa perspectiva, pode-se concluir que a dimensão necessária para o monitoramento é inferior à dimensão de medidas. Técnicas para esse monitoramento são conhecidas como Métodos de Estruturas Latentes, no qual dois merecem destaque: Método das Componentes Principais e Método dos Mínimos Quadrados Parciais. Explicações mais detalhadas desses métodos podem ser verificadas em Montgomery (2004).

#### 2.4.2 Métodos de Inteligência Computacional

Quando se compara um operador humano treinado com um controlador clássico ou controlador avançado nota-se uma grande diferença, uma vez que o operador humano pode reconhecer entradas familiares e, ainda, pode usar das suas experiências pessoais passadas para compensar perturbações no processo. Sistemas de controle adaptativo, por exemplo, são projetados de modo a modificar o sinal de controle à medida que o meio externo ao sistema muda de tal forma a manter um desempenho ótimo (ASSIS, 1996).

Um sistema será denominado como um sistema com aprendizado se for capaz de reconhecer determinadas características e padrões de comportamento (repetições) familiares de uma situação e se usar suas experiências passadas aprendidas para se comportar de uma forma ótima (ASSIS, 1996).

Uma série de ferramentas tem sido desenvolvida para auxiliar a construção de sistemas inteligentes. Tais sistemas são, de modo geral, sistemas computacionais, embora não sejam, necessariamente, digitais. Com o objetivo de facilitar o desenvolvimento de sistemas que utilizam inteligência computacional, foram desenvolvidas diversas classes de ferramentas como Linguagens Especiais, Redes Neurais Artificiais, Sistemas Nebulosos, Computação Evolutiva, Sistemas Híbridos etc. (AGUIRRE *et al.*, 2007).

Frente aos problemas que surgem com a utilização de técnicas de estimação baseadas em métodos de identificação de falhas e de monitoramento, onde modelos detalhados e um grande número de sensores e instrumentos de medida compatíveis com a observabilidade do sistema devem estar disponíveis e são necessários, vem sendo propostas metodologias alternativas que possam incorporar, em certo sentido, a experiência adquirida através do conhecimento acumulada por profissionais. Com o auxílio das técnicas de inteligência computacional, essas metodologias buscam organizar estas informações em um sistema

especialista baseado em procedimentos. O conhecimento adquirido com o processo intuitivo sobre as relações de causalidade que estão associadas a comportamentos não desejados, “descritas na forma de modelos qualitativos”. Estes modelos, então, são arranjados respeitando uma relação hierárquica, o que gera regras de diagnóstico e ação a ser tomada em cada nível. “Aspectos quantitativos muitas vezes são adicionados através do uso da teoria probabilística ou lógica nebulosa” (PETTI *et al.*, 1990 *apud* ALMEIDA, 1997).

Um sistema com aprendizado tem a capacidade de generalização e, com isso, responde a uma situação familiar sem necessitar de nova identificação do sistema. O treinamento das Redes Neurais é a etapa crucial, que pode ser entendida como um problema de otimização não linear, onde o sistema deverá aprender qual a melhor escolha para cada situação, através do ajuste adequado dos parâmetros da estrutura neuronal. Uma vez que o sistema tenha aprendido determinar a melhor escolha para cada situação dada, sejam relações simples ou complexas, ele pode operar próximo a uma condição ótima independentemente das alterações nas condições operacionais ou internas do processo (ASSIS, 1996 e MELEIRO, 2002).

As excepcionais possibilidades computacionais com o cérebro humano tem motivado o conceito de Redes Neurais Artificiais, que têm sido empregadas seja na identificação, seja no controle de sistemas dinâmicos não lineares. O cérebro humano apresenta determinadas capacidades psíquicas como percepção, reconhecimento de padrão, juízo, raciocínio, controle motor etc. A operação do cérebro humano é bastante complexa, não linear e possui uma estrutura particular denominada neurônio (SEBORG *et al.*, 2004 e AGUIRRE *et al.*, 2007).

A teoria de sistemas nebulosos é uma abordagem formal cujo propósito é tratar a modelagem, a representação, o raciocínio e o processamento de informações imprecisas como uma estratégia de solução de problemas. No núcleo dos sistemas nebulosos está a teoria de conjuntos nebulosos, que permite traduzir, em termos matemáticos, noções, informações e regras que expressam conhecimento de forma linguística. Ela também fornece um sistema de inferência que utiliza informação imprecisa representada por variáveis caracterizadas por conjuntos nebulosos e um conjunto de regras que representam funções ou relações entre variáveis envolvidas para processar informações e tomar decisão (AGUIRRE *et al.*, 2007).

Sistemas híbridos são aqueles que envolvem pelo menos duas tecnologias diferentes. Por exemplo, pode ser feita a combinação de redes neurais artificiais com modelos nebulosos, gerando um sistema inteligente híbrido denominado ANFIS – Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System. Sistemas especialistas podem se valer da Teoria das Probabilidades para fazer uso de inferências bayesianas (AGUIRRE *et al.*, 2007).

Com a necessidade de buscar alternativas para o monitoramento e controle de processos, foram desenvolvidas técnicas que incorporam a experiência dos profissionais. Davidson (1987) mostra a incorporação do conhecimento prático à estratégia de controle para um reator de batelada com jaqueta.

Chen *et al.* (1998) analisa a implementação do Filtro de Kalman Fuzzy, cuja estrutura preserva o mesmo mecanismo recursivo que o Filtro de Kalman convencional. Os resultados computacionais mostram que essa estratégia é robusta diante de variações aleatórias dos parâmetros do sistema.

Um estudo realizado por Zeybek *et al.* (2003) analisa a implementação de uma estrutura de controle heurístico adaptativo para temperatura de um reator de polimerização em batelada. Esse algoritmo consiste de uma rede neuronal artificial *feedforward* com três camadas. Os

resultados apresentados foram satisfatórios para a reação do estireno, pois manteve a temperatura de reação dentro de uma faixa aceitável, inclusive durante a inserção do monômero.

Resultados satisfatórios também foram alcançados por Ng (2004) no reator do Chylla e Haase (1993), onde as simulações mostraram as vantagens e a robustez de utilizar a rede neuronal em uma estratégia híbrida, especialmente quando um algoritmo adaptativo é implementado.

Wakabayashi (2007) em sua dissertação “Análise e Controle Fuzzy de Processos: Estudo de Caso em um Reator de Polimerização” cita que os dois principais desenvolvimentos metodológicos relacionados ao que se convencionou chamar de controle inteligente são as redes neurais artificiais e a lógica *fuzzy*. As redes neurais artificiais estão relacionadas com uma abordagem conexionista da inteligência artificial enquanto que a lógica *fuzzy* faz parte da abordagem cognitiva. Naquele trabalho, o autor relatou que os controladores obtidos de temperatura e pressão, do tipo *PI-fuzzy*, forneceram bons desempenhos. Isso mostra que é viável controlar as variáveis do processo, fazendo-as acompanhar os *setpoints* definidos. Considerando a característica não linear e o comportamento interativo do sistema, os resultados obtidos foram melhores com a estratégia de controle *PI-fuzzy* do que com estratégia PID clássica. O reator analisado na monografia é com jaqueta para nylon 6.

### 2.4.3 Métodos de Estimação

Como o presente trabalho é baseado na estimação de parâmetros em tempo real, apresenta-se a seguir uma avaliação dos métodos de estimação descritos na literatura relacionada ao tema.

#### 2.4.3.1 Observadores de Estado

A estimação de estados onde são dadas determinadas medições a partir de um sistema que não tenha nenhum ruído de condução dinâmica, mas cujas condições iniciais não sejam devidamente conhecidas, pode ser desenvolvida por meio de observadores (MAYBECK, 1979).

Observadores de Estado, segundo Ogata (1995), é uma estrutura no sistema de controle que realiza a estimação de variáveis de estado com base nas medidas das variáveis controladas e de saída. A condição de “observabilidade” é satisfeita quando cada estado inicial pode ser determinado através da observação da variável de saída no mesmo período de amostragem.

Segundo Aguirre *et al.* (2007), os observadores são estimadores de estado para sistemas determinísticos com o objetivo de reconstituírem os sistemas dinâmicos. Entende-se por sistemas determinísticos, sistemas sem ruídos tanto do processo quanto das medidas. Inicialmente, tais observadores foram apresentados por Luenberger e possuem diversas aplicações como monitoramento, controle e detecção de falhas. Basicamente, a abordagem dos observadores de estado é feita com base no modelo dinâmico do sistema. Dessa forma, é possível especificar uma estrutura para o observador, que deve ser realimentada com os valores medidos no campo, fazendo com que a dinâmica do erro (entre o valor medido e o esperado) se aproxime da estabilidade assintoticamente.

#### 2.4.3.2 Estimadores de estado: Filtro de Kalman

Como destacado anteriormente, o presente trabalho utiliza o Filtro de Kalman na estrutura do controle para estimar, em tempo real, os parâmetros desejados associados a reação de polimerização ( $Q_R$  e  $UA$ ) e, através deles, atuar no controle da planta utilizando balanços de energia simplificados. Dessa forma, o objetivo é ilustrar como a filtragem atua no processo como estimador de estado.

A filtragem é relacionada com a obtenção de um sinal a partir de dados disponíveis, porém portadores de um certo grau de incerteza, ou seja, corrompidos por um ruído. Em sistemas determinísticos, é possível prever exatamente o comportamento futuro de uma variável a partir das informações passadas. Porém, isso não se observa em casos estocásticos, que devido às incertezas do sistema não é possível prever com exatidão (ASSIS, 1996).

O Filtro de Kalman (FK) foi desenvolvido por Rudolph Emil Kalman em 1960, período propício devido o desenvolvimento da engenharia aeroespacial. Ele fornece um algoritmo recursivo para a estimação de estados que processa todas as medições realizadas, e integra a suas equações o ruído dinâmico para a determinação dos estados. Para a derivação do FK é necessário que as equações sejam lineares e que os ruídos apresentem distribuição gaussiana com média nula. Assume-se que não haja correlação entre os ruídos. Quando estas condições são satisfeitas, então o FK é ótimo quando avaliado o erro quadrático médio (SANTOS, 2005 e AGUIRRE *et al.*, 2007).

#### 2.4.3.3 Filtro de Kalman Estendido

O filtro Kalman considerado até este ponto abordou a estimativa de um vetor de estado em um modelo linear de um sistema dinâmico. No entanto, muitos sistemas reais apresentam dinâmicas e, conseqüentemente, modelos não lineares, dessa forma, uma das premissas não é satisfeita e perde-se a condição ótima do FK. Se, no entanto, o modelo não é linear, pode-se prolongar o processo de filtragem de Kalman através de um procedimento de linearização. Como o filtro de Kalman estima o estado do sistema, pode-se utilizar a estimativa do filtro de Kalman, como a própria trajetória nominal de estado. Este é o método implícito. A linearização é feita em torno da estimativa feita pelo filtro de Kalman e a estimativa do filtro de Kalman é, por sua vez, baseada no sistema já linearizado. Nesse caso, as equações não lineares são expandidas em série de Taylor e truncadas em primeira ordem de modo a aproximar o sistema para um conjunto de equações lineares e assim atingir uma condição considerada sub-ótima. Esses casos são denominados Filtro de Kalman Estendido – FKE – que foi originalmente proposto por Stanley Schmidt para que o filtro de Kalman pudesse ser aplicado a problemas não-lineares de navegação aeroespacial (HAYKIN, 2001; SANTOS, 2005; SIMON, 2006 e AGUIRRE *et al.*, 2007). O processo de filtragem com modelos linearizados é bastante simples e eficiente. Além disso, o FKE tem encontrado muitas aplicações em tempo real que são relevantes (CHUI e CHEN, 2009), em razão disso, o FKE será a técnica utilizada nessa dissertação e as equações não-lineares dos modelos do artigo original serão linearizadas.

#### 2.4.3.4 Filtro de Kalman Unscented (Sigma-point)

Como já mostrado no tópico anterior, o filtro de Kalman estendido (EKF) é a técnica de estimação de estado mais utilizado para sistemas não lineares. No entanto, o EKF oferece apenas uma aproximação para a estimativa não-linear ideal e pode apresentar dificuldade de ajuste e de realizar as estimações se as não linearidades do sistema forem significativas. Isto se dá porque o EKF propaga a média e covariância do estado através das equações linearizadas (HAYKIN, 2001 e SIMON, 2006).

A utilização do filtro de Kalman unscented (FKU) pode proporcionar uma melhoria significativa em relação ao FKE. A diferença fundamental entre o FKE e FKU decorre da forma em que as variáveis aleatórias gaussianas são propagadas. No FKE, o estado de distribuição é aproximado por variáveis aleatórias gaussianas, que são, então, propagadas analiticamente através da linearização de primeira ordem do sistema não linear. Isto pode introduzir erros significativos na covariância e, conseqüentemente, pode levar a um desempenho divergente do filtro. O FKU resolve esse problema usando uma abordagem de amostragem determinística. A distribuição de estado é novamente aproximada por variáveis aleatórias gaussianas, mas agora é representada usando um conjunto mínimo de pontos de amostragem cuidadosamente selecionados. Estas amostras buscam determinar a média e covariância reais das variáveis aleatórias gaussianas e quando propagadas através do modelo não linear, determinam, posteriormente, a média e a covariância com uma precisão de segunda ordem (expandida em série de Taylor) para qualquer não-linearidade e o FKE só atinge a precisão de primeira ordem. O FKU não usa cálculos Jacobianas e sua complexidade computacional é da mesma ordem de grandeza do FKE (HAYKIN, 2001 e SIMON, 2006).

O FKU é apresentado aqui porque alguns trabalhos na literatura aplicam essa técnica no problema proposto no artigo de Chylla e Haase (1993).

#### 2.4.3.5 Estimação em tempo real com base no Filtro de Kalman

Segundo Jazwinski (1970), o FK gera novas estimativas de estado na medida em que novas observações se tornam disponíveis, abrindo assim a possibilidade de estimativa em tempo real para os processos. Essa característica é importante para o desenvolvimento da proposta apresentada nesta dissertação, pois como muitos dados são inacessíveis na prática, como por exemplo o calor de reação e a taxa de transferência global de calor, a estimativa dessas variáveis viabiliza o desenvolvimento da estratégia de controle proposta e, simultaneamente, propicia o monitoramento da reação.

O conjunto de equações do FK fornece um recurso para a estimação do vetor de estados. Todas as medidas tomadas em conjunto e seus erros são combinados com o conhecimento da dinâmica do sistema, com os equipamentos de medidas e a estatística do ruído dinâmico. Nesse sentido o FK é um algoritmo utilizado para estimar os estados de um sistema dinâmico, baseado na medição da confiabilidade dos dados observados a partir de uma matriz de covariância que é atualizada a cada novo processo de estimação que utiliza o filtro. A partir de um ponto inicial conhecido o algoritmo combina todos os dados adicionados ao conhecimento anterior do sistema e assim realiza a estimativa das variáveis desejadas reduzindo o erro (SANTOS, 2005).

Diversos trabalhos têm utilizado o FK ou FKE como uma estratégia de controle. Dentre eles, pode-se citar MacGregor (1986) ao estudar um balanço de energia em tempo real (BETR), obtendo sucesso na implementação com resultados de controle satisfatórios para um reator com jaqueta.

MacGregor e Clarke-Pringle (1997) realizaram um estudo no reator de polimerização descontínuo proposto por Chylla e Haase (1993) com a aplicação do FKE em conjunto com geometria diferencial. Seus resultados mostraram a superioridade do conjunto desenvolvido quando comparado com o sistema tradicional de controle em cascata. A estratégia desenvolvida considerou em seu modelo os efeitos do aumento da viscosidade promovidos pelo efeito gel.

Helbig *et al.* (1996) estudou o mesmo reator *benchmark* e identificou erros no equacionamento do modelo. Através de correções propostas, o autor aplicou um controlador preditivo não linear, utilizando em sua estrutura o Filtro de Kalman. Seus resultados são comparados com um controlador PID padrão e obteve êxito em relação ao controle de temperatura dentro de uma faixa aceitável, mesmo com variação de tempos mortos que foram consideradas.

Almeida (1997) faz uma grande investigação sobre o uso do FKE como forma de estimar alguns parâmetros através das próprias equações do balanço de energia com modelos simplificados, tais como energia de reação e transferência global de energia. Essa abordagem é fundamental para o desenvolvimento da presente dissertação, pois os resultados alcançados por aquele autor mostram a viabilidade de aplicação de tal técnica na estrutura de controle.

Santos (2005) também utilizou a estrutura do FKE em seu trabalho para realizar estimativas de parâmetros energéticos para uso na estrutura de controle. O autor utilizou diversas estratégias como caminho aleatório, rampa aleatória e sistema híbrido.

Graichen *et al.* (2006) implementaram a estimação *on-line* para um controle *feedforward* aplicado ao reator do Chylla e Haase (1993), onde os parâmetros de calor de reação e transferência global de energia são estimados. No entanto, diferentemente da proposta apresentada nesta dissertação, os autores utilizaram os modelos completos para a estimação de resultados.

Trabalho semelhante foi realizado por Beyer *et al.* (2008), porém para um controle com linearização adaptativa através da implementação do filtro do Filtro de Kalman Sigma-Point. Esse autor também utilizou modelos mais complexos na estrutura do controlador e, nesse sentido, destoa do conceito que pretendemos para a estratégia proposta nesta dissertação.

Outro trabalho importante que utiliza o Filtro de Kalman como estimador foi apresentado por Vasanthi *et al.* (2011). Seus resultados foram alcançados pela implementação do Filtro de Kalman *Unscented* e utilizando os modelos completos do reator dados pelo artigo original. A vantagem da estratégia proposta por Vasanthi *et al.* (2011) é que não é necessário linearizar as equações do filtro utilizado.

## 2.5 Reação de Polimerização

Como o estudo de caso utilizado para testar a estrutura de controle proposta nesta dissertação é um reator de polimerização em emulsão, apresentam-se a seguir algumas de suas peculiaridades de forma bem sucinta.

A cinética de polimerização é de interesse primordial sob dois pontos de vista: A síntese prática de polímeros requer um conhecimento da cinética da reação de polimerização, e; do ponto de vista teórico, as diferenças significativas entre as reações de polimerização residem em grande parte nas suas respectivas características cinéticas (ODIAN, 2004).

### 2.5.1 Polimerização em Emulsão

A polimerização em emulsão desenvolveu-se como um método de escala industrial importante de produção de uma gama de polímeros (MATYJASZEWSKI e DAVIS, 2002). A reação em emulsão refere-se a um processo original utilizado para algumas polimerizações radiculares em cadeia. Isso envolve a polimerização de monômeros sob a forma de emulsões, ou seja, dispersões coloidais. O processo em emulsão possui características de mecanismo e reação que o distingue dos demais processos (ODIAN, 2004).

O processo de polimerização em emulsão tem várias vantagens distintas. O estado físico do sistema de emulsão (coloidal) faz com que seja fácil de controlar o processo. Problemas térmicos e de viscosidade são muito menos significativos do que na polimerização em massa, por exemplo. O produto de uma polimerização em emulsão, referido como um látex, pode em muitos casos ser utilizado diretamente, sem mais separações. No entanto, pode haver a necessidade de operações de mistura apropriadas como, por exemplo, a adição de pigmentos. Tais aplicações incluem tintas, revestimentos, acabamentos e polimentos de piso (ODIAN, 2004).

Para além da diferença física entre a emulsão e outros processos de polimerização, há uma diferença cinética muito significativa. Para os outros processos não existe uma relação inversa entre a velocidade de polimerização e o peso molecular do polímero. Um grande aumento de peso molecular pode ser feito apenas através da diminuição da velocidade de polimerização, reduzindo a concentração de iniciador, ou baixando a temperatura da reação. Polimerização em emulsão é um processo único em que se proporciona o meio para aumentar o peso molecular do polímero sem diminuir a velocidade de polimerização. Por causa de um mecanismo de reação diferente, a polimerização em emulsão tem a vantagem de atingir, simultaneamente, pesos moleculares elevados e a taxas de reação elevadas (ODIAN, 2004).

### 2.5.2 Efeito Gel

O efeito gel (ou Trommsdorf) é um fenômeno cinético conhecido que aparece durante o decorrer da reação de polimerização. O efeito gel surge normalmente no momento em que as conversões do monômero atingem a faixa de 20% a 40% e ele está relacionado diretamente ao aumento de viscosidade no meio reacional. As cadeias de crescimento tem sua mobilidade reduzida fortemente em razão do aumento significativo da viscosidade do meio, de forma que a velocidade de terminação cai abruptamente aumentando a concentração dos radicais,

resultando, conseqüentemente, numa auto-aceleração da polimerização; como a reação é exotérmica, a iniciação aumenta podendo gerar um processo descontrolado. Este fenômeno do efeito gel afeta fortemente as propriedades finais do polímero e isso leva a produção de resinas com larga distribuição de massas molares. Além disso, pode causar também a elevação brusca de temperatura no reator, fato relevante para o controle do processo. A presença do efeito gel introduz não linearidades relevantes no modelo de polimerização via radicais livres. Essas não linearidades podem se acentuar quando o aumento da viscosidade também diminui o coeficiente de transferência de calor efetivo entre as paredes do reator e o fluido refrigerante na jaqueta. Quando isso ocorre, o polímero acumulado nas paredes do reator causa a diminuição significativa da capacidade de troca de calor do reator, resultando, finalmente, em descontrole térmico da operação (MATYJASZEWSKI e DAVIS, 2002 e ODIAN, 2004).

## 2.6 Balanço de Energia com Estimação de Parâmetros em Tempo Real

O presente trabalho faz uso da abordagem proposta por Chylla e Haase (1993), que busca apresentar um estudo de controle de processo para reatores de polimerização em emulsão. A produção geralmente é limitada a um procedimento específico para cada etapa do processo. O controle de temperatura para os reatores de polimerização descontínuos é um problema importante e muitas vezes não elementar, pois conforme relatado por MacGregor e Clarke-Pringle (1997), o processo tem comportamento não linear ao longo do tempo devido à natureza de sua reação.

Como dito anteriormente, algumas variáveis de processos não podem ser medidas diretamente, medidas essas relevantes e fundamentais para obtenção do produto final dentro da especificação. Nesse sentido, a estimação de parâmetros em tempo real de variáveis de processo importantes surge como técnica bastante adequada para reatores de polimerização, tanto em estratégias de monitoramento como em estratégias de controle. A estimação de parâmetros em tempo real através do Filtro de Kalman traz uma importante contribuição como um instrumento inferencial para medição, além de tornar possível a determinação de termos normalmente indisponíveis, como a taxa de transferência de calor, o calor de reação, a conversão, entre outros, fazendo uso de balanços de energia bastante gerais e simplificados.

Conforme destacado nos trabalhos de Almeida (1997), MacGregor e Clarke-Pringle (1997), Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008), dentre outros, o reator de polimerização de Chylla-Haase (1993) é amplamente empregado como um problema modelo para avaliação de estratégias de controle para reatores de polimerização em batelada, embora muitos trabalhos na literatura proponham correções nos modelos do artigo original.

### 2.6.1 Problemas encontrados na Literatura com o Reator de Chylla e Haase

Helbig *et al.* (1996) em sua análise desse modelo afirmaram que o trabalho original apresentava muitos erros, indicaram um erro formal e propuseram a correção do termo do lado esquerdo da equação do balanço de energia do reator. No entanto, essa afirmação parece estranha, uma vez que sua proposta na verdade é uma simplificação do modelo original se aplicada a regra da cadeia e assumidas as condições necessárias, como as massas dos componentes e suas capacidades caloríficas invariantes no tempo. Os autores afirmam que os

dados fornecidos sobre a carga inicial de pré-polímero e água excedem o volume total do reator, porém um cálculo simples permite verificar que as informações originais estão corretas (infelizmente este autor não demonstrou seus cálculos para análise mais detalhada). Outra observação importante é que em sua simulação a viscosidade do produto tendia ao infinito na segunda alimentação, no entanto essa situação não foi observada em outros trabalhos.

Almeida (1997) observou o erro no artigo original e através de uma análise dimensional propôs uma correção ao modelo de temperatura de entrada da jaqueta ( $T_{jin}$ ) e ao modelo do ganho do processo ( $Kp$ ), obtendo, assim, resultados consistentes. No entanto, ficou evidente que o autor não teve acesso à *corrigenda* fornecida pelos autores, pois a referência não é citada em sua obra.

No trabalho desenvolvido por MacGregor e Clarke-Pringle (1997) foi feita uma crítica à equação do balanço de energia do reator afirmando haver uma falha no modelo apresentado pelos autores do reator *benchmark*. Com base em trabalhos desenvolvidos por outros autores, propuseram uma correção no termo de alimentação de monômeros, substituindo a temperatura ambiente ( $T_{amb}$ ) pela temperatura de monômero durante a alimentação ( $T_{feed}$ ). Essa mudança deve ser relevante se a temperatura do monômero na alimentação for significativamente diferente da temperatura ambiente. Esses autores afirmam que há uma falha dimensional no termo da energia de reação, no entanto, essa falha não foi identificada e lamentavelmente seu trabalho não apresenta dados para análise e comparação. Outra hipótese assumida por esses autores é considerar a jaqueta como mistura perfeita, sendo assim, assumem que a temperatura de saída da jaqueta é a própria temperatura de toda a jaqueta, essa consideração só é válida se a temperatura de entrada e saída tiverem diferenças pequenas, condição essa difícil de se conhecer *a priori*.

Os autores Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011) aceitaram, de forma acrítica (aqui, sem juízo de valor sobre a postura dos autores), as observações feitas por Helbig *et al.* (1996), mesmo tendo em suas referências o trabalho de Chylla e Haase (1993b).

## 2.6.2 Considerações acerca da Temperatura da Jaqueta

A temperatura da jaqueta, embora influencie a dinâmica do processo, é adotada por muitos autores como uma temperatura média ou o fluido da jaqueta é considerado perfeitamente misturado. Schuler e Schmidt (1992) em seu trabalho de estimadores de estado calorimétrico mostraram diversos balanços de energia para diferentes projetos de reator com dinâmicas térmicas específicas.

Essa premissa não foi verificada, por exemplo, em Bouhenchir (2001), que faz a modelagem da jaqueta para o enchimento e esvaziamento e para a troca térmica com a parede para um reator de jaqueta para a reação de glicol para formação de polímero.

Geralmente, o processo de polimerização pode ser subdividido em um intervalo de aquecimento com um período de produção subsequente. Durante o período de aquecimento, a matéria-prima é levada à temperatura de produção específica, que deve ser mantida constante até o término da operação. As mudanças que ocorrem no meio reacional ao longo do processo promovem alterações nas características de transferência de calor. As condições operacionais mudam de lote para lote, pois algumas vezes, mais de uma batelada ocorre em sequência sem

que haja limpeza do reator e algum material se adere às paredes do equipamento na medida em que as bateladas são conduzidas. Também há mudanças nas condições ambientais, como temperatura externa e temperatura da água de arrefecimento e perda de calor para o ambiente. Esses fenômenos provocam alterações nos fenômenos de transferência de calor que, por sua vez, exercem um forte impacto na cinética de polimerização (GRAICHEN *et al.*, 2006 e BEYER *et al.*, 2008).

### 2.6.3 Análise do Modo de Alimentação do Monômero no Processo

No artigo original, Chylla e Haase (1993) informam que a alimentação do monômero inicia depois que a temperatura da carga inicial atinge a temperatura de *setpoint* da reação. No entanto, não há referências sobre qual critério é utilizado na tomada de decisão para iniciar a alimentação, ou seja, se é avaliação do operador ou algum critério objetivo.

Helbig *et al.* (1996) definiram um critério temporal para o início da alimentação, especificando um determinado tempo para o aquecimento da carga inicial, ao término do qual a alimentação é iniciada. O problema desse critério, em termos práticos, é que se o tempo de aquecimento não for suficiente para atingir o *setpoint* o monômero será alimentado na temperatura errada.

MacGregor e Clarke-Pringle (1997) definiram como critério para alimentação do monômero o tempo correspondente ao que a temperatura da carga inicial atingir 1 °F abaixo do *set-point*, que é o valor do erro absoluto de temperatura aceitável para o processo em relação à referência. Esse critério garante que a temperatura mínima será atingida antes de se iniciar a alimentação do monômero. Porém, se a temperatura continuar subindo após atingir o valor mínimo aceitável e se estabilizar em um valor acima do desejado, novamente o monômero será alimentado com uma temperatura de reação inadequada.

Graichen *et al.* (2006) estabeleceram uma trajetória de aquecimento, definido por um polinômio, que garante que o *set-point* será atingido após 30 minutos de aquecimento. A proposta é, de fato, interessante considerando-se que o tempo de subida da temperatura é bastante previsível, porém o que chama a atenção é justamente a intenção do autor em garantir o aquecimento em 30 minutos, uma vez que para processos em batelada, de modo geral, busca-se maximizar a produtividade reduzindo o tempo das bateladas. É intuitivo concluir, nesse caso, que se um algoritmo garante o aquecimento em um tempo determinado seria provável que se o controlador trabalhasse “livre”, ou seja, atuando de acordo com o algoritmo de controle, o processo atingiria a temperatura desejada em menos tempo. Normalmente, as curvas de aquecimento controladas servem para garantir a integridade dos reagentes ou dos equipamentos, mas esse não é o caso para o problema de Chylla e Haase (1993).

A mesma estratégia de alimentação também foi utilizada por Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011), onde o primeiro autor propõe um polinômio para ajustar a vazão de alimentação do monômero, na forma de rampas, de modo a suavizar o início e o término da alimentação. Embora essa estratégia seja bastante interessante e contribua para o controle de temperatura reduzindo o erro, anda na contramão da proposta do presente trabalho, que almeja projetar uma estrutura de controle capaz de atuar na planta sem que se tenham informações específicas do processo ou de eventuais alterações no próprio processo.

### 3 METODOLOGIA

#### 3.1 Estudo de Caso: Reator de Polimerização em Batelada

Com objetivo de estudar o desempenho da estrutura de controle proposta nesta dissertação, que é baseada na estimação de parâmetros em tempo real utilizando o Filtro de Kalman Estendido (FKE), foi utilizado como estudo de caso um reator de polimerização em batelada, do tipo tanque agitado, com jaqueta de resfriamento e descrito na literatura como um desafio para testes de estruturas de controle. Este *benchmark* foi proposto originalmente por Chylla e Haase (1993) e reproduz um reator real que apresenta uma série de dificuldades, tais como tempo morto, produção de produtos distintos durante cinco bateladas consecutivas, incrustações na parede do reator, variações do clima, variação do volume reacional, cinéticas variáveis com o tempo e com a batelada, entre outras.

Nesta dissertação, a estrutura de estimação controle foi testada no referido reator de polimerização através da técnica de simulação computacional, cujo modelo matemático do processo foi validado e descrito pelos referidos autores e considerado como representativo do comportamento dinâmico da planta. Dessa forma, o modelo matemático do reator de polimerização foi utilizado para substituir a planta piloto real na tarefa de avaliar as estratégias desenvolvidas. Os dados referentes a cada produto, a estrutura de controle e ao processo são apresentados nos Anexo 7.7 e na Figura 3.1.

O problema apresentado no artigo original de Chylla e Haase (1993) foca o desenvolvimento de um controlador de temperatura para reações de polimerização em emulsão em processos descontínuos de um reator multipropósito. Obter um bom controle da temperatura para as condições impostas muitas vezes é difícil de ser alcançado, uma vez que propriedades físicas como capacidade térmica, coeficiente de transferência de calor, calor de reação, etc., variam de batelada para batelada.

Os reatores do tipo tanque agitado com jaqueta são utilizados principalmente para reações de polimerização em emulsão em processos descontínuos, sendo especialmente aplicados na indústria química para produzir uma grande variedade de produtos. Tais produtos podem ser caracterizados por algumas características físico-químicas como viscosidade, cinética de reação, peso molecular, calor específico, e por condições do processo como temperatura de reação, taxa de alimentação do monômero, tempo de adição de monômero, etc.

Essa pluralidade de aplicações torna o problema do controle de temperatura um desafio ainda maior, no sentido de desenvolver um sistema de monitoramento e controle capaz de acompanhar o andamento do processo e também adequado para manter a temperatura de reação dentro de uma faixa aceitável durante o processo. Esta malha de controle é de grande importância pelo fato de que a qualidade final do produto está diretamente vinculada ao controle de temperatura da reação em todo período de batelada.

Outros aspectos importantes são a incrustação de material nas paredes do reator, a injeção de monômero ao meio reacional após o início do aquecimento, a sequência de corridas sem a limpeza total do equipamento, a fabricação de produtos diferentes, o fator de impureza que varia aleatoriamente entre as corridas, embora seja considerado constante durante uma mesma batelada, a temperatura ambiente que é muito diferente no verão e no inverno.

### 3.1.1 Configuração do Reator

O reator apresentado por Chylla e Haase (1993) é um tanque agitado típico, que possui uma jaqueta para troca térmica através da circulação do fluido refrigerante (água), que preenche todo o compartimento destinado ao líquido. O volume interno do reator foi projetado para operar com um meio reacional cujo volume varia ao longo do processo. Os dados referentes à estrutura física do reator utilizado estão apresentados na Para facilitar a análise comparada das diversas condições, a maior parte dos gráficos foi mostrada com o mesmo tempo de simulação (200min), alguns resultados específicos foram exibidos retratando o tempo total do processo: desde a estabilização da temperatura, alimentação do monômero até o término da reação (vide Anexo 7.7). Os resultados da influência do modo de alimentação do monômero são mostrados com um recorte do tempo (50 min).

Tabela 4.1 e no Anexo 0. O reator apresenta a seguinte configuração:

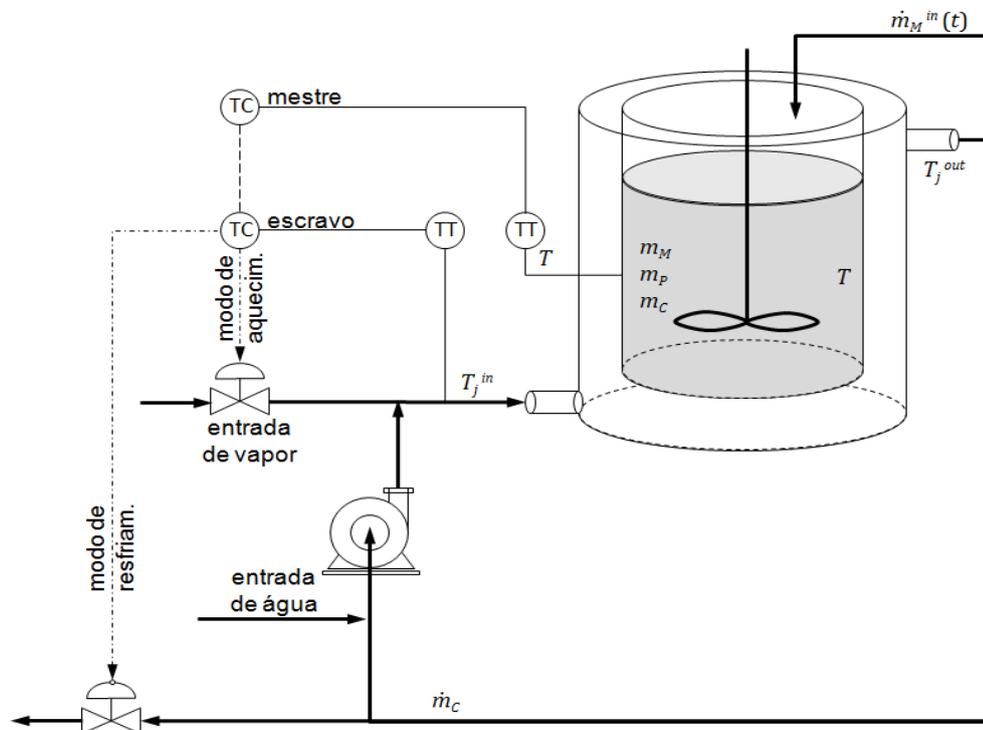


Figura 3.1: Reator de polimerização (CHYLLA e HAASE, 1993).

Para cada batelada, o reator é carregado com uma pré-carga (água e sólidos) que se encontra a uma temperatura constante, definida pela temperatura ambiente, e que varia significativamente nos meses de inverno e de verão. Posteriormente, a temperatura da mistura reacional inicial é elevada até a temperatura de reação, e somente quando este *setpoint* é atingido é que o monômero é adicionado e a reação de polimerização tem início. A reação é conduzida durante um determinado período de tempo, definido *a priori*, até que todo o monômero seja consumido.

### 3.1.2 Cinética de Reação

O modelo cinético proposto no artigo original não descreve a composição química dos reagentes nem a do produto; tampouco distribuições de pesos moleculares, tamanhos de partícula, ou mecanismo de iniciação. Como o objetivo do trabalho é descrever a dinâmica da reação de polimerização, um modelo cinético simplificado com base no consumo global do monômero foi utilizado. Dessa forma, como o volume do meio reacional é função do tempo da batelada, é mais simples modelar o balanço material em termos de número de moles de monômeros e não da concentração, pois esta propriedade varia com o volume do meio. Este modelo descreve de modo satisfatório a conversão do monômero e as equações que descrevem o balanço de massa no reator são descritas a seguir:

$$\frac{dn_M}{dt} = F_M - Rp \quad (3.1)$$

$$F_M = \frac{\dot{m}_M}{MW_M} \quad (3.2)$$

$$Rp = i(kn_M) \quad (3.3)$$

$$k = k_0 e^{\left[\frac{-6.400}{(T+460)}\right]} \mu^{0,4} \quad (3.4)$$

onde:

$m_M$  = vazão mássica de alimentação de monômero (lb/min);

$F_M$  = vazão molar de monômeros no reator (lbmol/min);

$n_M$  = número de moles de monômeros no reator (lbmol);

$Rp$  = taxa de polimerização (lbmol/min);

$MW_M$  = peso molecular da mistura de monômero (lb/lbmol);

$i$  = fator de impureza (adimensional);

$k$  = constante cinética de primeira ordem ( $\text{min}^{-1}$ );

$k_0$  = fator pré exponencial ( $\text{min}^{-1}$ );

$T$  = temperatura de reator ( $^{\circ}\text{F}$ );

$\mu$  = viscosidade da batelada (cP).

O fator de impureza assume um valor aleatório entre 0,8 e 1,2 para qualquer que seja a batelada. Este artifício é um modo de atribuir ao modelo, de maneira simples, as flutuações aparentes na cinética da reação causadas por possíveis impurezas presentes em cada batelada. A equação (3.4) mostra a influência da viscosidade da batelada sobre a constante cinética, modelando o efeito gel.

A reação de polimerização em reatores descontínuos possui características muito particulares que devem ser consideradas na análise para o desenvolvimento do sistema de controle de processo. A viscosidade da massa reacional possui modelos empíricos para os produtos A e B, que são apresentadas por Chylla e Haase (1993). Ao se processar a mistura reacional é observado, nitidamente no meio, o aumento da viscosidade no reator que é uma função da fração de sólido presente na mistura. As equações (3.5) e (3.6) são uma correlação para a viscosidade do produto A e a do produto B, respectivamente, que são determinadas

empiricamente a partir de dados experimentais. As equações que levam descrevem a fração de sólidos no meio reacional, a temperatura de reação e a conversão são:

$$\mu_A = 0,052e^{[16,4f]} 10^{[2,3(A-1,563)]} \quad (3.5)$$

$$\mu_B = 0,032e^{[19,1f]} 10^{[2,3(A-1,563)]} \quad (3.6)$$

$$A = \frac{1000}{(T+460)} \quad (3.7)$$

$$f = \frac{\text{sólidos}(t)}{\text{peso da batelada}(t)} \quad (3.8)$$

$$f = \frac{S(t)}{m_R(t)} \quad (3.9)$$

$$S(t) = S(0) + x(t) \cdot M_{MT}(t) \quad (3.10)$$

$$m_R(t) = S(t) + [1 - x(t)] \cdot M_{MT}(t) + W(0) \quad (3.11)$$

$$x(t) = \frac{N_{MT}(t) - N_M(t)}{N_{MT}(t)} \quad (3.12)$$

onde:

$\mu_i$  = viscosidade do produto (cP);

$f$  = fração de sólidos;

$T$  = temperatura de reator/reação (também denominado por  $T_R$  - °F);

$S(t)$  = massa de sólidos no reator função do tempo (lb);

$M_{MT}$  = massa total de monômeros adicionada ao reator (lb);

$N_{MT}$  = número de moles de monômeros totais adicionados no reator (lbmol);

$W$  = massa de água constante durante a reação (lb);

$x(t)$  = conversão em qualquer instante;

Derivando-se a equação (3.12) realizando as respectivas substituições, chega-se a equação abaixo e completa-se o balanço de massa no reator:

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{1}{N_{MT}(t)} \cdot [Rp(t) - x(t) \cdot F_{NM}(t)] \quad (3.13)$$

### 3.1.3 Transferência de Calor

Visando incorporar a influência da viscosidade do meio no balanço energético do reator, o coeficiente de transferência global de calor ( $U$ ) foi modelado de modo a descrever a queda drástica que ocorre neste parâmetro durante a batelada, uma vez que o coeficiente do filme de transferência de calor formado entre o meio reacional e a parede do reator é uma função da viscosidade. Admite-se ainda que o coeficiente global seja também uma função das

incrustações que ocorrem na parede do reator, medida pelo parâmetro (1/hf), que é determinado com base no número de operações realizadas previamente. Portanto, as equações de relacionadas à transferência de calor que ocorre durante o processo de polimerização são dadas abaixo.

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h} + \frac{1}{h_f}} \quad (3.14)$$

$$h = 143,4 \cdot e(-5,13 \cdot 10^{-3} \mu_{wall}) \quad (3.15)$$

$$\mu_{wall} = \mu(T_{wall}) \quad (3.16)$$

$$T_{wall} = \frac{T + \bar{T}_J}{2} \quad (3.17)$$

$$\frac{1}{h_f} = (0,000; 0,001; 0,002; 0,003; 0,004) \quad (3.18)$$

Obs.: Conforme o artigo original, para cada número de batelada (1; 2; 3; 4; 5) 1/h<sub>f</sub> assume o respectivo valor.

onde:

$T_{wall}$  = temperatura da parede do reator;

$\bar{T}_J$  = temperatura média da jaqueta;

$U$  = coeficiente global de transferência de calor;

$h$  = coeficiente do filme de transferência de calor (BTU/h.ft<sup>2</sup>.°F);

$1/h_f$  = fator de incrustação (h.ft<sup>2</sup>.°F/BTU).

### 3.1.4 Balanço de Energia no Reator

A formulação para o balanço de energia do reator reflete as contribuições do meio reacional,  $Rp$ ,  $C_R$ ,  $m_R$ ,  $U$  e  $A$ , cujos valores podem ser determinados através da resolução das equações do balanço de massa; pelas condições operacionais do processo  $Cp_M$ ,  $m_M(t)$  e  $T_{amb}$  e ainda as propriedades do sistema, tais como  $\Delta H_p$  e  $UA_{loss}$ , cujos valores são especificados ou conhecidos *a priori*.

Para o balanço de energia, o termo entálpico deve considerar os três componentes, monômero, polímero e água:

$$\frac{d(\sum_i m_i c_{p_i} T)}{dt} = \dot{m}_M c_{p_M} (T_{amb} - T) + Rp(-\Delta H_p) - UA(T - \bar{T}_j) - UA_{loss}(T - T_{amb}) \quad (3.19)$$

A equação anterior pode ser reescrita da forma:

$$m_R C_R \frac{dT}{dt} = \dot{m}_M c_{p_M} (T_{amb} - T) + Rp(-\Delta H_p) - UA(T - \bar{T}_j) - UA_{loss}(T - T_{amb}) \quad (3.20)$$

onde:

$m_i$  = massa do componente  $i$  (lb);

$m_R$  = massa do meio reacional (lb);

$Cp_i$  = calor específico do componente  $i$  (BTU/lb°F);

$C_R$  = calor específico médio dos componentes do meio reacional (BTU/lb°F);

$Cp_M$  = calor específico do monômero (BTU/lb°F);

$\Delta H_p$  = calor de polimerização (BTU/lbmol);

$UA_{loss}$  = taxa de troca de calor para o ambiente por unidade de temperatura (BTU/min.°F);

$T_{amb}$  = temperatura ambiente (°F);

$A$  = área de transferência de calor na jaqueta (ft<sup>2</sup>).

Analisando a equação (3.20), observa-se que o lado esquerdo do modelo considera a energia fornecida pelo meio reacional em razão da presença dos componentes dentro do reator. Por outro lado, o termo do lado direito da equação leva em consideração a influência do calor sensível da mistura, do calor gerado pela reação, da transferência de calor entre a parede do reator e a jaqueta e da perda de calor para o meio ambiente, respectivamente.

### 3.1.5 Balanço de Energia na Jaqueta

A formulação para o balanço de energia da jaqueta leva em conta as contribuições do meio reacional,  $U$  e  $A$ , cujos valores podem ser determinados através da resolução das equações do balanço de massa; pelos aspectos construtivos do equipamento,  $wc_J$  e pelas condições operacionais do processo,  $F_W$  e  $Cp_W$ , cujos valores são especificados ou conhecidos *a priori*.

A equação da temperatura de saída da jaqueta ( $T_J^{out}$ ) leva em consideração a temperatura média da jaqueta, a temperatura do meio reacional e ainda o comportamento da temperatura de entrada na jaqueta pelo fluido de arrefecimento:

$$wc_J \frac{dT_J^{out}(t)}{dt} = F_W Cp_W (T_j^{in}(t - \theta_1) - T_J^{out}(t)) + UA(T - \bar{T}_J) \quad (3.21)$$

$$\bar{T}_J = \frac{T_J^{out} + T_J^{in}}{2} \quad (3.22)$$

A temperatura de entrada na jaqueta ( $T_J^{in}$ ) é dada pela ação de controle e tem o comportamento dinâmico definido por:

$$\frac{dT_J^{in}(t)}{dt} = \frac{dT_J^{out}(t - \theta_2)}{dt} \frac{(T_J^{out}(t - \theta_2) - T_J^{in}(t))}{\tau_p} + \frac{K_p(t)}{\tau_p} \quad (3.23)$$

É importante destacar que o modelo apresentado na equação (3.23) foi corrigido por Chylla e Haase (1993b) através de uma *corrigenda* e adotado para esse trabalho, pois o modelo apresentado no artigo original apresentava vários erros.

Almeida (1997) identificou esses erros e através de uma análise dimensional propôs uma correção na equação original não mostrada nesse trabalho.

Santos (2005) apresentou um trabalho onde avaliava o desempenho do controle corrigido pelos autores do artigo original comparando-o ao modelo corrigido por Almeida (1997). Denominou o primeiro controle como mais ativo e o segundo como mais suave.

A expressão corrigida por Chylla e Haase (1993b) e utilizada nesse trabalho para o ganho do processo é dada por:

$$K_p = \begin{cases} 0,8(30)^{\left(\frac{-c(t)}{50}\right)}(T_{inlet} - T_j^{in}) & (\text{°F}) & 0 \leq c(t) \leq 49 \\ 0 & & c(t) = 50 \\ 0,15(30)^{\left(\frac{-c(t)}{50} - 2\right)}(T_{steam} - T_j^{in}) & (\text{°F}) & 51 \leq c(t) \leq 100 \end{cases} \quad (3.24)$$

Onde:

$w_{cJ}$  = produto da massa do fluido de arrefecimento e seu calor específico (lbBTU/lb°F);

$F_W$  = vazão mássica do fluido de arrefecimento na jaqueta (lb/min);

$C_{pW}$  = calor específico do fluido de arrefecimento na jaqueta (BTU/lb°F);

$\theta_1$  = tempo morto para a jaqueta (min);

$\theta_2$  = tempo morto para o circuito de arrefecimento (min);

$\tau_p$  = constante de tempo (min);

$K_P$  = ganho do processo (°F);

$T_{inlet}$  = temperatura da água no fluido de arrefecimento (°F);

$T_{steam}$  = temperatura do vapor no fluido de arrefecimento (°F);

$c(t)$  = saída do controlador (%).

### 3.1.6 Sistema de Controle

O sistema de controle utilizado para a temperatura do reator é efetivado a partir de uma estrutura em cascata. A malha externa (controle mestre) ajusta o valor de referência para a temperatura do fluido refrigerante no circuito de refrigeração. Esta referência é então utilizada pela malha interna (controle escravo) no sentido de estabelecer a temperatura requerida. As malhas externas usam originalmente um controlador PID cada (CHYLLA e HAASE, 1993). No entanto, no presente trabalho em ambas as malhas serão utilizados controladores PI, conforme sugerem os trabalhos de Graichen *et al.* (2006), Beyrer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011).

Os modelos para os controladores PI das malhas mestra e escrava, já em suas formas discretas, são dados por:

Controlador Mestre:

$$T_{jiset(k)} = T_{jiset(k-1)} + Kp_M \cdot (e_{M_K} - e_{M_{K-1}}) + \frac{h_t \cdot \sum_1^{k-1} e_{M_n}}{\tau_{1M}} \quad (3.25)$$

Controlador Escravo:

$$C(k) = C(k-1) + Kp_S \cdot (e_{S_K} - e_{S_{K-1}}) + \frac{h_t \cdot \sum_1^{k-1} e_{S_n}}{\tau_{1S}} \quad (3.26)$$

onde:

$T_{jisset}$  = saída do controlador mestre e setpoint do controlador escravo (°F);

$C$  = saída do controlador escravo (%);

$e_i$  = erro do valor real em relação ao valor esperado do sub-índice  $i$ ;

$/n$  = enésimo ponto;

$/k$  = caésimo ponto;

$/M$  = mestre;

$/S$  = escravo;

$h_t$  = tempo de amostragem (min);

$Kp_i$  = ganho do controlador do sub-índice  $i$  (°F);

$\tau$  = constante de tempo da ação integral (min);

Os parâmetros  $K_p$  e  $\tau$  são ajustados empiricamente de modo a garantir suavidade e rapidez para ambas as temperaturas. A literatura mostra diversas técnicas de ajuste de controladores e malhas, no entanto, neste trabalho esses parâmetros foram ajustados por tentativa e erros por livre escolha.

## 3.2 Estrutura de Estimação com Filtro de Kalman

### 3.2.1 Modelos para o Filtro de Kalman

Para o problema de estimação com base no Filtro de Kalman ou Filtro de Kalman Estendido, a formulação geral parte do conjunto de equações diferenciais que descreve a dinâmica do sistema, considerando os estados determinísticos e estocásticos. Seja para um modelo linear (FK), seja para um modelo linearizado localmente, a partir da última estimativa disponível (FKE). O sistema de equações para os estados determinísticos (índice “d”) e estocásticos (índice “s”) poderia ser expresso pela equação diferencial, sendo esta, já na forma linearizada, onde  $\underline{A}$  corresponde aos termos determinísticos,  $\underline{B}$  corresponde aos termos estocásticos e  $\underline{d}$  corresponde ao vetor dos termos independentes, os vetores  $\underline{x}^d$  e  $\underline{x}^s$  correspondem aos estados determinísticos e estocásticos, respectivamente:

$$\frac{d\underline{x}^d}{dt} = \underline{A}(t) \cdot \underline{x}^d(t) + \underline{B}(t) \cdot \underline{x}^s(t) + \underline{d}(t) \quad (3.27)$$

Após discretização para o instante  $t_k = k \cdot h_t$ , tem-se:

$$\underline{x}_{k+1}^d = \underline{\Phi}_k \cdot \underline{x}_k^d + \underline{\Theta}_k \cdot \underline{x}_k^s + \underline{\varphi}_k + \underline{\omega}_k^d \quad (3.28)$$

Onde:

$$\underline{\Phi}_k = e^{\underline{A}(t_k)h} \quad (3.29)$$

$$\underline{\Theta}_k = \underline{A}^{-1}(t_k) \cdot \left( \underline{\Phi}_k - \underline{I} \right) \cdot \underline{B}(t_k) \quad (3.30)$$

$$\underline{\varphi}_k = \underline{A}^{-1}(t_k) \cdot \left( \underline{\Phi}_k - \underline{I} \right) \cdot \underline{d}(t_k) \quad (3.31)$$

Se a dinâmica dos estados estocásticos for considerada como tipicamente de passo aleatório, segue a formulação:

$$\underline{x}_{k+1}^s = \underline{x}_k^s + \underline{\omega}_k^s \quad (3.32)$$

Um modelo dinâmico global para a estimação conjunta dos estados determinísticos e estocásticos pode ser expressa por:

$$\underline{x}_{k+1} = \underline{\Omega}_k \cdot \underline{x}_k + \underline{\psi}_k + \underline{\omega}_k \quad (3.33)$$

onde:

$$\underline{x}_k = \left[ \underline{x}_k^d \quad \underline{x}_k^s \right]^T \quad (3.34)$$

$$\underline{\psi}_k = \left[ \underline{\varphi}_k \quad \underline{0} \right]^T \quad (3.35)$$

$$\underline{\omega}_k = \left[ \underline{\omega}_k^d \quad \underline{\omega}_k^s \right]^T \quad (3.36)$$

$$\underline{\Omega}_k = \begin{bmatrix} \underline{\Phi}_k & \underline{\Theta}_k \\ \underline{0} & \underline{I} \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

As variáveis de saída podem ser expressas como funções lineares dos estados já contemplando seus respectivos ruídos, considerando-os gaussianos:

$$\underline{y}_{k+1} = \underline{H} \cdot \underline{x}_{k+1} + \underline{v}_{k+1} \quad (3.38)$$

Com base no modelo do sistema, o Filtro de Kalman Estendido que é composto por um conjunto de equações recursivas realiza a estimação de tal forma que:

- A predição é dada por:

$$\underline{x}(k+1/k) = \underline{\Omega}(k/k) \cdot \underline{x}(k/k) + \underline{\psi}(k/k) \quad (3.39)$$

$$\underline{P}(k+1/k) = \underline{\Omega}(k/k) \cdot \underline{P}(k/k) \cdot \underline{\Omega}^T(k/k) + \underline{R}_w \quad (3.40)$$

- A correção é dada por:

$$\underline{x}(k + 1/k + 1) = \underline{x}(k + 1/k) + \underline{K}(k + 1/k) \cdot \left[ \underline{\hat{y}}(k + 1) + \underline{H} \cdot \underline{x}(k + 1/k) \right] \quad (3.41)$$

$$\underline{P}(k + 1/k + 1) = \underline{P}(k + 1/k) - \underline{K}(k + 1/k) \cdot \underline{H} \cdot \underline{P}(k + 1/k) \quad (3.42)$$

- O ganho de Kalman é dado por:

$$\underline{K}(k + 1/k) = \underline{P}(k + 1/k) \cdot \underline{H}^T \cdot \left[ \underline{H} \cdot \underline{P}(k + 1/k) \cdot \underline{H}^T + \underline{R}_v \right]^{-1} \quad (3.43)$$

A notação  $k$ , acima, refere-se a valores computados no tempo  $t_k$  com medidas disponíveis até o tempo  $t_{k+1}$ ;  $\underline{P}$  é uma matriz de covariância para as estimativas e  $\underline{\hat{y}}$  o vetor com os valores efetivamente medidos.

Na concepção do Filtro de Kalman está implícito que os ruídos devem ser independentes, gaussianos e não correlacionados com o estado inicial. Desse modo, tem-se:

$$E[\underline{x}(0)] = \underline{x}_0 = \underline{x}(0/0) \quad (3.44)$$

$$E[\underline{\omega}(0)] = \underline{0} \quad (3.45)$$

$$E[\underline{v}(0)] = \underline{0} \quad (3.46)$$

$$E[\underline{\omega}(t_k) \cdot \underline{\omega}^T(t_j)] = \delta_{kj} \underline{R}_w \quad (3.47)$$

$$E[\underline{v}(t_k) \cdot \underline{v}^T(t_j)] = \delta_{kj} \underline{R}_v \quad (3.48)$$

$$E[\underline{\omega}(t) \cdot \underline{x}^T(0)] = E[\underline{v}(t) \cdot \underline{x}^T(0)] = E[\underline{\omega}(t) \cdot \underline{v}^T(t)] = \underline{0}; \quad \forall t \quad (3.49)$$

$$E\left[ (\underline{x}_0 - \underline{x}(0)) \cdot (\underline{x}_0 - \underline{x}(0))^T \right] = \underline{P}_0 = \underline{P}(0/0) \quad (3.50)$$

Diversos trabalhos têm utilizado o FK como uma estratégia de controle. Os modelos usados para o FK aqui apresentados tiveram como base as referências Jazwinski (1970), MacGregor (1986), Almeida (1997), MacGregor e Clarke-Pringle (1997) e Santos (2005).

### 3.2.2 Formulação dos Modelos para os Balanços de Energia

A formulação da estratégia que será utilizada na estimativa dos parâmetros desejados,  $Q_R$  e  $UA$ , será descrita a seguir. Para tanto, será apresentada a modelagem para o balanço de

energia simplificado que foi utilizado na estrutura do Filtro de Kalman, sob a perspectiva de avaliar a influência de alguns aspectos assumidos na construção dos modelos para o filtro.

### 3.2.2.1 Balanço de Energia: Hipótese da Média da Temperatura da Jaqueta

Nesse momento, usaremos uma abordagem cuja dinâmica da jaqueta é de tal forma que as temperaturas de entrada e saída apresentam valores diferentes e a temperatura da jaqueta será dada pela média dessas temperaturas. Portanto, adota-se o seguinte sistema de equações diferenciais para o modelo:

$$\frac{dT_R(t)}{dt} = \frac{1}{m_R(t)C_R(t)} [\dot{m}_M(t)C_{pM}(T_{amb} - T_R(t)) + Q_R(t) - UA(t)(T_R(t) - \bar{T}_J(t)) + UA_{loss}(T_R(t) - T_{amb})] \quad (3.51)$$

$$\frac{dT_J(t)}{dt} = \frac{1}{wc_J} [F_W C_{pW} (T_{JI}(t) - T_J(t)) + UA(t)(T_R(t) - \bar{T}_J(t))] \quad (3.52)$$

$$\bar{T}_J(t) = \frac{T_{JI}(t) + T_J(t)}{2} \quad (3.53)$$

Feita a linearização para cada instante  $t_k = k.h$  e aplicadas às equações (3.28) a (3.37) chega-se a:

$$\underline{x}^d(t) = [T_R(t) \ T_J(t)]^T \quad (3.54)$$

$$\underline{x}^s(t) = [UA(t) \ Q_R(t)]^T \quad (3.55)$$

Considerando que o mesmo ponto de linearização e discretização é tomado para o algoritmo que está sendo proposto,  $\underline{A}(t) = \underline{A}(t_k) = \underline{A}$ . Segue que:

$$\underline{A} = \begin{vmatrix} \frac{-(\dot{m}_M C_{pM} + UA + UA_{loss})}{m_R C_R} & \frac{UA/2}{m_R C_R} \\ \frac{UA}{wc_J} & \frac{-(UA/2 + F_W C_{pW})}{wc_J} \end{vmatrix} \quad (3.56)$$

$$\underline{B} = \begin{vmatrix} \frac{(T_J - T_{JI})/2}{m_R C_R} & \frac{1}{m_R C_R} \\ \frac{T_R - (T_J - T_{JI})/2}{wc_J} & 0 \end{vmatrix} \quad (3.57)$$

$$\underline{d} = \left| \begin{array}{c} \frac{(T_R - T_{J/2})UA + (\dot{m}_M c_{pM} + UA_{loss})T_{amb}}{m_R c_R} \\ \frac{F_W c_{pW} T_{JI} - (T_R - (T_R - T_{J/2}))UA}{w c_J} \end{array} \right| \quad (3.58)$$

Os estados determinísticos são medidos para efeito do filtro de Kalman, dessa forma, consideram-se apenas as temperaturas do reator e da jaqueta. Com isso pode-se representar o modelo da medida por:

$$\underline{H} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (3.59)$$

Uma vez apresentadas as equações que representam o modelo correspondente para o processo e para a medida, a estrutura de estimação segue a formulação apresentada para o Filtro de Kalman Estendido em seu modelo discreto.

### 3.2.2.2 Cálculo da Conversão

Em ambos os casos apresentados anteriormente, a conversão pode ser calculada analiticamente pela integração da equação (3.13). Desse modo, desenvolve-se um modelo para o cálculo da conversão ( $x$ ):

$$x(k+1) = x(k)e^{-\pi_1 h t} + \frac{\pi_2}{\pi_1} (1 - e^{-\pi_1 h t}) \quad (3.60)$$

onde:

$$\pi_1 = \frac{F_{NM}}{N_{MT}} \quad (3.61)$$

$$\pi_2 = -Rp = \frac{-Q_R}{(-\Delta H_P)} \quad (3.62)$$

### 3.2.3 Estrutura para os Modelos Estocásticos

Em seu trabalho, MacGregor (1986) destaca que o objetivo da estimação seria a reconstituição de  $Q_R$  e  $U$ , porém no presente trabalho estima-se  $UA$ . Há alternativas para se utilizar as estruturas de estimação, dentre as quais se podem citar: passo aleatório (*random walk*), rampa aleatória (*random ramp*), modelo exponencial e modelos híbridos. No entanto, a estrutura utilizada nesta dissertação foi o caminho aleatório (*random walk*). Santos (2005) apresentou um estudo mais aprofundado para as estruturas de estimação supracitadas.

Pode-se modelar a estrutura do passo aleatório como segue:

$$\frac{dx}{dt} = 0 \quad (3.63)$$

$$\int_{x(k)}^{x(k+1)} dx = 0 \int dt \quad (3.64)$$

$$x_{(k+1)} - x_{(k)} = 0 \quad (3.65)$$

$$x_{(k+1)} - x_{(k)} = \omega_p \quad (3.66)$$

$$x_{(k+1)} = x_{(k)} + \omega_p \quad (3.67)$$

Aplicando o modelo de passo aleatório para o valor de  $Q_r$  e  $UA$  tem-se:

$$Q_{R(k+1)} = Q_{R(k)} + \omega_p \quad (3.68)$$

$$UA_{(k+1)} = UA_{(k)} + \omega_p \quad (3.69)$$

Nessas equações,  $\omega_p$  representa um processo de ruído branco que descreve a natureza estocástica do parâmetro a ele associado ( $x$ ,  $Q_R$ ,  $UA$ ). Esse modelo assume que o parâmetro em questão não possui variação determinística (VALLIÈRE E BONVIN, 1990).

### 3.3 Estrutura do Controlador *Feedforward*

Apresenta-se a seguir como o controlador *feedforward* proposto neste trabalho foi implementado no sistema de controle do processo de polimerização. Basicamente, substituiu-se o controlador mestre PI da estrutura original pelo controlador *feedforward* baseado nas estimações do FKE e no balanço de energia simplificado do processo, conforme ilustrado na Figura 3.2.

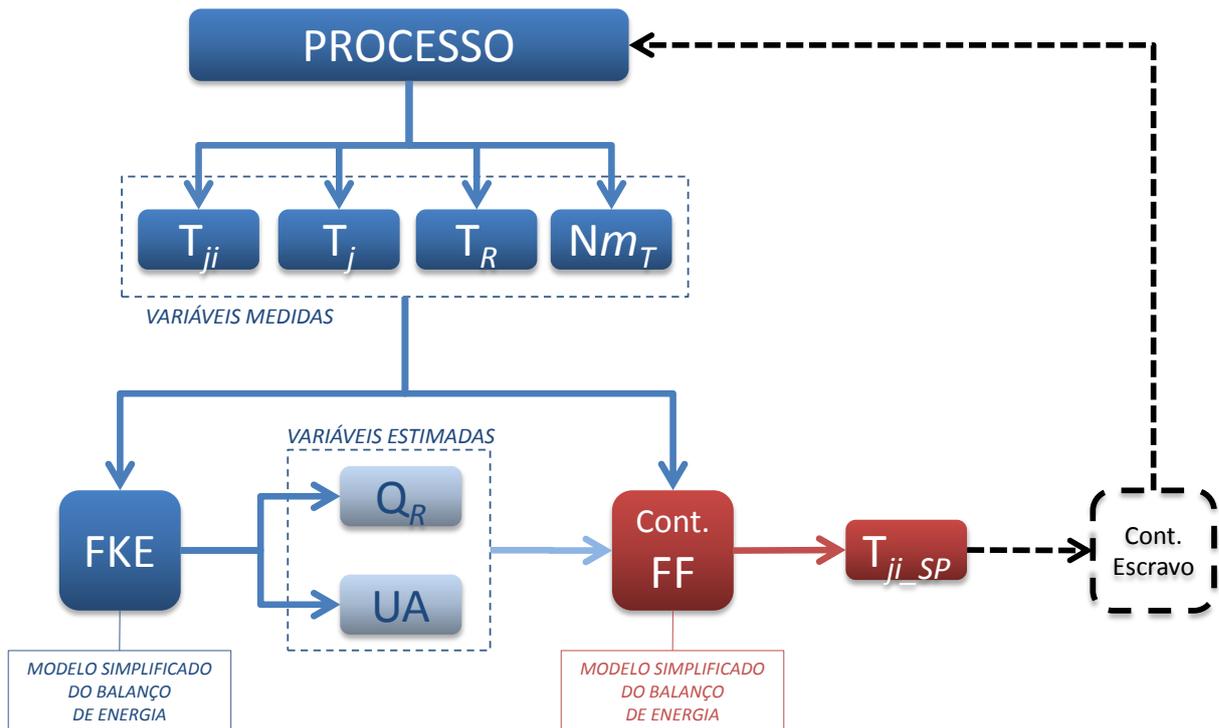


Figura 3.2: Digrama de blocos para a estrutura de controle proposta pelo trabalho.

Vale destacar que as poucas variáveis de processo necessárias para a implementação da estratégia de controle proposta estão disponíveis. As variáveis medidas utilizadas nesta abordagem são a temperatura de entrada da jaqueta ( $T_{ji}$ ), a temperatura de saída da jaqueta ( $T_j$ ), a temperatura de reação ( $T_R$ ) e a quantidade de monômeros adicionada no reator ( $Nm_T$ ). Essas informações são dados de entrada na estrutura do Filtro de Kalman Estendido (FKE) e na estrutura do controlador *feedforward*.

O FKE utiliza as variáveis medidas e, através de modelos simplificados do balanço de energia para o reator e para a jaqueta (seção 3.2), estima as variáveis de estado  $Q_R$  e  $UA$ , que são fornecidas para o controlador.

O controlador *feedforward* utiliza as variáveis medidas disponíveis do processo e as variáveis estimadas pelo FKE para atualizar os modelos simplificados dos balanços de energia do reator e da jaqueta (os mesmo modelos utilizados na estrutura de estimação do FKE). Com isso, o controlador *feedforward* fornece para o controlador escravo PI o valor desejado para a  $T_{ji}$ . A estrutura do controlador é ilustrada na Figura 3.3.

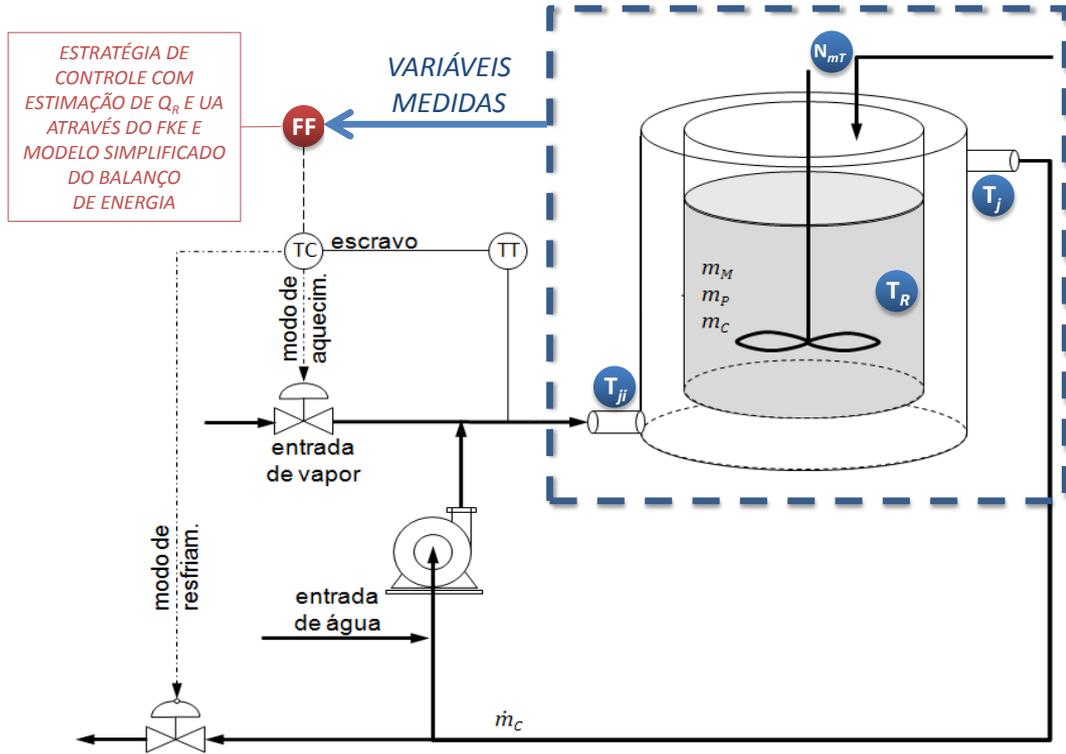


Figura 3.3: Estrutura de controle proposta para o reator de polimerização.

### 3.3.1 Modelo para o Balanço de Energia no Reator

Fazendo manipulação nos termos do modelo do balanço de energia no reator, cuja equação já foi mostrada anteriormente, obtém-se:

$$\frac{dT_R(t)}{dt} = \frac{1}{m_R(t)C_R(t)} [\dot{m}_M(t)Cp_M(T_{amb} - T_R(t)) + Q_R(t) - UA(t)(T_R(t) - \bar{T}_J(t)) + -UA_{loss}(T_R(t) - T_{amb})] \quad (3.70)$$

Considerando  $Q_R$  e  $UA$  constantes no intervalo de integração  $h$  obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{dT_R}{dt} = & -\frac{1}{m_R C_R} (\dot{m}_M C p_M + UA + UA_{loss}) T_R + \frac{UA}{m_R C_R} \bar{T}_J + \\ & + \frac{1}{m_R C_R} (\dot{m}_M C p_M + UA_{loss}) T_{amb} + \frac{Q_R}{m_R C_R} \end{aligned} \quad (3.71)$$

Reescrevendo como:

$$\frac{dT_R(t)}{dt} + f_{R1} T_R(t) = f_{R2} \bar{T}_J(t) + f_{R3} \quad (3.72)$$

Chega-se, portanto, a uma equação diferencial ordinária linear de 1ª ordem, que após discretizar e manipular os termos, pode-se obter a seguinte solução:

$$\bar{T}_J(k) = \frac{T_R(k+1) - \left[ T_R(k)(e^{-f_{R1}h}) + \frac{f_{R3}}{f_{R1}}(1 - e^{-f_{R1}h}) \right]}{\frac{f_{R2}}{f_{R1}}(1 - e^{-f_{R1}h})} \quad (3.73)$$

onde:

$$\bar{T}_J(k) = \bar{T}_{J\_ref} \quad (3.74)$$

$$T_R(k+1) = T_{R\_SET} \quad (3.75)$$

Para  $Q_R$  e  $UA$  constantes em  $k$ ,  $T_{R\_SET}$  é o valor do *setpoint* da reação e  $\bar{T}_{J\_ref}$  é o valor de referência para temperatura média da jaqueta.

### 3.3.2 Modelo para o Balanço de Energia na Jaqueta para $T_J$

O modelo simplificado do balanço de energia da jaqueta deverá ser usado na estrutura do controlador.

Retomando a equação 3.52, fazendo a manipulação dos termos do modelo do balanço de energia na jaqueta e considerando temperatura média, a equação mostrada anteriormente assume a seguinte notação:

$$\frac{dT_J(t)}{dt} = \frac{1}{wc_J} \left[ F_W Cp_W (T_{JI}(t) - T_J(t)) + UA(t) (T_R(t) - \bar{T}_J(t)) \right] \quad (3.76)$$

Considerando  $Q_R$  e  $UA$  constantes no intervalo de integração  $h$  obtém-se:

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{F_W Cp_W}{wc_J} T_{JI} - \frac{F_W Cp_W}{wc_J} T_J + \frac{UA}{wc_J} T_R - \frac{UA}{wc_J} \bar{T}_J \quad (3.77)$$

onde:

$$\frac{dT_J}{dt} + f_{J1} T_J = f_{J2} T_{JI} + f_{J3} T_R + f_{J4} \bar{T}_J \quad (3.78)$$

Chega-se, portanto, a uma equação diferencial ordinária linear de 1ª ordem, que após discretizar e manipular os termos, pode-se obter a seguinte solução:

$$T_{JI}(k) = \frac{\left[ 2 + \frac{f_{JA}}{f_{J1}}(1 - e^{-f_{J1}h}) \right] \bar{T}_{J\_ref} - \left[ T_J(k)(e^{-f_{J1}h}) + T_R(k) \frac{f_{J3}}{f_{J1}}(1 - e^{-f_{J1}h}) \right]}{\left[ 1 + \frac{f_{J2}}{f_{J1}}(1 - e^{-f_{J1}h}) \right]} \quad (3.79)$$

onde:

$$T_{JI}(k) = T_{JI\_SET} \quad (3.80)$$

Para  $Q_R$  e  $UA$  constantes em  $k$ ,  $T_{JI\_SET}$  é o valor determinado do *setpoint* para o controle de  $T_{JI}$  pela malha escrava.

### 3.3.3 Modelo para o Balanço de Energia na Jaqueta para $\bar{T}_J$

Nesse tópicó será mostrada uma alternativa ao modelo simplificado do balanço de energia da jaqueta para também ser usado na estrutura do controlador.

Tomando a equação do balanço na jaqueta e a seguinte relação entre a temperatura média da jaqueta e as temperaturas de entrada e saída:

$$\frac{dT_J(t)}{dt} = \frac{1}{wc_J} \left[ F_W Cp_W (T_{JI}(t) - T_J(t)) + UA(t) (T_R(t) - \bar{T}_J(t)) \right] \quad (3.81)$$

$$\bar{T}_J(t) = \frac{T_{JI}(t) + T_J(t)}{2} \quad (3.82)$$

Considerando  $dT_{JI}/dt$  nulo no intervalo  $h$ , tem-se:

$$\frac{dT_J(t)}{dt} = 2 \frac{d\bar{T}_J(t)}{dt} \quad (3.83)$$

Portanto, considerando  $Q_R$  e  $UA$  constantes no intervalo de integração  $h$  obtém-se uma equação do balanço de energia na jaqueta com base na temperatura média e não mais na temperatura de saída. Isso mostra uma alternativa na implementação da estrutura do controlador.

$$\frac{d\bar{T}_J}{dt} = \frac{F_W Cp_W}{wc_J} T_{JI} - \left( \frac{F_W Cp_W}{wc_J} + \frac{1}{2} \frac{UA}{wc_J} \right) \bar{T}_J + \frac{1}{2} \frac{UA}{wc_J} T_R \quad (3.84)$$

Reescrevendo como:

$$\frac{d\bar{T}_J}{dt} + f_{JM1} \bar{T}_J = f_{JM2} T_R + f_{JM3} T_{JI} \quad (3.85)$$

Chega-se, portanto, a uma equação diferencial ordinária linear de 1ª ordem, que após discretizar e manipular os termos, pode-se obter a seguinte solução:

$$T_{JI}(k) = \frac{\bar{T}_{J\_ref} - \left[ \bar{T}_J(k) (e^{-f_{JM1}h}) + T_R(k) \frac{f_{JM2}}{f_{JM1}} (1 - e^{-f_{JM1}h}) \right]}{\frac{f_{JM3}}{f_{JM1}} (1 - e^{-f_{JM1}h})} \quad (3.86)$$

onde:

$$T_{JI}(k) = T_{JI\_SET} \quad (3.87)$$

Para  $Q_R$  e  $UA$  constantes em  $k$ ,  $T_{JI\_SET}$  é o valor determinado do *setpoint* para o controle de  $T_{JI}$  pela malha escrava.

Importante reforçar que a diferença entre as equações 3.79 e 3.86 se deu apenas por uma manipulação algébrica partindo-se da mesma equação simplificada de balanço de energia na jaqueta e tomando-se como premissa a relação entre a temperatura média da jaqueta e as temperaturas de entrada e saída.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 4.1 Considerações Iniciais

A literatura especializada em controle apresenta algumas críticas ao modelo do reator apresentado no artigo original. Porém, os próprios autores publicaram uma *corrigenda* (CHYLLA e HAASE, 1993b) corrigindo os erros do modelo do processo, especificamente na equação para a temperatura de entrada na jaqueta do reator e para o ganho do processo.

No presente trabalho, utilizou-se o modelo apresentado no artigo original com as alterações da *corrigenda*, pois as críticas feitas pelos outros autores não pareceram consistentes. Analisando os resultados da simulação, fica claro que o modelo de Chylla e Haase (1993, 1993b) apresenta um comportamento coerente. Inclusive, isso já fora evidenciado pelos resultados alcançados por MacGregor e Clarke-Pringle (1997) e Almeida (1997), cujas alterações propostas foram menos radicais, e por Santos (2005) que obteve bons resultados sem alterações no modelo de Chylla e Haase (1993, 1993b).

Todas as estratégias concebidas para atender aos objetivos desse trabalho foram baseadas na estimação de parâmetros a partir do Filtro de Kalman Estendido (FKE). As variáveis  $T_R$ ,  $T_I$  foram consideradas como sendo os únicos estados determinísticos e disponíveis a cada tempo de amostragem, uma vez que as temperaturas de reação e as de entrada e saída da jaqueta são facilmente mensuráveis. As variáveis  $Q_r$  e  $UA$  foram consideradas estados estocásticos e não modeladas, visto que são variáveis que não são medidas, mas que podem ser estimadas e utilizadas na estratégia de controle proposta. As variáveis como  $F_w$ ,  $T_{amb}$ ,  $UA_{loss}$ , bem como  $Cr$ ,  $C_{pw}$ ,  $C_{pm}$  e  $W_{cj}$ , são assumidas como constantes. Todos os valores das variáveis deste processo e dos parâmetros operacionais foram obtidos do artigo original (CHYLLA e HAASE, 1993).

Cabe uma ressalva, visto que se sabe que  $Cr$  é função da conversão, portanto é função do tempo e, na prática, não é constante. No entanto, foi assumido como tal para efeito de simulação. Inclusive, se a variação de  $Cr$  fosse significativa e, conseqüentemente, influenciasse as ações de controle, o principal objetivo dessa dissertação de projetar um controlador independente de informações sobre o produto e/ou processo não teria sido alcançado.

Os resultados apresentados das simulações realizadas mostraram os melhores desempenhos obtidos com as diferentes estratégias utilizadas. Os ajustes dos parâmetros dos controladores e dos estimadores foram obtidos por tentativa e erro, visto que o resultado foi considerado satisfatório após diversas tentativas de ajuste dos índices.

Todos os resultados obtidos estão expressos em unidades inglesas (Tabela 4.1), mesmo sistema do artigo original de Chylla e Haase (1993). A motivação foi facilitar a comparação dos resultados obtidos nessa dissertação com os resultados de grande parte da literatura que trata desse estudo de caso. Além disso, por se tratar de um reator com parâmetros ajustados empiricamente, alguns parâmetros assumidos como adimensionais, podem não ser de fato, e a simples conversão de unidades para o SI (realizada no início deste trabalho), pode levar a distorções no comportamento dinâmico da planta, impactando os resultados obtidos.

Para facilitar a análise comparada das diversas condições, a maior parte dos gráficos foi mostrada com o mesmo tempo de simulação (200min), alguns resultados específicos foram exibidos retratando o tempo total do processo: desde a estabilização da temperatura, alimentação do monômero até o término da reação (vide Anexo 7.7). Os resultados da influência do modo de alimentação do monômero são mostrados com um recorte do tempo (50 min).

Tabela 4.1 – Sistema de unidades utilizadas nesta dissertação.

VARIÁVEL	UNIDADE
Tempo	Min
Massa	Lb
$U$	BTU / min °F ft <sup>2</sup>
$A$	ft <sup>2</sup>
$Q_R$	BTU / min
Calor específico	BTU / lb °F
Temperatura	°F

## 4.2 Influência do Modo de Alimentação do Monômero na Dinâmica do Processo

Nesse tópico faz-se a avaliação da influência do modo de alimentação de monômero sobre comportamento dinâmico do processo de polimerização.

Outros aspectos devem ser avaliados na definição de uma estratégia que automatize a alimentação de monômero de modo que o critério não dependa da decisão de um operador e que garanta que a temperatura esteja controlada quando o monômero começar a ser alimentado.

O artigo original estabelece que desvios de  $\pm 1$  °F são aceitáveis, no entanto, para estabelecer uma estratégia automática de alimentação do monômero, optou-se por ser mais restritivo neste trabalho impondo-se a condição que para iniciar a alimentação a temperatura dever estar em uma faixa de  $\pm 0,6$  °F. Posteriormente, foi definido que a temperatura deve oscilar dentro dessa especificação por um determinado número de medições tomadas. Nesse caso, foi atribuído o valor 10 medições seguidas (que equivalem a 1 minuto) com a temperatura controlada dentro da faixa esperada para iniciar a alimentação do monômero. Vale destacar que esses dois parâmetros são arbitrários e podem ser alterados dependendo da necessidade. Quanto maior a faixa de tolerância para a variação da temperatura, mais cedo o monômero tende ser alimentado, ganhando em produtividade, mas ao mesmo tempo aumentando o risco de iniciar a alimentação do monômero distante do *set-point*. O mesmo ocorre com o número de medições de temperatura consideradas, quanto maior o número de leituras maior a segurança em relação ao processo, porém perde-se em produtividade, pois mais medições representam mais tempo aguardando o início da reação de polimerização. Portanto, a definição desses dois parâmetros é, na verdade, um jogo de compromissos.

A seguir, apresenta-se o comportamento do processo utilizando a estratégia proposta para alimentação de monômero considerando 10 medições de temperatura (1 min). O resultado corresponde à produção do produto A no verão para apenas 50 minutos de simulação. A Figura 4.1 ilustra a temperatura do meio reacional durante o processo de aquecimento, a Figura 4.2 ilustra a vazão de alimentação de monômero e a Figura 4.3 representa a formação de polímero no meio reacional.

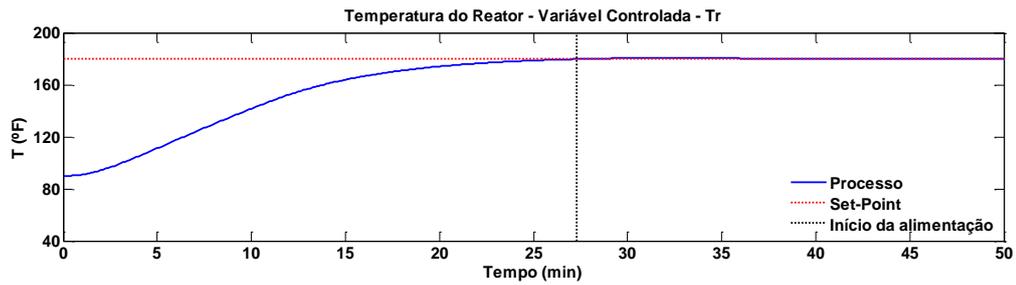


Figura 4.1: Temperatura do meio reacional para o produto A no verão com 10 pontos de amostragem.

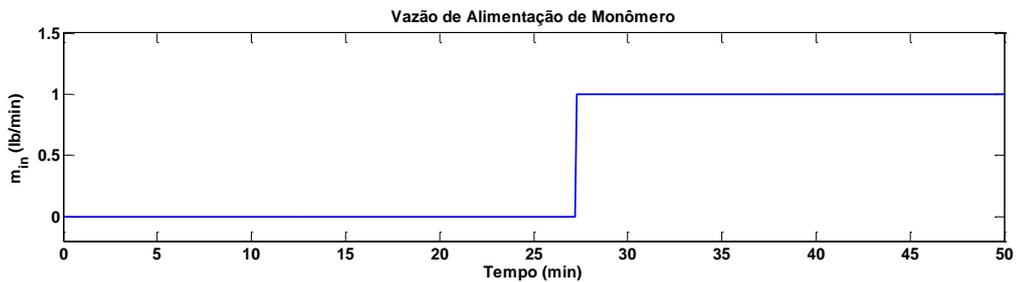


Figura 4.2: Vazão de alimentação de monômero com 10 pontos de amostragem.

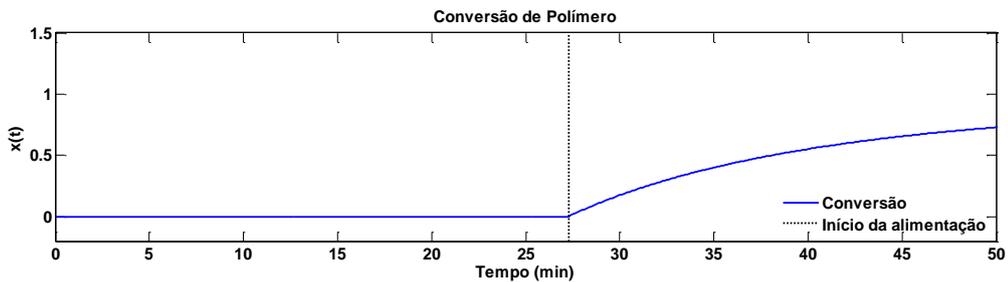


Figura 4.3: Conversão de polímero – vazão de alimentação de monômero com 10 pontos de amostragem.

Apresenta-se a seguir a mesma sequência de variáveis (Figura 4.4 a Figura 4.6) ilustrando o comportamento do processo utilizando, agora, a estratégia proposta para alimentação de monômero considerando 100 medições de temperatura (10 minutos).

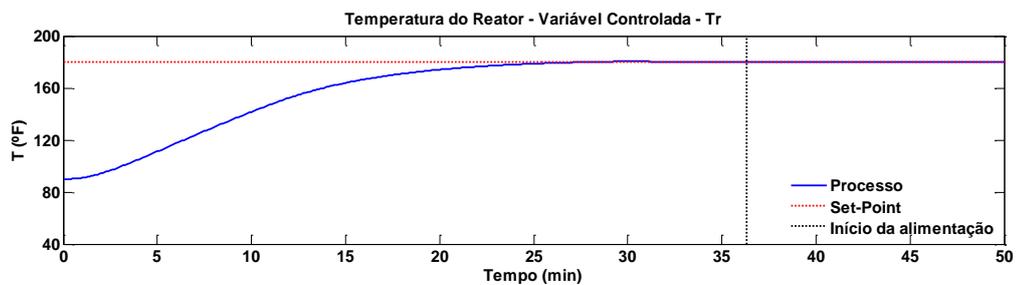


Figura 4.4: Temperatura do meio reacional para o produto A no verão com 100 pontos de amostragem.

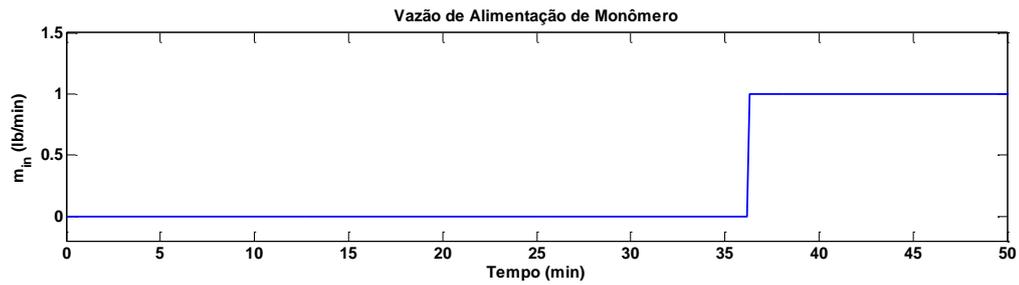


Figura 4.5: Vazão de alimentação de monômero com 100 pontos de amostragem.

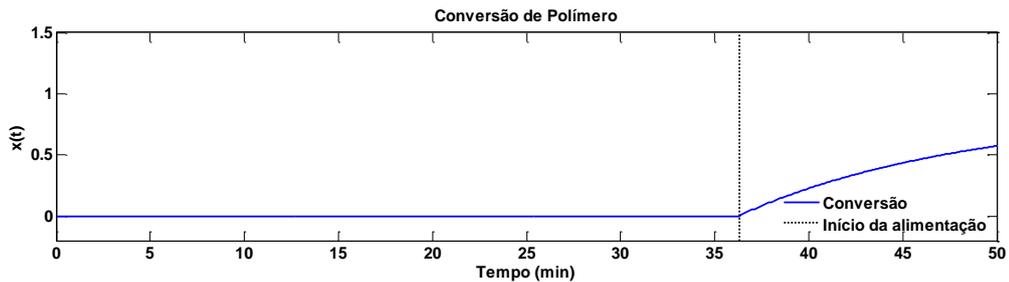


Figura 4.6: Conversão de polímero – vazão de alimentação de monômero com 100 pontos de amostragem.

Analisando essas figuras, pode-se observar que a estratégia utilizando uma amostragem de 100 pontos o monômero é alimentado cerca de 9 minutos mais tarde (de 27 para 36 minutos) quando comparada com a amostragem de 10 pontos, com isso, verifica-se o mesmo atraso no início da conversão.

Através desses resultados, percebe-se que o algoritmo implementado não apenas contribui para o sistema de controle do processo como tem potencial para ser uma estratégia otimizante para a sua operação. A estratégia de alimentação automatizada de monômero contribui para o desenvolvimento do trabalho, pois atribui toda a responsabilidade da produtividade para o sistema de controle, uma vez que é o desempenho do controlador quem comanda o início da adição do monômero através da estabilidade da temperatura do meio reacional.

### 4.3 Simulação do Caso Base: Reator com Controle em Cascata Utilizando Controladores PI

A primeira etapa do trabalho consistiu em simular o reator exatamente como apresentado por Chylla e Haase (1993), utilizando a estrutura de controle em cascata com controladores PI tanto na malha escrava quanto na mestra.

#### 4.3.1 Simulação dos produtos A e B

Nesta etapa, realizou-se a simulação do processo a partir do modelo fornecido por Chylla e Haase (1993) com o objetivo de verificar se os resultados obtidos seriam coerentes. Tal procedimento foi motivado pelas críticas ao modelo relatadas na Seção 2.6.1, visto que a

validação das estratégias de estimação e controle propostas nesta dissertação dependeria da credibilidade no modelo do *benchmark* para teste de controladores proposto pelos autores.

Foram realizadas simulações dos processos de polimerização dos produtos A e B levando-se em consideração as condições climáticas de verão e inverno, que interferem nas temperaturas ambiente e da água de refrigeração. Considerou-se, também, que as reações se dariam para as bateladas de número 1 e 5, de modo a mostrar a influência do fator de incrustação no comportamento do processo e do controle. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na Tabela 4.2. As simulações foram codificadas de acordo com o tipo de produto (PA ou PB), número da batelada (B1 ou B5), verão ou inverno (VE ou IN), tipo de controlador mestre, PI ou *feedforward* (FF) e estimando variáveis de processo com o FK ou não (FK ou 0).

Tabela 4.2 – Parâmetros utilizados na simulação do controle em cascata original.

ITEM	SIMULAÇÃO			
	PA-B1-VE-PI-0	PA-B5-VE-PI-0	PB-B1-IN-PI-0	PB-B5-IN-PI-0
Controlador	PI	PI	PI	PI
Produto	A	A	B	B
Clima	Verão	Verão	Inverno	Inverno
Batelada	n° 1	n° 5	n° 1	n° 5
Temp. Reação	180°F	180°F	176°F	176°F
Atuação do controlador	0,1 min	0,1 min	0,1 min	0,1 min
$K_{P(\text{mestre})}$	9	9	9	9
$\tau_{I(\text{mestre})}$	9	9	9	9
$K_{P(\text{escravo})}$	1	1	1	1
$\tau_{I(\text{escravo})}$	9	9	9	9

#### 4.3.1.1 Resultados para o Produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão com controlador mestre do tipo PI sem estimação de variáveis do processo. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-PI-0”.

A Figura 4.7 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que a estrutura de controle original para este caso foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.8, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até 177,3 min. O regime de alimentação de monômero para o produto A é ilustrado na Figura 4.9.

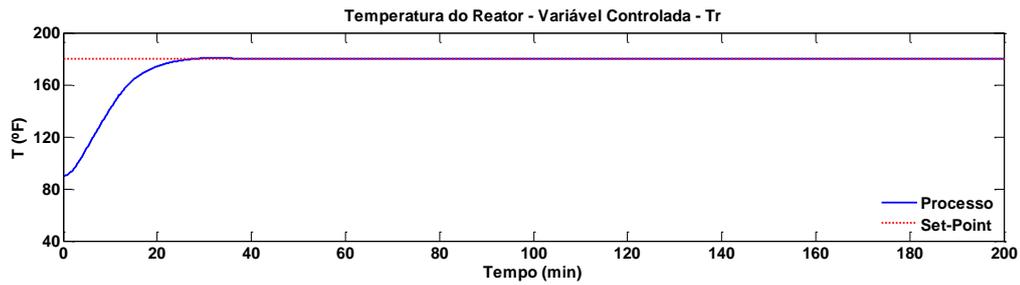


Figura 4.7: Temperatura do reator (PA-B1-VE-PI-0).

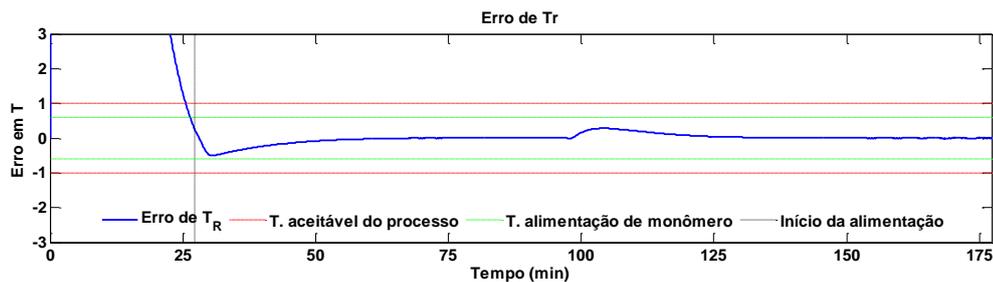


Figura 4.8: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-VE-PI-0).

As alterações observadas na temperatura do processo, calor de reação e taxas de transferência de calor nos instantes 29 minutos e 99 minutos correspondem aos instantes de início e término da alimentação de monômero, conforme observado na Figura 4.9.

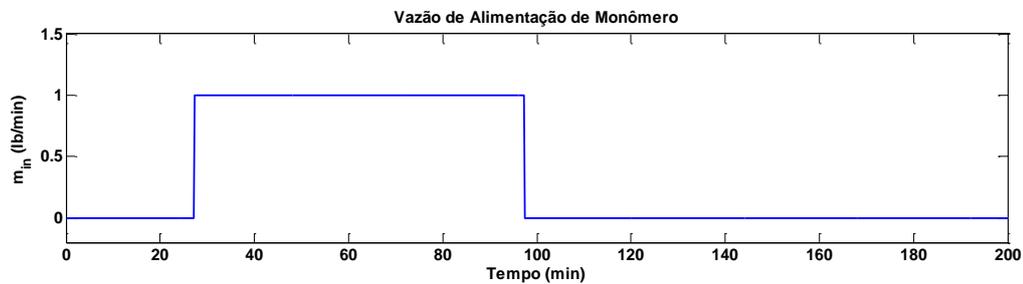


Figura 4.9: Dinâmica de alimentação do monômero (PA-B1-VE-PI-0).

As temperaturas de entrada e saída da jaqueta são ilustradas na Figura 4.10 e na Figura 4.11. Pode-se observar com auxílio da Figura 4.10 que as temperaturas na jaqueta exibem um comportamento característico. No início do processo observa-se claramente que a temperatura de entrada da jaqueta ( $T_{Jin}$ ) é maior que a temperatura de saída ( $T_{Jout}$ ). Isso ocorre porque o meio reacional encontra-se a temperatura ambiente, que é inferior à temperatura de *setpoint*, o que faz com que o sistema de controle forneça calor ao meio. Por outro lado, a troca de calor entre o meio reacional e a jaqueta faz com que a temperatura de saída seja menor do que a de entrada. Durante a etapa de reação, entre 29 e 99 minutos, observa-se a inversão no comportamento dessas variáveis, visto que a temperatura de entrada fica ligeiramente abaixo da temperatura de saída. Isso ocorre porque a reação é exotérmica e fornece calor ao meio e, conseqüentemente, para o fluido da jaqueta que, nessa etapa da batelada, é água de refrigeração e não mais vapor.

Com auxílio da Figura 4.11 é possível perceber que as temperaturas de entrada e saída da jaqueta convergem para um valor acima do *setpoint* no período de pós-reação. Isso ocorre para compensar a perda de calor para o ambiente ( $UA_{loss}$ ) e permitir o controle da temperatura.

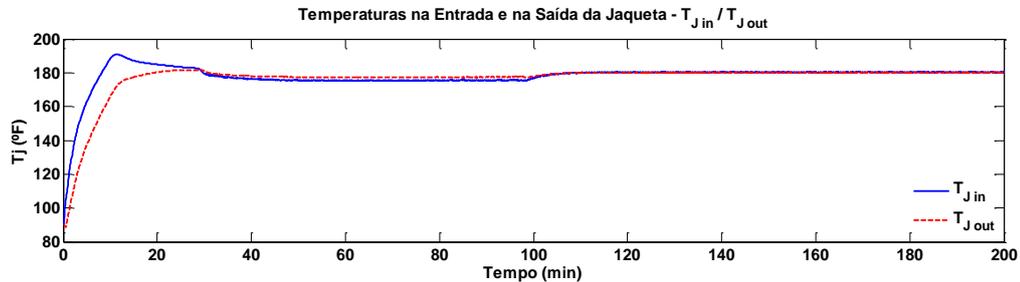


Figura 4.10: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-PI-0).

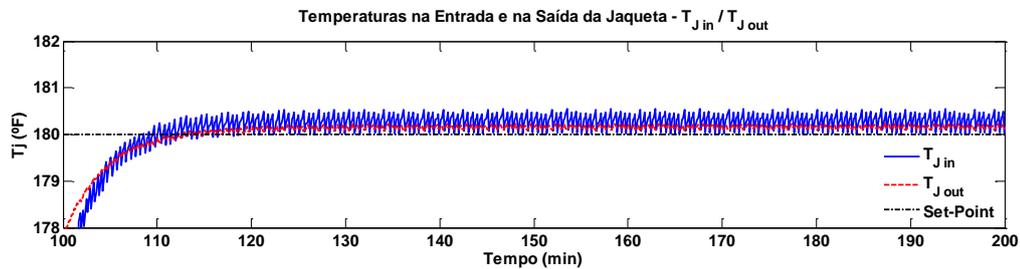


Figura 4.11: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta após o período de reação (PA-B1-VE-PI-0).

É importante destacar que a temperatura de reação convergiu para o *setpoint* no período pós-reação, como apresentado pela Figura 4.8.

A dinâmica das ações de controle, representada pela abertura da válvula (variável manipulada), é ilustrada na Figura 4.12. Vale destacar que a válvula atua de duas formas, tanto para aquecimento quanto para resfriamento do meio reacional (*split-range control*, para mais detalhes sugere-se a leitura do artigo original). Assim, entre 0 e 49% de abertura ocorre a alimentação de água de refrigeração, entre 51 e 100% alimenta-se vapor e em 50% a válvula permanece fechada, conforme mostrado na equação de ganho. Verifica-se, através da Figura 4.12, que o seu comportamento é coerente com o esperado, visto que no início da batelada a válvula abre 100% para preencher a jaqueta com vapor de modo a elevar a temperatura do meio reacional, que está à temperatura ambiente, até o valor do *setpoint*. Quando a temperatura do meio reacional se aproxima do *setpoint*, a válvula diminui a vazão de vapor. Após a temperatura desejada ser atingida, é iniciada a alimentação de monômero e, como a reação é exotérmica e fornece calor para o meio, a válvula reduz ainda mais a alimentação de vapor e fica atuando em torno de 50% para manter a temperatura reacional. É importante destacar que mesmo no início e no término da alimentação de monômero a válvula não executa movimentos bruscos.

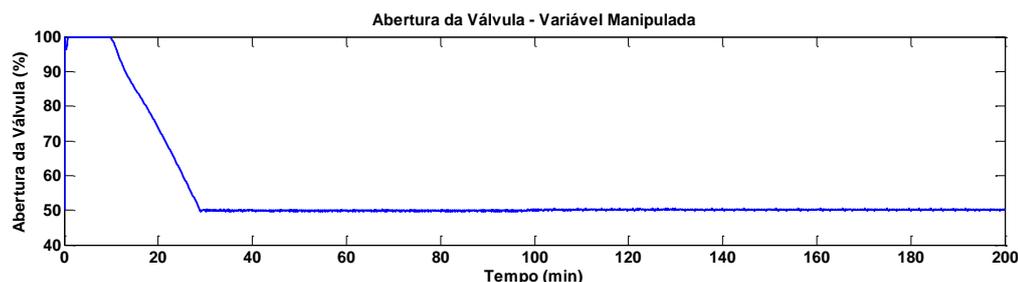


Figura 4.12: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-PI-0).

A evolução do calor de reação ( $Q_R$ ) ao longo da batelada 1 é ilustrada na Figura 4.13. Pode-se perceber que antes da alimentação de monômero (29 min.) não há liberação de calor, pois não há reação, isso mostra coerência da modelagem proposta. No início da alimentação de monômero tem início a liberação de calor pela reação e o perfil da curva ilustra a dinâmica do processo exotérmico de reação. Ao término da adição do monômero (99 min.) a taxa de calor converge para zero à medida que a concentração de monômero diminui no meio reacional, o que também mostra a coerência da modelagem para o balanço de massa e energia.

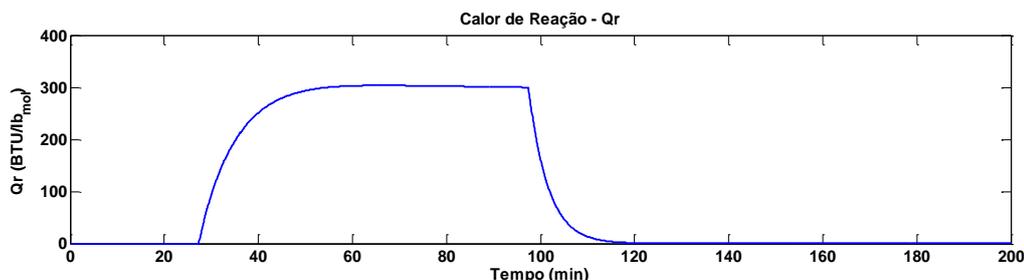


Figura 4.13: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-PI-0).

Vale destacar que o calor de reação é fundamental na estratégia de controle proposta, uma vez que será estimado, juntamente com o produto entre o coeficiente global de transferência de calor e a área de troca térmica ( $UA$ ), pelo Filtro de Kalman Estendido (FKE) através dos modelos simplificados do balanço de energia. Esses estados serão fornecidos para o algoritmo do novo controlador mestre *feedforward* para determinação do *setpoint* da malha escrava através dos mesmos modelos simplificados do balanço de energia utilizados pelo FKE.

A evolução da troca global de calor ( $UA$ ), representada pelo produto entre a área de troca térmica e o coeficiente global de transferência de calor, é apresentada na Figura 4.14. Vale destacar que o coeficiente global de transferência de calor é variável por conta da dinâmica de aquecimento e de problemas de incrustação na superfície de troca térmica, conforme mostra Figura 4.15. A área de troca térmica também varia devido ao aumento do volume reacional ao longo da batelada, conforme mostra Figura 4.16.

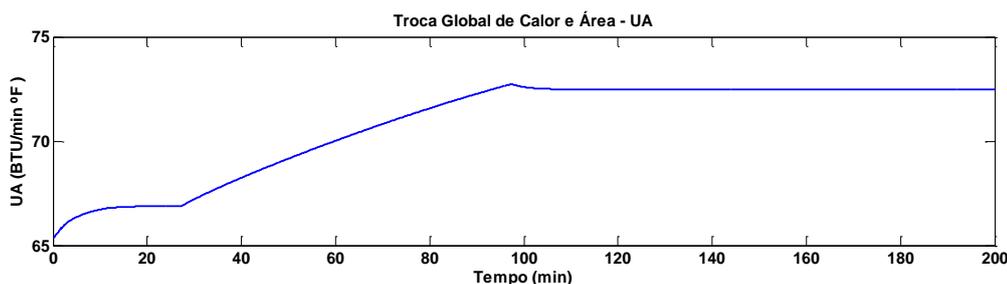


Figura 4.14: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-PI-0).

O interesse no comportamento de  $UA$  e não apenas em  $U$  é porque a área de troca térmica varia, como dito anteriormente, em função da dinâmica do meio reacional. Logo, seu cálculo depende de informações específicas dos reagentes e produtos e isso não atende ao principal objetivo desse trabalho, que é utilizar modelos simplificados e generalistas sem considerar características específicas dos reagentes ou do processo. Dessa forma, o produto  $UA$  será estimado através do FKE e utilizado, assim como o calor de reação ( $Q_R$ ), na estratégia de controle proposta nessa dissertação.

Analisando a Figura 4.14 observa-se que durante o período de aquecimento do reator até a temperatura atingir o *setpoint* (até 29 min.) há um pequeno aumento de  $UA$ , seguido da sua estabilização. Isso é esperado, pois com temperatura constante a troca térmica também se mantém constante uma vez que sem reação a área de troca térmica não varia, conforme Figura 4.16. Um comportamento semelhante ocorre após o término de monômero no meio reacional, onde se observa que  $UA$ ,  $U$  e  $A$  permanecem constantes. Durante o período de adição de monômero (entre 29 e 99 min.) há um aumento de  $UA$ , que não pode ser explicado apenas observando-se o respectivo gráfico.

A Figura 4.15 mostra que durante o processo de alimentação de monômero, portanto período de reação, o coeficiente global de troca térmica ( $U$ ) diminui. Esse comportamento é esperado porque a reação é exotérmica, conforme já observado no gráfico de  $Q_R$ , fazendo com que a troca térmica entre jaqueta e meio reacional reduza seu valor por unidade de área. No entanto, analisando-se a

Figura 4.16 observa-se que a área aumenta durante o período de reação, indicando que o volume do meio reacional está aumentando com o andamento da polimerização. Isso explica o motivo pelo qual o produto  $UA$  aumenta nesse período, pois seu comportamento é resultado da interação entre as variáveis  $U$  e  $A$ .

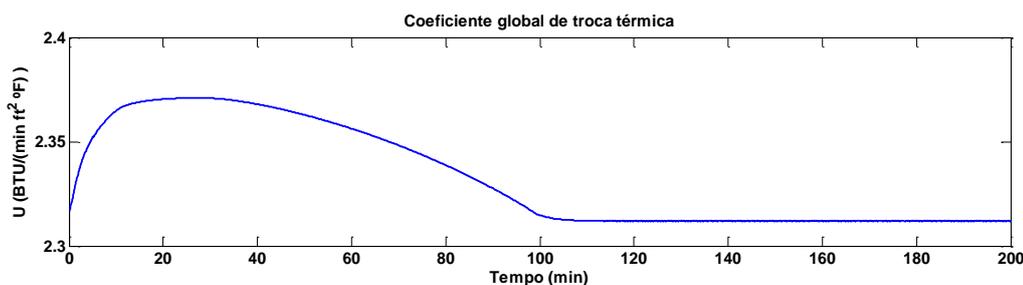


Figura 4.15: Coef. global de transferência de calor (PA-B1-VE-PI-0).

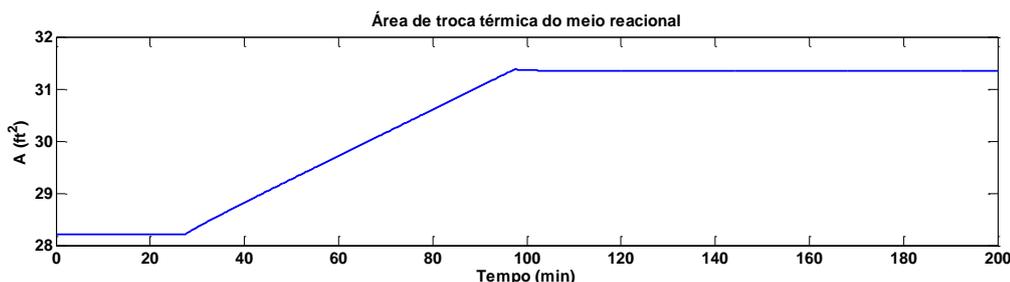


Figura 4.16: Área de troca térmica do meio reacional (PA-B1-VE-PI-0).

A conversão do polímero ao longo do tempo da batelada pode ser visualizada com auxílio da Figura 4.17, onde é possível verificar que ela só se inicia com a entrada do monômero (29 min.). Com o andamento da reação nota-se que a conversão converge assintoticamente até que se encerra a adição de monômero (99 min.). Nesse momento, com a ausência da alimentação de monômero, a reação se completa com o monômero residual que ainda permanece no meio reacional. Por isso observa-se essa descontinuidade na curva exatamente no instante de 99 minutos, onde a conversão acelera e a reação termina, indicando que todo o monômero foi consumido. Esse comportamento também mostra total coerência do modelo proposto para o balanço de massa.

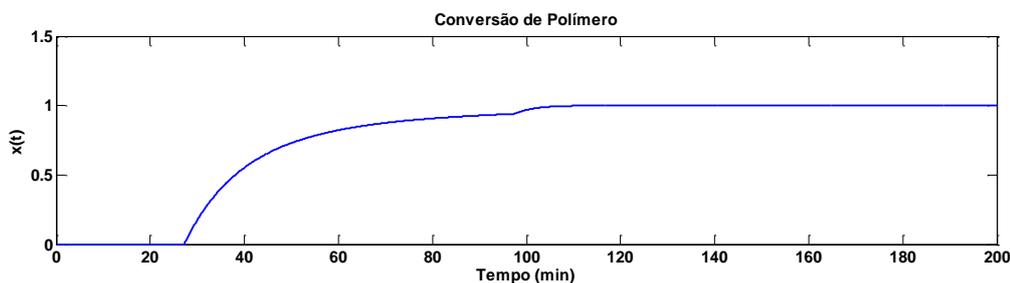


Figura 4.17: Conversão do polímero (PA-B1-VE-PI-0).

Na sequência, realizou-se a simulação do processo de polimerização para o seguinte caso: Produto A, batelada5, realizada no verão com controlador mestre do tipo PI sem estimação de variáveis do processo. O comportamento dinâmico das variáveis de processo para esta simulação foi similar ao comportamento das variáveis apresentado na simulação anterior (“PA-B1-VE-PI-0”). Dessa forma, decidiu-se apresentar os resultados no Anexo 7.1.1 pois sua leitura não é fundamental para o entendimento do processo.

#### 4.3.1.2 Resultados para o Produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no inverno com controlador mestre do tipo PI sem estimação de variáveis do processo. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-IN-PI-0”.

A Figura 4.18 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que a estrutura de controle original para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do

resultado apresentado na Figura 4.19, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até 247,6 min. O regime de alimentação de monômero para o produto B é ilustrado na Figura 4.20.

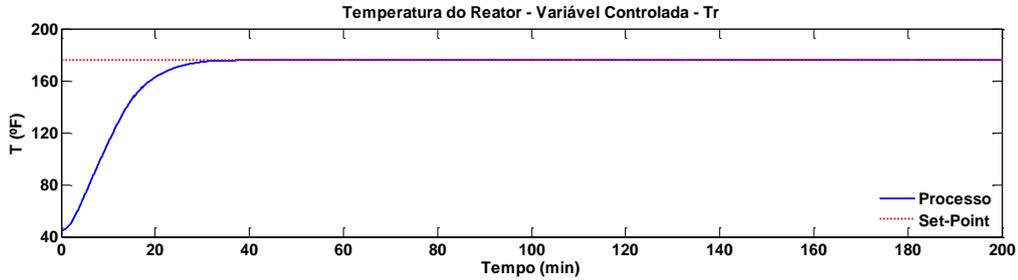


Figura 4.18: Temperatura do reator (PB-B1-IN-PI-0).

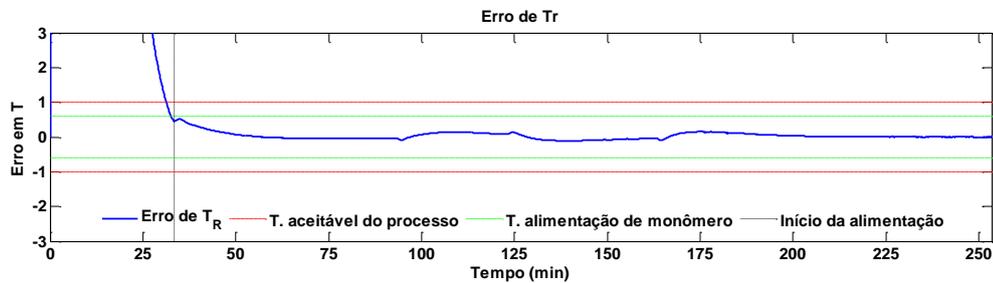


Figura 4.19: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-IN-PI-0).

Comparando a simulação “PB-B1-IN-PI-0” com a “PA-B1-VE-PI-0” nota-se que houve uma demora maior para o início da alimentação do monômero, mesmo o *setpoint* desta simulação sendo menor que o da anterior. Isso ocorreu porque no inverno a temperatura ambiente e a temperatura do fluido de refrigeração são inferiores àquelas da simulação anterior, feita no verão. Com isso levou-se mais tempo para atingir o *setpoint* da reação.

As alterações observadas na temperatura do processo, calor de reação e taxas de transferência de calor nos instantes 35 e 95 minutos e nos instantes 125 e 165 minutos correspondem aos instantes de início e término da alimentação de monômero, que nesse processo ocorrem em dois momentos, conforme pode ser observado na Figura 4.20.

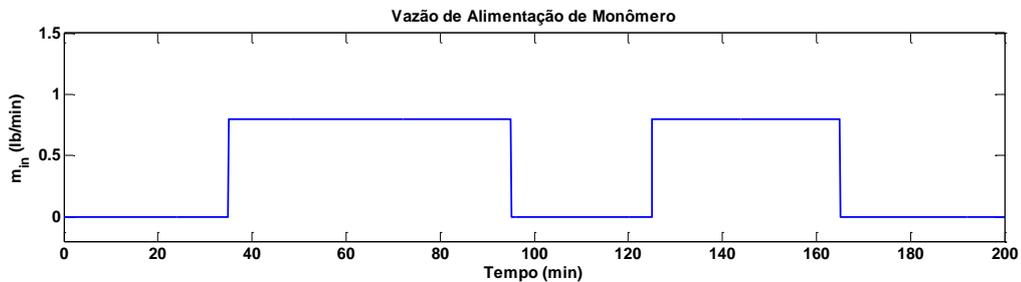


Figura 4.20: Dinâmica de alimentação do monômero (PB-B1-IN-PI-0).

As temperaturas de entrada e saída da jaqueta são ilustradas na Figura 4.21 e na Figura 4.22 e as ações de controle, representadas pela abertura da válvula, na Figura 4.23. Pode-se

observar com auxílio da Figura 4.21 que as temperaturas na jaqueta exibem um comportamento característico. No início do processo, observa-se claramente, que a temperatura de entrada da jaqueta ( $T_{Jin}$ ) é maior que a temperatura de saída ( $T_{Jout}$ ). Isso ocorre porque o meio reacional parte de uma temperatura ambiente que é inferior à temperatura de *setpoint*, necessitando que o sistema de controle forneça calor ao meio, por outro lado, com a troca de calor entre o meio reacional e a jaqueta, a temperatura de saída é menor que a entrada. Durante as etapas de reação, entre 35 e 95 minutos e entre 125 e 165 minutos, observa-se que a temperatura de entrada, muda de posição e fica ligeiramente abaixo da temperatura de saída. Isso ocorre pelo mesmo motivo observado para o produto A.

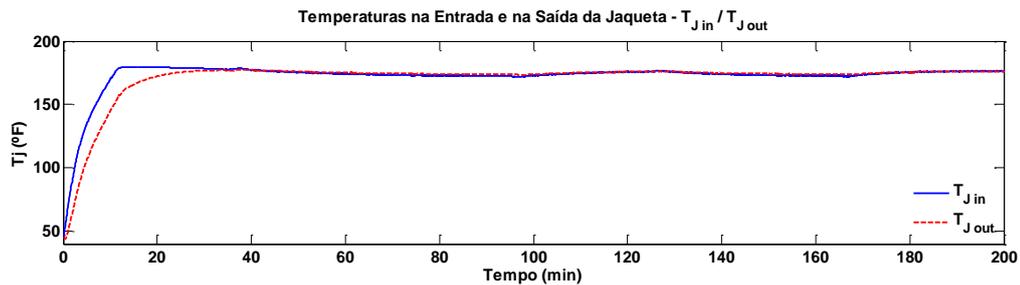


Figura 4.21: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-PI-0).

Observando a Figura 4.22, para o período pós-reação (especificamente após 190 minutos), nota-se que as temperaturas de entrada e saída da jaqueta convergem para um determinado valor que está acima do valor do *setpoint*. Isso ocorre porque há uma taxa de calor ponderada pela área que é cedida ao ambiente ( $UA_{loss}$ ) fazendo com que a temperatura da jaqueta seja ligeiramente superior à do meio reacional para manter sua temperatura controlada. Importante destacar que pela Figura 4.19 já havia sido mostrado que a temperatura de reação convergira para o *setpoint* no período pós-reação.

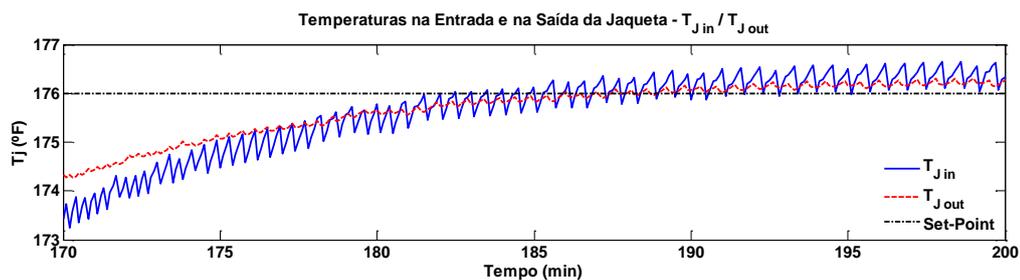


Figura 4.22: Temperaturas de entrada e na saída da jaqueta após período de reação (PB-B1-IN-PI-0).

A dinâmica de abertura da válvula para controle da temperatura (variável manipulada) é ilustrada na Figura 4.23. Verifica-se que o seu comportamento é coerente com o esperado, visto que a válvula abre para 100% para alimentação com vapor de modo a elevar a temperatura do meio reacional que está à temperatura ambiente para o valor do *setpoint*. Quando a temperatura do meio reacional se aproxima do *setpoint* a válvula começa a fechar a alimentação de vapor. Após alcançar a temperatura desejada é iniciada a alimentação de monômero. Como a reação é exotérmica e fornece calor para o meio a válvula continua fechando a alimentação

de vapor e fica atuando em torno de 50% mantendo a temperatura reacional. Importante destacar que mesmo com a adição de monômero e término da alimentação a válvula não executa movimentos bruscos, se mantendo bem comportada.

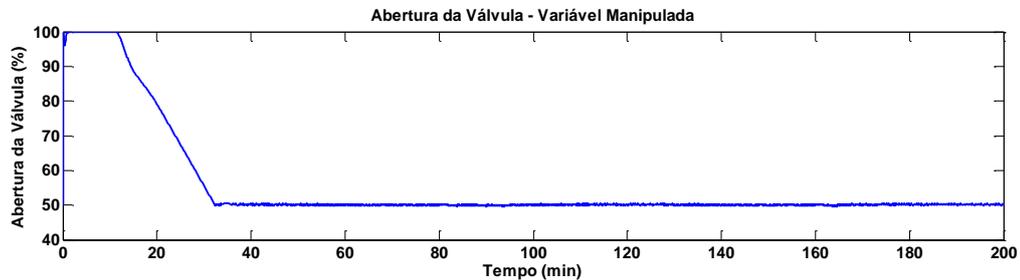


Figura 4.23: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-PI-0).

A evolução do calor de reação ( $Q_R$ ) ao longo da batelada 1 é ilustrada na Figura 4.24. Pode-se perceber que antes da alimentação de monômero (35 min.) não há liberação de calor, pois não há reação, isso mostra coerência da modelagem proposta. Ao início da alimentação de monômero começa a liberação de calor pela reação e o perfil da curva está relacionado à própria dinâmica do processo. Ao término da adição do monômero (95 min.) a taxa de calor liberada diminui à medida que a concentração de monômero diminui no meio reacional. Quando é iniciada nova adição de monômeros (125 min.) o calor de reação volta a subir, indicando liberação de energia em razão da reação de polimerização, conforme ocorreria anteriormente e ao cessar a nova adição (165 min.) observa-se que o calor de reação cai tendendo a 0 (zero) o que indica que todo o monômero reagiu. Isso também mostra a coerência dos modelos propostos para o balanço de massa e energia. Deve-se verificar que nesse processo o calor de reação apresenta um comportamento mais “complexo” de subidas e descidas sequenciais o que exigirá bastante perícia no ajuste do filtro para que a estimação acompanhe esse comportamento oscilatório.

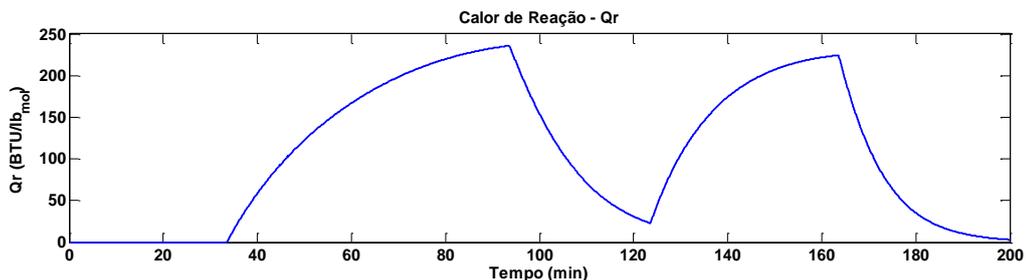


Figura 4.24: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-PI-0).

A evolução da troca global de calor, representada pelo produto entre a área de troca térmica e o coeficiente global de transferência de calor é apresentada na Figura 4.25. Vale destacar que o coeficiente global de transferência de calor é variável por conta da dinâmica de aquecimento e de problemas de incrustação na superfície de troca térmica, conforme mostra a Figura 4.26, e a área de troca térmica também varia devido ao aumento do volume reacional ao longo da batelada, conforme mostra Figura 4.27.

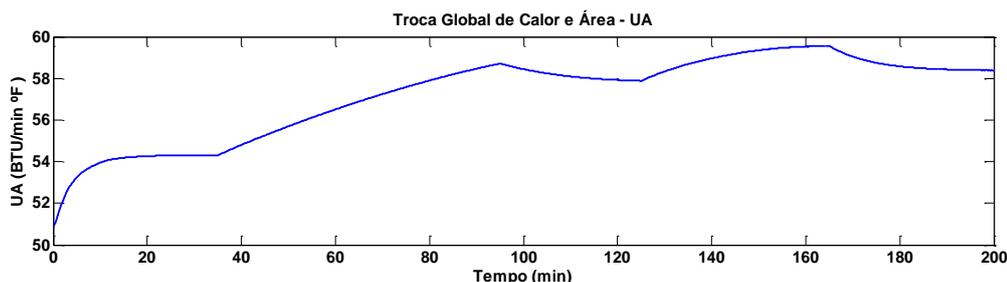


Figura 4.25: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-PI-0).

O comportamento de  $UA$  já foi devidamente esclarecido anteriormente. Dessa forma, a análise do produto  $UA$  na Figura 4.25 mostra que durante o período de aquecimento do reator (até 35 min.) há um aumento de  $UA$  até que se atinja a temperatura de *setpoint*, onde o mesmo fica invariante no tempo (também pode ser visto na Figura 4.26). Isso é esperado, pois com temperatura constante a troca térmica também se mantém constante uma vez que sem reação a área de troca térmica não varia, conforme Figura 4.27. Esse mesmo comportamento ocorre após o término de monômero no meio reacional, observa-se que  $UA$ ,  $U$  e  $A$  estão constantes. Durante o período de adição de monômero (entre 35 e 95 min. e entre 125 e 165 min.) há um aumento de  $UA$ , que não pode ser explicado apenas observando-se o respectivo gráfico.

A Figura 4.26 mostra que durante o processo de alimentação de monômero, portanto período de reação, o coeficiente global de troca térmica ( $U$ ) diminui. Esse comportamento é esperado porque a reação é exotérmica, conforme já observado no gráfico de  $Q_R$ , fazendo com que a troca térmica entre jaqueta e meio reacional reduza seu valor por unidade de área. No entanto, analisando a Figura 4.27 observa-se que a área, durante o período de reação, aumenta, indicando que o volume do meio reacional está aumentando com o andamento da polimerização. Isso explica o motivo pelo qual o produto  $UA$  aumenta nesse período, pois seu comportamento é resultado da operação matemática entre as variáveis  $U$  e  $A$ . Esse comportamento pode ser observado para os dois períodos de adição de monômero.

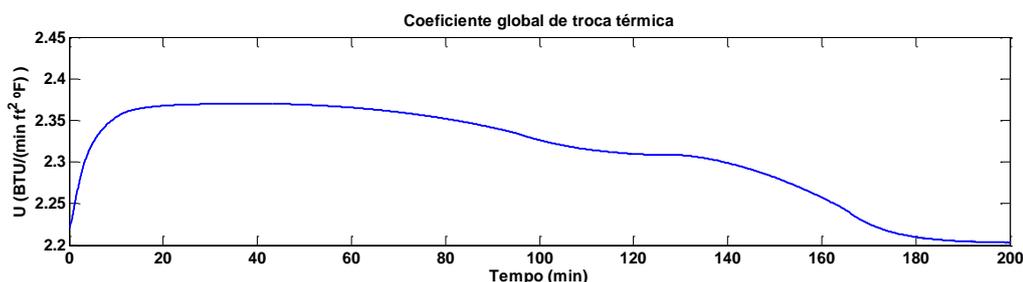


Figura 4.26: Coef. global de transferência de calor (PB-B1-IN-PI-0).

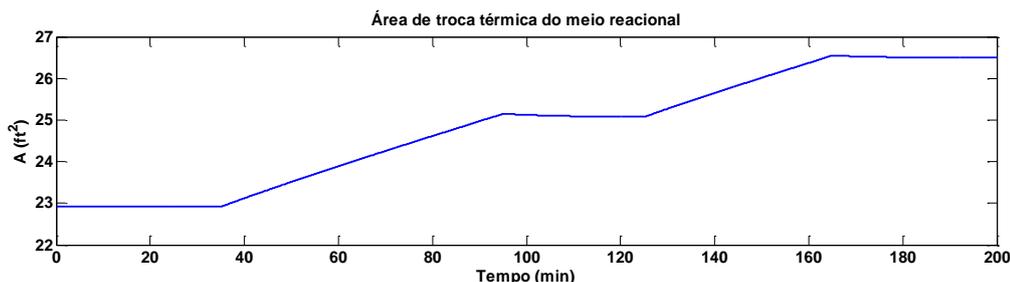


Figura 4.27: Área de troca térmica do meio reacional (PB-B1-IN-PI-0).

A conversão do polímero ao longo do tempo da batelada pode ser visualizada com auxílio da Figura 4.28, onde é possível verificar que ela só se inicia com a entrada de monômeros (35 min.). Com o andamento da reação nota-se que a conversão vai convergindo assintoticamente até que se encerra a adição de monômero (95 min.). Nesse momento, com a ausência da alimentação de monômeros, a reação se dá apenas com os monômeros residuais que ainda permanecem no meio reacional. Por isso observa-se essa descontinuidade na curva exatamente no instante de 95 min., onde a conversão acelera até que nova adição de monômeros ocorre (125 min.) fazendo com que a relação produto/reagente caia inicialmente. É possível notar que a conversão volta a subir próximo de 160 min. até que em 165 min. encerra a adição de monômeros e há a conversão completa, indicando que todo o monômero reagiu. Isso mostra total coerência do modelo proposto para o balanço de massa.

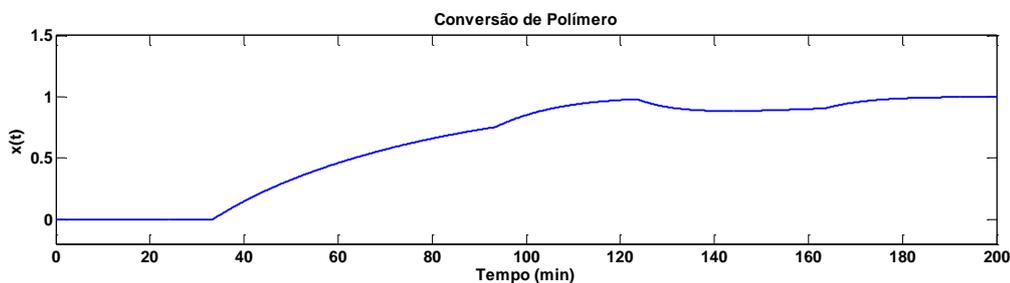


Figura 4.28: Conversão do polímero (PB-B1-IN-PI-0).

Na sequência, realizou-se a simulação do processo de polimerização para o seguinte caso: Produto B, batelada5, realizada no inverno com controlador mestre do tipo PI sem estimação de variáveis do processo. O comportamento dinâmico das variáveis de processo para esta simulação foi similar ao comportamento das variáveis apresentado na simulação anterior (“PB-B1-IN-PI-0”). Dessa forma, decidiu-se apresentar os resultados no Anexo 7.1.2.

#### 4.3.2 Considerações sobre a Credibilidade do Modelo de Chylla e Haase (1993)

Analisando todos os resultados mostrados nos gráficos de temperatura de reação ( $T_R$ ), pode-se concluir que o desempenho da estrutura de controle em cascata com controladores PI nas malhas mestre e escravo foi muito satisfatório, pois mantém a temperatura de reação na faixa esperada ( $\pm 1^\circ\text{F}$  em relação ao *setpoint*). Essa conclusão é válida independente das condições da simulação, seja para os produtos A e B, seja para as condições climáticas de verão e inverno, seja para qualquer que seja o fator de incrustação para as bateladas 1 e 5. Este

resultado é importante porque mostra que o controlador PI mostrou-se robusto para diversas situações, configurando-se como um desafio a mais para as pretensões desse trabalho.

O artigo de Chylla e Haase (1993) já mencionava que a estrutura de controle existente no reator modelado apresentava desvios eventuais da ordem de 5°F. A dificuldade era exatamente obter um ajuste robusto o suficiente para manter um bom desempenho na tarefa de controlar a temperatura diante de todas as adversidades: clima, incrustação, etc.

O trabalho apresentado por Helbig *et al.* (1996) não apresenta um resultado satisfatório em relação ao PID implementado, pois o controlador apresenta *off-set* e apresenta um desvio de 3 K, onde o tolerável seria 0,6 K (as unidades de temperatura foram dadas em Kelvin). Dessa forma, qualquer estratégia ou ajuste que eliminem essas situações indesejadas já tornariam os resultados melhores.

Os resultados apresentados por MacGregor e Clarke-Pringle (1997) não são positivos em relação ao desempenho de seu controlador PID. A variável controlada flutua fora da faixa tolerada para o processo, chegando a 3 °F em relação ao *setpoint*. Na verdade, os próprios autores afirmam que, eventualmente, observam-se valores variando próximo a 5 °F, resultado muito próximo do que o artigo original do reator *benchmark* informa.

Avaliando o trabalho realizado por Santos (2005), pode-se observar que as simulações feitas com o seu controlador PID obtiveram resultados muito bons com o conjunto de parâmetros escolhidos para seu ajuste. O controle de temperatura com o PID mostra a temperatura bem comportada. Os valores da simulação flutuam dentro da faixa tolerável para o processo, que é de 1 °F para mais ou para menos. Na verdade, os valores oscilam dentro de uma faixa de 0,5 °F, que é um resultado excelente.

Os resultados encontrados por Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011) são muito semelhantes. Esses autores utilizam uma estrutura em cascata com controladores PI. Os resultados encontrados excedem o limite tolerado para o processo de 0,6 K (esses autores também adotaram a unidade Kelvin). Os primeiros autores obtiveram erros da ordem de 2 K, os segundos de 3 K e os terceiros obtêm erros da ordem de 1 K.

É bem verdade que a comparação dos resultados obtidos por esses últimos autores é, de certa forma, incoerente, pois as alterações na modelagem propostas por eles, assim como por Helbig *et al.* (1996) são tão contundentes que se pode considerar que fazem uma avaliação de um equipamento que é diferente do reator *benchmark* de Chylla e Haase (1993). No entanto, insistiu-se nessas avaliações comparativas para que se pudesse ter um horizonte mais amplo para o desenvolvimento desse trabalho.

Os gráficos de  $Q_R$ ,  $UA$ ,  $T_{Jin}$ ,  $T_{Jout}$  e  $x$  (conversão) apresentam o mesmo perfil e ordem de grandeza quando comparados com os resultados obtidos por Almeida (1997) e Santos (2005) e com isso os resultados foram considerados satisfatórios. Importante destacar que as temperaturas de  $T_{Jin}$  e  $T_{Jout}$  ficam ligeiramente descoladas uma da outra em razão da perda de calor para o ambiente ( $UA_{loss}$ ). O gráfico de abertura da válvula mostra que a variável manipulada apresenta um bom comportamento, uma vez que atua rapidamente para atingir o *setpoint* e mantém certa estabilidade para manter a temperatura. Outros autores não possuem resultados adequados para que se possa comparar, ora porque não usam exatamente a mesma modelagem (reator), como é o caso de Helbig *et al.* (1996), Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011), ora porque não mostram os mesmos tipos de gráficos.

Desse modo, tem-se a garantia de que o modelo matemático do processo utilizado nesse trabalho é confiável, ou seja, quando comparando com outros trabalhos divulgados os resultados alcançados mostraram-se coerentes. Dessa forma, esses mesmos resultados serão utilizados para validar, através de comparação, os demais resultados obtidos nesta dissertação.

#### 4.4 Simulação do Processo com Controlador Mestre PI e Estimação de Parâmetros com Filtro de Kalman

Posteriormente à etapa de simulação dos controladores PI, foi implementado o Filtro de Kalman Estendido (FKE) com o objetivo de estimar os parâmetros  $Q_R$ ,  $UA$  e a conversão ( $x$ ). A ideia de dispor das estimativas do filtro de Kalman nesse momento é garantir que sua implementação está correta comparando seus resultados com os encontrados no sistema em cascata com controladores PI, uma vez que mais à frente as variáveis estimadas pelo FKE serão usadas na estratégia de controle baseada na estimação de parâmetros em tempo real.

##### 4.4.1 Simulação dos produtos A e B com estimação de parâmetros pelo FKE

O objetivo de se estimar  $Q_R$  e  $UA$  é que eles serão utilizados na estratégia de controle, já o objetivo de se ter a estimativa da conversão é que essa estratégia suscita a possibilidade prática de monitorar o andamento da reação em tempo real. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na tabela abaixo. A codificação segue a regra anterior, porém, acrescenta-se o indicativo de valor da estimativa inicial para  $UA$  (30 ou 80).

Tabela 4.3 – Parâmetros para simulação e estimação com Filtro de Kalman Estendido.

ITEM	SIMULAÇÃO			
	PA-B1-VE-PI-FK-80	PA-B5-VE-PI-FK-80	PB-B1-IN-PI-FK-30	PB-B5-IN-PI-FK-30
Controlador	PI	PI	PI	PI
Produto	A	A	B	B
Clima	Verão	Verão	Inverno	Inverno
Batelada	n° 1	n° 5	n° 1	n° 5
Temp. Reação	180°F	180°F	176°F	176°F
T. de controle	0,1 min	0,1 min	0,1 min	0,1 min
$UA_{(inicial)}$	80	80	30	30
$K_{P(mestre)}$	9	9	9	9
$\tau_{I(mestre)}$	9	9	9	9
$K_{P(escravo)}$	1	1	1	1
$\tau_{I(escravo)}$	9	9	9	9
$W_{(aquecimento)}$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

Uma vez que o comportamento dinâmico do processo foi exaustivamente detalhado na simulação do caso base na Seção 4.3, a análise a seguir focará tão somente no comportamento

apresentado pelas variáveis que estão sendo estimadas e na avaliação das peculiaridades dos resultados encontrados.

Foram realizadas simulações dos processos de polimerização dos produtos A e B levando-se em consideração as condições climáticas de verão e inverno, que interferem nas temperaturas ambiente e da água de refrigeração. Considerou-se, também, que as reações se dariam para as bateladas de número 1 e 5, de modo a mostrar a influência do fator de incrustação no comportamento do processo e no desempenho do algoritmo de controle. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na Tabela 4.3. As simulações foram codificadas de acordo com o tipo de produto (PA ou PB), número da batelada (B1 ou B5), verão ou inverno (VE ou IN), tipo de controlador mestre PI ou *feedforward* (PI ou FF) e estimando variáveis de processo com o FK ou não (FK ou 0).

#### 4.4.1.1 Resultados para o Produto A e estimação de parâmetros através do FKE

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão com controlador mestre do tipo PI, com estimação de variáveis do processo através do FKE e valor inicial de UA de 80 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-PI-FK-80”.

A Figura 4.29 apresenta o comportamento do calor de reação ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que o FKE para este processo foi capaz de estimar adequadamente o comportamento da variável, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.32, que mostra que o erro da estimação de  $Q_R$  é baixo. Percebe-se que mesmo nos instantes de entrada e saída de monômero (29 e 99 min.) o FKE foi capaz de acompanhar o comportamento dinâmico da variável.

A Figura 4.30 apresenta o comportamento do coeficiente global de troca térmica e área ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que também para o UA o FKE foi capaz de estimar adequadamente o comportamento da variável, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.33, que mostra que o erro da estimação de UA é baixo. Um fator complicador para essa estimação é o fato de não se conhecer o valor inicial de UA, diferentemente do  $Q_R$ , cujo valor inicial é bem conhecido, uma vez que na ausência de reação assume valor 0 (zero). Ainda assim verifica-se que o filtro convergiu para o valor real da variável (cerca de 20 min.). Outro fato relevante é que mesmo nos instantes de entrada e saída de monômero (29 e 99 min.) o FKE conseguiu acompanhar o comportamento dinâmico da variável.

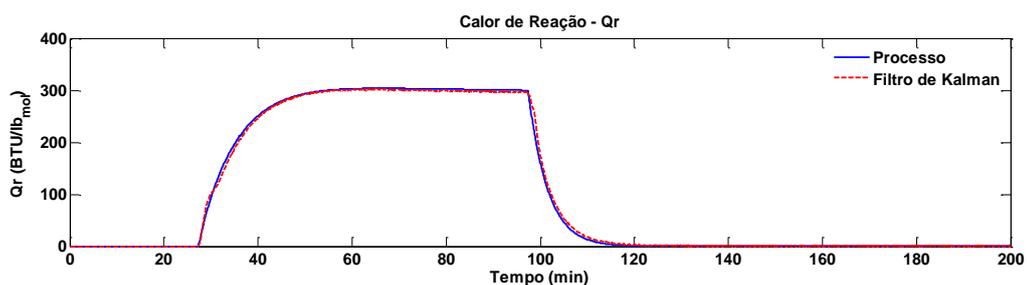


Figura 4.29: Calor de reação real e estimado (PA-B1-VE-PI-FK-80).

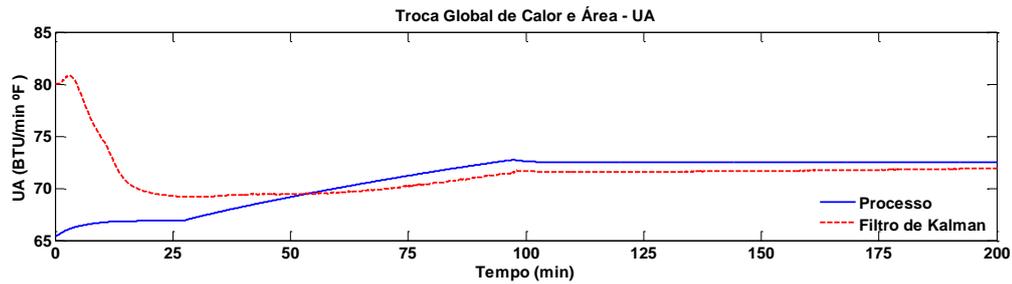


Figura 4.30: Coef. global de troca térmica e área real e estimado (PA-B1-VE-PI-FK-80).

A conversão ao longo da batelada 1, representada na Figura 4.31, também foi estimada adequadamente pelo FKE. O gráfico, por si só, mostra que a estimação da conversão acompanhou toda a dinâmica do processo no que se refere a entrada e saída de monômero, inclusive no ponto de descontinuidade (99 min.). Esse comportamento já era esperado, uma vez que a conversão é função do  $Q_R$  cuja estimação já havia se mostrado bastante apropriada para as pretensões desse trabalho.

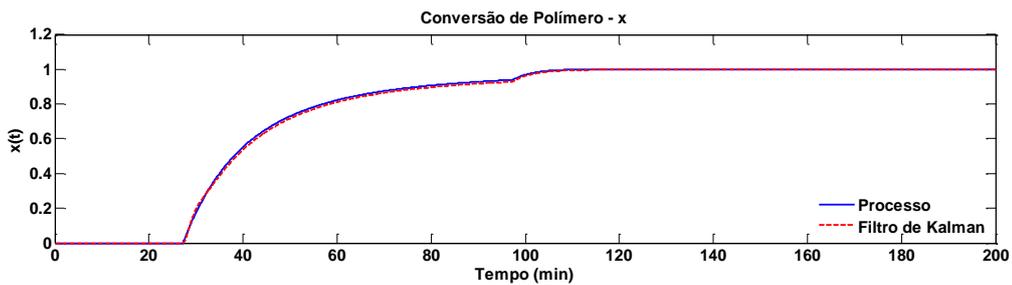


Figura 4.31: Conversão real e estimada (PA-B1-VE-PI-FK-80).

A Figura 4.32 e a Figura 4.33 mostram os erros relativo e absoluto da estimação  $Q_R$  e  $UA$ , respectivamente. Observa-se que a estimação de  $Q_R$  foi sensível à entrada e saída de monômero (29 e 99 min.), pois os gráficos mostram picos nesses instantes. No entanto, o erro é muito pequeno não comprometendo o resultado final, como visto anteriormente. Chama-se a atenção para o fato do erro relativo de  $Q_R$  aumentar continuamente no final da simulação. Isso é explicado pelo fato do valor de  $Q_R$  tender a zero, conforme mostra o gráfico de erro absoluto, fazendo com que o erro relativo aumente significativamente com o andamento da simulação, mas isso não tem qualquer impacto no resultado dessa variável.

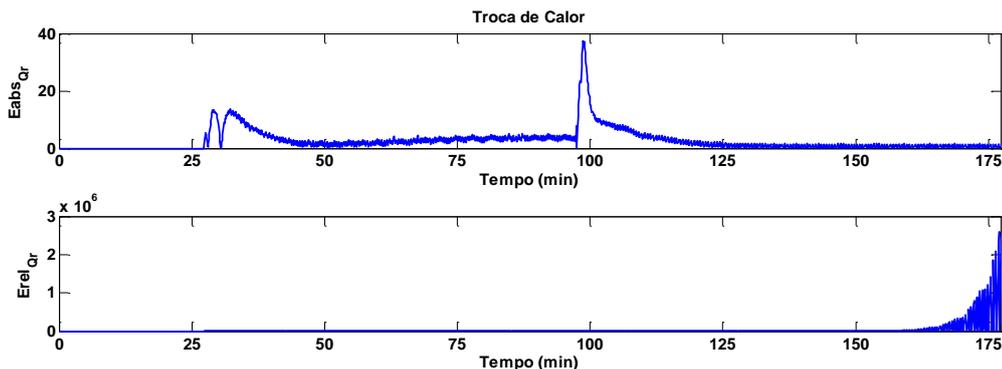


Figura 4.32: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-PI-FK-80).

Conforme se observa nos gráficos dos erros relativo e absoluto de  $UA$  (Figura 4.33), o FKE convergiu para o valor real da variável após o início da simulação. Nota-se que mesmo com um valor inicial de  $UA$  distinto do valor real, com o passar do tempo o valor convergiu para o esperado. A estimação de  $UA$  não foi afetada pela entrada e saída dos monômeros (29 e 99 min.), o que pode ser explicado pelo fato de  $UA$  não ser dependente da reação.

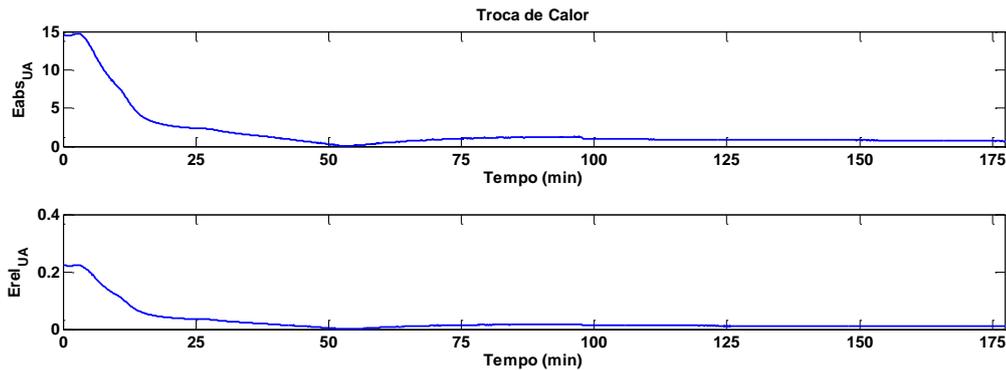


Figura 4.33: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-PI-FK-80).

Na sequência, realizou-se a simulação do processo de polimerização para o seguinte caso: Produto A, batelada5, realizada no verão com controlador mestre do tipo PI, com estimação de variáveis do processo. O comportamento dinâmico das variáveis de processo para esta simulação foi similar ao comportamento das variáveis apresentado na simulação anterior (“PA-B5-VE-PI-FK-80”). Dessa forma, decidiu-se apresentar os resultados no Anexo 7.1.3.

#### 4.4.1.2 Resultados para o Produto B e estimação de parâmetros através do FKE

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no verão com controlador mestre do tipo PI, com estimação de variáveis do processo através do FKE e valor inicial de  $UA$  de 30 BTU / min<sup>o</sup>F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-IN-PI-FK-30”.

O comportamento dinâmico do calor de reação ao longo da batelada 1 é apresentado na Figura 4.34. Pode-se verificar que o FKE para este processo foi capaz de estimar adequadamente o comportamento desta variável, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.37, que mostra que o erro da estimação de  $Q_R$  é baixo. Percebe-se que mesmo nos instantes de entrada e saída de monômero (em 35 e 95 minutos, e em 125 e 165 minutos) o FKE foi capaz de acompanhar o comportamento dinâmico da variável em uma situação de maior complexidade comparada ao produto A, devido ao comportamento mais oscilatório da variável.

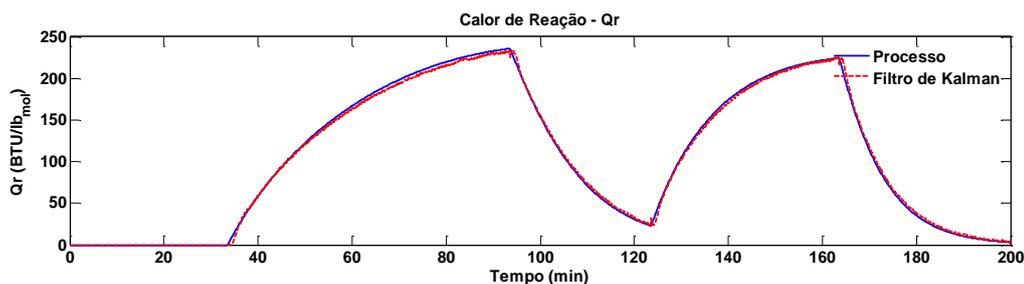


Figura 4.34: Calor de reação real e estimado (PB-B1-IN-PI-FK-30).

A Figura 4.35 apresenta o comportamento do coeficiente global de troca térmica e área para a batelada 1. Verifica-se que o FKE estimou adequadamente o comportamento da variável  $UA$ , fato confirmado pela Figura 4.38, que mostra que o erro da estimação de  $UA$  é pequeno. Um fator complicador também para essa estimação é o fato de não se conhecer o valor inicial de  $UA$ , diferentemente do  $Q_R$ , cujo valor inicial é conhecido (zero). Ainda assim verifica-se que o filtro convergiu para o valor real da variável em cerca de 20 minutos, mostrando que a estimação independe do chute inicial de  $UA$ , visto que nessa simulação o valor inicial utilizado (30) foi diferente do valor utilizado na simulação anterior (80). Outro fato relevante é que mesmo nos instantes de entrada e saída de monômero o FKE conseguiu acompanhar o comportamento dinâmico da variável.

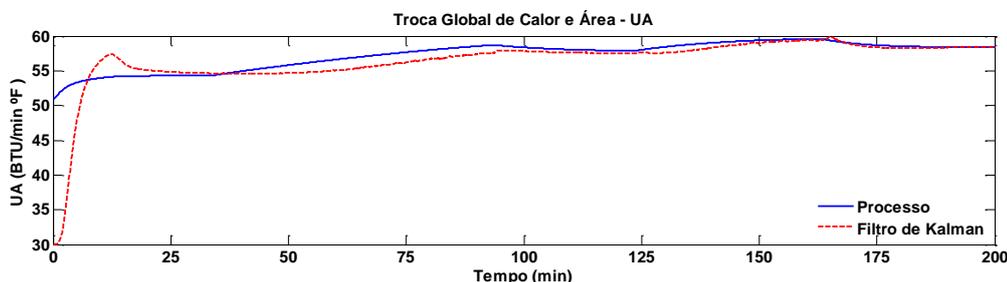


Figura 4.35: Coef. global de troca térmica e área real e estimado (PB-B1-IN-PI-FK-30).

A conversão ao longo da batelada 1, representada na Figura 4.36, também foi estimada adequadamente pelo FKE mesmo para uma dinâmica mais complexa. O gráfico ilustra que a estimação da conversão acompanhou toda a trajetória da variável no que se refere a entrada e saída de monômero, inclusive nos pontos de descontinuidade (95 e 165 minutos). Esse comportamento já era esperado uma vez que a conversão é função do  $Q_R$  cuja estimação já havia se mostrado bastante apropriada.

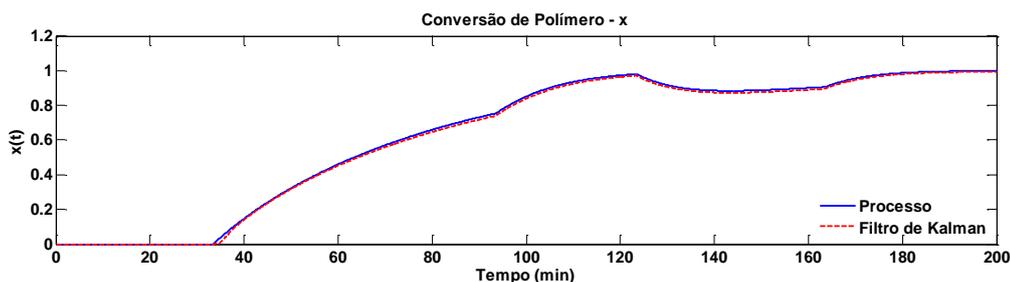


Figura 4.36: Conversão real e estimada (PB-B1-IN-PI-FK-30).

A Figura 4.37 e a Figura 4.38 mostram os erros relativo e absoluto da estimação  $Q_R$  e  $UA$ , respectivamente. Observa-se que a estimação de  $Q_R$  foi sensível a entrada e saída de monômero (em 35 e 95 min. e em 125 e 165 min.), pois os gráficos mostram picos nesses instantes. No entanto, o erro não é significativo e não compromete o resultado, como visto anteriormente.

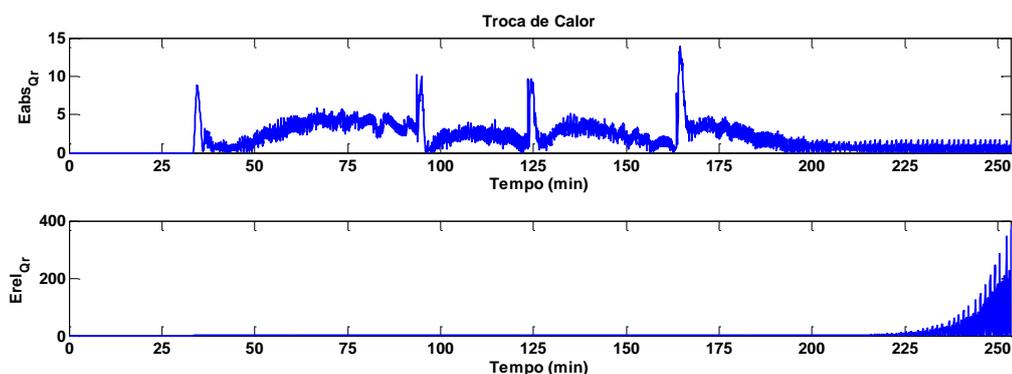


Figura 4.37: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-IN-PI-FK-30).

Conforme se observa nos gráficos de erros relativo e absoluto de  $UA$ , as estimativas do FKE convergiram para o valor real da variável após o início da simulação. Nota-se que mesmo com um valor inicial de  $UA$  distinto do valor real com o andamento da simulação o valor convergiu para o esperado. A estimação de  $UA$  novamente não foi sensível ao regime de alimentação de monômero. Outra observação importante é que o erro da estimação de  $UA$  para essa simulação converge para zero mais rápido, indicando que a estimação foi melhor.

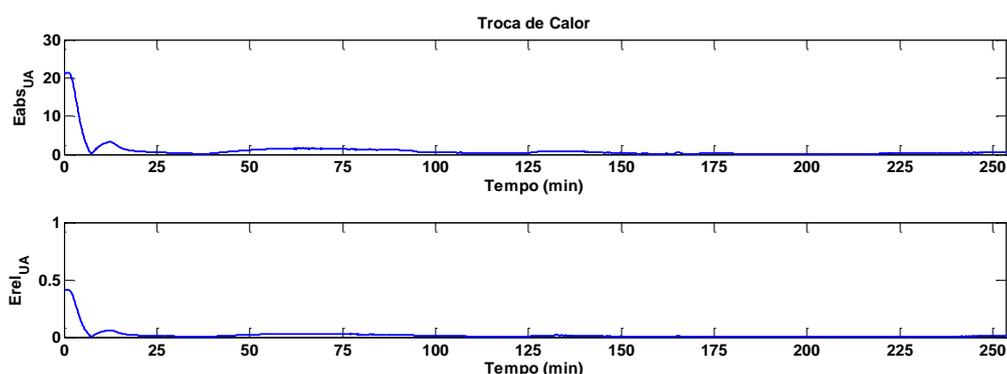


Figura 4.38: Erros abs. e relat. do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-PI-FK-30).

Na sequência, realizou-se a simulação do processo de polimerização para o seguinte caso: Produto B, batelada5, realizada no inverno com controlador mestre do tipo PI, com estimação de variáveis do processo. O comportamento dinâmico das variáveis de processo para esta simulação foi similar ao comportamento das variáveis apresentado na simulação anterior (“PB-B1-IN-PI-FK-80”). Dessa forma, decidiu-se apresentar os resultados no Anexo 7.1.4.

#### 4.4.2 Considerações sobre a Estimação de $Q_R$ e $UA$

Analisando os resultados alcançados com as estimações feitas pelo filtro de Kalman para  $Q_R$ ,  $UA$  e conversão ( $x$ ) verifica-se que estão bastante consistentes quando comparados com os resultados da simulação do modelo de Chylla e Haase (1993). Os gráficos de  $Q_R$ ,  $UA$  e conversão ( $x$ ) mostram pequenos erros entre o valor estimado pelo FKE e o valor real determinado pelo modelo validado apresentado no artigo original. Esperava-se que houvesse uma dificuldade maior de estimar  $UA$  em relação a  $Q_R$  e a conversão (que é função direta do  $Q_R$ ) uma vez que na modelagem  $UA$  aparece tanto na equação do balanço de energia do reator quanto na da jaqueta. Portanto,  $UA$  sofre mais influência dos erros associados aos dois modelos. Por outro lado,  $Q_R$  só aparece no balanço de energia do reator e, dessa forma, sofre influência apenas do erro associado a esse modelo. Consequentemente, a conversão tende a apresentar o mesmo comportamento em relação à sua variável real. No entanto, não foi possível observar essa diferença de modo significativo.

Outro ponto importante a se destacar é que  $Q_R$  e  $UA$  precisam de seus valores iniciais para suas estimativas. Determinar o valor inicial de  $Q_R$  é relativamente simples, uma vez que não havendo reação, condição inicial para esta reação é zero. Porém, determinar o valor inicial de  $UA$  não é uma tarefa trivial. Avaliando o trabalho de Almeida (1997), há um tópico específico para determinação de condições iniciais através da estimação de parâmetros em tempo real. Utilizando a fase de aquecimento para o produto A, no verão e para as bateladas de número 1 e 5, obteve-se como resultados aproximados 67 BTU/min.°F.ft<sup>2</sup>, para a primeira corrida, e 42 BTU/min.°F.ft<sup>2</sup>, para a última. Cabe ressaltar que Almeida parte de valores iniciais arbitrários para a fase de aquecimento (30 e 100 BTU/min.°F.ft<sup>2</sup>, respectivamente).

No presente trabalho, a fase de aquecimento já está integrada em toda a simulação e, nesse sentido, a estimativa inicial de  $UA$  (30 e 80 BTU/min.°F.ft<sup>2</sup>) para a fase de aquecimento fez com que a estimação em tempo real através do uso do FKE terminasse a fase de aquecimento em um valor mais adequado para o  $UA$  da fase de reação. Note-se, que os resultados finais foram consistentes e independentes da estimativa inicial.

O entendimento de todas as observações levantadas nesses tópicos são fundamentais para a compreensão dos resultados que serão mostrados nas etapas de implementação das estratégias de controle. Uma vez que o comportamento das variáveis já foi bem analisado no que se refere à relação de causa e efeito, restarão as análises focadas nos desempenhos das ações de controle. Uma boa compreensão dos resultados anteriores faz com que a análise das estratégias de controle seja bastante objetiva.

Nas estratégias concebidas a partir do uso das estimativas do filtro de Kalman, as variáveis  $T_R$  e  $T_J$  foram consideradas como estados determinísticos e disponíveis a cada tempo de amostragem, uma vez que as temperaturas de reação e da jaqueta são facilmente medidas na prática. Os parâmetros  $Q_R$  e  $UA$  foram considerados como estados estocásticos, já que na prática são variáveis que não são medidas. As variáveis como  $F_w$ ,  $T_{amb}$ ,  $UA_{loss}$  bem como,  $C_R$ ,  $C_{pw}$ ,  $W_{cj}$ , são assumidas como sendo constantes. Todos os valores dos parâmetros operacionais e variáveis de processo foram utilizados conforme dados do artigo original (CHYLLA e HAASE, 1993). O  $Cr$  é função do andamento da reação, portanto é função do tempo, contudo foi assumido como constante para efeito de simulação.

A mesma estrutura de simulação adotada nesse trabalho pode ser observada, por exemplo, em Almeida (1997) e Santos (2005). Ambos desenvolveram trabalhos de modelagem para balanço de energia em tempo real em reações de polimerização através da implementação do Filtro de Kalman.

#### **4.5 Simulação do Processo com Controlador Mestre *Feedforward* Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para $T_J$**

Nesse tópico apresenta-se o âmago do trabalho, que propõe desenvolver uma estratégia de controle baseada na estimação simultânea em tempo real do calor de reação ( $Q_R$ ) e do produto entre o coeficiente de transferência de calor e a área de troca térmica ( $UA$ ) utilizando o Filtro de Kalman Estendido. Equações simplificadas do balanço de energia serão utilizadas nas estruturas do FKE e do controlador *feedforward*, que atuará como controlador mestre em uma malha em cascata.

O desafio proposto no trabalho de Chylla e Haase (1993) tem por objetivo estimular a elaboração de um sistema de controle para um reator multipropósito, onde não se incluam nenhum tipo de modelo cinético, propriedades físicas de reagentes e produtos, nem coeficientes de transferência de calor. Embora o trabalho desenvolvido nessa dissertação não tenha pretensão, inicialmente, de resolver o problema proposto pelos autores, as restrições impostas são exatamente o escopo desse trabalho e, portanto, se os resultados encontrados nesse trabalho forem satisfatórios com as estratégias desenvolvidas, resolver-se-á o problema proposto por Chylla e Haase (1993) por consequência.

##### **4.5.1 Desempenho do controlador de temperatura para os produtos A e B**

Como um dos objetivos desse trabalho é que o sistema de controle seja aplicável a processos multipropósitos, será feita a avaliação de como se comportará o controle de temperatura através da simulação de polimerização dos produtos A e B com a implementação da estratégia de controle baseada na estimação de estados em tempo real.

O controlador *feedforward*, conforme descrito na Seção 3.3, utiliza as estimativas de  $Q_R$  e  $UA$  fornecidas pelo FKE e as medidas de temperaturas da jaqueta ( $T_J$ ) e da reação ( $T_R$ ) nos modelos simplificados do balanço de energia para determinar o novo *setpoint* ( $T_{Jin}$ ) para o controlador escravo (PI) em uma malha em cascata. Nesse tópico, o modelo do balanço de energia da jaqueta utilizado pelo controlador faz uso da equação desenvolvida considerando  $T_J$ . A estratégia de controle assim desenvolvida foi codificada como “FFTJ”.

O processo estocástico que foi utilizado na estrutura do filtro de Kalman teve como estratégia a técnica do passo aleatório (*random walk*). Os modelos utilizados no FKE e no controlador desconsideram várias informações específicas do processo, tais como o tipo de produto e informações sobre o equipamento, tornando a estratégia generalista e robusta, uma vez que poderia ser aplicada a diversos processos apresentando bom desempenho, mesmo diante de cenários adversos e diversos. Os dados utilizados para a simulação encontram-se na tabela Tabela 4.4:

Tabela 4.4 – Parâmetros para simulação com os produtos A e B para FFTJ.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-VE-FFTJ-80	PB-B1-VE-FFTJ-80
Produto	A	B
Clima	Verão	Verão
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$U_{A(inicial)}$	80	80
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	n° 1	n° 1
$K_{P(escravo)}$	7	7
$\tau_{I(escravo)}$	11	11
$W_{(aquecimento)}$	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

Os parâmetros do controlador escravo foram reajustados para esse novo cenário e, portanto, são diferentes do ajuste para o caso base. Este procedimento foi necessário porque o controlador escravo precisou sintonizado considerando a nova dinâmica de geração de *setpoints* através dos modelos desenvolvidos. Os parâmetros do filtro não foram alterados nem para a fase de aquecimento e nem para a fase de reação. Isso mostra uma vantagem dessa abordagem, pois representa um controlador a menos a ser ajustado quando comparado com a estrutura de controle original que utiliza dois controladores clássicos do tipo PI.

A codificação das simulações segue os mesmos critérios apresentados anteriormente, acrescenta-se apenas o TJ ao lado do FF para indicar qual o modelo que a estratégia de controle está utilizando.

#### 4.5.1.1 Resultados para o produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_r$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $UA$  de 80 BTU / min °F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTJ-80”.

A Figura 4.39 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.40, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até 168,4 min.

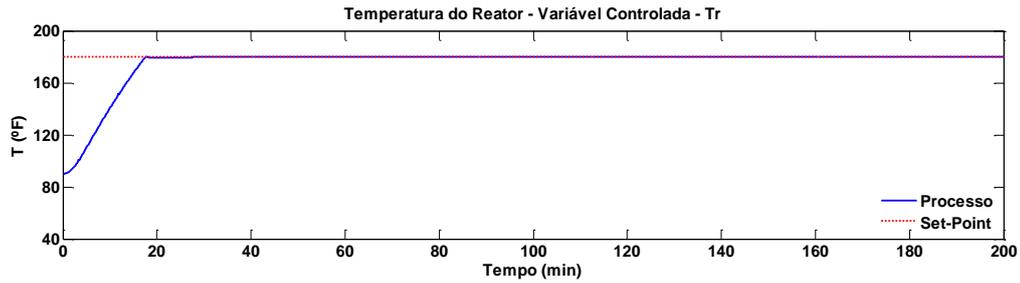


Figura 4.39: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-80).

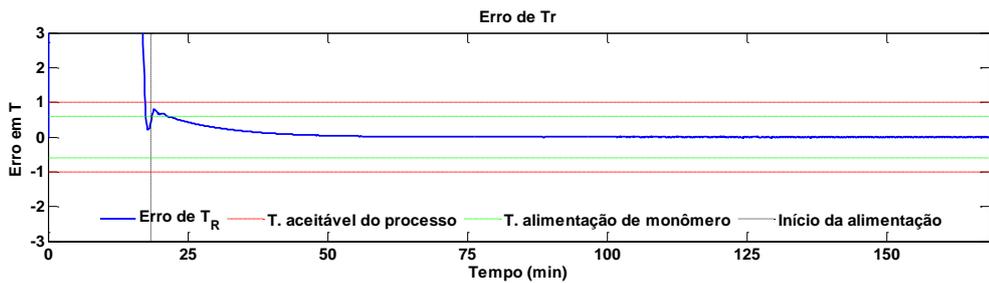


Figura 4.40: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-VE-FFTJ-80).

A Figura 4.40 mostra o erro da temperatura de reação em relação ao *setpoint*. Observa-se que a alimentação do monômero inicia-se próximo aos 18 minutos, quando o algoritmo libera a adição em um tempo menor do que o obtido com o controlador PI. Esse resultado mostra um bom desempenho do controlador, pois a temperatura não oscila com o fim da adição do monômero (88 min.) e converge para o valor do *setpoint*, o que ilustra a contribuição do algoritmo de alimentação automática de monômero desenvolvido para esta estratégia de controle.

O comportamento dinâmico das temperaturas de entrada e saída da jaqueta foi bem discutido anteriormente, dessa forma, ressaltar-se-á nesse tópico o que é específico dessa simulação. Através da Figura 4.41 nota-se que as temperaturas de entrada e saída da jaqueta apresentam um comportamento ligeiramente oscilatório, mas que se atenua rapidamente. A oscilação na temperatura de entrada ocorre em razão da dinâmica da abertura da válvula, conforme é mostrado na Figura 4.42. Já o comportamento da temperatura de saída é apenas uma reação ao comportamento da variável de entrada.

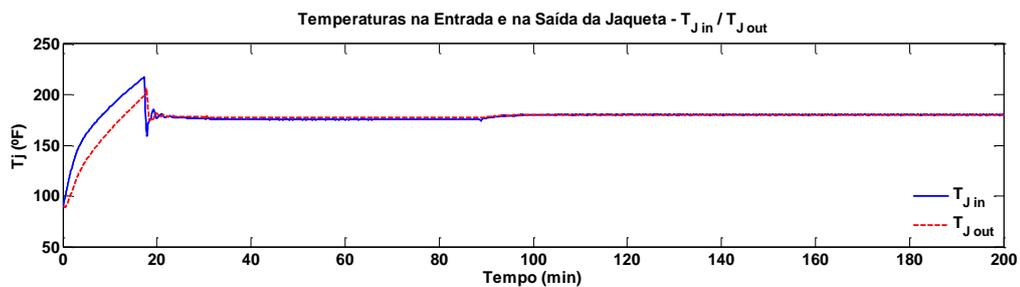


Figura 4.41: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTJ-80).

Conforme ilustrado na Figura 4.42, no início da batelada a válvula de controle apresentou um comportamento dinâmico bastante distinto do que foi visto no estudo do caso base. É preciso destacar que essa estrutura é baseada em um modelo do processo e seu comportamento reflete o que o próprio modelo determina como *setpoint*. Além disso, é importante lembrar que os modelos utilizados nesta proposta são bastante simplificados, tanto para a estimação quanto para o controlador, o que significa que não carregam informações características deste processo como os tempos mortos, além de considerarem constantes alguns parâmetros que na verdade variam. Apesar disso, os gráficos anteriores de temperatura mostram que o comportamento da válvula proporcionou um controle mais efetivo da temperatura de reação e que após o período inicial a válvula se estabilizou próximo de 50%, mesmo patamar em que a válvula do controlador PI trabalhou, mostrando coerência entre os resultados.

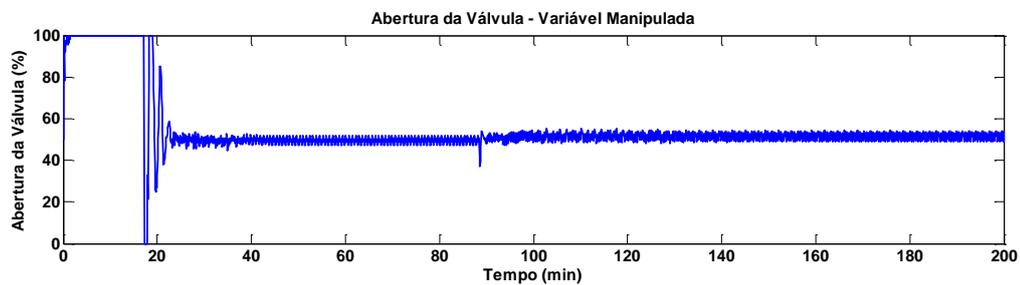


Figura 4.42: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTJ-80).

O comportamento dinâmico do calor de reação foi bem discutido anteriormente, não havendo grandes observações a serem feitas nesse momento. Contudo, conforme ilustrado na Figura 4.43, destaca-se a boa estimação desta variável em relação a seu valor real apesar do pequeno atraso da estimação no início da adição de monômero. No entanto, os resultados globais mostram que não houve influência significativa no desempenho do controle de temperatura da reação.

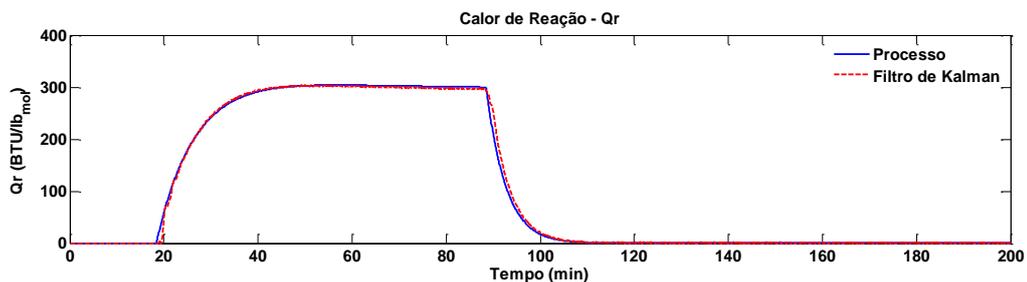


Figura 4.43: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80).

Analogamente, o comportamento dinâmico da variável *UA* foi exaustivamente discutido anteriormente, portanto, não há grandes observações a serem feitas nesse momento. Porém, a Figura 4.44 permite visualizar a boa estimação desta variável em relação a seu valor real, assim como uma pequena queda no início da adição de monômero. Isso se explica pelo fato da adição de monômero ter sido antecipada em relação à estratégia do caso base, mas como pode ser observado, este fato inclusive contribuiu para a convergência das estimções de *UA*. Analisando

os resultados globais, esse comportamento não gerou problemas para o desempenho do controlador de temperatura da reação.

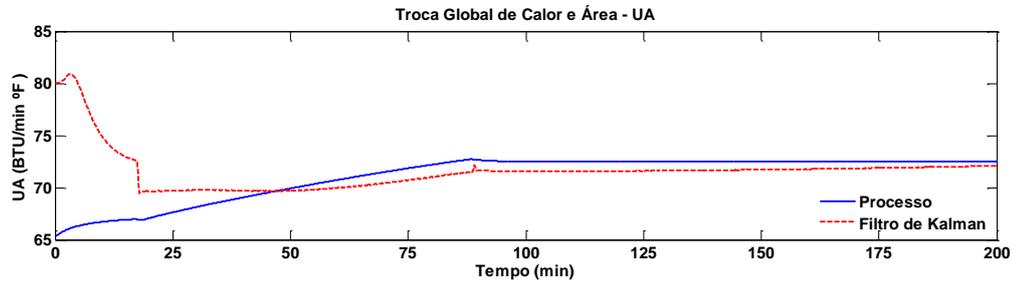


Figura 4.44: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-80).

A conversão do polímero é uma função do calor de reação, portanto, é esperado que com a boa estimativa de  $Q_R$ , a conversão apresente um comportamento igualmente adequado. Nota-se, pela Figura 4.45, que a conversão teve boa estimativa, o que proporcionou o monitoramento do processo em termos de avanço da reação em tempo real. A possibilidade de monitorar o processo é outra contribuição que essa estratégia proporcionou no desenvolvimento desse trabalho. Demais características do comportamento da conversão podem ser vistas nas sessões anteriores, onde sua dinâmica foi devidamente analisada.

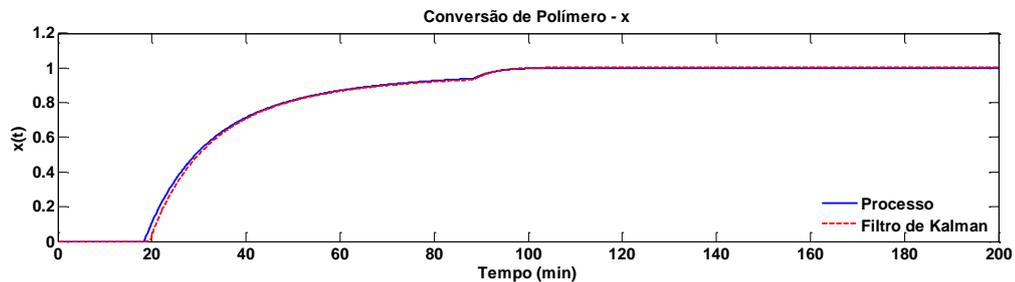


Figura 4.45: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-80).

A Figura 4.46 e a Figura 4.47 mostram os erros relativo e absoluto da estimativa  $Q_R$  e  $UA$ , respectivamente, e apresentam rigorosamente os mesmos comportamentos analisados anteriormente. Destaca-se apenas o fato do erro absoluto de  $Q_R$  ter ficado ligeiramente maior nos instantes de início e término da alimentação de monômero (18 e 88 minutos, respectivamente) comparado com os resultados do caso base, com estimativa e a queda mais acentuada do valor de  $UA$ .

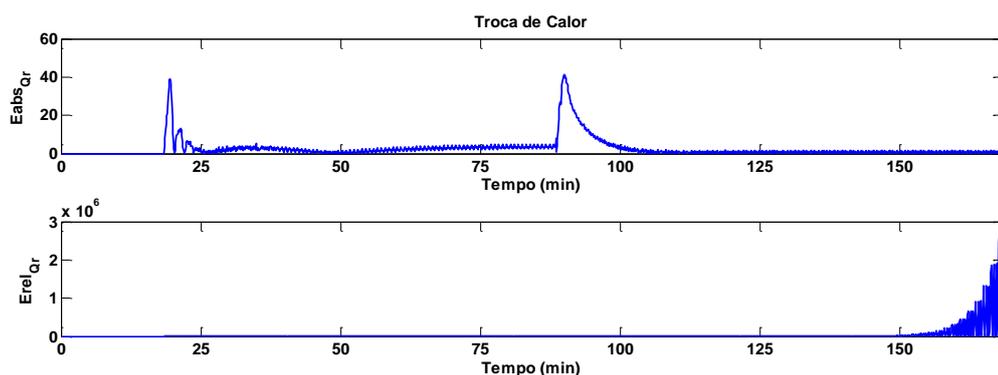


Figura 4.46: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80).

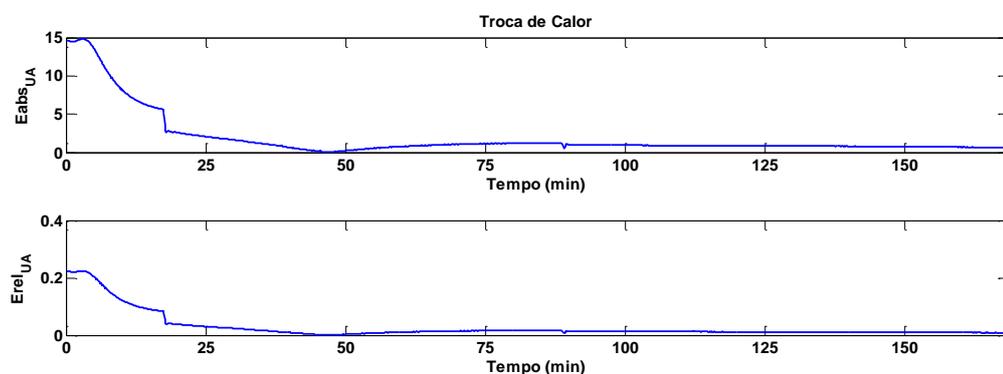


Figura 4.47: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTJ-80).

#### 4.5.1.2 Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_r$ . A estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso e o valor inicial para  $UA$  foi de 80 BTU / min $^{\circ}$ F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-VE-FFTJ-80”.

A Figura 4.48 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.49, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$   $^{\circ}$ F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint*.

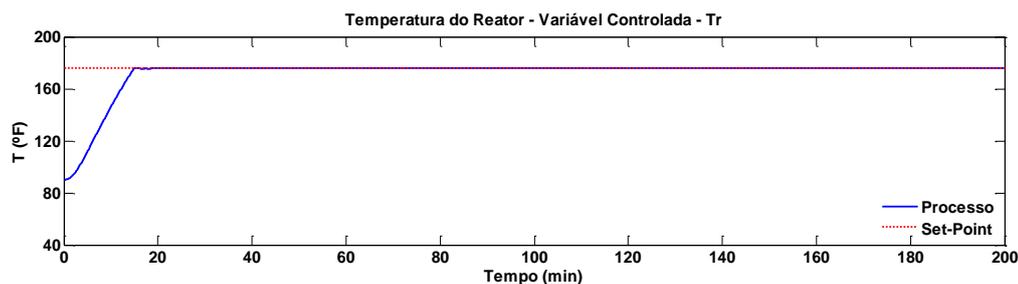


Figura 4.48: Temperatura do reator (PB-B1-VE-FFTJ-80).

A Figura 4.49 mostra o erro da temperatura de reação em relação ao *setpoint*. Observa-se que a alimentação do monômero inicia-se próximo aos 17 quando se utiliza o algoritmo para alimentação automática e que este tempo foi menor do que o obtido com o controlador PI original. Diferentemente da simulação anterior para o produto A, após a liberação do monômero, a temperatura se manteve ainda dentro da faixa de  $\pm 0,6$  °F, isso se explica pelo fato de a temperatura de *setpoint* ser menor, exigindo menos da atuação do controlador. Esse resultado mostra o bom desempenho do controlador, pois a temperatura não oscilou com o término da adição de monômero (78 min.) e tampouco com o segundo ciclo de alimentação (com início em 108 min. e término em 148 min.). A temperatura convergiu para o valor do *setpoint* até 235,8 min e o resultado ilustrou a contribuição do algoritmo de alimentação automática desenvolvido na estratégia de controle.

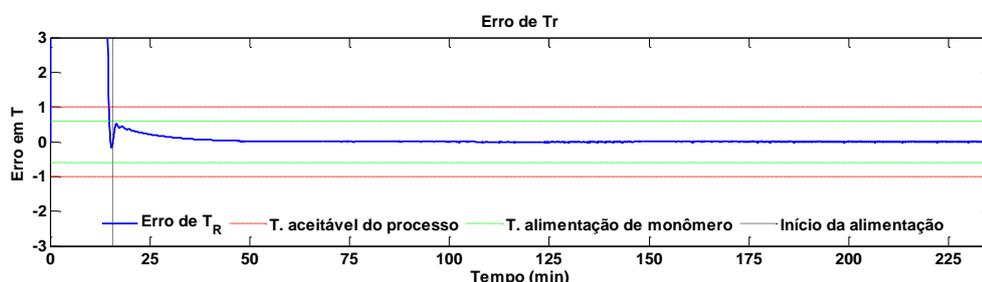


Figura 4.49: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-VE-FFTJ-80).

Com auxílio da Figura 4.50, é possível perceber que as temperaturas de entrada e saída da jaqueta, assim como na simulação do produto A, apresentam um comportamento ligeiramente oscilatório, demonstrando que esse comportamento não está relacionado a características dos produtos. A oscilação na temperatura de entrada ocorre em razão da dinâmica da abertura da válvula e a temperatura de saída é apenas uma reação ao comportamento da variável de entrada. Observa-se que as oscilações se atenuam rapidamente.

O comportamento da válvula de controle, ilustrada na Figura 4.51, apresentou no início da batelada uma dinâmica bastante distinta da observada no estudo do caso base, mas que pode ser explicada de modo análogo ao do produto A.

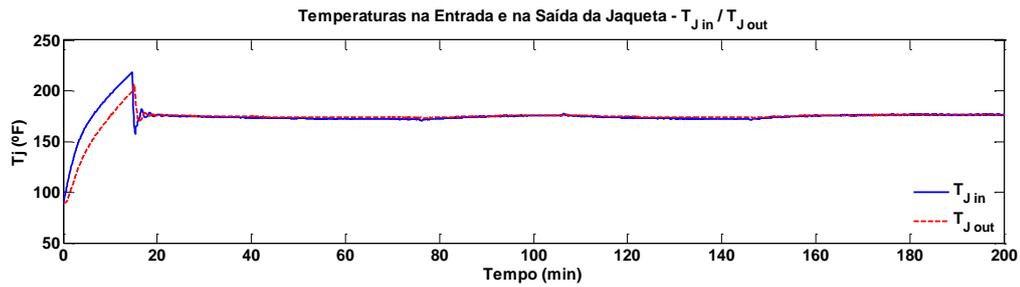


Figura 4.50: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-VE-FFTJ-80).

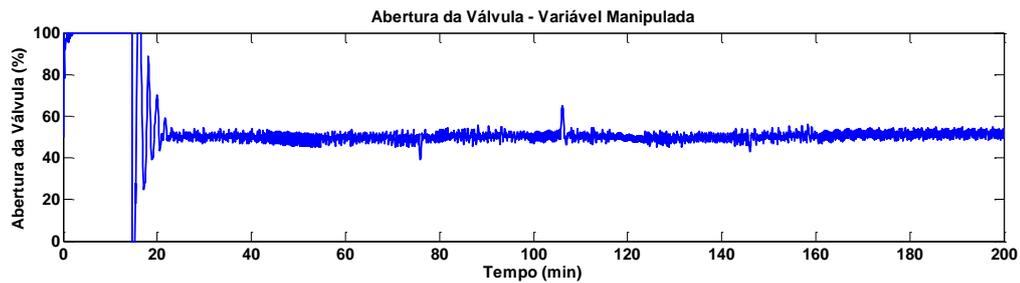


Figura 4.51: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-VE-FFTJ-80).

Similarmente, a dinâmica do calor de reação foi bem explorada anteriormente, não havendo observações adicionais a serem feitas nesse momento. Destaca-se, mais uma vez, a boa estimação desta variável (Figura 4.52), mesmo frente ao comportamento oscilatório do perfil do calor de reação decorrente da estratégia de alimentação de monômero, que representa uma dificuldade maior para a estimação. Há também um pequeno atraso da estimação no início da adição de monômero, mas que os resultados globais mostraram não ter influenciado significativamente o desempenho do controle da temperatura da reação.

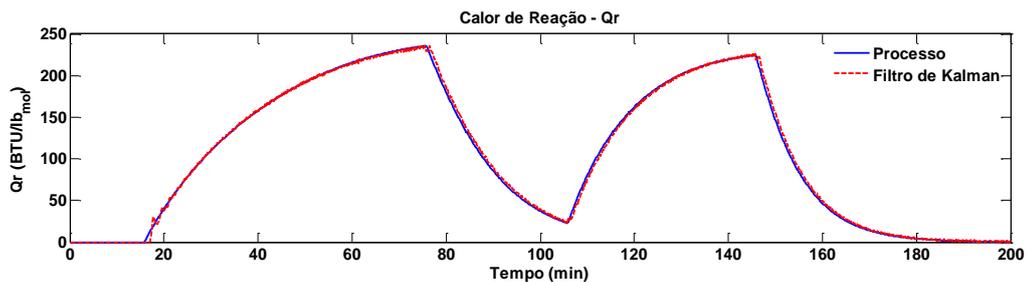


Figura 4.52: Evolução do calor de reação (PB-B1-VE-FFTJ-80).

A boa estimação da variável  $UA$  pode ser visualizada através da Figura 4.53, mostrando também uma pequena queda no início da adição de monômero. Isso se explica pelo fato da adição de monômero ter sido antecipada em relação à estratégia do caso base, mas como pode ser observado, isso contribuiu para a convergência de  $UA$ . Analisando os resultados globais, esse comportamento também não ocasionou problemas para o controle da temperatura da reação.

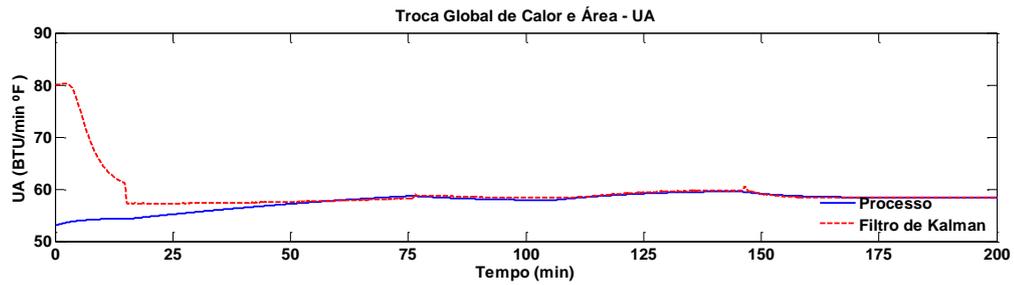


Figura 4.53: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-VE-FFTJ-80).

A conversão do polímero apresentou um comportamento igualmente adequado, assim como observado para o produto A, apresentado na seção anterior. Nota-se, pela Figura 4.54, a estimação bastante precisa desta variável.

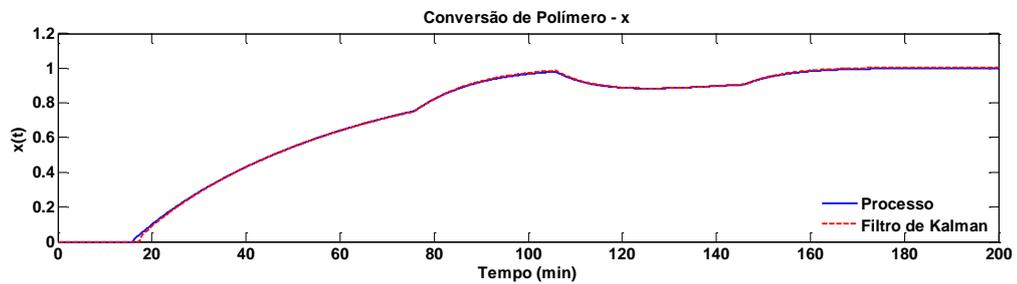


Figura 4.54: Conversão do polímero (PB-B1-VE-FFTJ-80).

A Figura 4.55 e a Figura 4.56 mostram os erros relativo e absoluto da estimação  $Q_R$  e  $UA$ , respectivamente, e apresentam rigorosamente os mesmos comportamentos que os analisados anteriormente e a mesma ordem de grandeza de modo geral, mesmo nos ciclos de adição de monômero.

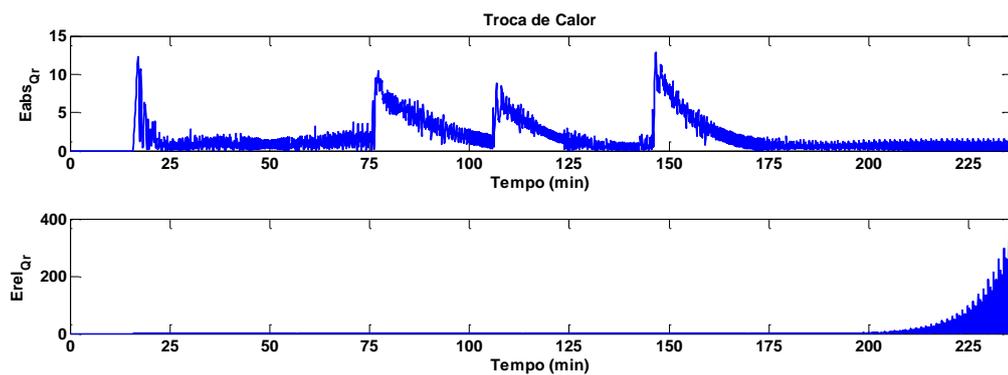


Figura 4.55: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-VE-FFTJ-80).

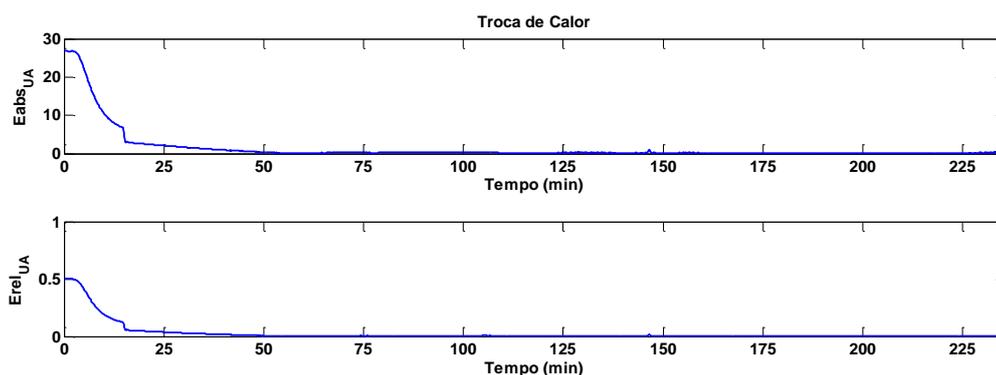


Figura 4.56: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-VE-FFTJ-80).

#### 4.5.1.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$

Os resultados gráficos ilustram de modo claro que a estratégia de estimação e controle proposta atende perfeitamente aos objetivos traçados para o desenvolvimento desse trabalho. Se forem comparados com os resultados do controle em cascata original (usando dois controladores PI), que já havia mostrado um bom desempenho, pode-se verificar que houve uma melhora significativa no controle da temperatura de reação.

As mesmas observações sobre  $Q_R$ ,  $UA$ ,  $T_J$ ,  $T_{Jin}$  e conversão que foram feitas nos resultados da simulação de estimação são válidas nesse caso. As curvas apresentam o mesmo perfil e ordem de grandeza quando comparados com os resultados obtidos por Almeida (1997) e Santos (2005) e com os próprios resultados da simulação, ou seja, são bastante satisfatórios. É possível verificar que a estimação dos parâmetros desejados,  $Q_R$  e  $UA$ , foi bem executada e que a estimação da conversão permite monitorar o avanço da reação de polimerização.

Helbig *et al.* (1996) obtiveram bons resultados para os produtos A e B com sua estrutura MPC (*Model Predictive Control*), porém, para uma constante de tempo 25% maior, situação prevista no artigo original, verificaram-se valores de temperatura fora da faixa. Uma avaliação mais específica sobre mudança nos parâmetros de tempos mortos será feita mais adiante. Vale destacar que os autores utilizaram modelos com diversos parâmetros considerados conhecidos, diferente da abordagem adotada nesta dissertação, que utiliza modelos simplificados e sem qualquer informação sobre o processo de polimerização na estrutura do FKE.

Através de um controle adaptativo não linear, MacGregor e Clarke-Pringle (1997) obtiveram bons resultados para as simulações dos produtos A e B, analisando a primeira batelada. Sua estrutura de controle conseguiu manter a temperatura da reação controlada dentro da faixa de tolerância aceitável (1 °F) em ambos os casos citados. No entanto, analisando a modelagem utilizada no trabalho, embora haja algumas simplificações no balanço de energia no reator, houve a introdução de um parâmetro denominado “fator de auto-aceleração”, que nada mais é do que um termo que leva em consideração a variação da viscosidade no meio alterando a taxa de reação em razão do efeito gel. Vale ressaltar que essa estratégia diverge das pretensões desse trabalho, uma vez que o proposto é eliminar todas as características do

processo com os modelos simplificados. Portanto, embora a modelagem proposta por esse trabalho não explicita tais peculiaridades, está intrínseco que a estratégia deverá ser capaz de absorver qualquer mudança e manter a variável controlada sob a faixa aceitável para o processo.

O trabalho desenvolvido por Graichen *et al.* (2006) obtém resultados muito positivos para o controle de temperatura da reação para os produtos A e B, mesmo com variações de 20% a 25% nos tempos mortos (esse assunto será tratado mais adiante), conforme previsto por Chylla e Haase (1993). Sob o aspecto da modelagem, o artigo adota uma abordagem diferente, pois como os parâmetros desejados para estimação,  $Q_R$  e  $U$ , só aparecem nas equações de balanço de energia do reator e da saída da jaqueta, os autores negligenciaram o balanço de energia na entrada da jaqueta e com isso eliminaram diversos parâmetros específicos como ganhos de processo e constantes de tempo. Porém, além do modelo para o FKE usar cinco equações diferenciais, o modelo simplificado desenvolvido por esses autores não eliminou a necessidade de se conhecer outros parâmetros específicos do processo, tais como tempo morto, área de troca térmica, entalpia de reação, etc. Nesse aspecto, insiste-se mais uma vez na estratégia de se desenvolver modelos mais simples capazes de manter a temperatura controlada.

Beyer *et al.* (2008) em seu trabalho de controle adaptativo de linearização exata também obtiveram resultados muito bons, atendendo a faixa de tolerância aceitável para a temperatura utilizando Filtro de Kalman com Sigma-Point. O artigo também trabalha na busca de modelos simplificados e consegue, por exemplo, eliminar os tempos mortos de seus modelos. No entanto, diversos parâmetros específicos ainda são necessários como, por exemplo, constantes de tempo e área de reação. Uma vantagem encontrada em seu trabalho, comparada com os demais é que o uso da técnica de “Sigma-Point” torna desnecessário o desenvolvimento analítico do Jacobiano. Quando o modelo do processo é composto por muitas equações, essa é uma vantagem realmente primorosa, porém o modelo simplificado desenvolvido nesta dissertação utiliza apenas duas equações diferenciais, que são utilizadas na estratégia do FKE. Portanto, calcular o Jacobiano analiticamente não é um problema.

O trabalho desenvolvido por Vasanthi *et al.* (2011) também alcança resultados excelentes no que se refere à faixa tolerável de temperatura para o processo. Porém, diferente da proposta dessa dissertação, os autores utilizaram a modelagem integral do reator. Como sua estratégia é utilizar o Filtro de Kalman “Unscented” (U FK), não é necessário linearizar os modelos nem calcular o Jacobiano. Nesse ponto, já foi mencionado que para o modelo simplificado desenvolvido nesta dissertação, composto por apenas duas equações diferenciais, o processo de linearização e cálculo do Jacobiano não é problemático.

#### 4.5.2 Desempenho do controlador frente a mudanças na estimativa inicial de $UA$

Um dos problemas levantados já na etapa de simulação através da estimação com filtro de Kalman é que a atuação do estimador e, conseqüentemente, do controlador deveria ser independente das estimativas iniciais atribuídas a determinadas variáveis, especificamente  $UA$ , uma vez que a determinação do valor inicial de  $Q_R$  é elementar.

Nesse tópico será mostrado como o controlador se comporta diante da mudança do valor inicial de  $UA$ , uma vez que na Seção 4.4 foi visto que a estimação não sofrera alteração com a mudança dessa variável. Os parâmetros utilizados nessa simulação encontram-se na Tabela 4.5:

Tabela 4.5 – Parâmetros para simulação com mudança do  $UA$  inicial para FFTJ.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-VE-FFTJ-30	PB-B1-VE-FFTJ-30
Produto	A	B
Clima	Verão	Verão
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	30	30
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	n° 1	n° 1
$K_{P(escravo)}$	7	7
$\tau_{I(escravo)}$	11	11
$W_{(aquecimento)}$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

#### 4.5.2.1 Resultados para o produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada 1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ . A estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso e o valor inicial de  $UA$  é 30 BTU / min °F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTJ-30”. O comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1 é ilustrado na Figura 4.57.

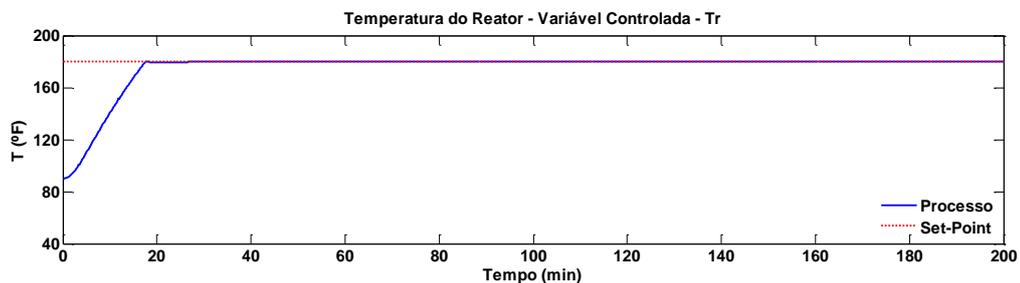


Figura 4.57: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-30).

Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.58, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até 168,4 min. Observa-se que a alimentação do monômero inicia-se próximo aos 18 minutos, que é um tempo menor do que o obtido com o controlador PI e ilustra a contribuição do algoritmo de

alimentação automático desenvolvido nesta estratégia de controle. Esse resultado mostra o bom desempenho do controlador, pois a temperatura não oscila após o término da adição do monômero (88 min.) e converge para o valor do *setpoint*.

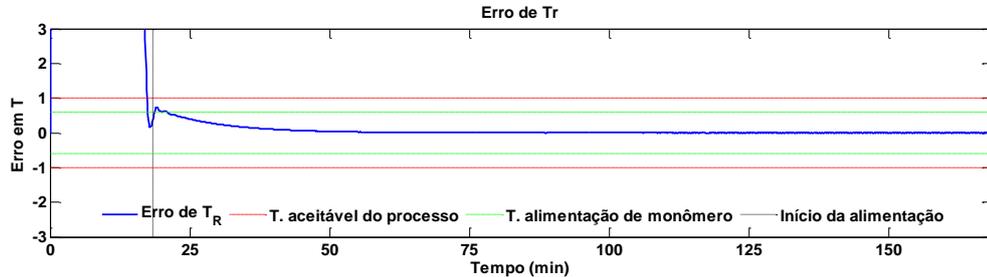


Figura 4.58: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-VE-FFTJ-30).

A dinâmica das temperaturas de entrada e saída da jaqueta foi bem discutida anteriormente, dessa forma, ressaltar-se-á nesse tópico o que é específico dessa simulação. Nota-se que as temperaturas de entrada e saída da jaqueta (Figura 4.59) apresentam um comportamento ligeiramente oscilatório, mas que se atenua rapidamente. A oscilação na temperatura de entrada ocorre em razão da dinâmica da abertura da válvula, conforme é mostrado na Figura 4.60. Já o comportamento da temperatura de saída é apenas uma reação ao comportamento da variável de entrada.

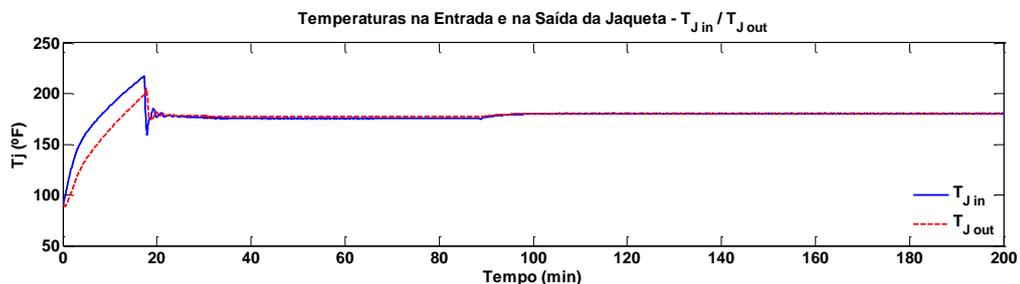


Figura 4.59: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTJ-30).

A abertura da válvula, ilustrada na Figura 4.60, apresenta no início uma dinâmica bastante distinta da que foi observada no estudo de caso base. É preciso destacar que essa estrutura é baseada em um modelo do processo e seu comportamento reflete o que o próprio modelo determina como *setpoint* e é importante lembrar que os modelos propostos, tanto para a estimação, quanto para o controlador são simplificados, o que significa que não carregam consigo informações características como tempos mortos que são inerentes do processo e consideram constantes alguns parâmetros. Apesar disso, as curvas de temperatura do processo mostram que esse comportamento da válvula propiciou um controle mais efetivo e que após o período inicial a válvula se estabilizou próximo de 50%, mesmo patamar em que a válvula do controlador PI original, mostrando coerência entre os resultados.

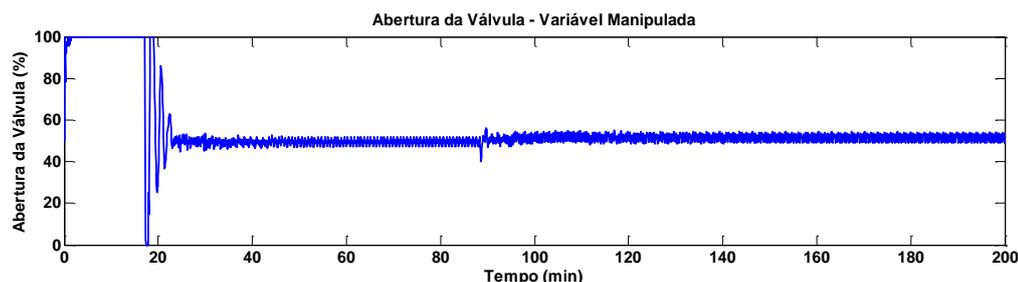


Figura 4.60: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTJ-30).

A dinâmica do calor de reação foi bem desenvolvida anteriormente, não havendo grandes observações a serem feitas nesse momento. Contudo, destaca-se mais uma vez a boa estimativa dessa variável, conforme ilustrado na Figura 4.61 e corroborado pelo efetivo controle de temperatura da reação.

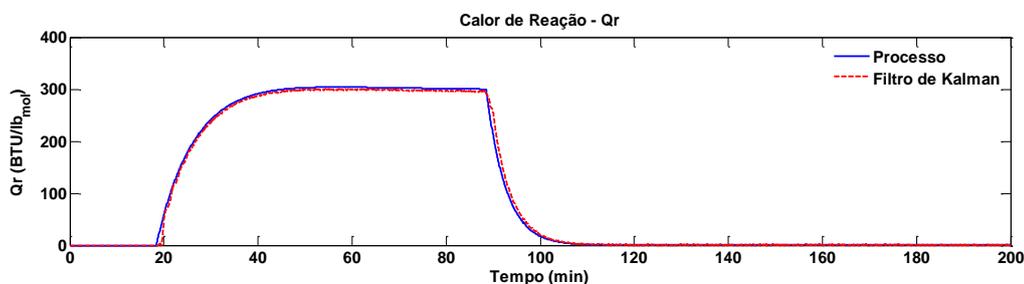


Figura 4.61: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-30).

Observações análogas podem ser feitas a respeito da estimativa da variável  $UA$ , cuja estimativa é apresentada na Figura 4.62.

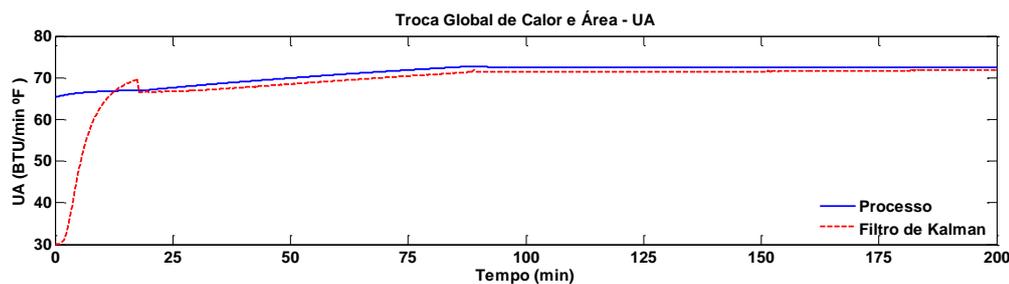


Figura 4.62: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-30).

A conversão do polímero é uma função do calor de reação, portanto, é esperado que com uma boa estimativa de  $Q_R$ , a conversão apresente um comportamento igualmente adequado. Este fato foi novamente confirmado neste caso e o resultado apresentado na Figura 4.63. A possibilidade de monitorar o processo é outra contribuição que essa estratégia proporciona no desenvolvimento desse trabalho. Demais características do comportamento da conversão foram descritas nas sessões anteriores.

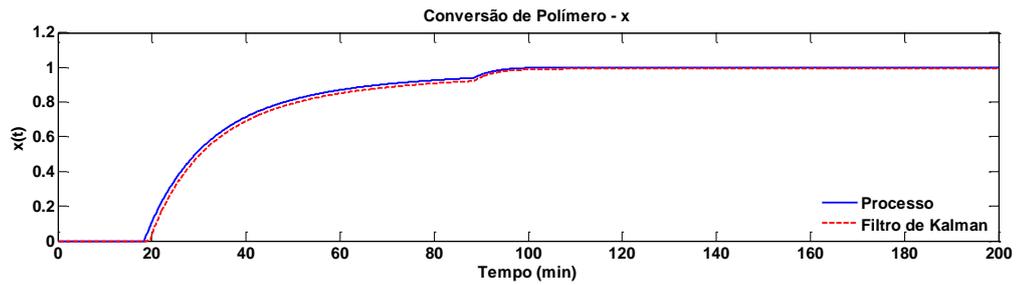


Figura 4.63: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-30).

A Figura 4.64 apresenta os erros relativo e absoluto da estimação  $Q_R$  e a Figura 4.65 mostra a mesma informação referente a estimação de  $UA$ . Pode-se verificar que esses resultados apresentam rigorosamente os mesmos comportamentos apresentados e analisados anteriormente para essas variáveis. Destaca-se apenas o fato de o erro absoluto de  $Q_R$  ter ficado ligeiramente maior nos instantes de início e término da alimentação de monômero (18 min. e 88 min.) comparado com os resultados do caso base com estimação e a queda mais acentuada do valor de  $UA$ .

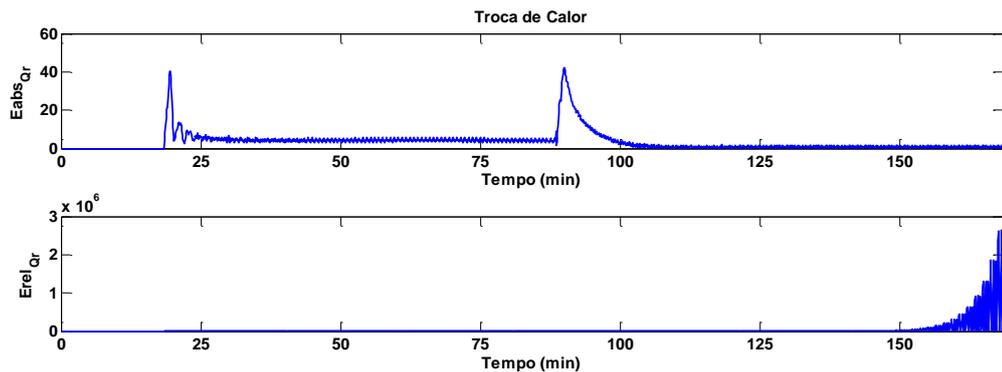


Figura 4.64: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-30).

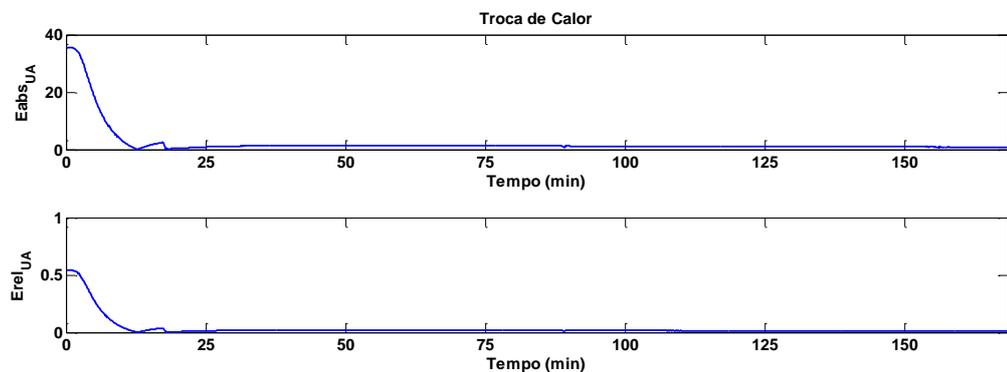


Figura 4.65: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTJ-30).

#### 4.5.2.2 Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada 1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_r$ . A estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso e valor inicial de UA foi de 30 BTU / min °F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-VE-FFTJ-30”.

A Figura 4.66 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.67, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até 235,8 min.

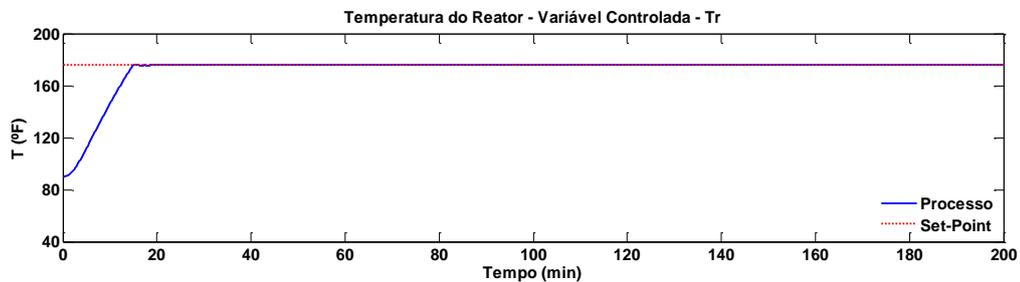


Figura 4.66: Temperatura do reator (PB-B1-VE-FFTJ-30).

Esse resultado mostra um bom desempenho do controlador, pois a temperatura não oscila com o término da alimentação do monômero (78 min.) nem durante o segundo ciclo de alimentação (com início em 108 min. e término em 148 min.).

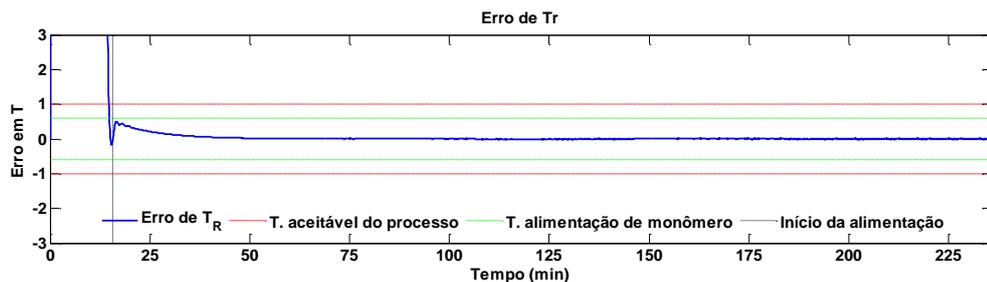


Figura 4.67: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-VE-FFTJ-30).

O comportamento dinâmico das temperaturas de entrada e saída da jaqueta foi similar ao já observado até o momento e está ilustrado na Figura 4.68. As ações de controle, representadas na Figura 4.69, apresentam uma dinâmica um pouco distinta no início, quando comparada ao caso base. É preciso destacar que essa estrutura é baseada em um modelo do processo e seu comportamento reflete o que o próprio modelo determina como *setpoint* e é importante lembrar que os modelos propostos, tanto para a estimação, quanto para o controlador são simplificados. Apesar disso, o comportamento geral da válvula foi coerente com esperado.

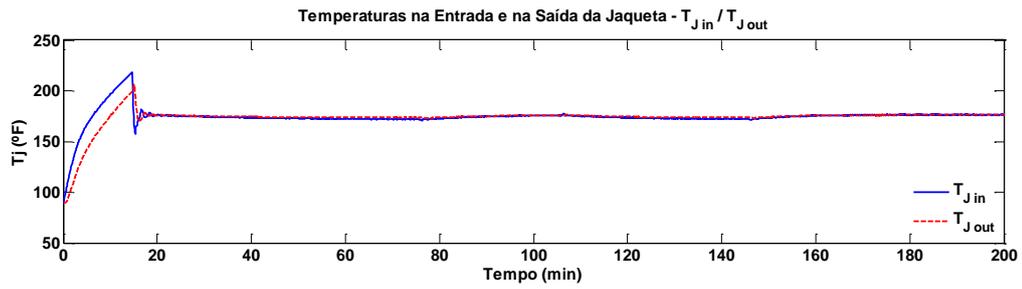


Figura 4.68: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-VE-FFTJ-30).

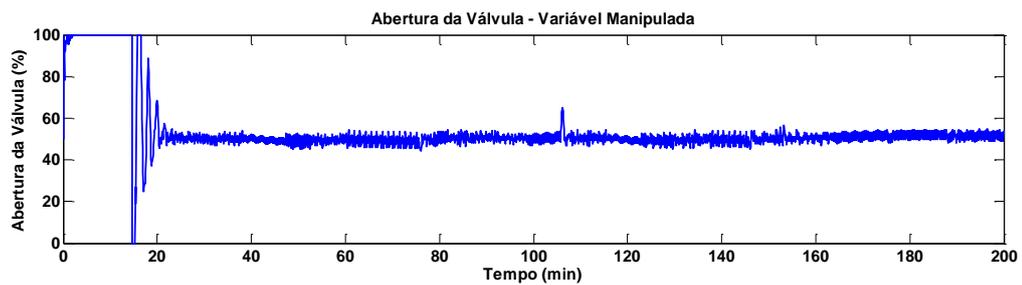


Figura 4.69: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-VE-FFTJ-30).

De modo análogo, a estimação do calor de reação foi similar e bastante adequada, conforme ilustrado na Figura 4.70.

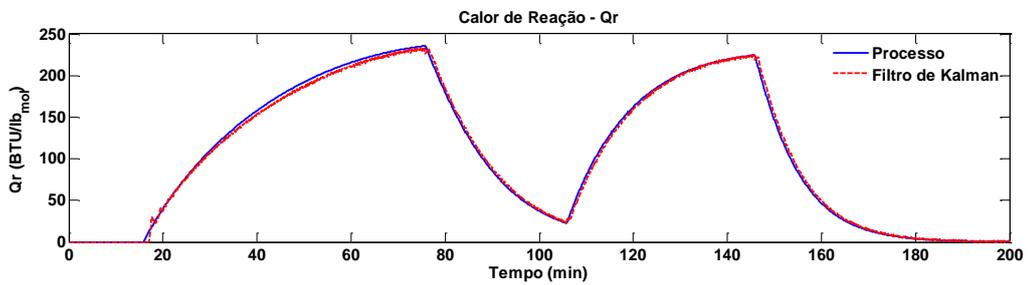


Figura 4.70: Evolução do calor de reação (PB-B1-VE-FFTJ-30).

O resultado apresentado na Figura 4.71 confirma que o FKE é capaz de estimar apropriadamente a variável  $UA$ , independentemente do valor atribuído para a estimativa inicial.

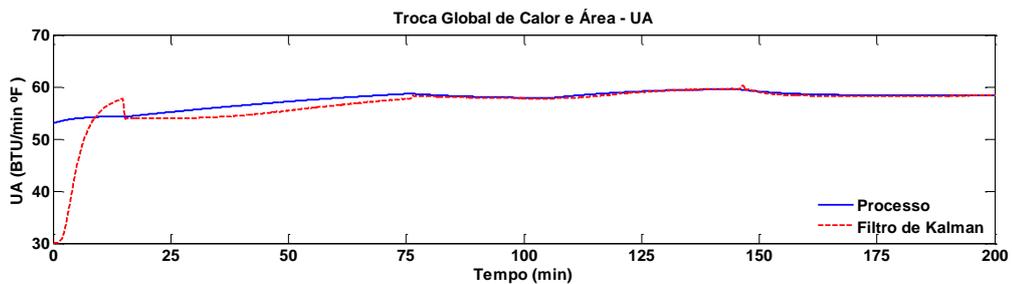


Figura 4.71: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-VE-FFTJ-30).

A conversão do polímero é uma função do calor de reação, portanto, já era esperado que com a boa estimativa de  $Q_R$ , a estimativa da conversão apresentasse bons resultados, o que pode ser confirmado pela Figura 4.72.

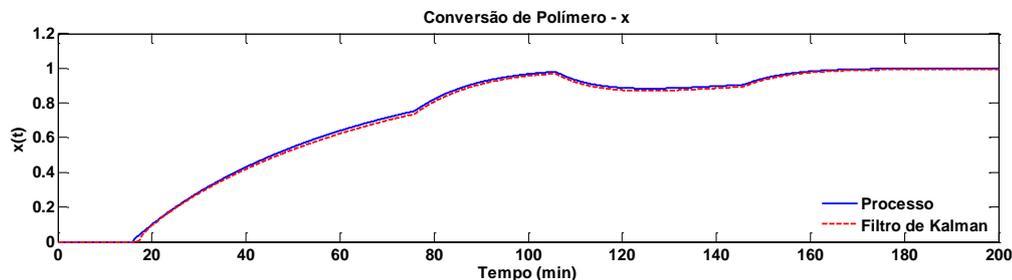


Figura 4.72: Conversão do polímero (PB-B1-VE-FFTJ-30).

A Figura 4.73 e a Figura 4.74 mostram os erros relativo e absoluto da estimativa  $Q_R$  e  $UA$ , respectivamente, e apresentam rigorosamente os mesmos comportamentos que os analisados anteriormente.

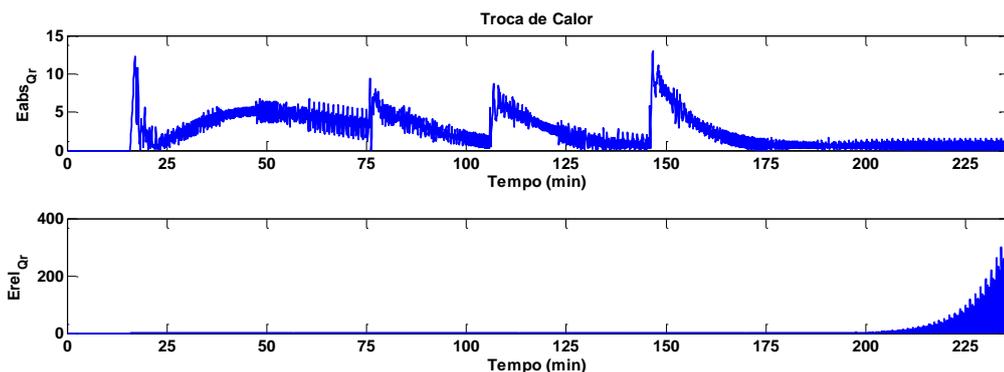


Figura 4.73: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-VE-FFTJ-30).

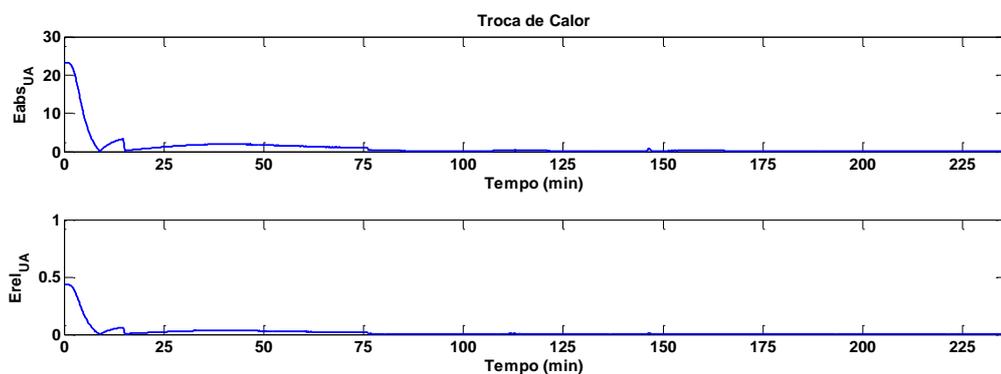


Figura 4.74: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PB-B1-VE-FFTJ-30).

#### 4.5.2.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_j$

Como esperado, a mudança da estimativa inicial de  $UA$  não resultou em um problema de estimação e controle do processo. Comparando os resultados encontrados a partir dos valores de 30 BTU / min °F e 80 BTU / min °F para o  $UA$  fica claro que a estratégia de controle não sofre influência dessa mudança. Isso é positivo e contribui com as pretensões do trabalho, uma vez que a estratégia de estimação e controle proposta não fica dependente da estimativa inicial.

Outros trabalhos não fizeram uma análise sobre esse aspecto, portanto não se pode realizar comparações objetivas em relação ao efeito da mudança da estimativa inicial de  $UA$  sobre o processo de estimação e a estratégia de controle. Porém, através da comparação dos resultados apresentados nesta dissertação pode-se concluir que a proposta obteve sucesso.

#### 4.5.3 Desempenho do controlador frente a mudanças no fator de incrustação

Outro aspecto relevante apontado no artigo original de Chylla e Haase (1993), é que o processo passa por sucessivas bateladas ininterruptas. Isso faz com que haja impregnação de material nas paredes do reator, o que influencia drasticamente o coeficiente global de transferência de calor ( $U$ ). Na medida em que as bateladas vão ocorrendo, mais material é depositado, dificultando a troca térmica entre a parede do reator e o meio reacional, fazendo com que o coeficiente de transferência global caia a cada batelada. Isso de fato é um problema, pois o controle de temperatura se dá exatamente pela troca térmica entre reator e jaqueta. Nesse ponto, decidiu-se verificar se a estratégia de controle continuará eficiente apesar do problema de incrustação. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na Tabela 4.6:

Tabela 4.6 – Parâmetros para simulação com mudança da incrustação para FFTJ.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B5-VE-FFTJ-30	PB-B5-VE-FFTJ-30
Produto	A	B
Clima	Verão	Verão
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	30	30
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	n° 5	n° 5
$K_{P(escravo)}$	7	7
$\tau_{(escravo)}$	11	11
$W_{(aquecimento)}$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

#### 4.5.3.1 Resultados para o produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada 5, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_r$ , estimação dos parâmetros inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de UA de 30 BTU / min °F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B5-VE-FFTJ-30”.

As figuras a seguir descrevem o resultado dessa simulação e atestam que a estratégia de estimação e controle proposta neste trabalho foi robusta o suficiente para lidar com o problema da incrustação apresentado por esse processo de polimerização. A partir da Figura 4.75 e até a Figura 4.83 pode-se verificar que o comportamento de todas variáveis foi similar aos apresentados nas seções anteriores, fato que corrobora a robustez do controlador FFTJ.

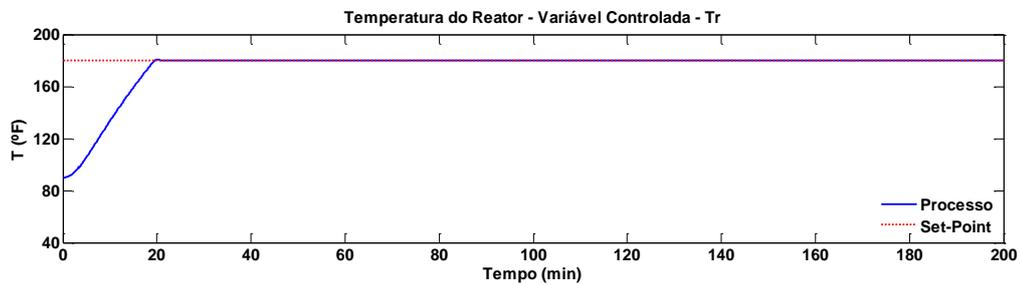


Figura 4.75: Temperatura do reator (PA-B5-VE-FFTJ-30).

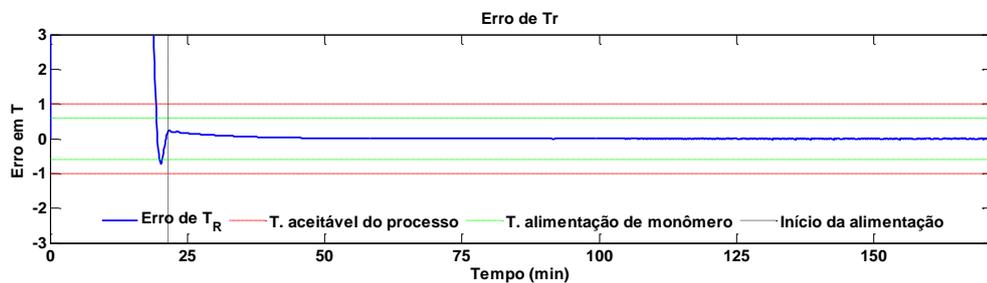


Figura 4.76: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B5-VE-FFTJ-30).

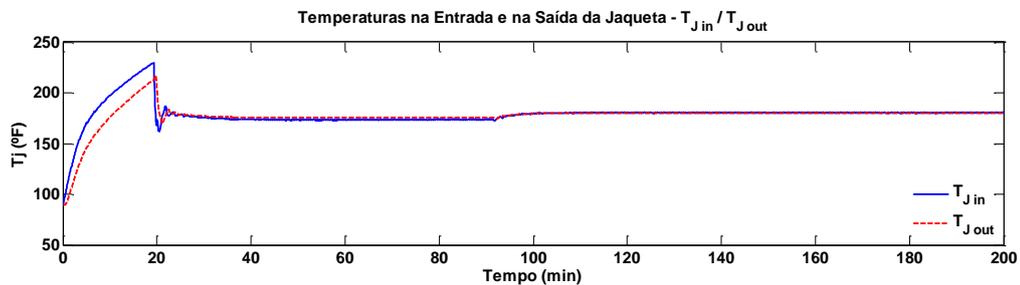


Figura 4.77: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B5-VE-FFTJ-30).

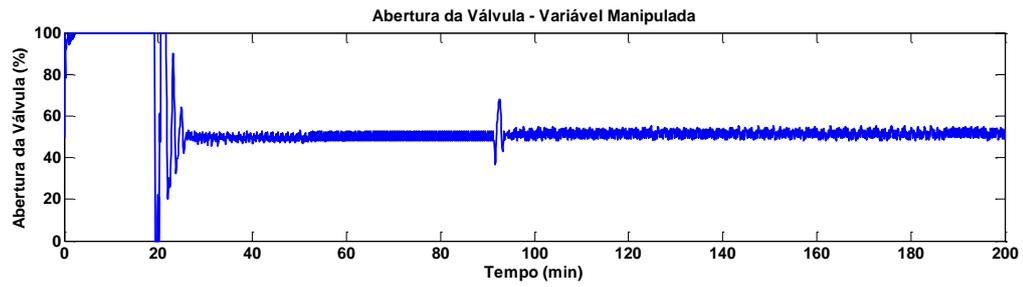


Figura 4.78: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B5-VE-FFTJ-30).

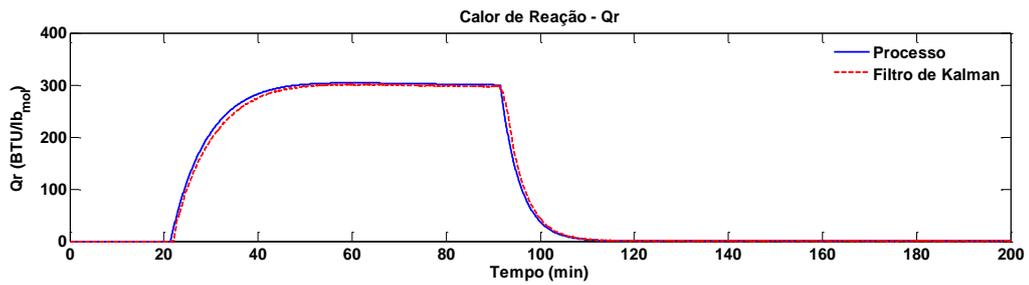


Figura 4.79: Evolução do calor de reação (PA-B5-VE-FFTJ-30).

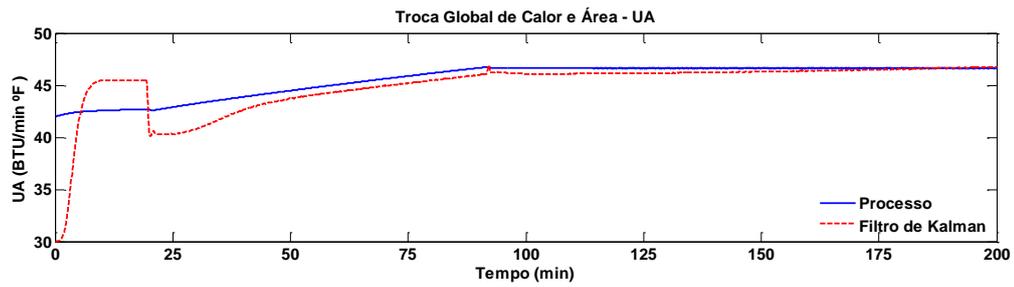


Figura 4.80: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B5-VE-FFTJ-30).

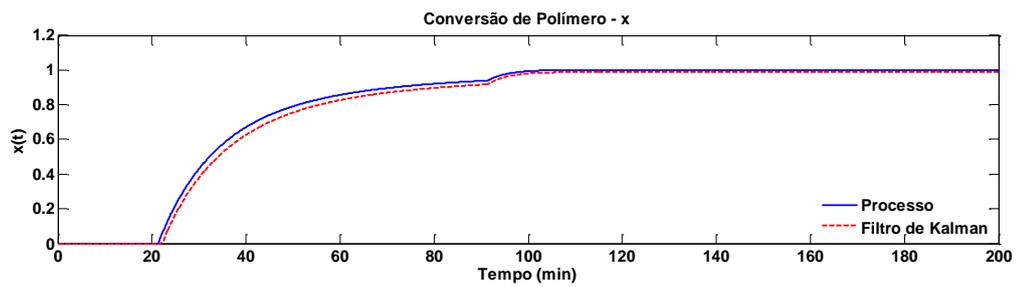


Figura 4.81: Conversão do polímero (PA-B5-VE-FFTJ-30).

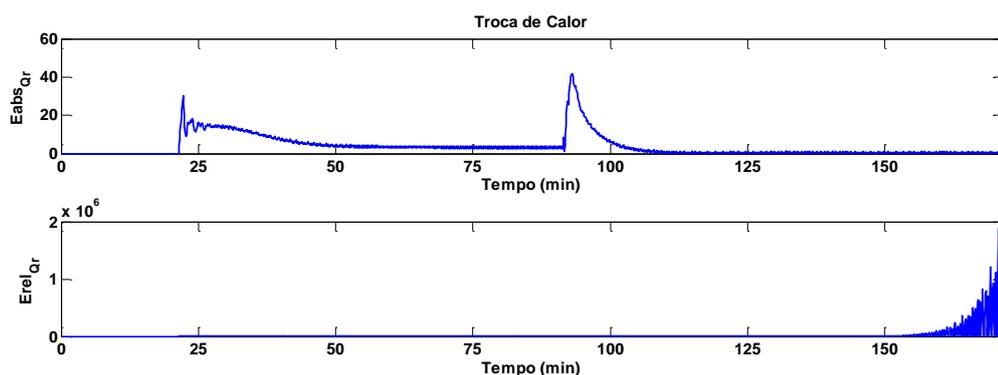


Figura 4.82: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B5-VE-FFTJ-30).

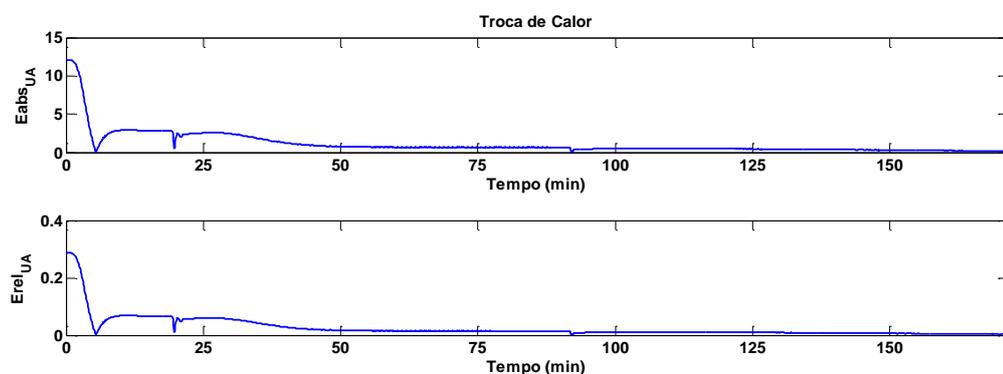


Figura 4.83: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B5-VE-FFTJ-30).

#### 4.5.3.2 Resultados para o produto B

Os resultados para o produto B são análogos àqueles obtidos para o produto A no que tange a capacidade do controlador de lidar com o problema da incrustação. Nesse sentido, decidiu-se apresentar esses resultados no Anexo 7.2.1, visto que a leitura desse texto não é essencial para a compreensão da estratégia de estimação e controle apresentada neste trabalho.

#### 4.5.3.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$

O problema estudado nesta seção é, provavelmente, o maior desafio para a estratégia de controle, uma vez que o fator de incrustação provocado pelo número sucessivo de bateladas influencia diretamente a troca térmica entre a jaqueta e o meio reacional. Sabe-se que  $UA$  recebe influências das leituras das temperaturas do reator e da jaqueta, diferentemente de  $Q_R$ , que só é influenciado pela temperatura do reator. Com isso, esperava-se que a estimação de  $UA$  fosse mais prejudicada, no entanto, analisando o gráfico de erro relativo, não é possível identificar essa característica, o que demonstra que a variável está sendo perfeitamente estimada.

MacGregor e Clarke-Pringle (1997), Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011) também avaliaram o desempenho para as bateladas de número 1 e 5 e obtiveram resultados muito bons, mantendo a temperatura controlada dentro da faixa tolerada para o processo. Devemos destacar, no entanto, que todos esses trabalhos destoam da proposta apresentada nesta dissertação, uma vez que aqui se buscou desenvolver um controlador baseado na estimação de parâmetros em tempo real através de modelos simplificados do balanço de energia com o uso do FKE e tal estratégia não leva em consideração diversas informações do processo, equipamento e produtos.

#### 4.5.4 Desempenho do controlador frente a mudanças climáticas

Outro ponto que merece análise é se a mudança climática pode interferir no desempenho da atual estratégia de controle. Essa preocupação é justificada porque o balanço de energia do reator proposto por Chylla e Haase (1993) mostra claramente que a temperatura ambiente é uma das variáveis dos modelos. Na prática, deve-se lembrar de que os monômeros estão sendo adicionados ao reator à temperatura ambiente, que a mistura reacional inicial é alimentada no reator a temperatura ambiente e que o fluido refrigerante apresenta temperaturas distintas nos meses de verão e de inverno. A dúvida que se coloca é se essa interferência é significativa para o controlador desenvolvido nesse trabalho. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na Tabela 4.7:

Tabela 4.7 – Parâmetros para simulação com mudança climática para FFTJ.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-IN-FFTJ-80	PB-B1-IN-FFTJ-30
Produto	A	B
Clima	Inverno	Inverno
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	80	30
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	nº 1	nº 1
$K_{P(escravo)}$	7	7
$\tau_{I(escravo)}$	11	11
$W_{(aquecimento)}$	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

#### 4.5.4.1 Resultados para o produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no inverno, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_r$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso e valor inicial de UA de 80 BTU / min °F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-IN-FFTJ-80”.

O comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1 é apresentada na Figura 4.84. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.85, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até 174,3 min.

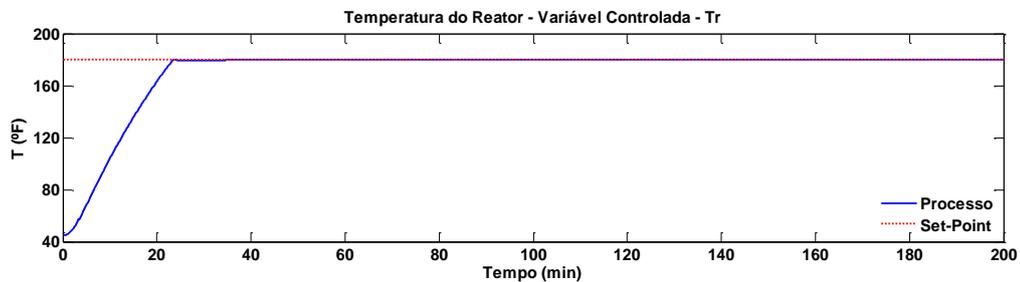


Figura 4.84: Temperatura do reator (PA-B1-IN-FFTJ-80).

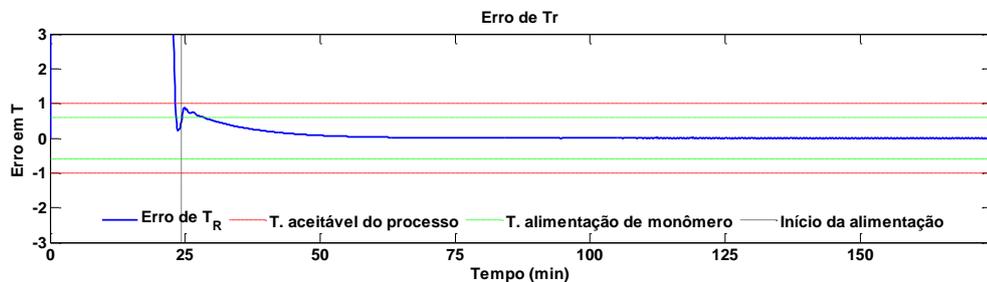


Figura 4.85: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-IN-FFTJ-80).

Nota-se que as temperaturas de entrada e saída da jaqueta apresentam um comportamento ligeiramente oscilatório no início da alimentação de monômero, mas que se atenua rapidamente, conforme mostrado na Figura 4.86. A oscilação na temperatura de entrada ocorre em razão da dinâmica da abertura da válvula, ilustrada na Figura 4.87.

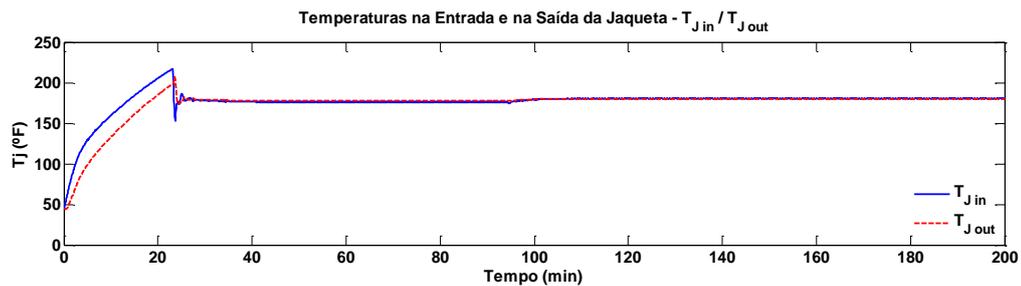


Figura 4.86: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-IN-FFTJ-80).

As ações de controle, ilustradas na Figura 4.87, apresentam no início da batelada uma dinâmica distinta da que foi observada no estudo de caso base. Tal comportamento, como já foi discutido anteriormente, deve-se ao fato de que essa estrutura é baseada em um modelo do processo e seu comportamento reflete o que o próprio modelo determina como *setpoint* e é importante lembrar que os modelos propostos, tanto para a estimação, quanto para o controlador são simplificados, o que significa que não carregam consigo informações características como tempos mortos que são inerentes do processo e consideram constantes alguns parâmetros. Apesar disso, verifica-se o perfeito controle da temperatura de reação.

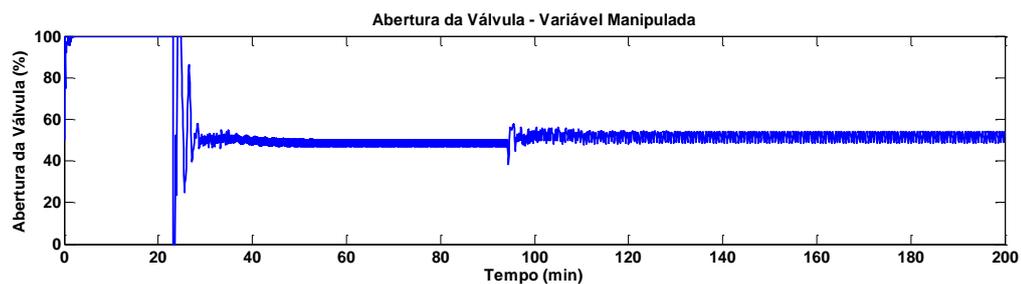


Figura 4.87: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-IN-FFTJ-80).

A Figura 4.88 ilustra a boa estimação do calor de reação, apesar do pequeno atraso no início e no término da adição de monômero. Contudo, os resultados globais mostram que tal comportamento não causou influência significativa sobre o desempenho do controlador.

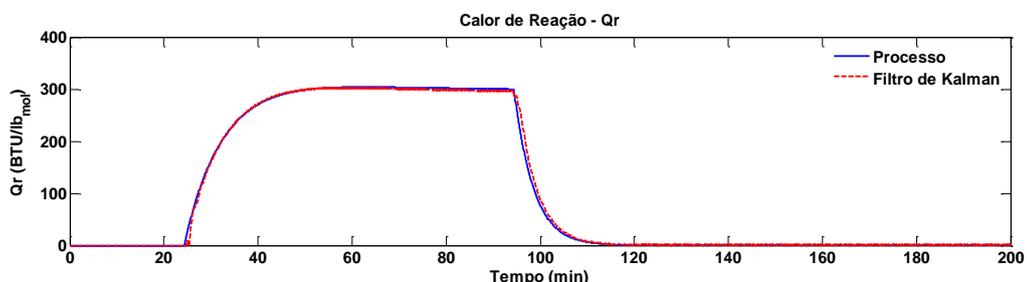


Figura 4.88: Evolução do calor de reação (PA-B1-IN-FFTJ-80).

Apresenta-se na Figura 4.89 o resultado da boa estimação de  $UA$ , que mais uma vez convergiu para seu valor real após um tempo relativamente curto.

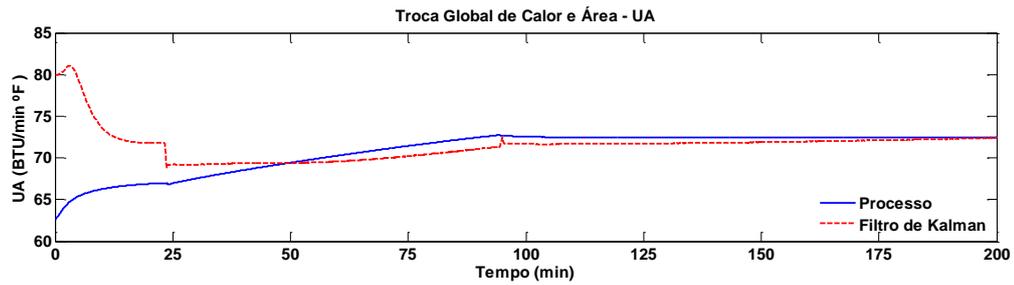


Figura 4.89: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-IN-FFTJ-80).

A estimação da conversão do polímero para esta simulação é apresentada na Figura 4.90, que novamente foi bastante precisa, ressaltando a possibilidade de monitorar o processo através da estratégia proposta nesse trabalho.

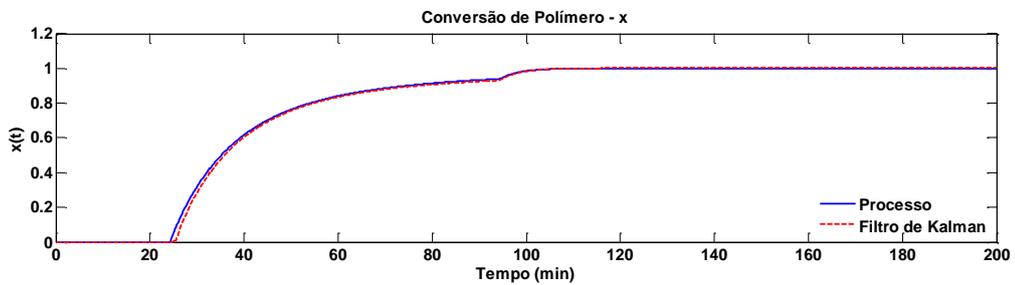


Figura 4.90: Conversão do polímero (PA-B1-IN-FFTJ-80).

A Figura 4.91 mostra o erro relativo e absoluto da estimação  $Q_R$  e a Figura 4.92 apresenta as mesmas informações para  $UA$ . Pode-se verificar que a estimação dessas variáveis apresentam rigorosamente os mesmos comportamentos observados nas simulações anteriores.

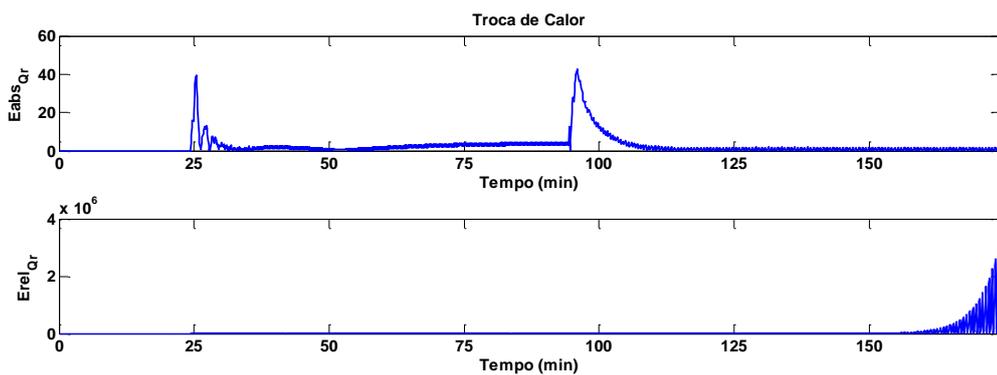


Figura 4.91: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-IN-FFTJ-80).

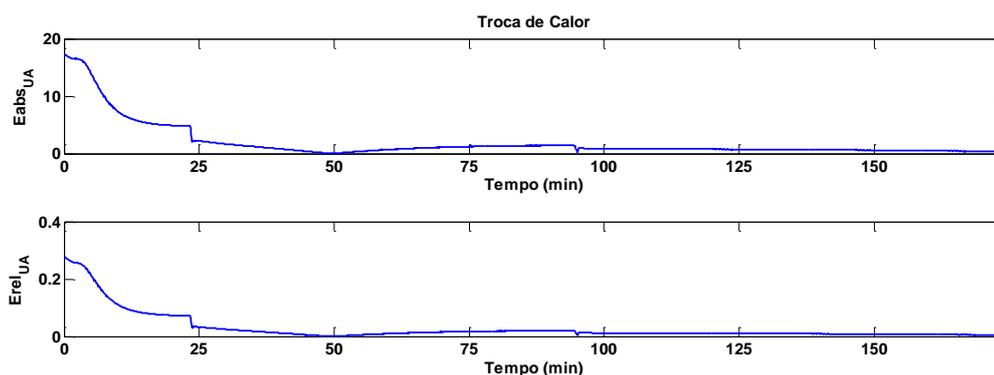


Figura 4.92: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-IN-FFTJ-80).

#### 4.5.4.2 Resultados para o produto B

Os resultados para o produto B são análogos àqueles obtidos para o produto A no que tange a capacidade do controlador de lidar com o problema da mudança climática. Nesse sentido, decidiu-se apresentar esses resultados no Anexo 7.3.1, visto que a leitura desse texto não é essencial para a compreensão da estratégia de estimação e controle apresentada neste trabalho.

#### 4.5.4.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_J$

Os resultados gráficos mostram, mais uma vez, que o sistema de controle desenvolvido apresentou bom desempenho, mesmo havendo mudança climática. Contudo, apesar das mudanças das condições ambientais influenciarem significativamente o comportamento dinâmico do processo, a estratégia de estimação e controle proposta mostrou-se robusta e eficiente.

Outros trabalhos apresentados na literatura como os de MacGregor e Clarke-Pringle (1997), Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011) também avaliaram o desempenho de seus sistemas de controle frente a mudança climática e também obtiveram resultados satisfatórios e chegaram às mesmas conclusões aqui apresentadas. Cabe sempre ressaltar nesse ponto, que todos os trabalhos divergem da ideia inicial desse trabalho, uma vez que se busca um controle baseado na estimação de parâmetros em tempo real através de modelos simplificados do balanço de energia com o uso do FKE.

#### 4.5.5 Desempenho do controlador frente a mudanças nos tempos mortos do processo

Uma das características do processo apresentada no trabalho de Chylla e Haase (1993) é que os valores nominais dos parâmetros relacionados aos tempos de atraso poderiam sofrer uma variação de até 25%. É certo que os modelos utilizados nesse trabalho negligenciam essas informações, porém, o processo real pode mostrar tal comportamento. Dessa forma, a estratégia

deverá ser eficiente a ponto de manter a temperatura controlada mesmo diante de tais mudanças. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na Tabela 4.8:

Tabela 4.8 – Parâmetros para simulação com mudança climática para FFTJ.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-VE-FFTJ-80-TM	PB-B1-IN-FFTJ-30-TM
Produto	A	B
Clima	Verão	Inverno
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	80	30
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	n° 1	n° 1
$K_{P(escravo)}$	7	7
$\tau_{I(escravo)}$	11	11
$\theta_1$	+25%	+25%
$\theta_2$	+20%	+20%
$W_{(aquecimento)}$	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

A codificação das simulações segue os mesmos critérios apresentados anteriormente, acrescenta-se apenas o índice TM para indicar que foram alterados os valores nominais dos tempos mortos originais.

#### 4.5.5.1 Resultados para o produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_I$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, valor inicial de UA de 80 BTU / min °F e mudança dos tempos mortos. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTJ-80-TM”.

O comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1 é apresentado na Figura 4.93. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de manter o processo bem controlado, fato que também pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.94, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor determinado até os 169,1 min do processo.

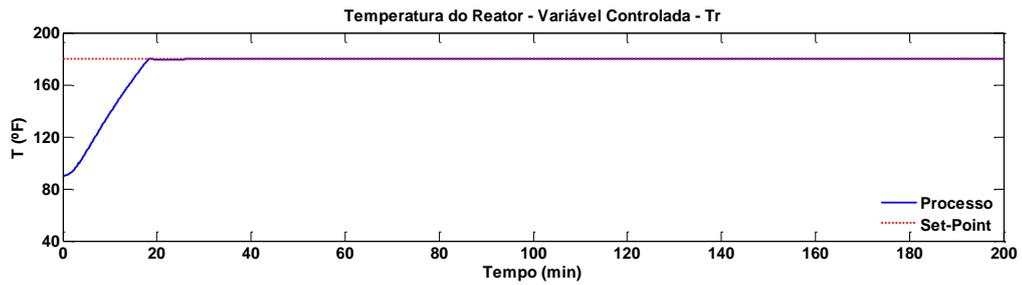


Figura 4.93: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

As demais variáveis também apresentam comportamento bastante similar àqueles apresentados nas seções anteriores, fato que comprova que a variação nos tempos mortos do processo em até 25% não influenciou o desempenho da estratégia de estimação e controle desenvolvida neste trabalho.

Apresentam-se a seguir as figuras com o comportamento dinâmico das variáveis de interesse do processo.

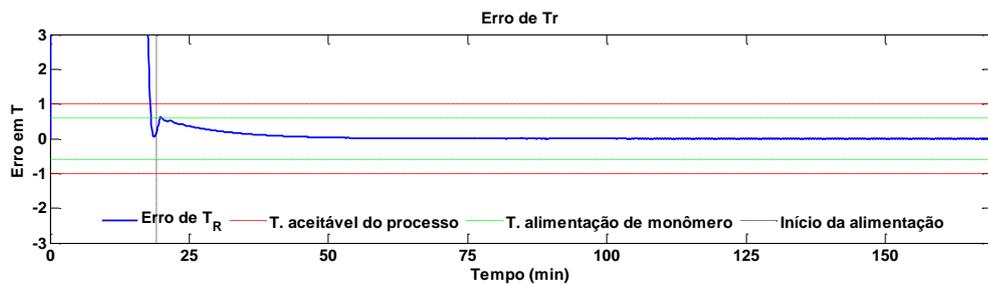


Figura 4.94: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

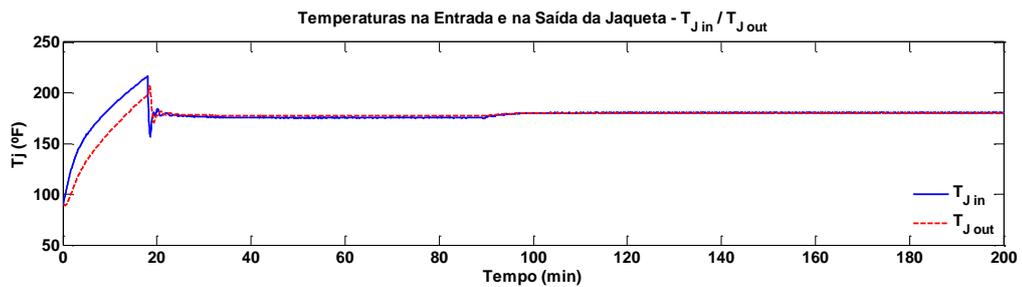


Figura 4.95: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

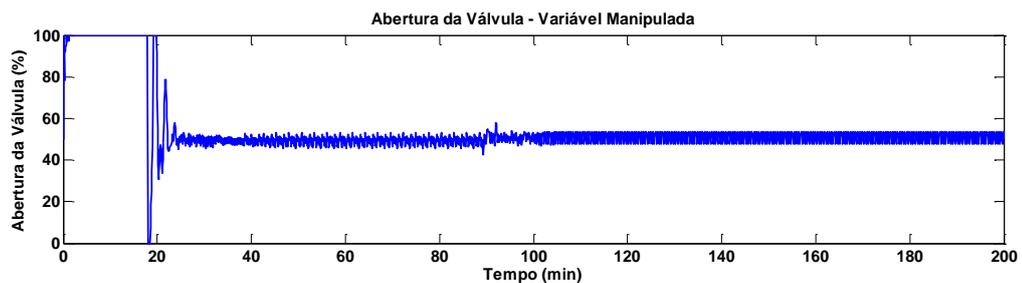


Figura 4.96: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

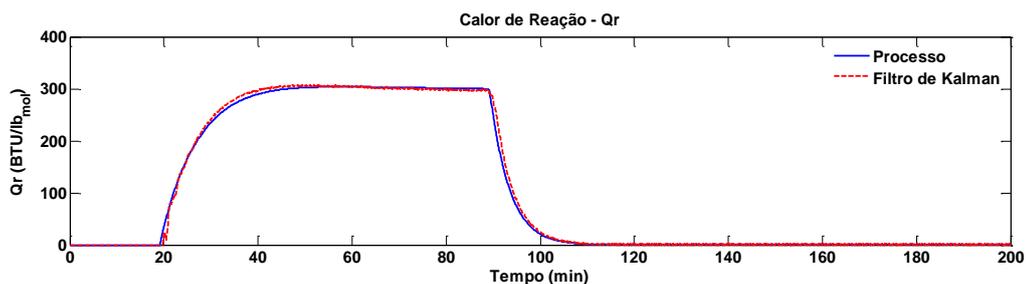


Figura 4.97: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

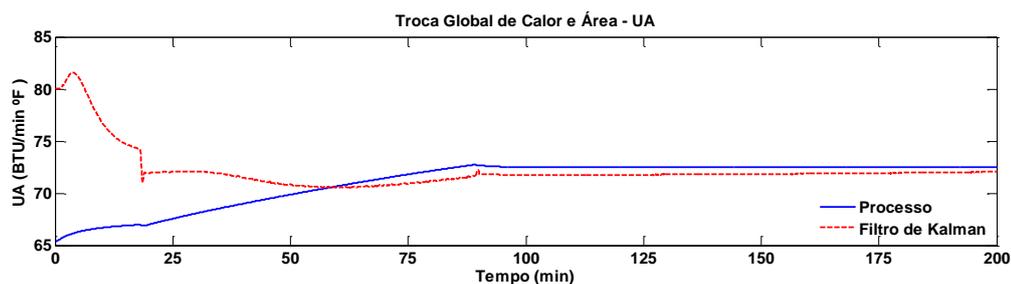


Figura 4.98: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

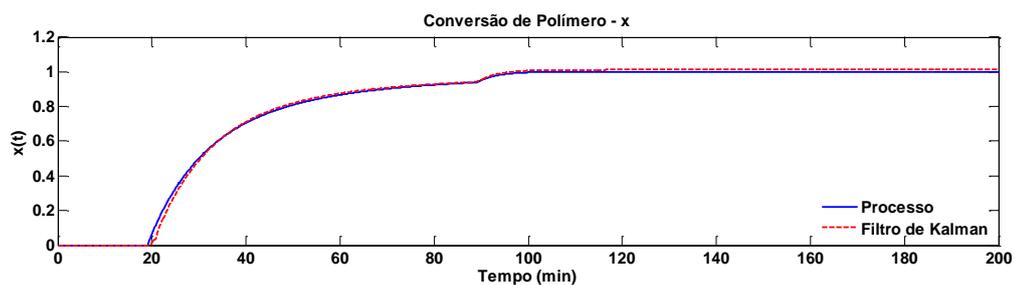


Figura 4.99: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

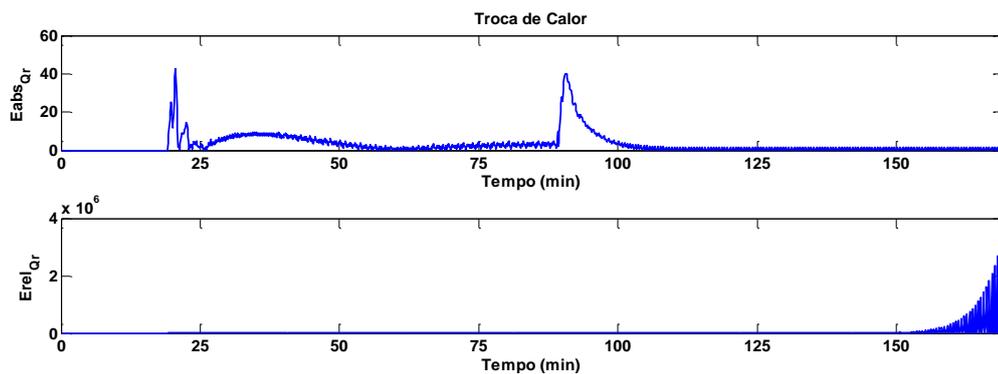


Figura 4.100: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

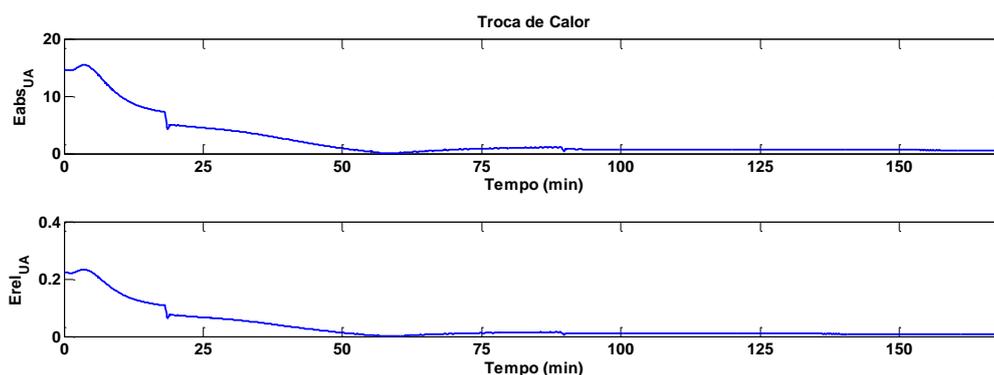


Figura 4.101: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-TM).

#### 4.5.5.2 Resultados para o produto B

Os resultados para o produto B são análogos àqueles obtidos para o produto A no que tange a capacidade do controlador de lidar com o problema da variação nos tempos mortos do processo. Nesse sentido, decidiu-se apresentar esses resultados no Anexo 7.4.1, visto que a leitura desse texto não é essencial para a compreensão da estratégia de estimação e controle apresentada neste trabalho.

#### 4.5.5.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_I$

O trabalho desenvolvido por Helbig *et al.* (1996) alcançou bons resultados para os produtos A e B com a estrutura MPC (*Model Predictive Control*). Porém, quando utilizava uma constante de tempo 25% maior, situação prevista no artigo original, valores de temperatura ficaram fora da faixa aceitável.

Graichen *et al.* (2006) obtiveram resultados bastante satisfatórios para a estratégia de controle de temperatura da reação para os produtos A e B. Mesmo com variações de 20% a 25% nos tempos mortos, conforme previsto por Chylla e Haase (1993), seu controlador apresentou bons desempenhos. Importante lembrar, nesse momento, que a característica da estratégia do trabalho desses autores diferencia-se da proposta nessa dissertação.

Destaca-se, que na estrutura do presente trabalho não se utilizou as constantes de tempo, pois os modelos são simplificados. No entanto, o controlador proposto se mostrou apto em absorver essas mudanças e manter o processo sob controle. Pequenas mudanças na estimação de  $Q_R$  e  $UA$  ocorreram, pois a mudança nos tempos mortos do processo provocam alterações em seu comportamento, dessa forma, o filtro atribui essas “falhas” à estimação dos parâmetros, mas não impacta na ação de controle.

## 4.6 Simulação do Processo com Controlador Mestre *Feedforward* Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para $T_{J\text{médio}}$

Nesse item ainda se apresenta o cerne do trabalho e há interesse em se realizar uma investigação para a estratégia de controle com uso de modelos para  $T_{J\text{médio}}$ , que é uma alternativa ao modelo simplificado do balanço de energia da jaqueta para também ser usado na estrutura do controlador, conforme apresentado no item 3.3.3, e poder comparar com os resultados alcançados com a estratégia de controle com modelos para  $T_J$  e com outros autores.

A motivação para essa série de avaliações é buscar uma alternativa de estratégia de controle baseada na estimação em tempo real do calor de reação ( $Q_R$ ) e do coeficiente de transferência de calor e a área de troca térmica ( $UA$ ) através do Filtro de Kalman Estendido. Serão utilizadas equações simplificadas do balanço de energia nas estruturas do FKE e do controlador *feedforward* com o modelo para  $T_{J\text{médio}}$ , atuando em uma malha em cascata como mestre. O objetivo desse trabalho, uma vez atendido, resolverá, por conseguinte, o problema apresentado no trabalho de Chylla e Haase (1993) onde propuseram o desenvolvimento de um sistema de controle para um reator multipropósito, onde não se incluíam modelos cinéticos, viscosidades ou relações de transferência de calor etc.

### 4.6.1 Desempenho do controlador de temperatura para os produtos A e B

Como já dito algumas vezes, um dos objetivos desse trabalho é que o sistema de controle seja aplicável a processos de múltiplos produtos. Será feita a avaliação de como o controle de temperatura ocorrerá através da simulação de polimerização dos produtos A e B com a implementação de nossa estratégia de controle.

Adotou-se, portanto, a mesma estratégia de controle, conforme mostrado na Seção 3.3, onde o controlador *feedforward* utiliza a estimação simultânea de  $Q_R$  e de  $UA$  através do FKE e as medidas de temperaturas da jaqueta ( $T_J$ ) e da reação ( $T_R$ ), nos modelos simplificados das equações de balanço de energia para determinar o novo *setpoint* ( $T_{Jm}$ ) para o controlador escravo (PI) em uma malha em cascata. Nesse item, o modelo do balanço de energia da jaqueta utiliza a equação desenvolvida para  $T_{J\text{médio}}$  e é utilizado no controlador. A estratégia de controle assim desenvolvida foi codificada como “FFTM”.

Os modelos utilizados no FKE e no controlador não consideram diversas informações particulares do processo o que permite que a estratégia seja utilizada de modo geral em processos distintos. A estratégia também se torna robusta, pois precisa manter o controle de temperatura mesmo diante de cenários inóspitos. O processo estocástico que foi utilizado na estrutura do filtro de Kalman teve como estratégia a técnica do passo aleatório (*random walk*). Os dados utilizados para a simulação encontram-se na Tabela 4.9:

Tabela 4.9 – Parâmetros para simulação com os produtos A e B para FFTM.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-VE-FFTM-80	PB-B1-VE-FFTM-80
Produto	A	B
Clima	Verão	Verão
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$U_{A(inicial)}$	80	80
Controlador	FF TM	FF TM
Batelada	n° 1	n° 1
$K_{P(escravo)}$	2	2
$\tau_{I(escravo)}$	8	8
$W_{(aquecimento)}$	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

Os parâmetros do controlador escravo foram reajustados para essa nova realidade se comparado com a simulação do caso base e com a simulação com modelo para  $T_J$ . Isso foi necessário, pois o controlador escravo precisou de uma sintonia que se adequasse à nova dinâmica de geração de *setpoint* através dos modelos desenvolvidos. Os parâmetros do filtro mantiveram-se os mesmos em todas as etapas o que torna essa estratégia vantajosa por ter um controlador a menor para ser sintonizado.

A codificação das simulações segue os mesmos critérios apresentados anteriormente, acrescenta-se apenas o TM ao lado do FF para indicar qual o modelo que a estratégia de controle está utilizando.

#### 4.6.1.1 Resultados para o Produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_{Jmédio}$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $U_A$  de 80 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTM-80”.

A Figura 4.102 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 4.103, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* seguindo até os 170,8 min.

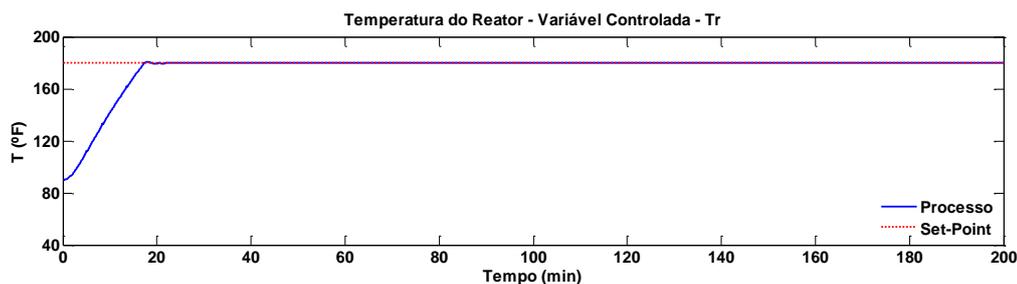


Figura 4.102: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTM-80).

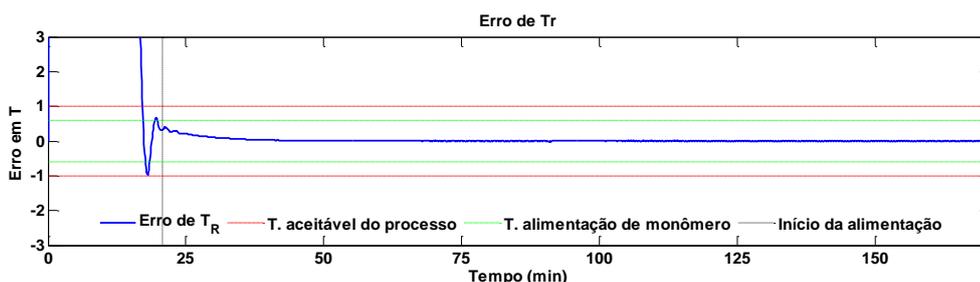


Figura 4.103: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-VE-FFTM-80).

A Figura 4.103 mostra o erro da temperatura de reação em relação ao *setpoint*. Observa-se que a alimentação do monômero inicia-se próximo aos 21 min, quando o algoritmo libera a adição, tempo menor que o obtido com o controlador PI, porém superior ao obtido pela estratégia com modelo para  $T_J$ . Isso se explica, pois, conforme se vê no gráfico, a temperatura sai da faixa de critério do algoritmo ( $\pm 0,6^\circ\text{F}$ ) por duas vezes, o que provocou uma “demora” na alimentação do monômero. A maior demora observada para o modelo de  $T_{J\text{médio}}$  mostra que ele tem um desempenho inferior do alcançado com o modelo para  $T_J$ , mas também mostra a contribuição do algoritmo de alimentação desenvolvido na estratégia de controle. Após a liberação do monômero, a temperatura se manteve dentro da faixa de  $\pm 0,6^\circ\text{F}$ . O resultado mostra um desempenho satisfatório do controlador, pois a temperatura se mantém controlada mesmo com o término da alimentação de monômero (91 min).

O comportamento das temperaturas de entrada e saída da jaqueta foi bem desenvolvido em tópicos anteriores, dessa forma, ressaltar-se-á, nesse item, o que é específico dessa simulação. Observando-se a Figura 4.104 percebe-se que as temperaturas da jaqueta, entrada e saída, para a estratégia com  $T_{J\text{médio}}$  apresentam um comportamento oscilatório maior que para a estratégia do controle com modelo para  $T_J$ . Essa dinâmica explica o comportamento da temperatura de reação mostrada na Figura 4.103 que demorou mais tempo para alcançar a temperatura desejada. A oscilação nas temperaturas de entrada e saída se justifica pela dinâmica da abertura da válvula, conforme é mostrado na Figura 4.105.

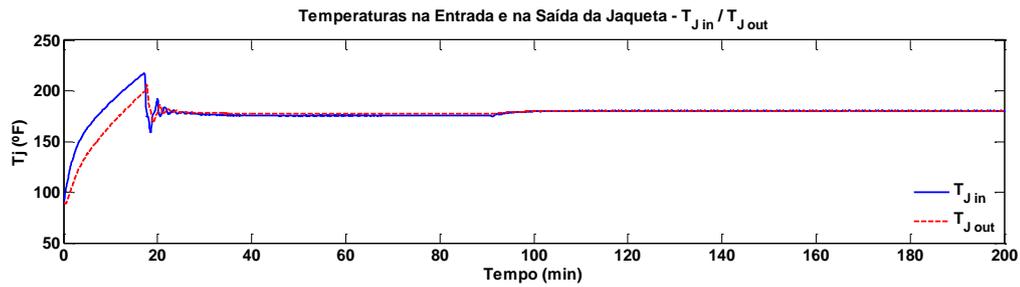


Figura 4.104: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTM-80).

A abertura da válvula, ilustrada na Figura 4.105, tem uma dinâmica no início, bastante distinta da que foi vista no estudo do caso base, porém similar ao observado no controle com base no modelo para  $T_J$ . O próprio comportamento do processo, associado à estratégia, explica a dinâmica de abertura, uma vez que a determinação do *setpoint* do controlador escravo está baseada em modelos simplificados de estimação de parâmetros e de controle. Com isso, algumas informações características são negligenciadas. A válvula atuou de modo a levar a temperatura do meio rapidamente para o valor de *setpoint* e posteriormente se estabilizou próximo de 50%, mesma faixa em que a válvula do controlador PI trabalhou, mostrando resultados coerentes.

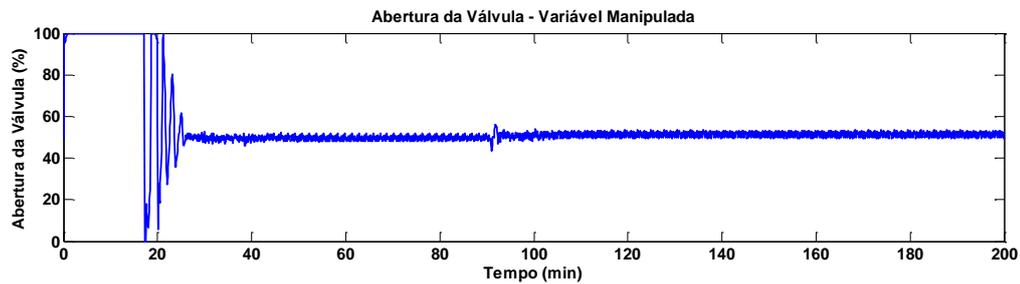


Figura 4.105: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTM-80).

A dinâmica do calor de reação foi bem desenvolvida anteriormente, não havendo muitas observações adicionais a serem feitas. Entretanto, observando a Figura 4.106, nota-se que não aparece o atraso encontrado na simulação da Seção 4.5.1 e que a estimação em relação ao valor real é muito boa, o que contribui para a estimação correta da conversão ( $x$ ).

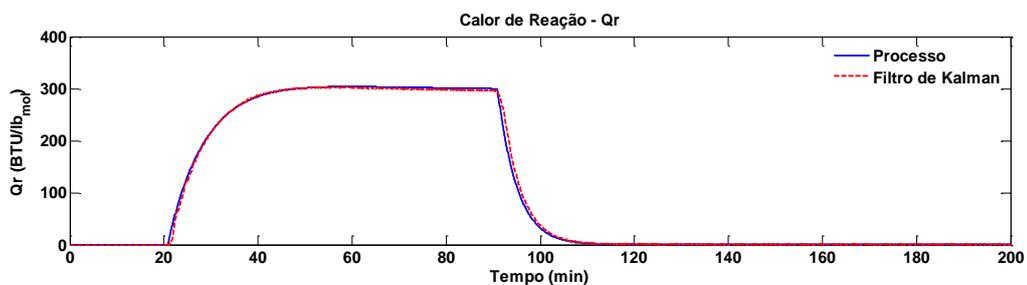


Figura 4.106: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-80).

Similarmente, a dinâmica do coeficiente global de troca térmica e a área foram devidamente analisadas e discutidas anteriormente. Portanto, será reforçada sua característica semelhante à encontrada na simulação da Seção 4.5.1. Conforme observado na Figura 4.107, houve uma boa estimativa em relação ao valor real e também identifica-se uma pequena queda abrupta no início da adição de monômero, explicada pelo fato da adição de monômero ter sido antecipada em relação à estratégia do caso base e que contribui com a convergência da estimativa de  $UA$ . Esse comportamento não gerou problemas para o controle, que se mostrou bastante efetivo.

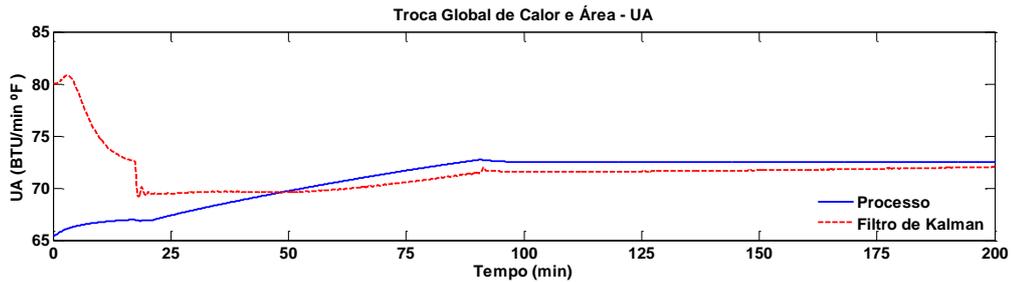


Figura 4.107: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTM-80).

Conforme se verifica na Figura 4.108, a conversão tem boa estimativa e permite o monitoramento adequado do processo. A viabilidade de se monitorar o andamento do processo é outra contribuição que essa estratégia proporciona no desenvolvimento desse trabalho. Como já era esperado, uma boa estimativa de  $Q_R$  acarreta em uma boa estimativa da conversão.

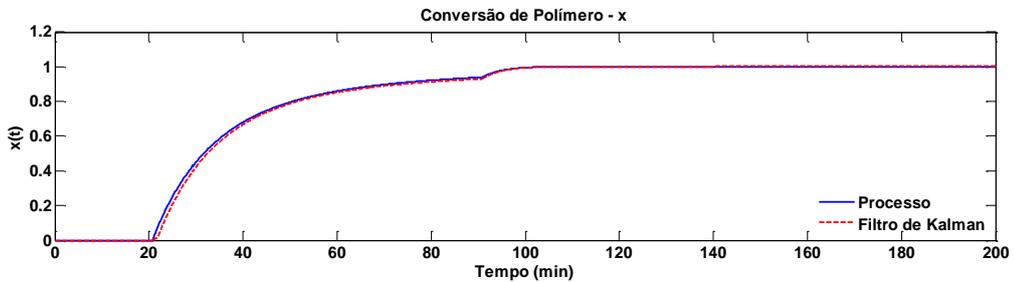


Figura 4.108: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTM-80).

Conforme se observa na Figura 4.109 e na Figura 4.110 os erros relativo e absoluto da estimativa  $Q_R$  e  $UA$ , respectivamente, apresentam comportamentos muito similares aos analisados anteriormente. Reforça-se apenas o fato do erro absoluto de  $Q_R$  ser ligeiramente maior nos instantes de início e término (21 min e 91 min) da alimentação de monômero e a queda mais acentuada do valor de  $UA$ .

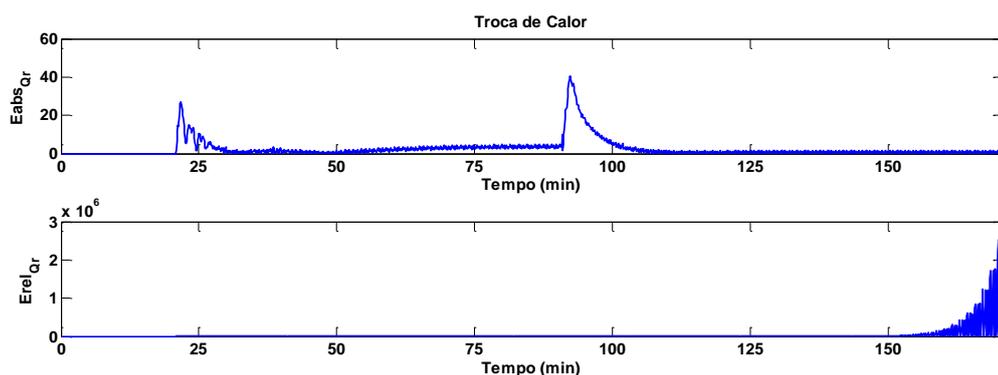


Figura 4.109: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-80).

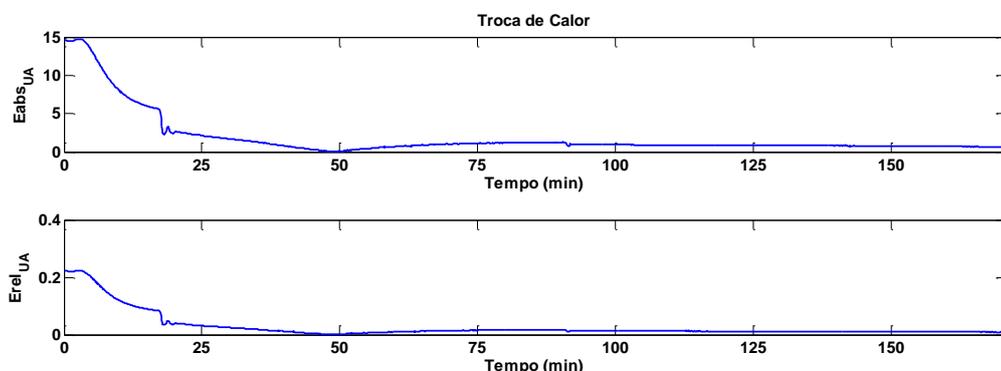


Figura 4.110: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTM-80).

#### 4.6.1.2 Resultados para o Produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_{Jmédio}$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $UA$  de 80 BTU / min $^{\circ}$ F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-VE-FFTM-80”.

A Figura 4.111 apresenta a dinâmica da temperatura do reator durante o decorrer da primeira batelada. O resultado encontrado mostra que a proposta de controle desenvolvida tem boa atuação no controle de temperatura conforme detalhado na Figura 4.112, onde fica evidenciado que a temperatura de reação se manteve dentro da faixa aceitável de  $\pm 1$   $^{\circ}$ F durante a reação e, sobretudo, convergindo para o valor do *setpoint* até 238,6 min.

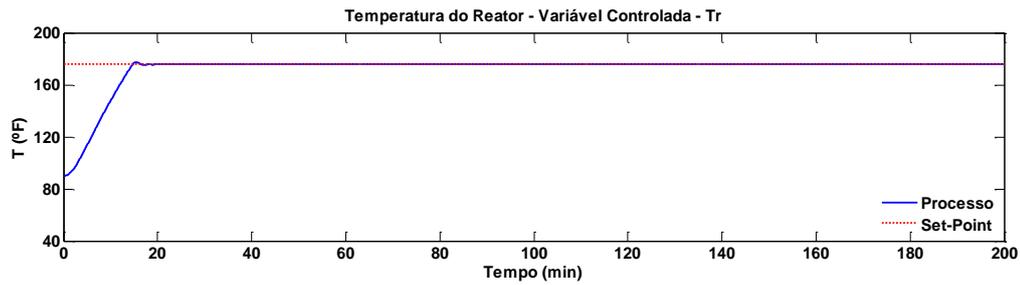


Figura 4.111: Temperatura do reator (PB-B1-VE-FFTM-80).

O erro da temperatura em relação ao *setpoint* é ilustrado pela Figura 4.112. Observa-se que a alimentação do monômero inicia-se cerca dos 18 min, instante em que se inicia a adição de monômero, conforme critério definido pelo algoritmo de alimentação. O tempo em que se atinge a temperatura desejada é menor que o tempo alcançado pelo controlador PI do caso base e pelo controle do processo para o produto A, devido ao *setpoint* do produto B ser menor; mas o tempo é superior ao obtido pela estratégia anterior. Esse efeito foi devidamente explicado na análise para o produto A e está relacionado à dinâmica da temperatura. A maior demora observada para o modelo de  $T_{Jmédio}$  mostra que seu desempenho é inferior ao do modelo para  $T_J$  e mostra a contribuição dada pelo algoritmo de alimentação na estratégia de controle. Assim como a simulação anterior para o produto A, após o início da alimentação, a temperatura se manteve dentro da faixa de  $\pm 0,6$  °F e convergiu para o *setpoint*. Esse resultado mostra bom desempenho do controlador mesmo com a saída do monômero (78 min) e com a nova alimentação (com início em 108 min e término em 148 min).

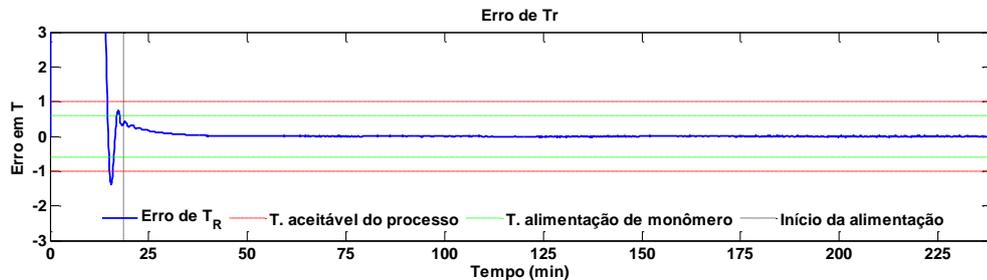


Figura 4.112: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-VE-FFTM-80).

Analisando a dinâmica das temperaturas de entrada e saída da jaqueta para o produto B através da Figura 4.113 nota-se que apresentam, assim como na simulação do produto A, um comportamento oscilatório maior que para a estratégia do controle com modelo para  $T_J$ . A oscilação na temperatura de entrada ocorre em razão da dinâmica da abertura da válvula, conforme é mostrado na Figura 4.113 e na Figura 4.114 e a temperatura de saída é apenas uma reação ao comportamento da variável de entrada.

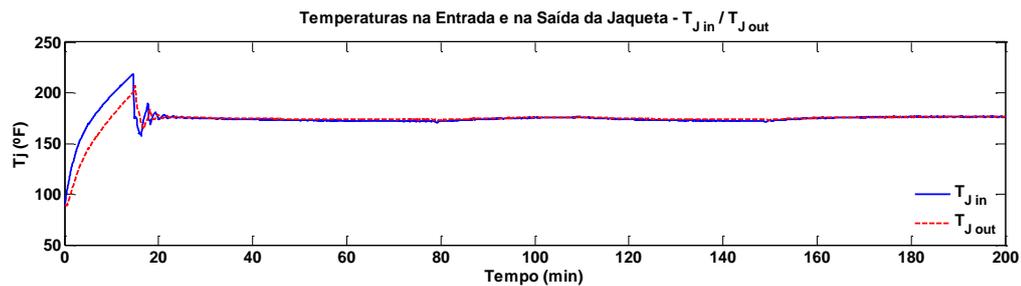


Figura 4.113: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-VE-FFTM-80).

Como pode ser visto na Figura 4.114, o comportamento da válvula de controle apresentou uma dinâmica bastante distinta no início da batelada se comparada ao resultado observado no estudo do caso base, mas que pode ser explicado de modo análogo ao do produto A.

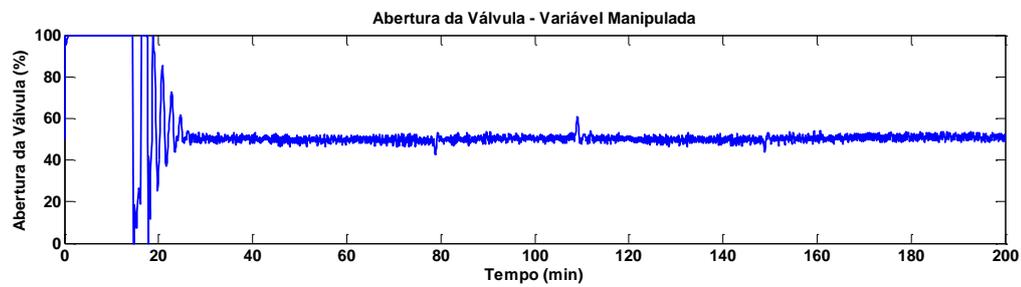


Figura 4.114: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-VE-FFTM-80).

De modo análogo, o comportamento do calor de reação foi devidamente desenvolvido em tópicos anteriores, não havendo observações adicionais. Destaca-se, conforme Figura 4.115, a boa estimativa em relação ao valor real, mesmo para esse comportamento sinuoso do perfil do calor de reação em função da dinâmica de alimentação de monômero que representa uma dificuldade maior para a estimativa.

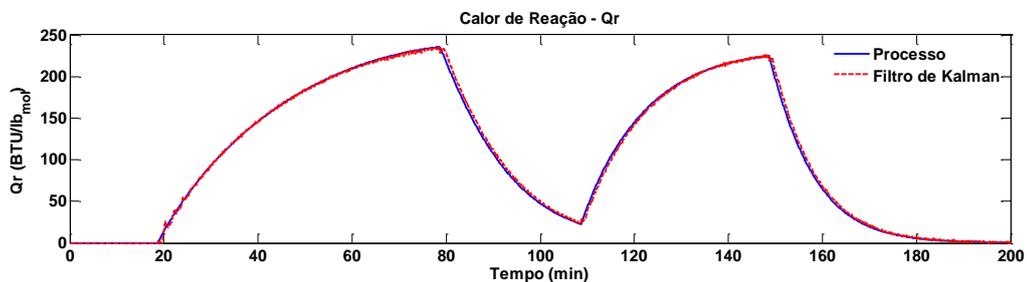


Figura 4.115: Evolução do calor de reação (PB-B1-VE-FFTM-80).

A dinâmica do coeficiente global de troca térmica e a área, já discutida anteriormente, mostra, através da Figura 4.116, a boa estimativa em relação ao valor real e que há uma pequena queda no início da adição de monômero. Isso se explica pelo fato da adição de monômero ter sido antecipada em relação à estratégia do caso base, mas, como pode ser observado, há uma

contribuição para a convergência de  $UA$ . Analisando os resultados globais esse comportamento não gerou problemas para o controle, que se mostrou bastante efetivo.

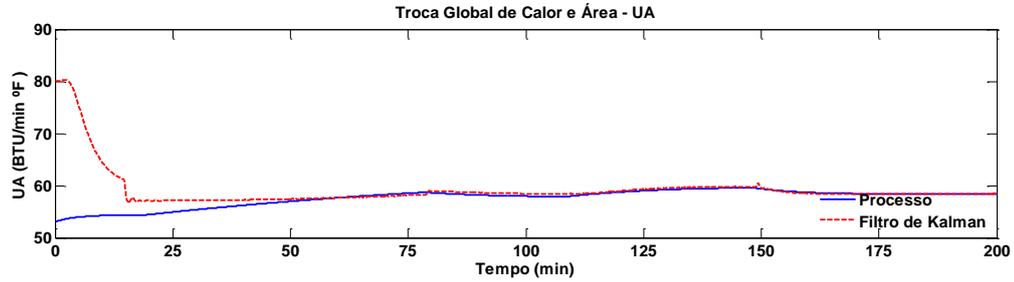


Figura 4.116: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-VE-FFTM-80).

A conversão do polímero apresentou um comportamento bastante adequado, assim como observado para o produto A, apresentado anteriormente. Observa-se, através da Figura 4.117 que a conversão tem uma estimação precisa.

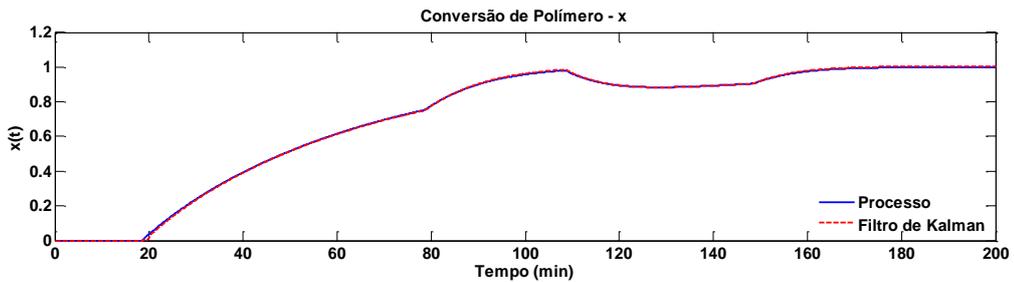


Figura 4.117: Conversão do polímero (PB-B1-VE-FFTM-80).

A Figura 4.118 e a Figura 4.119 mostram os erros relativo e absoluto da estimação  $Q_R$  e  $UA$ , respectivamente, e apresentam rigorosamente os mesmos comportamentos que os analisados anteriormente e a mesma ordem de grandeza de modo geral, mesmo nos períodos de adição de monômero (em 18 min e 88 min e em 118 min e 148 min).

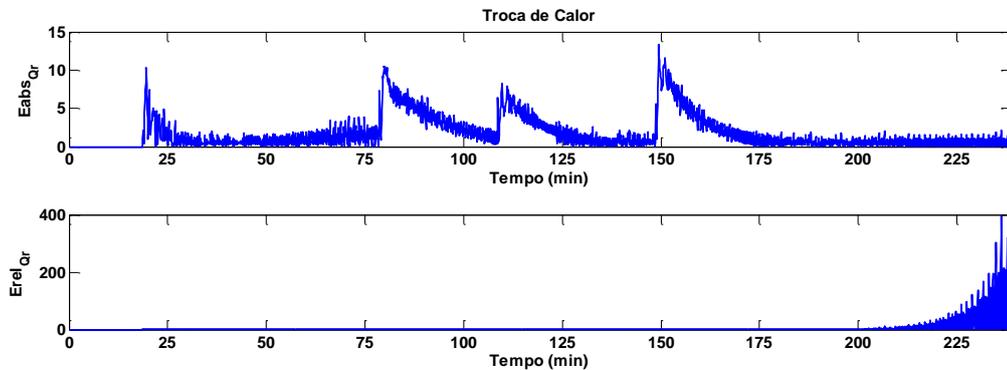


Figura 4.118: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PB-B1-VE-FFTM-80).

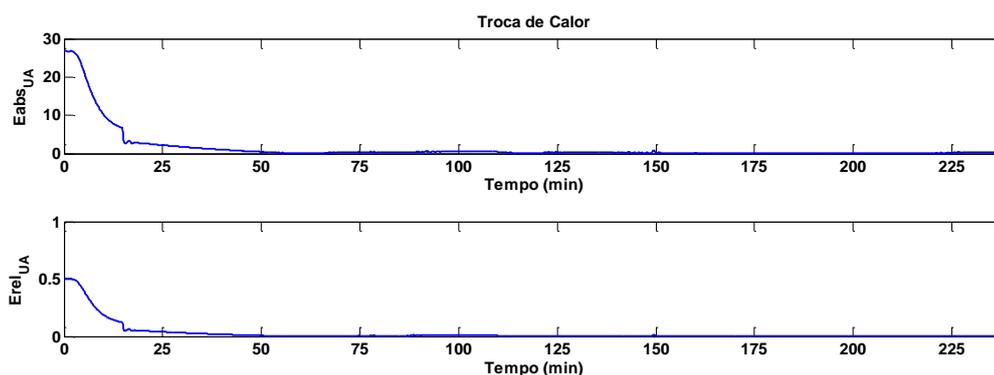


Figura 4.119: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PB-B1-VE-FFTM-80).

#### 4.6.1.3 Considerações sobre o Controlador Mestre *Feedforward* Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para $T_{Jmédio}$

Os resultados alcançados nessa avaliação mostram que a estratégia tem um desempenho um pouco inferior aos alcançados com a estratégia anterior baseada no modelo para  $T_J$ . No entanto, não se pode afirmar que essa estratégia não atende aos objetivos traçados para o desenvolvimento desse trabalho, pois os resultados mostraram o processo com temperatura controlada, reação sendo monitorada e resultados superiores quando comparados com o controlador PI do estudo de caso base.

As mesmas observações sobre os gráficos de  $Q_R$ ,  $UA$ ,  $T_{JI}$ ,  $T_J$  e Conversão ( $x$ ) podem ser feitas nesse caso. Apresentam o mesmo perfil e ordem de grandeza quando comparados com os resultados obtidos por Almeida (1997) e Santos (2005) e com os próprios resultados da simulação anterior, ou seja, são satisfatórios. É nítido que a estimação dos parâmetros desejados ( $Q_R$  e  $UA$ ) está sendo bem executada e que a conversão ( $x$ ) permite perfeitamente o monitoramento do processo.

Para uma comparação com resultados da literatura, recomenda-se que seja vista a Seção 4.5.1.3, onde os resultados alcançados podem ser comparados aos dessa Seção.

#### 4.6.2 Desempenho do controlador frente a mudanças na estimativa inicial de $UA$

Como já avaliado na etapa de implementação da estimação através do FKE e na etapa de avaliação do controle com base no modelo para  $T_J$ , um dos problemas levantados é que a atuação do estimador e também do controle deveria ser independente das estimativas iniciais atribuídas a determinadas variáveis, especificamente de  $UA$ , uma vez que o valor inicial de  $Q_R$  é facilmente determinado.

Será mostrado nesse tópico como a estimação e o controle com base no modelo para  $T_{Jmédio}$  se comportam diante da mudança do valor inicial de  $UA$ . Assim como na Seção 4.4 e na Seção 4.5.2, espera-se que em nada interfira no processo de estimação e na estratégia de controle. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na Tabela 4.10:

Tabela 4.10 – Parâmetros para simulação com mudança do UA inicial para FFTM.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-VE-FFTM-30	PB-B1-VE-FFTM-30
Produto	A	B
Clima	Verão	Verão
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	30	30
Controlador	FF TM	FF TM
Batelada	n° 1	n° 1
$K_{P(escravo)}$	2	2
$\tau_{I(escravo)}$	8	8
$W_{(aquecimento)}$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

#### 4.6.2.1 Resultados para o produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_{Jmédio}$ . A estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso e valor inicial de UA de 30 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTM-30”. A Figura 4.120 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1.

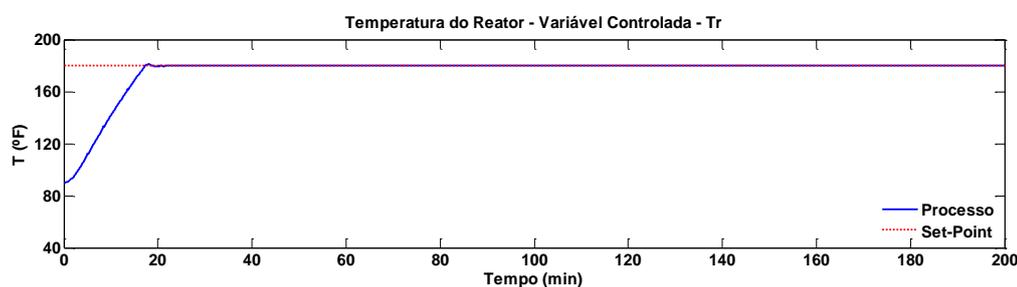


Figura 4.120: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTM-30).

Constata-se que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode se confirma através do resultado apresentado na Figura 4.121, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até os 170,8 min. Observa-se que a alimentação do monômero inicia-se próximo aos 21 min, valor inferior ao obtido no caso base do controlador PI, mas é superior ao tempo da estratégia anterior (modelo

para  $T_J$ ) porque a temperatura do reator oscila fora da faixa aceitável atrasando a alimentação do monômero. Isso valida a estratégia de alimentação desenvolvida e mostra a inferioridade desse modelo em relação ao modelo para  $T_J$ . O resultado global mostra um bom desempenho mesmo com a saída do monômero (91 min).

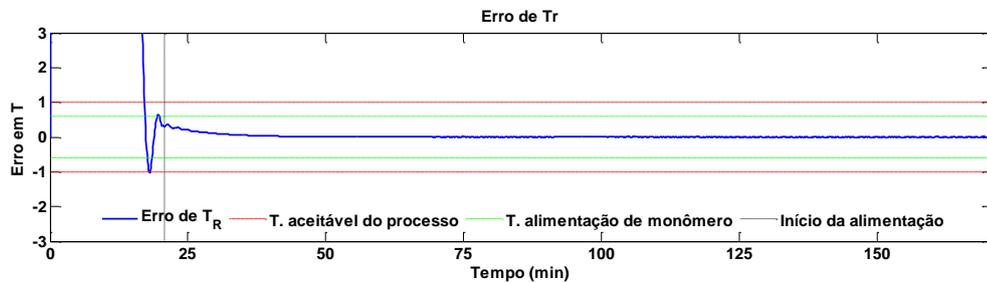


Figura 4.121: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-VE-FFTM-30).

Em relação à análise das temperaturas de entrada e saída da jaqueta ressaltar-se-á apenas o que é característico dessa simulação específica, pois o assunto já foi bem desenvolvido anteriormente. Percebe-se que as temperaturas de entrada e saída da jaqueta (Figura 4.122) apresentam um comportamento ligeiramente oscilatório. A oscilação das temperaturas é ligeiramente superior ao observado na Figura 4.59, que é a figura análoga para a estratégia com modelo para  $T_J$ . A oscilação na temperatura de entrada ocorre em razão da dinâmica da abertura da válvula, conforme é mostrado na Figura 4.123. Já o comportamento da temperatura de saída é apenas uma reação ao comportamento da variável de entrada.

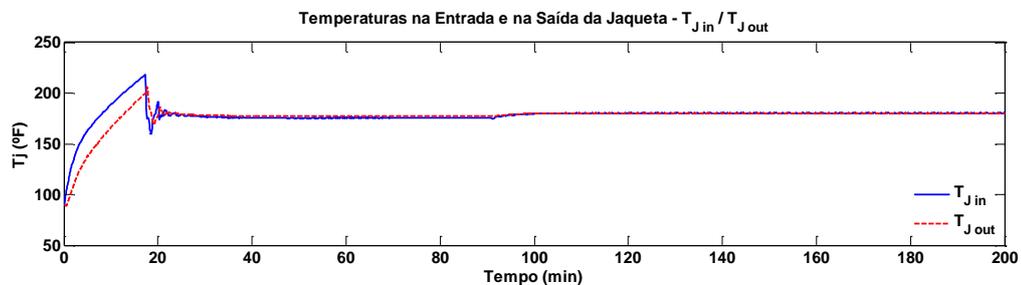


Figura 4.122: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTM-30).

A abertura da válvula, ilustrada na Figura 4.123, assim como nos resultados para o modelo  $T_J$ , tem uma dinâmica, no início, bastante distinta da que foi vista no estudo do caso base. Lembrando, como já dito, que essa estrutura está baseada em um modelo do processo e seu comportamento reflete o que o modelo determina como *setpoint*, e vale sempre destacar que os modelos propostos para a estimação e para o controlador são simplificados e não possuem em sua estrutura informações características como tempos mortos que são inerentes do processo e consideram constantes alguns parâmetros. Apesar disso, os gráficos de temperatura vem mostrando que esse comportamento da válvula implicou em um controle mais efetivo e após o período inicial a válvula se estabilizou próximo de 50%, mesmo patamar em que a válvula do controlador PI e do modelo para  $T_J$ .

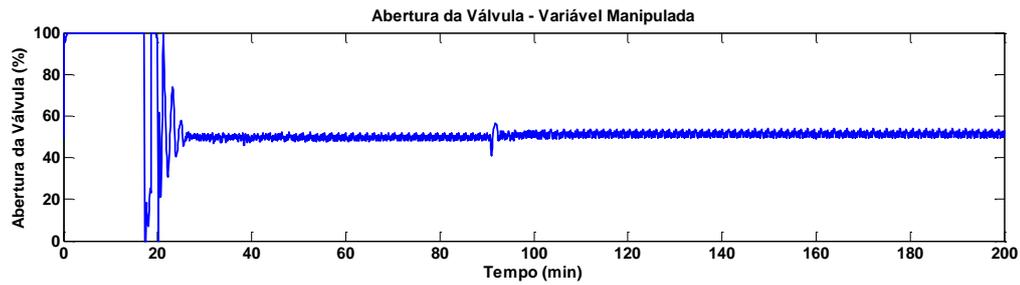


Figura 4.123: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTM-30).

A dinâmica do calor de reação já foi bem desenvolvida até o momento e por essa razão, não há mais observações a serem feitas nessa análise. Novamente chama a atenção, conforme Figura 4.124, a boa estimação da variável comparada ao valor real e que não se observa nenhum atraso na estimação como o observado na Figura 4.61. O resultado contribui significativamente para o controle de temperatura da reação.

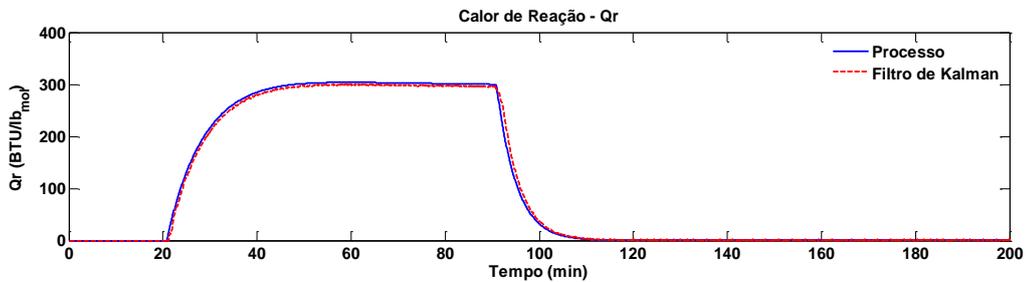


Figura 4.124: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-30).

Observações similares podem ser feitas a respeito da estimação da variável  $UA$ , cuja estimação é apresentada na Figura 4.125.

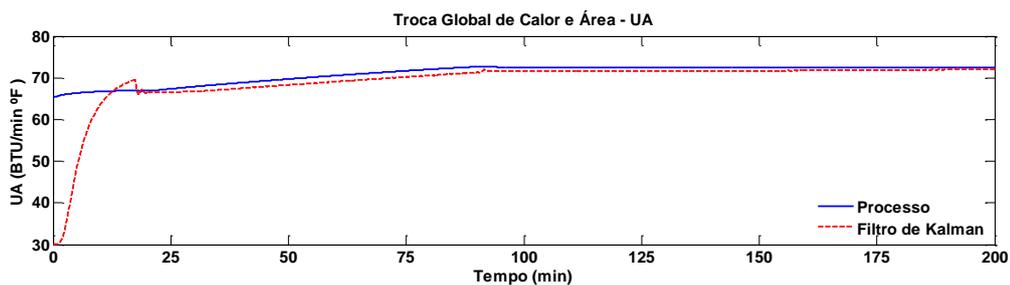


Figura 4.125: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTM-30).

A conversão do polímero é uma função do calor de reação, portanto, é esperado que com uma boa estimação de  $Q_R$ , a conversão apresente um comportamento igualmente adequado. Nota-se, pela Figura 4.126, que esse fato foi novamente comprovado pelo resultado apresentado. O monitoramento do processo é outra contribuição que essa estratégia proporciona no desenvolvimento desse trabalho. Demais características do comportamento da conversão podem ser vistas nas sessões anteriores, onde sua dinâmica foi devidamente analisada.

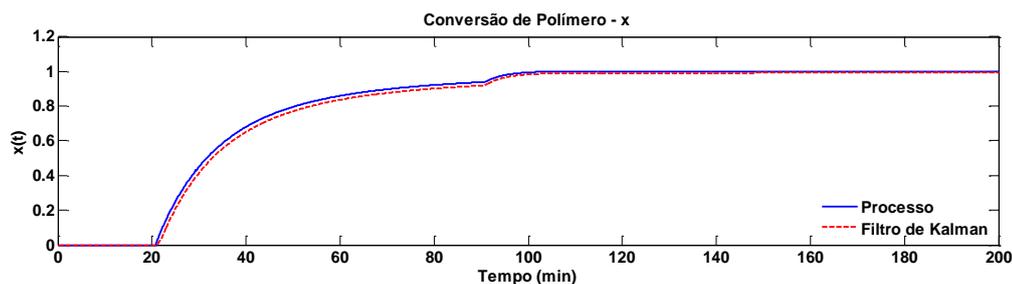


Figura 4.126: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTM-30).

Os erros, relativo e absoluto, da estimação  $Q_R$  são mostrados na Figura 4.127 e a Figura 4.128 mostra a mesma informação referente à estimação de  $UA$ . Verifica-se, através desses resultados, que os comportamentos são similares aos já mostrados nesse trabalho. Destaca-se, apenas o fato de o erro absoluto de  $Q_R$  ter ficado ligeiramente maior nos instantes de início e término (em 21 min e 91 min) da alimentação de monômero quando comparado aos resultados anteriores.

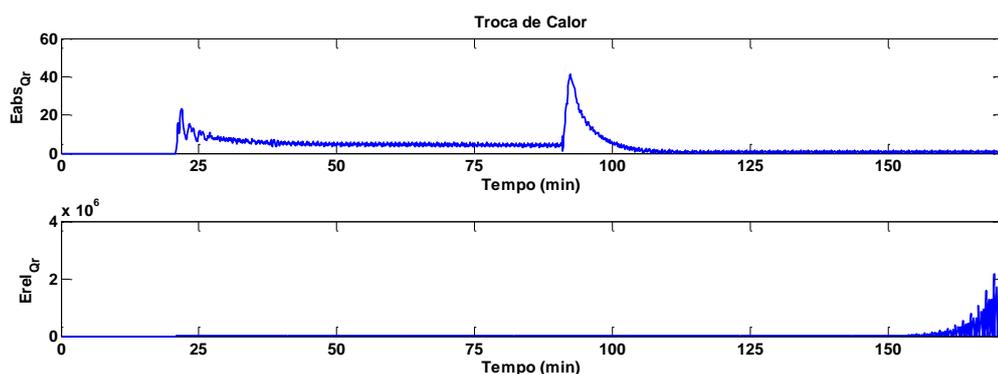


Figura 4.127: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-30).

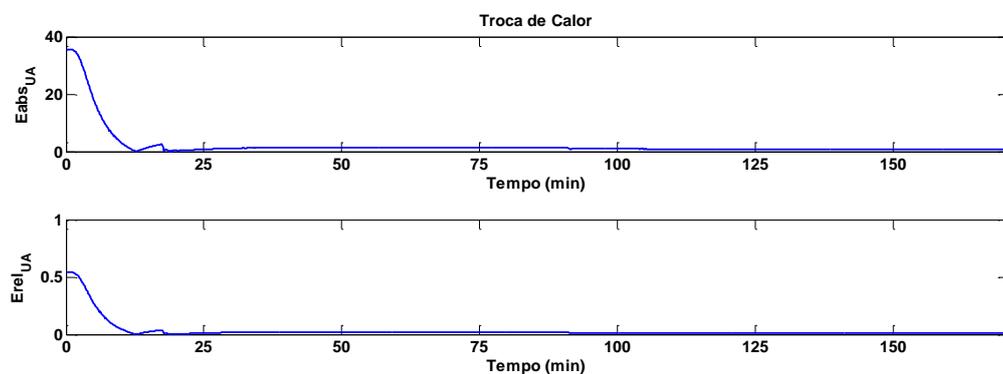


Figura 4.128: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTM-30).

#### 4.6.2.2 Resultados para o Produto B

A seguir são apresentados os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada 1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_{\text{médio}}$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $UA$  de 30 BTU / min $^{\circ}$ F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-VE-FFTM-30”.

Conforme se observa na Figura 4.129, a estrutura de controle que foi implementada para o processo foi capaz de manter adequadamente a temperatura do processo, o que se pode confirmar através do resultado apresentado na Figura 4.130, que ilustra que a temperatura de reação manteve-se no limite aceitável de  $\pm 1$   $^{\circ}$ F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* esperado até os 238,7 min.

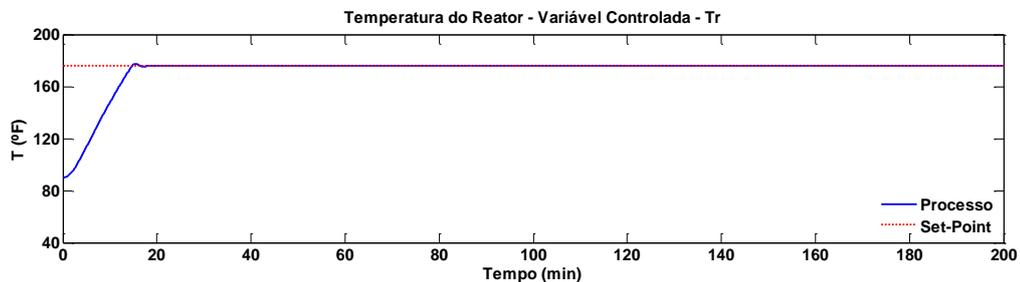


Figura 4.129: Temperatura do reator (PB-B1-VE-FFTM-30).

Embora o desempenho desse controlador seja inferior ao controlador apresentado na Seção 4.5.2, constatado pela maior oscilação da temperatura do reator antes do processo de reação, o resultado obtido com essa estratégia é bastante satisfatório, pois a temperatura não oscila com o término da alimentação do monômero (78 min.) nem durante o segundo ciclo de alimentação (com início em 108 min. e término em 148 min.).

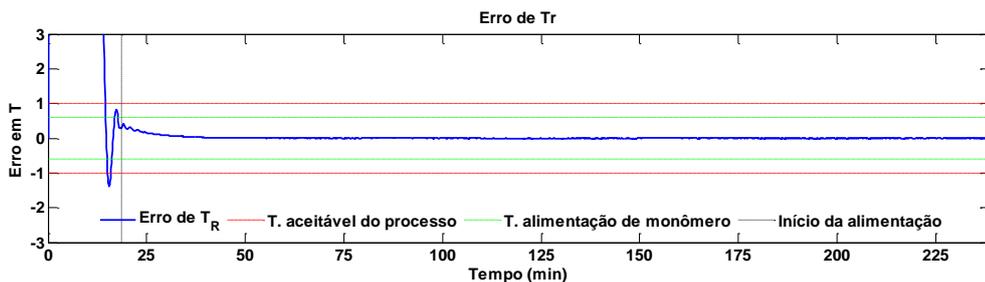


Figura 4.130: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-VE-FFTM-30).

A dinâmica das temperaturas de entrada e saída da jaqueta, como pode ser observado na Figura 4.131, foi análogo ao observado anteriormente. As ações de controle, representadas na Figura 4.132, mostram um comportamento dinâmico inicialmente distinto ao observado no caso base. Destaca-se que essa estrutura está formulada em modelos do próprio processo e seu comportamento se dá conforme os próprios modelos determinam como *setpoint* para o controlador escravo e que esses modelos propostos, sejam para a estimação, sejam para o

controlador, são simplificados. No entanto, a válvula apresentou um comportamento geral coerente com esperado.

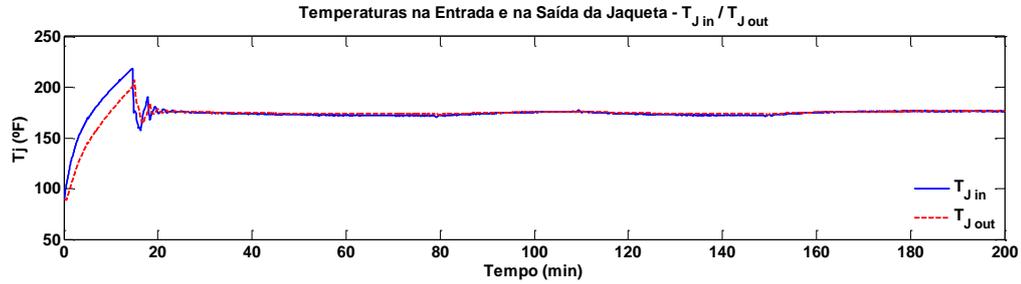


Figura 4.131: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-VE-FFTM-30).

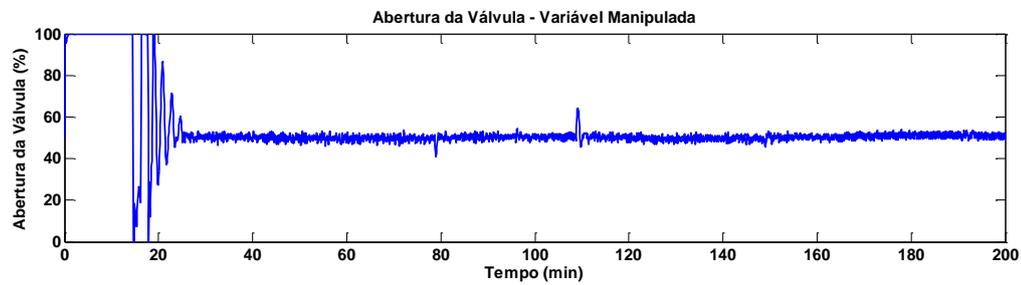


Figura 4.132: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-VE-FFTM-30).

Analogamente, a estimação do calor de reação foi bastante semelhante e propícia aos propósitos desse trabalho, conforme ilustrado na Figura 4.133.

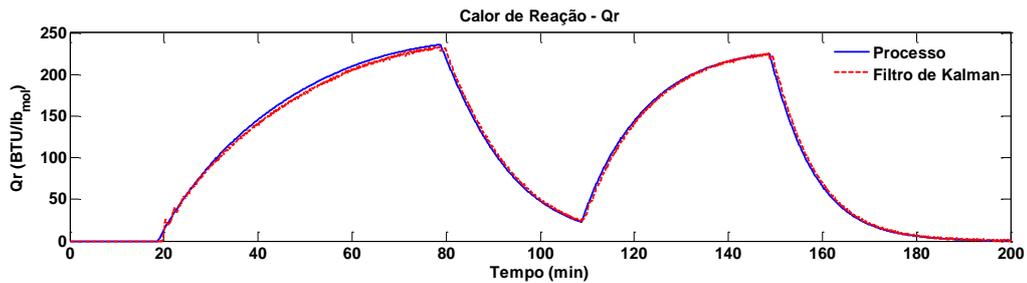


Figura 4.133: Evolução do calor de reação (PB-B1-VE-FFTM-30).

O resultado apresentado na Figura 4.134 valida a ideia que o FKE é capaz de estimar apropriadamente a variável  $UA$ , independentemente do valor atribuído à estimativa inicial.

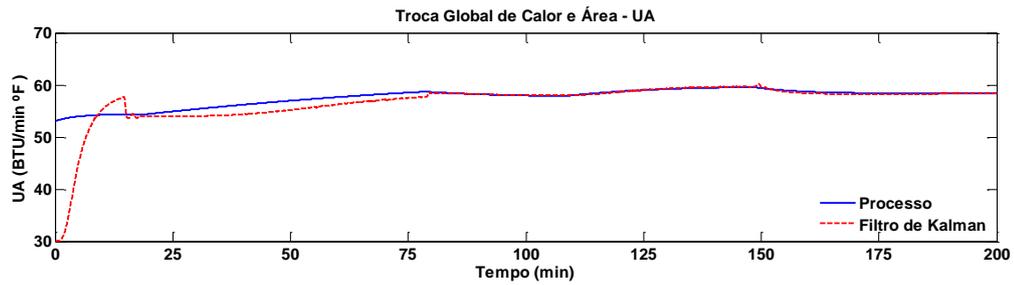


Figura 4.134: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-VE-FFTM-30).

É esperado que com uma boa estimativa de  $Q_R$ , a conversão do polímero apresente um comportamento igualmente adequado. Isso ocorre porque a conversão do polímero é uma função do calor de reação. Esses resultados podem ser vistos na Figura 4.135.

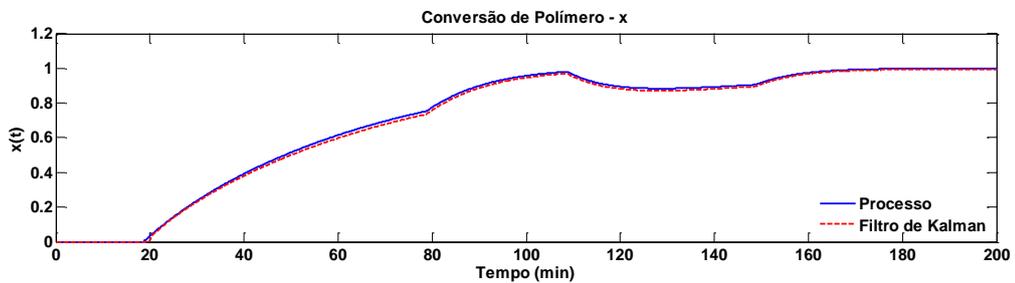


Figura 4.135: Conversão do polímero (PB-B1-VE-FFTM-30).

A Figura 4.136 e a Figura 4.137 mostram os resultados encontrados para os erros relativo e absoluto da estimativa  $Q_R$  e  $UA$ , respectivamente, e apresentam rigorosamente os mesmos comportamentos que os analisados anteriormente e a mesma ordem de grandeza, mesmo nos períodos de adição de monômero (entre 18 min e 88 min e em 118 min e 148 min).

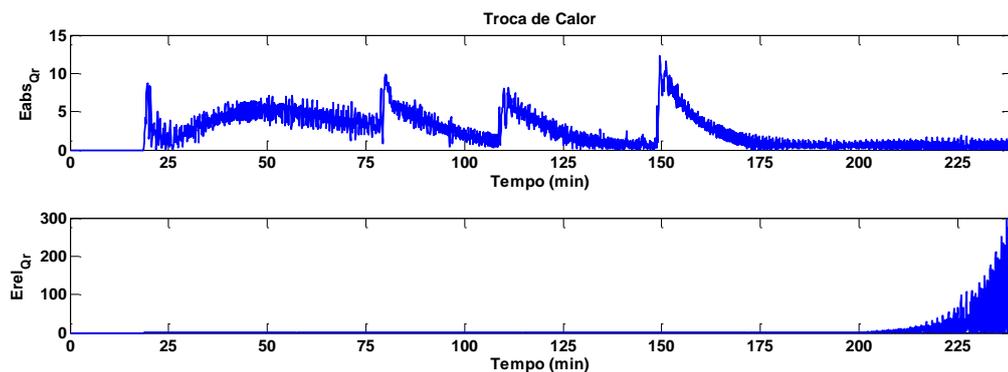


Figura 4.136: Erro absoluto e relativo da estimativa do calor de reação (PB-B1-VE-FFTM-30).

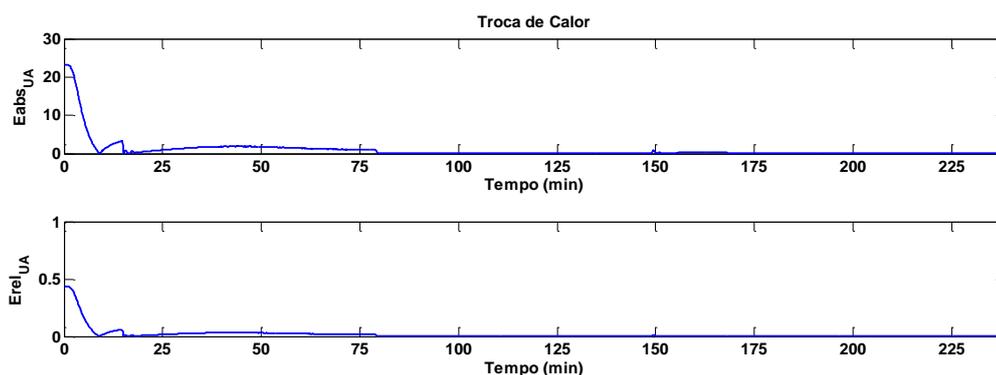


Figura 4.137: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PB-B1-VE-FFTm-30).

#### 4.6.2.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_{J\text{médio}}$

Comparando os resultados encontrados e apresentados nos gráficos entre os valores de 30 BTU / min °F e 80 BTU / min °F para o UA fica evidente que a estratégia de controle não sofre influência dessa mudança. Isso é positivo e contribui com o trabalho que não fica vulnerável ao problema do valor inicial do correspondente parâmetro.

A literatura carece de análises desse aspecto, por conseguinte não se pode realizar comparações objetivas em relação ao efeito que a mudança na estimativa inicial de UA provocaria no processo de estimação e estratégia de controle. Porém, através dos resultados obtidos com esse trabalho pode-se concluir que essa proposta apresenta um desempenho inferior ao controle com base no modelo para  $T_J$ , no entanto, os resultados globais para o controle de temperatura são bons e corroboram com os objetivos estabelecidos.

#### 4.6.3 Desempenho do controlador frente a mudanças no fator de incrustação

O artigo original de Chylla e Haase (1993) mostra que o processo passa por sucessivas bateladas, isso faz com que haja aumento da incrustação, o que influencia drasticamente o coeficiente global de transferência de calor ( $U$ ). Com a sequência de bateladas mais materiais são depositados, dificultando a troca térmica entre a parede do reator e o meio reacional, fazendo com que o coeficiente de transferência global caia. Isso de fato é um problema, pois o controle de temperatura se dá exatamente pela troca térmica entre reator e jaqueta.

Dessa forma, optou-se por verificar se a estratégia de controle proposta manterá sua eficiência mesmo com o problema de incrustação. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na

Tabela 4.11:

Tabela 4.11 – Parâmetros para simulação com mudança da incrustação para FFTM.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B5-VE-FFTM-30	PB-B5-VE-FFTM-30
Produto	A	B
Clima	Verão	Verão
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	30	30
Controlador	FF TM	FF TM
Batelada	n° 5	n° 5
$K_{P(escravo)}$	2	2
$\tau_{(escravo)}$	8	8
$W_{(aquecimento)}$	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

#### 4.6.3.1 Resultados para o Produto A

Serão apresentados os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada5, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_{Jmédio}$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de UA de 30 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B5-VE-FFTM-30”.

Os resultados apresentados pelas figuras que virão ratificam que a estratégia de estimação e controle proposta neste trabalho foi robusta a ponto de lidar com o problema da incrustação apresentado por esse processo de polimerização. Analisando a Figura 4.138 até a Figura 4.146 pode-se constatar que todas as variáveis apresentaram comportamentos análogos aos apresentados nos tópicos anteriores, o que confirma a robustez do controlador FFJM. No entanto, é importante destacar que os resultados não são tão bons quanto os encontrados pelo controlador FFTJ. Isso se verifica pela oscilação maior da temperatura do reator antes da adição do monômero.

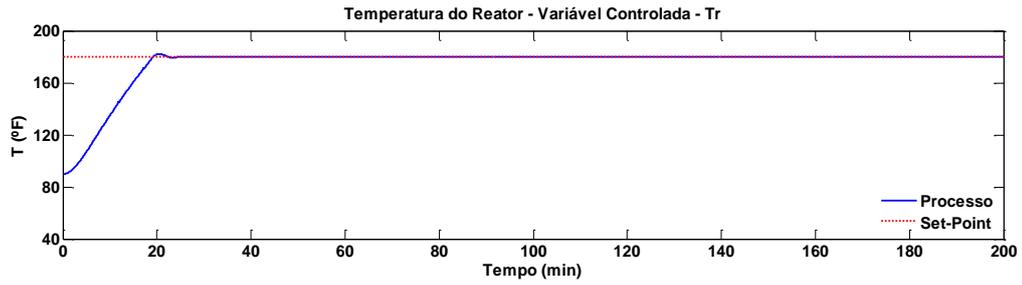


Figura 4.138: Temperatura do reator (PA-B5-VE-FFTM-30).

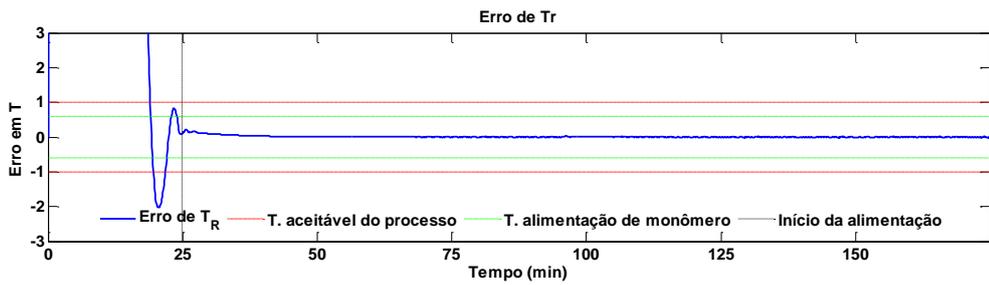


Figura 4.139: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B5-VE-FFTM-30).

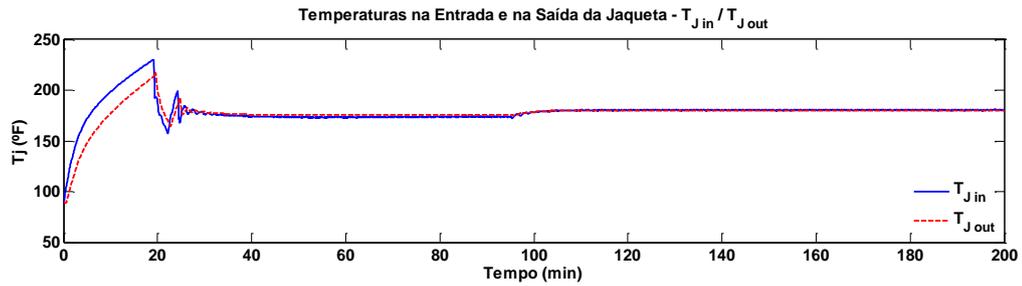


Figura 4.140: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B5-VE-FFTM-30).

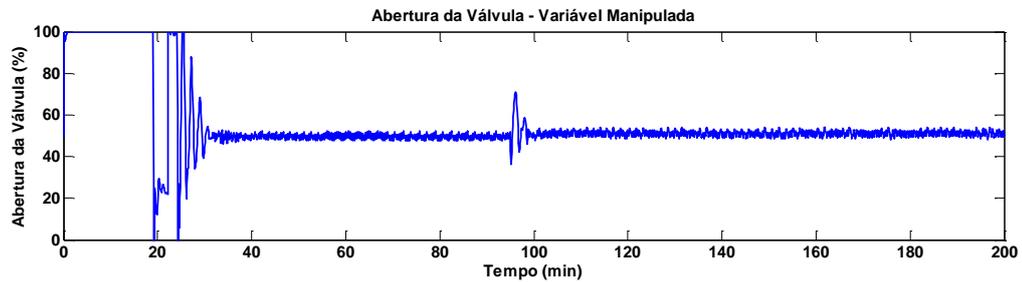


Figura 4.141: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B5-VE-FFTM-30).

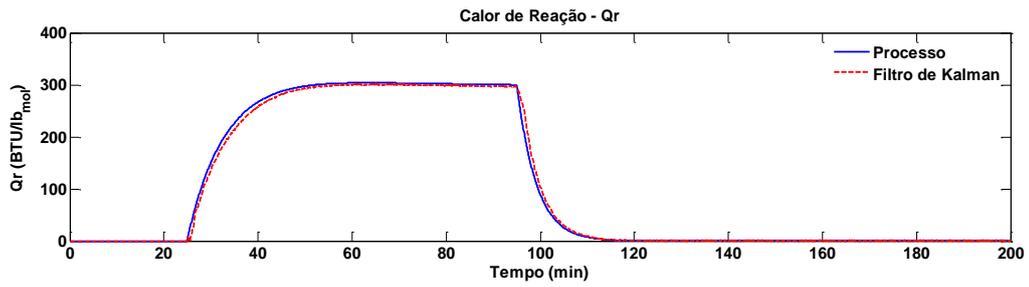


Figura 4.142: Evolução do calor de reação (PA-B5-VE-FFTM-30).

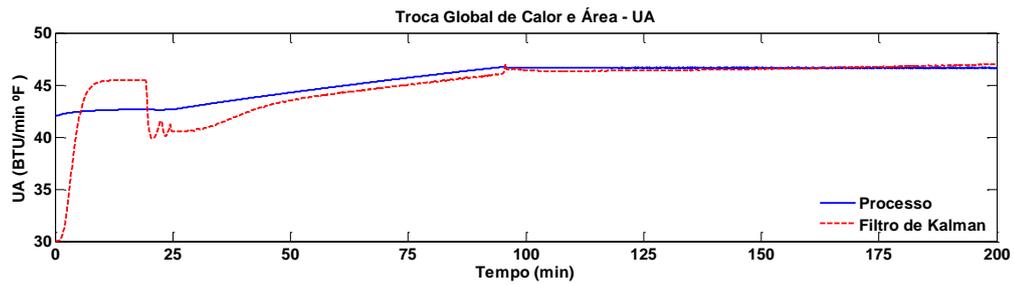


Figura 4.143: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B5-VE-FFTM-30).

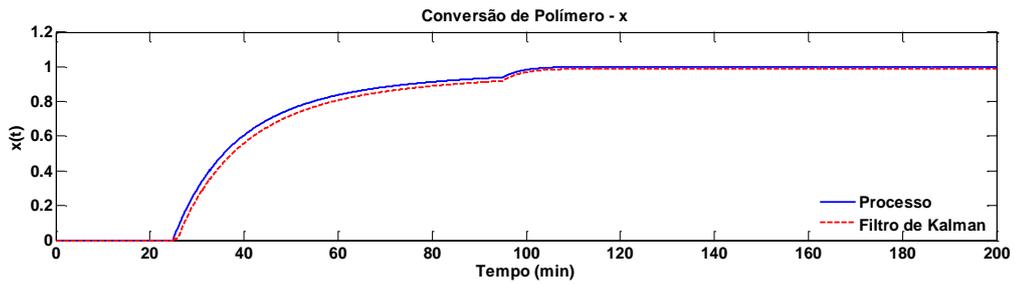


Figura 4.144: Conversão do polímero (PA-B5-VE-FFTM-30).

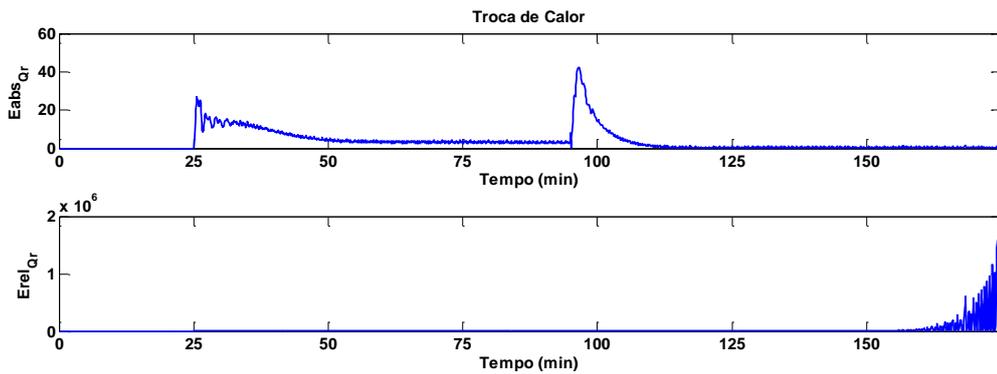


Figura 4.145: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PA-B5-VE-FFTM-30).

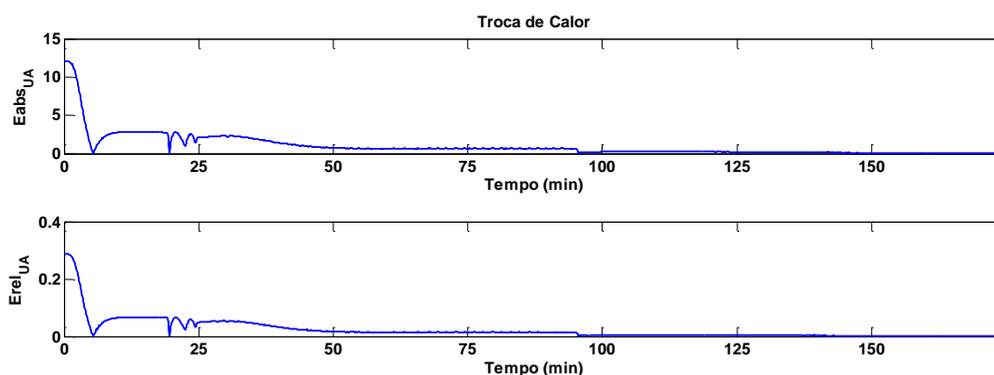


Figura 4.146: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B5-VE-FFTMs-30).

#### 4.6.3.2 Resultados para o Produto B

Os resultados para o produto B são análogos àqueles obtidos para o produto A no que tange a capacidade do controlador de lidar com o problema da incrustação. Nesse sentido, decidiu-se apresentar esses resultados no Anexo 7.2.1, visto que a leitura desse texto não é essencial para a compreensão da estratégia de estimação e controle apresentada neste trabalho.

#### 4.6.3.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_{Jmédio}$

Como visto na estratégia anterior, a questão da incrustação estudada talvez seja o maior desafio para a estratégia de controle proposta nessa seção. Isso ocorre em razão da sequência de bateladas que provocam aumento da incrustação o que afeta diretamente a troca térmica entre a jaqueta e o reator. O  $UA$  é influenciado pelas leituras das temperaturas do reator e da jaqueta. Já o  $Q_R$  só tem influência da temperatura do reator. Dessa forma, acreditava-se que a estimação de  $UA$  fosse dificultada, mas esse comportamento não foi evidenciado nos gráficos, observa-se, no entanto, que o erro relativo de  $UA$  é bem pequeno mostrando boa precisão da estimação.

A literatura também avalia o desempenho do controle para as bateladas de número 1 e 5. MacGregor e Clarke-Pringle (1997), Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011) obtiveram resultados excelentes, mantendo a temperatura controlada dentro da faixa tolerada para o processo. Porém, deve-se destacar que todos os trabalhos citados diferenciam-se da proposta feita nessa dissertação, uma vez que se buscou desenvolver um controlador baseado na estimação de parâmetros em tempo real através de modelos simplificados do balanço de energia com o uso do FKE e tal estratégia não leva em consideração diversas informações do processo, equipamento e produtos.

#### 4.6.4 Desempenho do controlador frente a mudanças climáticas

Um aspecto levantado no artigo original e que merece atenção é a influência da mudança climática no desempenho da estratégia de controle proposta. Essa preocupação é justificada porque o balanço de energia do reator, proposto por Chylla e Haase (1993), mostra claramente que a temperatura ambiente é uma das variáveis presentes nos modelos. É importante destacar que os monômeros são adicionados ao reator à temperatura ambiente e que o fluido refrigerante muda sua temperatura em função da estação climática. A dúvida que se coloca é se essa interferência é significativa para o controle que está sendo desenvolvido por esse trabalho. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na Tabela 4.12:

Tabela 4.12 – Parâmetros para simulação com mudança climática para FFTM.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-IN-FFTM-80	PB-B1-IN-FFTM-30
Produto	A	B
Clima	Inverno	Inverno
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	80	30
Controlador	FF TM	FF TM
Batelada	n° 1	n° 1
$K_{P(escravo)}$	2	2
$\tau_{(escravo)}$	8	8
$W_{(aquecimento)}$	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

#### 4.6.4.1 Resultados para o Produto A

Os resultados da simulação são apresentados a seguir para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no inverno, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_{Jmédio}$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de UA de 80 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-IN-FFTM-80”.

A Figura 4.147 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Verifica-se que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato validado através da Figura 4.148, onde

mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite aceitável do processo de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até 174,0 min

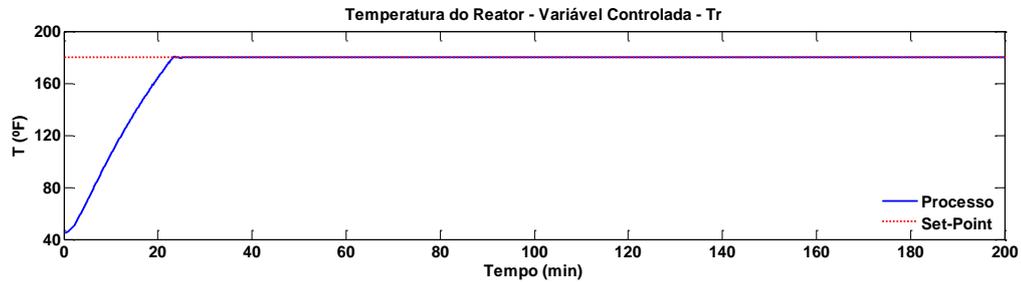


Figura 4.147: Temperatura do reator (PA-B1-IN-FFTM-80).

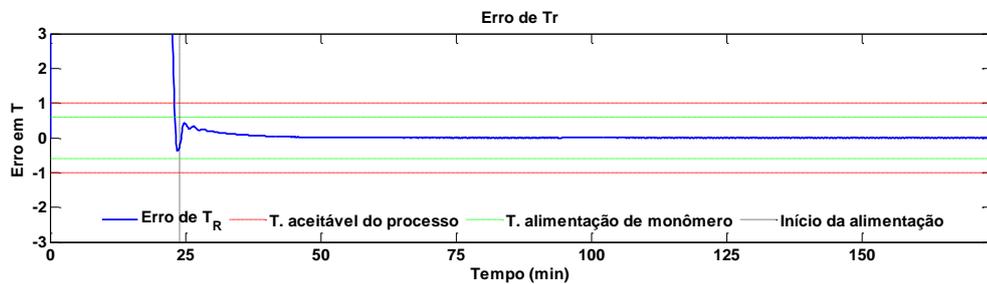


Figura 4.148: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-IN-FFTM-80).

Pode-se observar que as temperaturas de entrada e saída da jaqueta apresentam um perfil ligeiramente oscilatório logo após a entrada do monômero, mas que se atenua logo em seguida. A oscilação na temperatura de entrada ocorre em razão da dinâmica da abertura da válvula, conforme é mostrado na Figura 4.150.

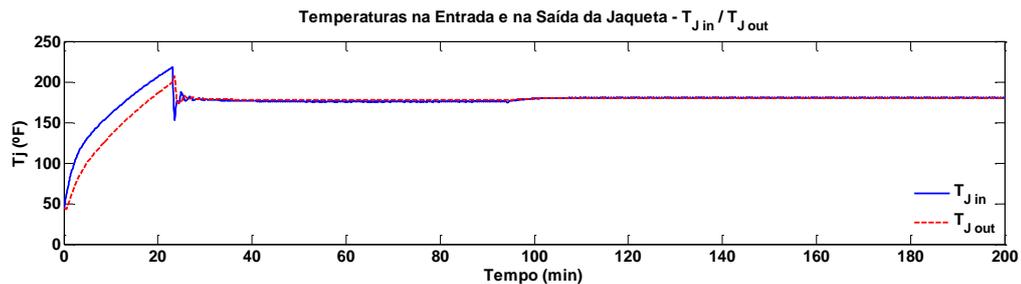


Figura 4.149: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-IN-FFTM-80).

A abertura da válvula, ilustrada na Figura 4.150, tem uma dinâmica no início, bastante distinta da que foi vista no estudo do caso base. Conforme já discutido em outras oportunidades, é preciso destacar que o comportamento da válvula se dá pelo que o modelo do processo determina como *setpoint*. Reforça-se ainda a questão dos modelos utilizados na estrutura de estimação e de controle serem simplificados, o que significa que não carregam consigo informações características do processo. No entanto, verifica-se que o controle de temperatura é bastante efetivo e mostra coerência com os resultados até aqui apresentados.

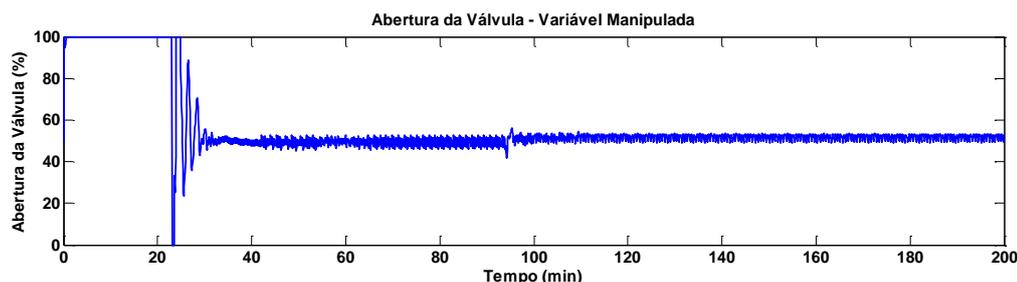


Figura 4.150: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-IN-FFTM-80).

Destaca-se, conforme Figura 4.151, a boa estimaco em relao ao valor real e que h um pequeno atraso da estimaco no incio da adio de monmero, mas que os resultados globais mostram que no h influncia significativa, pois o controle de temperatura da reao foi bastante efetivo.

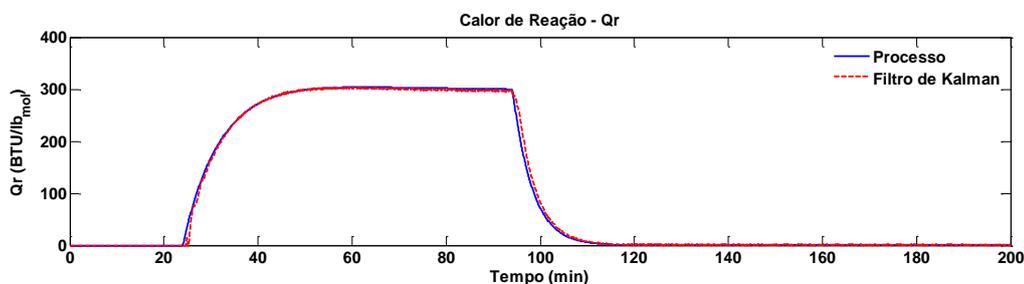


Figura 4.151: Evoluo do calor de reao (PA-B1-IN-FFTM-80).

Apresenta-se na Figura 4.152 o resultado da boa estimaco de  $UA$ , que mais uma vez convergiu para seu valor real aps um tempo relativamente curto.

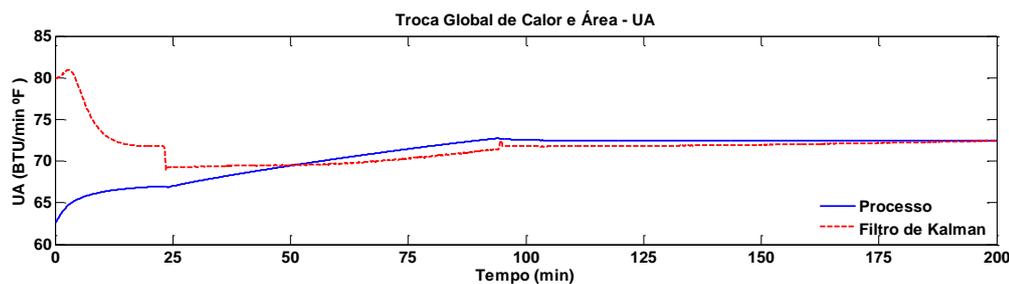


Figura 4.152: Coef. global de transferncia de calor e rea (PA-B1-IN-FFTM-80).

A Figura 4.153 ilustra a estimaco da converso do polmero para esta simulao e novamente mostrou bastante acurcia, reforando a viabilidade de monitorar o processo atravs da estratgia proposta nesse trabalho.

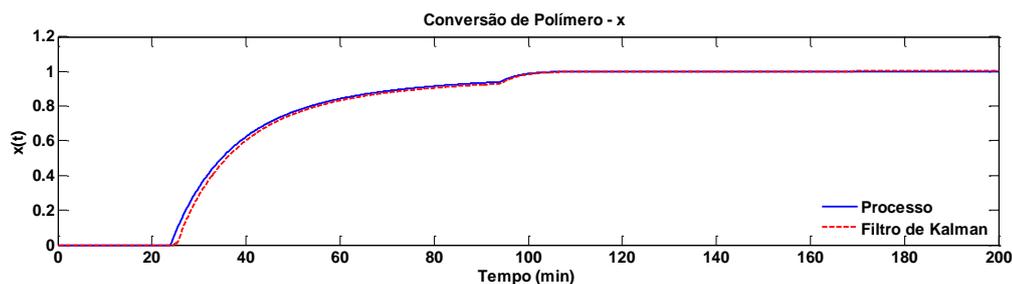


Figura 4.153: Conversão do polímero (PA-B1-IN-FFTM-80).

O erro relativo e absoluto da estimação  $Q_R$  é apresentado na Figura 4.154 e a Figura 4.155 apresenta as mesmas informações para  $UA$ . Verifica-se que a estimação dessas variáveis apresentam rigorosamente os mesmos comportamentos observados nas simulações anteriores.

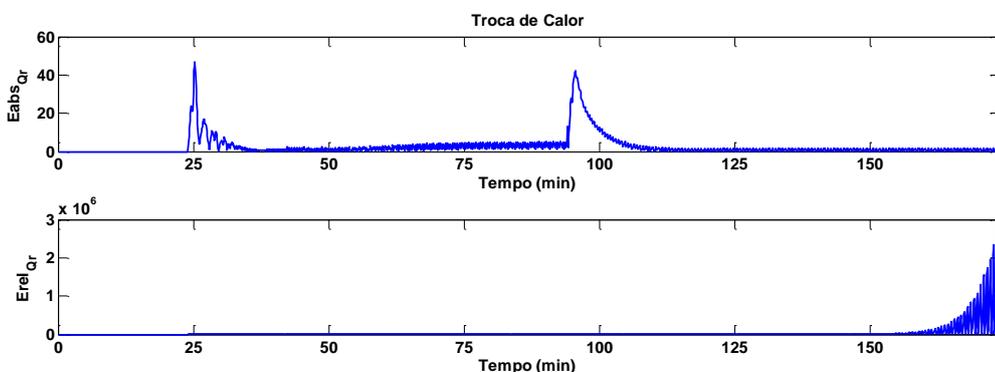


Figura 4.154: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PA-B1-IN-FFTM-80).

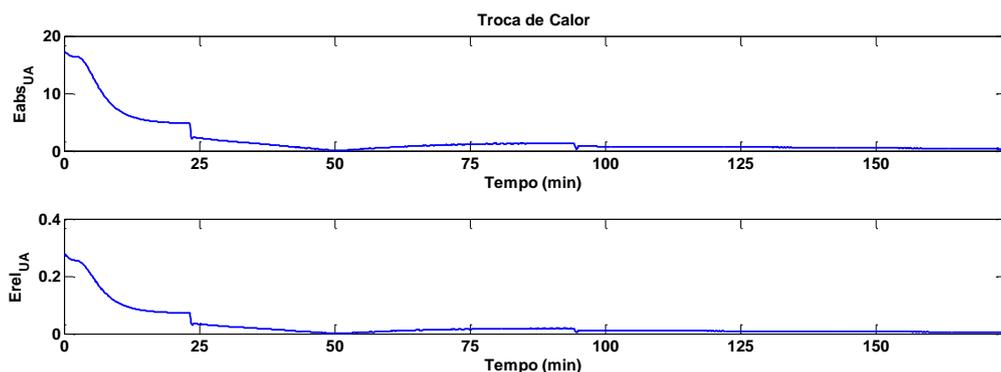


Figura 4.155: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-IN-FFTM-80).

#### 4.6.4.2 Resultados para o produto B

Assim como os resultados para o produto A, expostos no tópico anterior, os resultados para o produto B mostram a capacidade do controlador de lidar com o problema da mudança de temperatura ambiente. Nesse sentido, decidiu-se apresentar esses resultados no Anexo 7.3.1,

uma vez que a leitura desse texto não é essencial para a compreensão da estratégia de estimação e controle apresentada neste trabalho.

#### 4.6.4.3 Considerações sobre o Controlador Mestre *Feedforward* Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para $T_{J\text{médio}}$

Novamente, os resultados apresentados nos gráficos mostram um bom desempenho do sistema de controle desenvolvido mesmo havendo mudança na temperatura ambiente externa. Embora as mudanças das condições ambientais influenciem a dinâmica do processo a estratégia de controle mostrou-se eficiente e robusta, mantendo a temperatura de reação bem controlada.

Também se avalia o desempenho do sistema de controle frente a mudanças climáticas em trabalhos encontrados na literatura como os de MacGregor e Clarke-Pringle (1997), Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011) que obtêm excelentes resultados. Mais uma vez, cabe ressaltar que todos os trabalhos destoam do propósito inicial da proposta desse trabalho, uma vez que se busca um controle baseado na estimação de parâmetros em tempo real através de modelos simplificados do balanço de energia com o uso do FKE. A estratégia proposta não leva em consideração diversas informações do processo, equipamento e produtos.

#### 4.6.5 Desempenho do controlador frente a mudanças dos tempos mortos do processo

O trabalho de Chylla e Haase (1993) apresenta que mudanças nos valores nominais dos parâmetros relacionados aos tempos de atraso poderiam sofrer uma variação de até 25%. Certamente os modelos utilizados nesse trabalho negligenciam essas informações, no entanto, o processo real pode apresentar tal comportamento. Nesse sentido, a estratégia deverá ser eficiente a ponto de manter a temperatura controlada mesmo diante de tais mudanças. Os parâmetros utilizados para essa simulação encontram-se na Tabela 4.13:

Tabela 4.13 – Parâmetros para simulação com mudança nos tempos mortos.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-VE-FFTM-80-TM	PB-B1-IN-FFTM-30-TM
Produto	A	B
Clima	Verão	Inverno
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(\text{inicial})}$	0	0
$UA_{(\text{inicial})}$	80	30
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	n° 1	n° 1
$K_{P(\text{escravo})}$	2	2
$\tau_{(\text{escravo})}$	8	8
$\theta_1$	+25%	+25%
$\theta_2$	+20%	+20%

$W_{(aquecimento)}$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$
$Ni_{(aquecimento)}$	$[0,0; 0,1]$	$[0,0; 0,1]$
$W_{(reação)}$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$
$Ni_{(reação)}$	$[0,00; 0,02]$	$[0,00; 0,02]$

A codificação das simulações segue os mesmos critérios apresentados anteriormente, acrescenta-se apenas o índice TM para indicar que foi alterado o valor nominal dos tempos mortos originais.

#### 4.6.5.1 Resultados para o Produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $UA$  de 80 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTM-80-TM”.

A Figura 4.156 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. É possível constatar que a estrutura de controle implementada por este trabalho foi capaz de controlar adequadamente a temperatura do processo. Confirma-se através do resultado apresentado na Figura 4.157, que mostra que a temperatura de reação manteve-se no limite aceitável de  $\pm 1$  °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint* até o tempo final de 170,2 min.

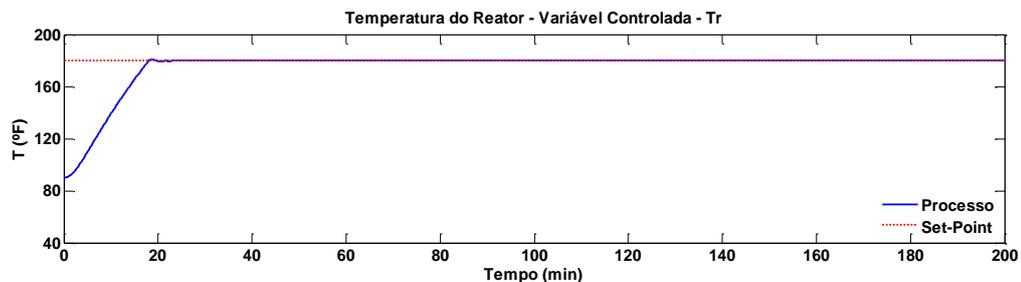


Figura 4.156: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

Também pode ser visto que outras variáveis apresentaram novamente comportamentos bastantes similares àqueles já vistos em seções anteriores. Essa condição comprova que a variação nos tempos mortos do processo em até 25% não compromete o desempenho da estratégia de estimação e controle desenvolvida neste trabalho.

Apresentam-se a seguir as figuras com o comportamento dinâmico das variáveis de interesse do processo.

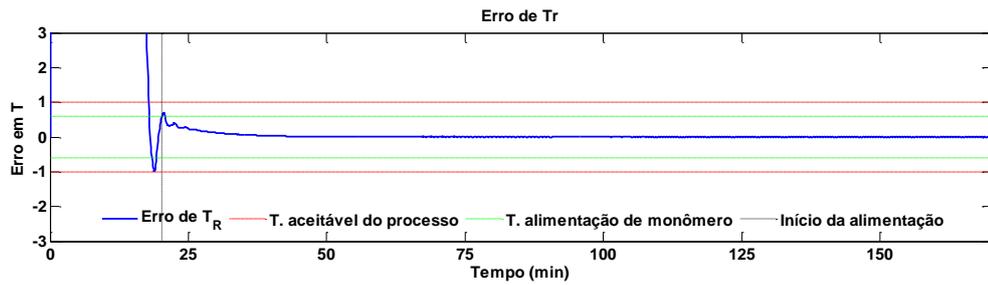


Figura 4.157: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

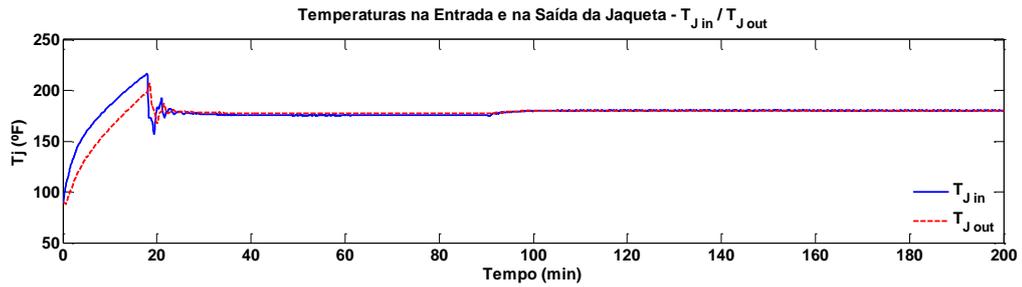


Figura 4.158: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

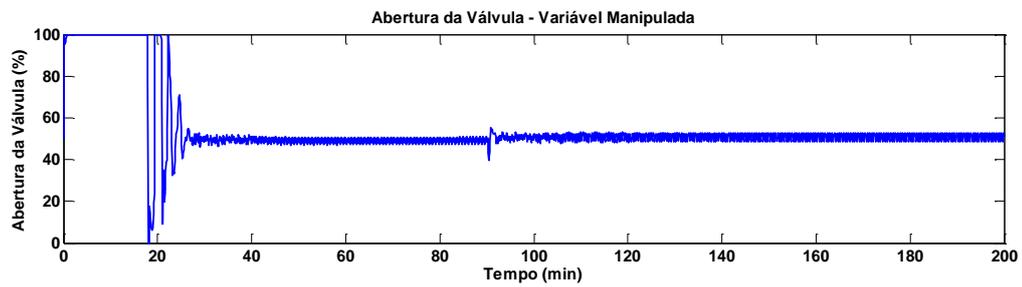


Figura 4.159: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

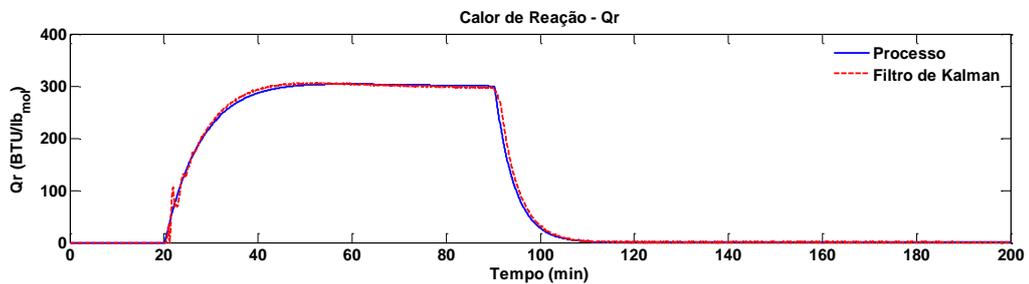


Figura 4.160: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

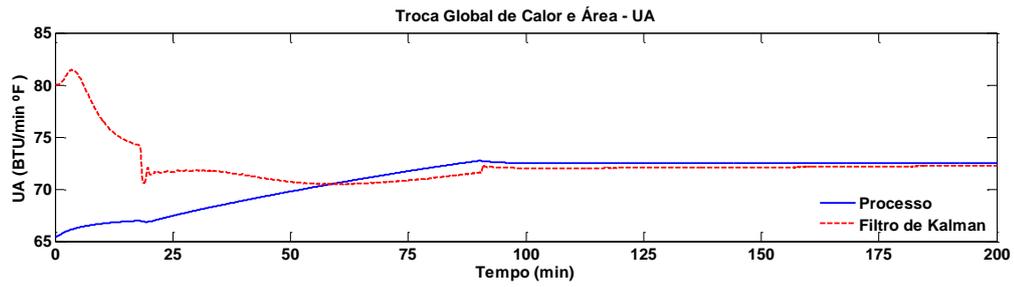


Figura 4.161: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

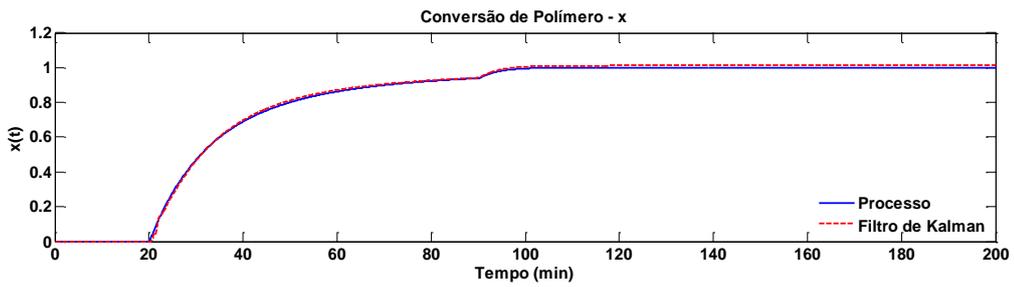


Figura 4.162: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

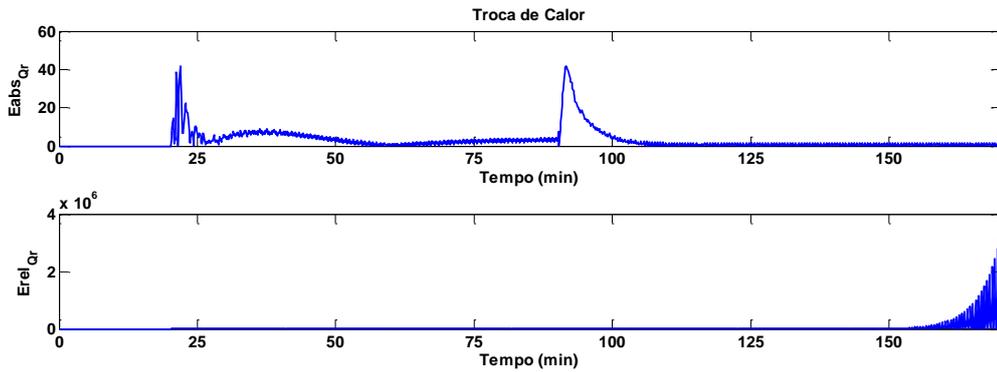


Figura 4.163: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

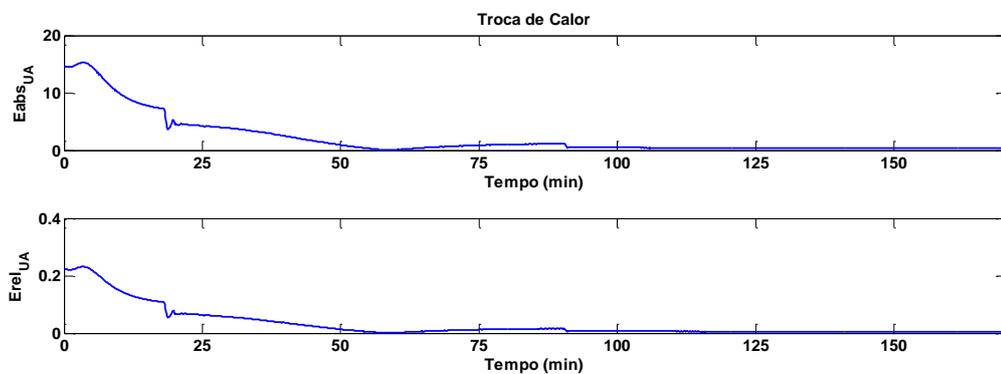


Figura 4.164: Erro absoluto e relativo da estimativa do calor de reação (PA-B1-VE-FFTM-80-TM).

#### 4.6.5.2 Resultados para o produto B

Os resultados para o produto B são análogos àqueles obtidos para o produto A no que tange a capacidade do controlador de lidar com o problema da variação nos tempos mortos do processo. Nesse sentido, decidiu-se apresentar esses resultados no Anexo 7.4.1, visto que a leitura desse texto não é essencial para a compreensão da estratégia de estimação e controle apresentada neste trabalho.

#### 4.6.5.3 Considerações sobre o Controlador Mestre *Feedforward* Baseado na Estimação de Parâmetros com uso do Modelo para $T_{J\text{médio}}$

Vale lembrar que na estrutura do presente trabalho não se utilizou as constantes de tempo, pois os modelos desenvolvidos são simplificados. Entretanto, o controle implementado se mostrou capaz de absorver essas mudanças e manter o processo bem controlado. Mudanças sutis na estimação de  $Q_R$  e  $UA$  ocorreram, pois a mudança nos tempos mortos do processo provocam alterações em seu comportamento, dessa forma, o filtro atribui essas “falhas” à estimação dos parâmetros, mas não impacta na ação de controle.

Em seu trabalho, Helbig *et al.* (1996) mostra que os resultados alcançados foram bons tanto para o produto A quanto para o B através da estrutura *Model Predictive Control* (MPC). No entanto, quando utilizavam uma constante de tempo 25% maior, uma condição possível do processo, segundo o artigo original, ocorriam eventuais valores de temperatura fora da faixa aceitável (que para o seu caso é de 0,6 K).

O trabalho de Graichen *et al.* (2006) obtêm resultados bastante satisfatórios com o trabalho que realizou para a estratégia de controle de temperatura da reação para os produtos A e B. Mesmo com variações de 20% a 25% nos tempos mortos, conforme previsto por Chylla e Haase (1993), seu controle apresentou bons desempenhos. Importante lembrar, nesse momento, a característica da estratégia do trabalho desses autores que diferencia-se da proposta nessa dissertação.

### 4.7 Desempenho da Estratégia de Estimação e Controle Mediante Incerteza no Calor Específico

Já foi mostrado que as estratégias que foram concebidas para atender aos objetivos desse trabalho são baseadas na estimação de parâmetros em tempo real com o Filtro de Kalman Estendido (FKE). As variáveis  $T_R$ ,  $T_J$  foram consideradas estados determinísticos e que estão disponíveis a cada tempo de amostragem, uma vez que são facilmente medidas no processo. Os parâmetros  $Q_r$  e  $UA$  foram considerados estados estocásticos, pois não são medidas no processo. Algumas variáveis como  $F_w$ ,  $T_{amb}$ ,  $UA_{loss}$  bem como,  $Cr$ ,  $Cpw$ ,  $Cpm$  e  $Wcj$ , foram assumidas como constantes.

Como já se sabe o  $Cr$  é função da reação, portanto varia com o tempo e, portanto, não é constante. Além disso, deve-se considerar que para um reator multipropósitos o calor específico

certamente será diferente para diversos produtos, meios reacionais, etc. Contudo, o objetivo de obter um controlador que independa de informações de produto e do processo não seria alcançado, caso essa mudança de calor específica interfira no desempenho do controlador. Desse modo, é extremamente conveniente que se demonstre que a estratégia adotada é capaz de manter o processo adequadamente controlado e monitorado, mesmo para os casos em que os calores específicos sejam diferentes.

#### 4.7.1 Desempenho do controlador de temperatura dos produtos A e B

A seguir serão mostrados os resultados das simulações para reações cujos calores específicos tenham valores de  $\pm 20\%$  em relação ao valor de referência adotado no trabalho. Os parâmetros para essa simulação encontram-se na Tabela 4.14.

Tabela 4.14 – Parâmetros para simulação com incerteza no calor específico.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+	PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-
Produto	A	B
Clima	Verão	Inverno
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	80	30
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	n° 1	n° 1
$K_{P(escravo)}$	7	7
$\tau_{(escravo)}$	11	11
$C_p$	+20%	-20%
$W_{(aquecimento)}$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

A codificação das simulações segue os mesmos critérios apresentados anteriormente, acrescenta-se apenas o índice CP+ (+20%) ou CP- (-20%) para indicar se está sendo considerada a variação da capacidade calorífica.

##### 4.7.1.1 Resultados para o produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada 1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de UA de 80 BTU / min °F e calor específico 20% maior. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+”.

Observa-se mais uma vez que o desempenho da estratégia de estimação e controle proposta nesta dissertação foi bastante eficiente e, por conta disso, as variáveis de processo apresentaram praticamente o mesmo comportamento. Isto significa que o controlador foi capaz de lidar adequadamente com as incertezas sobre o valor do calor específico. Sendo assim, apresentam-se a seguir apenas as figuras com o comportamento das respectivas variáveis, visto que a discussão dos resultados seria bastante similar às aquelas apresentadas nos tópicos anteriores.

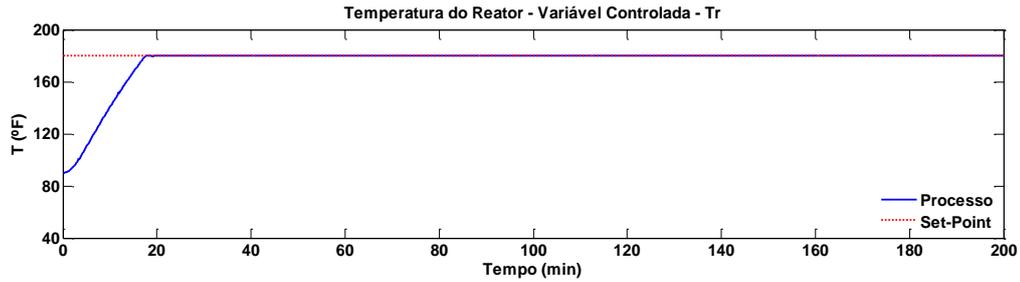


Figura 4.165: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

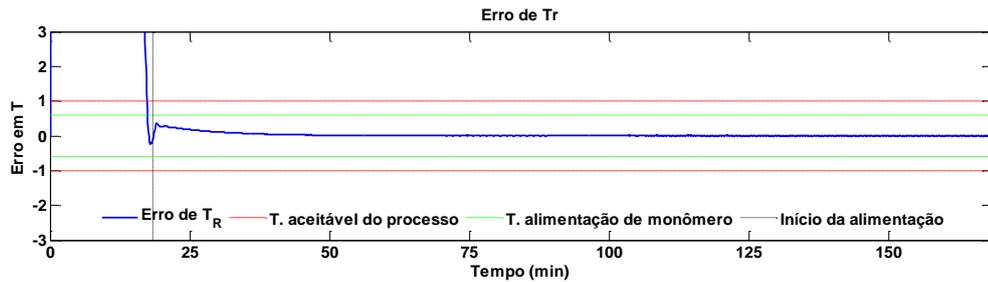


Figura 4.166: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

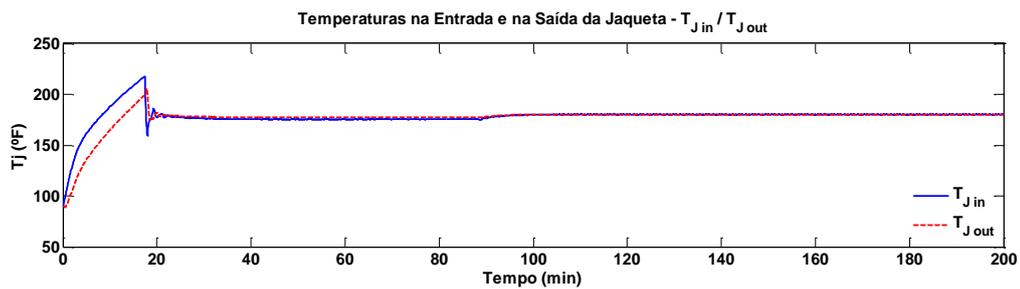


Figura 4.167: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

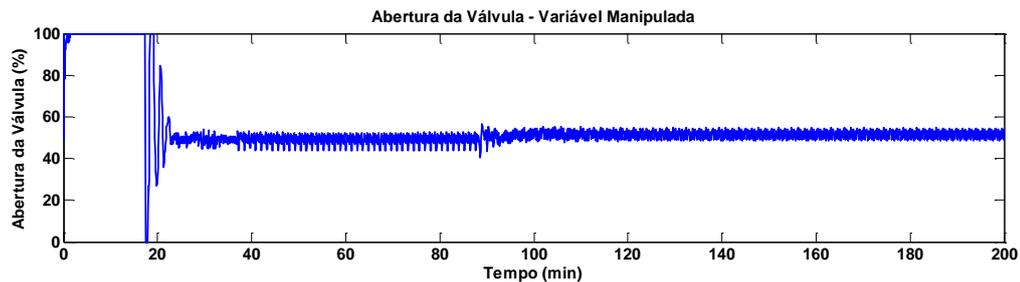


Figura 4.168: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

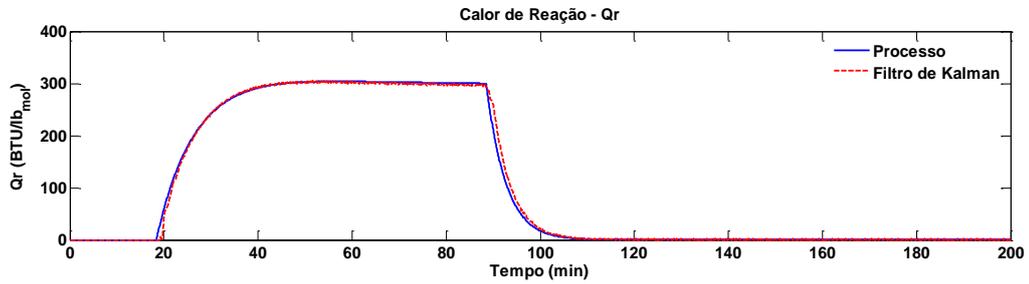


Figura 4.169: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

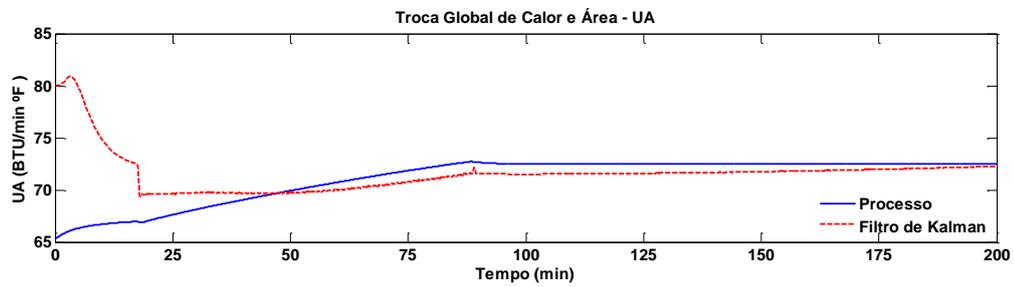


Figura 4.170: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

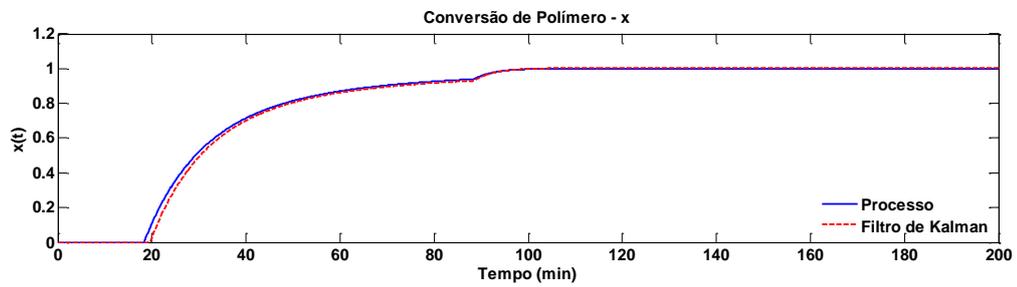


Figura 4.171: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

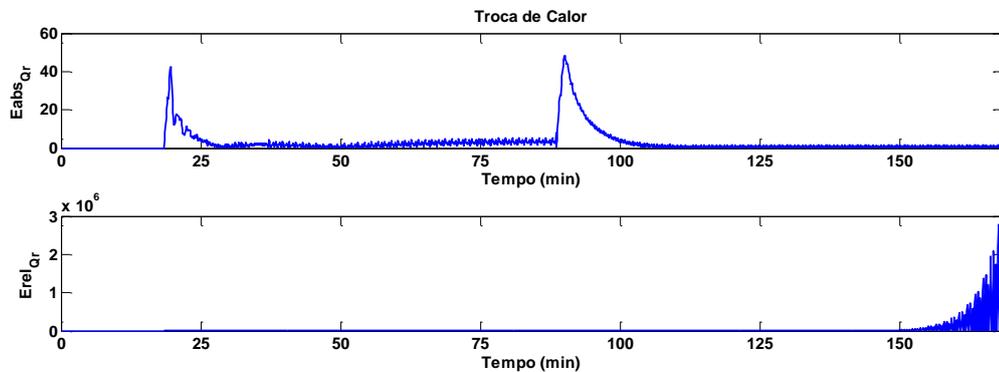


Figura 4.172: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

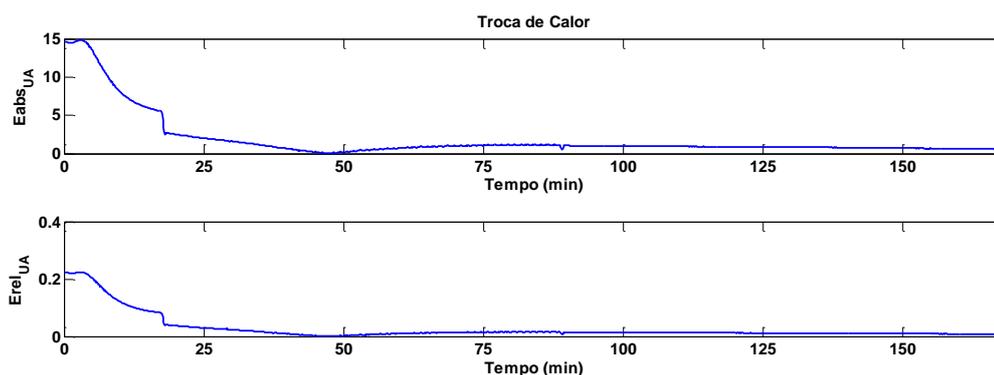


Figura 4.173: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-CP+).

#### 4.7.1.2 Resultados para o produto B

Os resultados para o produto B são análogos àqueles obtidos para o produto A no que tange a capacidade do controlador de lidar com o problema da variação nos tempos mortos do processo. Nesse sentido, decidiu-se apresentar esses resultados no Anexo 7.4.1, visto que a leitura desse texto não é essencial para a compreensão da estratégia de estimação e controle apresentada neste trabalho.

#### 4.7.1.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_I$

Os resultados apresentados mostram que mesmo com a mudança do calor específico o processo foi controlado adequadamente. Isso demonstra que a estratégia de estimação e controle é robusta e independe da informação do valor real do calor específico. Dessa forma, se na prática esta informação não for disponível, pode-se adotar um determinado valor que a estratégia proposta manterá o processo sob controle e bem monitorado.

Não se encontrou na literatura uma avaliação como essa, mesmo porque os trabalhos analisados fizeram uso, de modo geral, dos modelos completos, com uma ou outra alteração de modo que se encaixasse em suas estratégias, porém sem desconsiderar as informações específicas do processo.

### 4.8 Desempenho da Estratégia de Estimação e Controle Mediante Incerteza no Calor Perdido

Pensando na possibilidade de não se conhecer a taxa de calor perdida pelo sistema reacional para o meio ambiente ( $UA_{loss}$ ), como ocorre, por exemplo, em processos novos, em trocas de instalações, perda da informação, etc., decidiu-se testar a estratégia de estimação dos parâmetros e de controle proposta. É bem verdade que a estimação de  $UA_{loss}$  pode ser feita através de um teste relativamente simples no reator, por exemplo, com água e sob aquecimento.

No entanto, deseja-se pensar na possibilidade onde, por qualquer razão, esse teste não seria possível de ser realizado.

#### 4.8.1 Simulação dos produtos A e B

Analisando os modelos simplificados do balanço de energia para o reator e a jaqueta, observa-se que o termo  $UA_{loss}$  aparece na equação do balanço da temperatura do reator, portanto, está ligado à estimação de  $Q_R$ , mas não à estimação de  $UA$ . Os parâmetros para essa simulação encontram-se na Tabela 4.15.

Tabela 4.15 – Parâmetros para simulação com  $UA_{loss}$  nulo.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlo	PB-B1-IN-FFTJ-30-UAlo
Produto	A	B
Clima	Verão	Inverno
Temp. Reação	180°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_{R(inicial)}$	0	0
$UA_{(inicial)}$	80	30
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	nº 1	nº 1
$K_{P(escravo)}$	7	7
$\tau_{(escravo)}$	11	11
$UA_{loss}$	0	0
$W_{(aquecimento)}$	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]	[10 <sup>-1</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ]
$Ni_{(aquecimento)}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(reação)}$	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]	[10 <sup>-3</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 10 <sup>-2</sup> ; 1]
$Ni_{(reação)}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

A codificação das simulações segue os mesmos critérios apresentados anteriormente, acrescenta-se apenas o índice  $UAlo$  indicando que a simulação trabalha com  $UA_{loss}$  desconhecido (nulo).

##### 4.8.1.1 Resultados para o produto A

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada 1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle e valor inicial de  $UA$  de 80 BTU / min °F e o  $UA_{loss}$  é nulo. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlo”.

O comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1 é apresentada na Figura 4.174. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo.

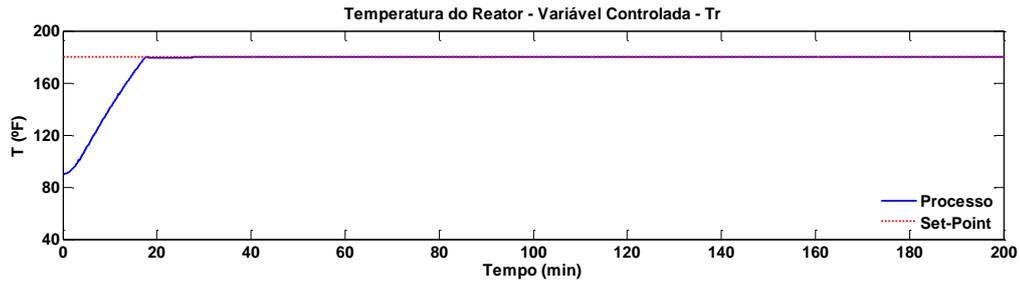


Figura 4.174: Temperatura do reator (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlo).

Observa-se uma defasagem entre o valor de  $Q_R$  estimado e o valor real, conforme mostra a Figura 4.175. Isso ocorre porque o balanço de energia não está computando a carga térmica perdida de  $UA_{loss}$  com isso o modelo atribui o erro ao calor liberado pela reação e o estima abaixo do valor real. Ainda assim, observa-se que a estimação é capaz de acompanhar a dinâmica de entrada e saída de monômeros e que os resultados globais mostram que não há influência significativa no desempenho do controlador.

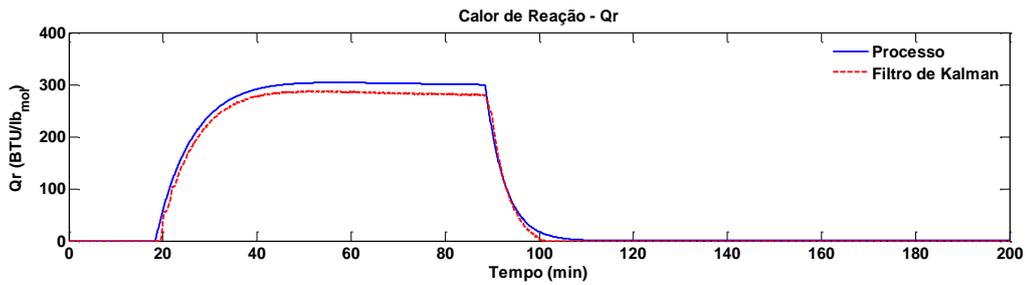


Figura 4.175: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlo).

Por outro lado, a estimação de  $UA$  apresentou resultado semelhante aos obtidos anteriormente, visto que esta variável não está relacionada a  $UA_{loss}$  na equação do FKE e, portanto, não sofre influência direta deste parâmetro.

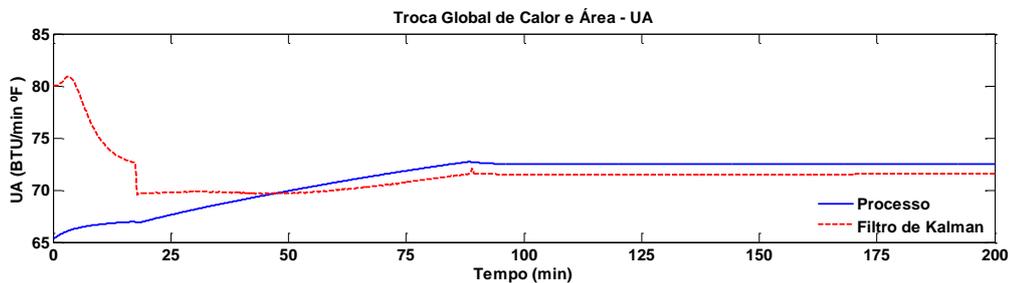


Figura 4.176: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlo).

A conversão do polímero é uma função do calor de reação, portanto, é esperado que a estimação da conversão tenha o comportamento semelhante ao da estimação de  $Q_R$ . Contudo, nota-se pela Figura 4.177 que a conversão acompanha o comportamento da variável real, ainda que defasada.

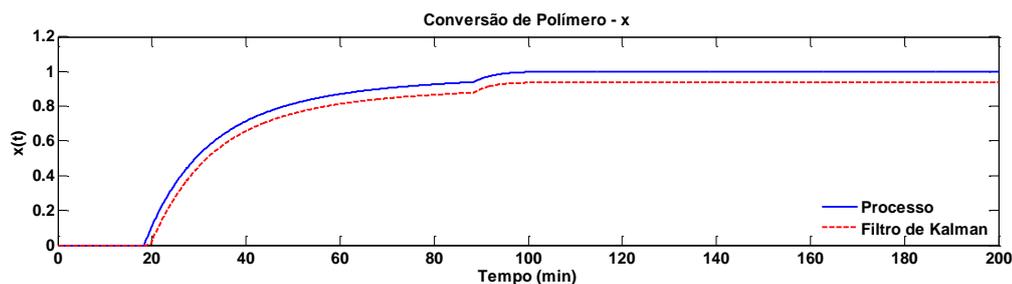


Figura 4.177: Conversão do polímero (PA-B1-VE-FFTJ-80-UA1o).

#### 4.8.1.2 Resultados para o produto B

Os resultados para o produto B são análogos àqueles obtidos para o produto A no que tange a capacidade do controlador de lidar com o problema da falta de informação sobre a taxa de calor perdida para o meio ambiente. Nesse sentido, decidiu-se apresentar esses resultados no Anexo 7.6, visto que a leitura desse texto não é essencial para a compreensão da estratégia de estimação e controle apresentada neste trabalho.

#### 4.8.1.3 Considerações sobre o controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com uso do modelo para $T_I$

Analisando os resultados apresentados acima é possível concluir que mesmo sem conhecer o valor de  $UA_{loss}$ , portanto, admitindo-se como sendo zero, a estimação de  $UA$  permanece boa, assim como os resultados até agora apresentados. A estimação de  $Q_R$  teve uma perda de qualidade, uma vez que divergiu da curva real, embora mantendo a tendência da evolução da variável. Já o monitoramento da conversão ( $x$ ) também apresentou um descolamento da curva real e, por esse motivo, não permitiria monitorar o processo adequadamente. Apesar de tudo, a temperatura da reação manteve-se controlada dentro da faixa aceitável.

Considerando o início da análise desse tópico, pode-se entender que a perda da informação do calor perdido ( $UA_{loss}$ ) alterou a capacidade do FKE estimar com precisão  $Q_R$ . Isso ocorreu porque o  $UA_{loss}$  só interfere na estimativa do calor de reação, logo, os erros encontrados serão atribuídos ao próprio  $Q_R$ , e como o modelo está recebendo a informação de que não há perda de energia essa carga energética que sobraria é compensada através de uma estimação menor do próprio calor de reação. Consequentemente, como a conversão depende diretamente do valor de  $Q_R$ , erros na estimação do calor de reação interferem no seu cálculo.

Por outro lado, o desempenho do controlador não sofreu interferência dessa falta de informação, o que pode ser explicado pelo fato de que o próprio  $Q_R$  é penalizado em sua estimativa por falta da informação de  $UA_{loss}$  e, dessa forma, já há uma compensação do balanço energético. Esses resultados são bastante positivos, pois mostram que mesmo que não se conheça o calor perdido pelo processo a estratégia proposta é eficiente, pois mantém o processo controlado.

## 4.9 Considerações Sobre as Estratégias de Controle Implementadas

### 4.9.1 Índices de qualidade para as estratégias de controle

A fim de analisar sistematicamente os resultados obtidos com a implementação da estratégia de estimação e controle, apresenta-se na

Tabela 4.16 um resumo com os principais resultados quantitativos para as estratégias desenvolvidas.

Os resultados desse trabalho foram comparados com os resultados obtidos por Vasanthi *et al.* (2011). Os autores utilizam um polinômio de aquecimento, portanto, o *setpoint* varia durante o aquecimento fazendo com que a diferença entre variável controlada e a temperatura desejada seja pequena, mantendo os dois parâmetros próximos ao longo do tempo.

Para contornar essa diferença, uma vez que essa dissertação não utiliza polinômio de aquecimento, mas um algoritmo onde o *setpoint* já está estabelecido desde o início do aquecimento e sem mantê-lo sempre o mesmo durante o período de reação, calculou-se os índices totais (IAE, ISE e ITAE) e também os índices apenas para a etapa de reação (ISE\_reaç e ITAE\_reaç), buscando obter uma equiparação dos resultados que seguem na

Tabela 4.16.

A codificação segue os mesmos critérios até agora definidos, considerando, apenas que para o controlador do artigo que está sendo comparado acrescenta-se o nome do autor e seus dois controladores.

Analisando a tabela, ratifica-se que o desempenho do controlador PI desenvolvido nesse trabalho é excelente. Além disso, percebe-se estudando a tabela que os índices IAE são bastante equivalentes entre os dois trabalhos, no entanto, os índices ISE são visivelmente melhores para o trabalho dos autores consultados. Isso se explica, como já informado anteriormente, pois o processo desenvolvido por essa dissertação considera o *setpoint* constante tanto na etapa de aquecimento, quanto na etapa de reação, o que não ocorre com o trabalho de Vasanthi *et al.* (2011). Os índices ITAE foram colocados para consultas futuras.

Quando se faz uma análise entre os índices relacionados apenas com a etapa de reação (\_reaç.), os resultados são muito melhores para a estratégia de controle desenvolvida por esse trabalho. Dessa forma, fica óbvio concluir sobre a viabilidade da estratégia proposta.

Tabela 4.16 – Índices de qualidade das estratégias de controle.

INDICADORES QUALITATIVOS DAS ESTRATÉGIAS DE CONTROLE						
	IAE	ISE	ITAE	IAE_reaç	ISE_reaç	ITAE_reaç
PA-B1-VE-PI-0	883,20	52.326,72	6.651,77	11,32	2,80	791,63
PA-B5-VE-PI-0	972,77	59.095,41	7.980,00	17,93	6,24	1.222,60
PA-B1-IN-PI-0	1.619,73	144.731,67	14.002,40	10,67	2,55	808,81
PA-B5-IN-PI-0	1.787,83	162.845,00	16.791,01	16,75	5,48	1.252,44
PA-B1-VE-FFTJ-80	835,13	53.034,37	5.127,98	8,73	3,37	270,76
PA-B1-VE-FFTJ-80	936,51	60.596,02	6.213,89	2,72	0,32	96,42
PA-B1-IN-FFTJ-80	1.583,98	147.641,51	12.348,69	9,60	4,08	354,44
PA-B5-IN-FFTJ-80	1.771,44	167.706,71	15.069,67	3,70	0,57	152,53
PA-B5-VE-FFTJ-30	936,78	60.596,21	6.220,53	2,59	0,28	94,79
Vasanthi Cascata PA-B1-VE	1.455,50	764,58	NA	NA	NA	NA
Vasanthi Cascata PA-B5-VE	1.719,60	994,43	NA	NA	NA	NA
Vasanthi Self-tunig PA-B1-VE	449,02	54,96	NA	NA	NA	NA
Vasanthi Self-tunig PA-B5-VE	579,05	85,61	NA	NA	NA	NA
Vasanthi Cascata PA-B1-IN	1.413,80	848,04	NA	NA	NA	NA
Vasanthi Cascata PA-B5-IN	1.717,30	1.175,60	NA	NA	NA	NA
Vasanthi Self-tunig PA-B1-IN	458,65	58,94	NA	NA	NA	NA
Vasanthi Self-tunig PA-B1-IN	556,18	75,57	NA	NA	NA	NA

#### 4.9.2 Índices de qualidade para as estimações de $Q_R$ e $UA$

Vale destacar que os erros absolutos e relativos, tanto de  $Q_R$  quanto de  $UA$ , já foram apresentados graficamente ao longo do trabalho para diversas simulações realizadas, o que possibilita avaliar e comparar o desempenho de cada estrutura de controle sujeita a determinadas condições.

Ficou claro ao longo do trabalho que os erros associados à estimação de  $UA$  foram sempre menores que os erros associados à estimação de  $Q_R$ , não correspondendo às expectativas, pois para a estimação do  $UA$  os erros associados aos modelos da jaqueta e do reator são considerados e para o  $Q_R$  apenas o modelo do reator é utilizado para o seu cálculo.

No entanto, com o intuito de complementar a análise de índices qualitativos, na Tabela 4.17 são apresentados os resultados dos erros médios acumulados nas estimações de  $Q_R$  e  $UA$  para algumas simulações realizadas no desenvolvimento desse trabalho. O índice *absm* representa o erro absoluto médio da variável correspondente, o índice *relm* representa o erro relativo médio da variável correspondente. A Tabela 4.17 apresenta o resultado de algumas das simulações apresentadas nesse trabalho.

Observa-se que os erros médios associados a  $Q_R$  são maiores que os erros médios associados a  $UA$ . Porém, pelos resultados obtidos ao longo desse trabalho evidenciam que as simulações foram bem conduzidas e foram alcançados excelentes resultados de controle de temperatura com as estratégias desenvolvidas.

Tabela 4.17 – Erros médios absoluto e relativo de  $Q_R$  e  $UA$ .

	Erro de UA		Erro de QR	
	UAabsm	UArelm	QRabsm	QRrelm
PA-B1-VE-PI-FK	2	0,03	2,95	31,26
PA-B5-VE-PI-FK	2,49	0,06	4	21,53
PA-B1-VE-FFTJ-80	2,04	0,03	2,77	318
PA-B5-VE-FFTJ-80	2,7	0,06	4,3	125
PA-B1-VE-FFTM-80	2,03	0,03	2,7	171
PA-B5-VE-FFTM-80	2,51	0,06	3,89	38
PA-B1-IN-FFTJ-80	2,14	0,03	2,73	87
PA-B5-IN-FFTJ-80	2,59	0,06	4,19	29
PB-B1-IN-FFTJ-30	0,99	0,02	19	0,333
PB-B5-IN-FFTJ-31	1,49	0,04	18,78	0,3

O resultado geral mostra que o processo de estimação está adequado e apresenta, de modo geral erros pequenas entre o estimado e o real.

## 5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

### 5.1 Conclusão e Aprendizado do Trabalho

O algoritmo de alimentação de monômero que foi desenvolvido e implementado para que a alimentação ocorresse de modo automático é um diferencial em relação a outros trabalhos encontrados na literatura específica. Essa estratégia contribuiu significativamente para a melhoria de todo o processo, visto que retira o critério de subjetividade ou o excesso de margem de segurança na tomada de decisão para o início da alimentação do monômero e transfere toda a responsabilidade para a estratégia de controle implementada, que passa a ser responsável por garantir o início do processo dentro de parâmetros aceitáveis. Nesse sentido, há uma otimização do processo, uma vez que o tempo de alimentação não só foi controlado, como minimizado, e a alimentação só foi iniciada quando o critério pré-estabelecido foi alcançado.

Os controladores PI que foram implementados no sistema de controle em cascata original ou quando combinados com o controlador *feedforward*, desenvolvido com base na estimação de parâmetros, mostraram-se muito eficientes e robustos para controlar o processo dentro da faixa desejada. Este fato gerou dúvidas em relação ao mau desempenho desses controladores apresentados em outros trabalhos encontrados na literatura, onde muitas vezes o desempenho do controlador (PI ou PID) foi ruim.

A estratégia de estimação e controle desenvolvida nesse trabalho mostrou ser eficiente e robusta para diversas situações distintas e adversas, que, inclusive, exigiram esforço por parte do controlador para manter a variável controlada ( $Tr$ ) dentro da faixa de trabalho esperada. As simulações foram feitas para diferentes produtos (polímeros A e B), variações na temperatura ambiente (verão e inverno), mudanças do meio reacional (fator de incrustação, mudança de calor específico...) etc. e ainda assim as estratégias apresentadas mantiveram bons desempenhos.

Os modelos que foram propostos para o balanço de energia do reator e da jaqueta, de modo que pudessem viabilizar a estimação dos parâmetros  $UA$  e  $Qr$ , apresentam apenas duas equações bastante simplificadas, o que torna a determinação da matriz Jacobiana elementar comparando com trabalhos que apresentavam 4, 5 ou 6 equações para os modelos utilizados para a estimação, sendo possível determinar o Jacobiano analiticamente.

O controle foi feito com base na estimação em tempo real de parâmetros  $UA$  e  $Qr$  através do próprio balanço de energia. Porém, os modelos dos balanços de energia foram extremamente simplificados, pois eliminaram-se informações originalmente necessárias como constantes de tempo, tempos mortos, área de reação etc., o que tornou a estratégia bastante simples, prática e generalista, uma vez que o uso desses modelos simplificados várias informações dependentes dos reagentes ou de características específicas do processo são desnecessárias para a estratégia de controle.

Os resultados encontrados com as simulações, seja com a implementação do controle em cascata, seja na implementação do controle com estimativas em tempo real, mostraram que a modelagem proposta por Chylla e Haase (1993) é consistente e não carece das correções observadas em outros trabalhos. Esse entendimento é importante, uma vez que muitos trabalhos

têm obtido bons resultados através da manipulação de algumas considerações, que pelos nossos resultados mostram ser desnecessários.

A estimativa de parâmetros em tempo real através do uso do Filtro de Kalman Estendido para fins de controle de reatores de polimerização mostrou-se uma alternativa viável para aplicações multipropósito, onde não se dispõe de muitas informações do processo (reagentes, produtos, parâmetros de processo, etc.).

## 5.2 Perspectivas para a Estimação em Tempo Real Através do FKE

O presente trabalho teve a pretensão de apresentar uma alternativa ao controle e monitoramento de processos de polimerização buscando se inserir na literatura de controle de processos. No entanto, ficou longe de nossas intenções apresentar um trabalho definitivo. Temos ciência de que muitas lacunas permanecem e com isso abre-se espaço para novas investigações e avaliações sobre o tema.

Ao chegarmos ao final dessa dissertação esperamos ter contribuído com um estudo significativo e relevante para a utilização do Filtro de Kalman Estendido na estimação em tempo real dos parâmetros de  $Qr$  e  $UA$  para o controle de temperatura de reatores de polimerização em batelada, bem como ter demonstrado a aplicabilidade da estratégia desenvolvida.

Objetivando perspectivas futuras de continuidade do trabalho e investigação por outros interessados, citamos algumas alternativas e opções que poderiam ser utilizadas complementando as estratégias desenvolvidas até então:

- 1) Pensando que, em questões práticas, as medidas podem estar disponíveis em frequências menores deve-se verificar se novos modelos para o comportamento dinâmico dos estados estocásticos podem trazer benefícios para as estimações, controle e monitoramento cujos processos tenham maiores tempos de amostragem.
- 2) Avaliar os benefícios para a estimação, controle e monitoramento de se considerar a variável  $T_{ji}$  como um estado estocástico, buscando reduzir sua influência nas correções feitas em  $UA$ .

## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABONYI, J.; MADÁR, J.; SZEIFERT, F.; NAGY, L.; CHOVÁN, T.** Tendency model based improvement of the slave loop in cascade temperature control of batch process units. *Computers & Chemical Engineering*, v. 28, p. 737 – 744, 2004.
- AGUIRRE, L.A. *et al.***; Enciclopédia de Automática Controle e Automação. São Paulo: Edgard Blucher, v. 1, 2007a.
- AGUIRRE, L.A. *et al.***; Enciclopédia de Automática Controle e Automação. São Paulo: Edgard Blucher, v. 2, 2007b.
- AGUIRRE, L.A. *et al.***; Enciclopédia de Automática Controle e Automação. São Paulo: Edgard Blucher, v. 3, 2007c.
- AGUIRRE, L.A.; TEIXEIRA, B. O. S; TÔRRES, L. A. B.** Filtragem de Kalman com Restrições para Sistemas. *Revista Controle & Automação*, v. 21, p. 127 – 146, 2010.
- ALMEIDA, A.** Balanço de energia em tempo real para o monitoramento e controle de reatores de polimerização não-contínuos. 1997. VI, 192 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – COPPE/UFRJ. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- ANZALDO-MENESES, A.; BONNARD, B.; GAUTHIER, J. P.; MONROY-PÉREZ, F.** Contemporary trends in nonlinear geometric control theory and its applications. Singapura: World Scientific, 2002.
- ARAUJO, P.V.** Geometria Diferencial. Rio de Janeiro: IMPA, 2ª edição, 2012.
- ASSIS, A. J.** Projeto de controladores adaptativos auto-ajustáveis. 1996. Tese (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química/UNICAMP. Universidade Estadual de Campinas, São Paulo.
- ASTRÖM, K.J.** Introduction to stochastic control theory. Nova York: Academic Press, 1970.
- ASTRÖM, K.J.; WITTENMARK, B.** Adaptive Control. Nova York: Addison Wesley, 2ª edição, 1995.
- BEYER, M.; GROTE, W.; REINIG, G.** Adaptive exact linearization control of batch polymerization reactors using a Sigma-Point Kalman Filter. *Journal of Process Control*, v. 18, p. 663 – 675, 2008.
- BINDER, T.; CRUSE, A.; CRUZ VILLAR, C.A., MARQUARDT, W.** Dynamic optimization using a wavelet based adaptive control vector parameterization strategy. *Computers & Chemical Engineering*, v. 24, p. 1201 – 1207, 2000.

- BONVIN D., DE VALLIÈRE; RIPPIN, D.W.T.** Application of estimation techniques to batch reactors: I. Modelling thermal effects. *Computers chem. Engng.*, v. 13, n. 1/2, p. 1 – 9, 1989.
- BOUHENCHIR, H.; CABASSUD, M.; LE LANN, M. V.; CASAMATTA, G.** A general simulation model and a heating: cooling strategy to improve controllability of batch reactors. *Institution of Chemical Engineers*, v. 79, parte A, p. 641 – 654, 2001.
- CABASSUD, M.; LE LANN, M. V.; LOULEH, Z.** A new strategy for temperature control of batch reactors: experimental application. *Control Engineering Journal*, v. 75, p. 11 – 20, 1999.
- CAMPOS, M. C. M. M.; TEIXEIRA, H. C. G.** Controles típicos de equipamentos e processos industriais. São Paulo: Edgard Blücher, 1ª edição, 2006.
- CASAMATTA, G.; LE LANN, M. V.; CABASSUD, M.** Modeling, optimization and control of batch chemical reactors in fine chemical production. *Annual Reviews in Control*, v. 23, p. 25 – 34, 1999.
- CHEN, G.; XIE, Q.; SHIEH, L. S.** Fuzzy Kalman filtering. *Journal of Information Sciences*, v. 109, p. 197 – 209, 1998.
- CHUI, C. K.; CHEN, G.** Kalman Filtering with real-time applications. Berlin: Springer, 4ª edição, 2009.
- CHYLLA, R. W.; HAASE, D. R.** Temperature control of semi batch polymerization reactors. *Computers chem. Engng.*, v. 17, n. 3, p. 257 – 264, 1993a.
- CHYLLA, R. W.; HAASE, D. R.** Temperature control of semi batch polymerization reactors. *Computers chem. Engng.*, v. 17, n. 12, p. 1213, 1993b.
- CLARKE, D.; MOHTADI, C.; TUFFS, P.** Generalized predictive control. Partes I e II, *Automatica* 23(2), p. 137 – 160, 1987.
- COELHO, A. A. R.; LUIZ, C. C.; SILVA, A. C.; BRUCIAPAGLIA, A. H.** Controle adaptativo versus controle fuzzy: um estudo de caso em um processo de nível. *SBA Contrate & Automação*, v.8, n. 2, p. 43 – 51, 1997.
- COTT, B. J.; MACCHIETTO, S.** Temperature control of exothermic batch reactor using generic model control. *Ind. Engng. Chem.*, v. 28, p. 1177 – 1184, 1989.
- COUGHANOWR, D. R.** Process systems analysis and control. Singapura: McGraw-Hill, 2ª edição, 1991.

- DAVIDSON, R. S.** An intelligent temperature controller for jacketed reactors. 3M Corporate Research Process Technology Laboratory, TP 8, p. 1380 – 1385, 1987.
- ERDOGAN, S.; ALPBAZ, M.; KARAGÖZ, A.R.** The effect of operational conditions on the performance of batch polymerization reactor control. *Chemical Engineering Journal*, v. 86, p. 259 – 268, 2002.
- FACCIN, F.** Abordagem inovadora no projeto de controladores PID. 2004. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – PPGEQ/UFRGS. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- FINKLER, T. F.; DOGRU, M. B.; ENGELL, S.** Optimizing Control of Semi-batch Polymerization Reactors. *ACODS*, 2012.
- FLORCHINGER, P.** Adaptive Stabilization of Nonlinear Stochastic Systems. *Appl Math Optim*, v. 38, p. 109 – 120, 1998.
- GRAICHEN, K.; HAGENMEYER, V.; ZEITZ, M.** Feedforward control with online parameter estimation applied to the Chylla–Haase reactor benchmark. *Journal of Process Control*, v. 16, p. 733 – 745, 2006.
- GRAICHEN, K.; HAGENMEYER, V.; ZEITZ, M.** Design of adaptive feedforward control under input constraints for a benchmark CSTR based on a BVP solver. *Computers and Chemical Engineering*, v. 33, p. 473 – 483, 2009.
- HAYKIN, S.** Kalman filtering and neural networks. Nova York: John Wiley & Sons, INC., 2001.
- HELBIG, A.; ABEL, O.; M’HAMDI, A.; MARQUARDT, W.** Analysis and nonlinear model predictive control of the Chylla-Haase benchmark problem. *Proceedings of the UKACC International Conference Control*, p. 1172 – 1177, 1996.
- JAZWINSKI, A. H.** Stochastic processes and filtering theory. Nova York: Academic Press, INC., 1970.
- JUTAN, A.; UPPAL, A.** Combined *Feedforward*-Feedback servo control scheme for an exothermic batch reactor. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 23, p. 597 – 602, 1984.
- KREYSZIG, E.** Differential geometry. Nova York: Dover Publications, INC., 1991.
- KOTHARE, M.V.; ÖZKANA, L.; GEORGAKISB, C.** Control of a solution copolymerization reactor using multi-model predictive control. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 1207 – 1221, 2003.

- LAWRYNCZUK, M.** Computationally efficient nonlinear predictive control based on neuronal wiener models. *Neurocomputing*, v. 74, p. 401 – 417, 2010.
- LOULEH, Z.; CABASSUD, M.; LE LANN, M.V.; CHAMAYOU, A.; CASAMATTA, G.** A new heating-cooling system to improve controllability of batch reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 11, p. 3163 – 3168, 1996.
- LOULEH, Z.; CABASSUD, M.; LE LANN, M. V.** A new strategy for temperature control of batch reactors: experimental application. *Chemical Engineering Journal*, v. 75, p. 11 – 20, 1999.
- LUYBEN, W. L.** *Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers*. New York: McGraw-Hill, 2ª edição, 1996.
- LUYBEN, W. L.; LUYBEN, M. L.** *Essentials of Process Control*. Singapura: McGraw-Hill, 1997.
- MACGREGOR J. F.** On-line reactor energy balances via Kalman filtering. *Proc. IFAC, PRP6, Automation*, p. 27 – 31, 1986.
- MACGREGOR, J.F.; CLARKE-PRINGLE, T.** Nonlinear adaptive temperature control of multi-product, semi-batch polymerization reactors. *Computers & Chemical Engineering*, v. 21, n. 12, p. 1395 – 1409, 1997.
- MACGREGOR, J.F.; FLORES-CERRILLO, J.** Latent variable MPC for trajectory tracking in batch processes. *Journal of Process Control*, v. 15, p. 651 – 663, 2005.
- MACHADO, F.; LIMA, E. L; PINTO, J. C.** Uma Revisão Sobre os Processos de Polimerização em Suspensão. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, v. 17, p. 166 – 179, 2007.
- MARQUARDT, W.; ABEL, O.** Scenario-integrated on-line optimization of batch reactors. *Journal of Process Control*, v. 13, p. 703 – 715, 2003.
- MARROQUIN, G.; LUYBEN, W. L.** Experimental evaluation of nonlinear cascade controllers for batch reactors. *Ind Eng Chem Fundam*, v. 11, n. 2, p. 552 – 556, 1972.
- MATYJASZEWSKI, K.; DAVIS, T.P.** *Handbook of radical polymerization*. Hoboken: John Wiley, 2002.
- MAYBECK, P.S.** *Stochastic Models, Estimation and Control*. Nova York: Academic Press, v. 1, 1979a.

- MAYBECK, P.S.** Stochastic Models, Estimation and Control. Nova York: Academic Press, v. 2, 1979b.
- MAYBECK, P.S.** Stochastic Models, Estimation and Control. Nova York: Academic Press, v. 3, 1979c.
- MELEIRO, L. A. C.** Projeto e aplicação de controladores baseados em modelos lineares, neurais e nebulosos. 2002. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – DEQ/UNICAMP. Universidade Estadual de Campinas, Campinas.
- MISTURINI, R.** Movimento Browniano, Integral de Itô e Introdução às Equações Diferenciais Estocásticas. 2010. Dissertação (Mestrado em Matemática) – PPGM/UFRGS. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- MONFORTE, J. C.** Geometric, control and numerical aspects of nonholonomic systems. Berlin: Springer, 2002.
- MONTGOMERY, D. C.** Introdução ao controle estatístico de processo. Rio de Janeiro: LTC, 2004.
- MOUDGALYA, K.M.; RYALI, V.** Robust temperature control of a semibatch polymerization reactor: frequency domain specifications. Colloids and Surfaces, v. 133, p. 63 – 68, 1998.
- NAGY, Z.K.; MAHN, B; FRANKE, R.; ALLGÖWER, F.** Evaluation study of an efficient output feedback nonlinear model predictive control for temperature tracking in an industrial batch reactor. Control Engineering Practice, v. 15, p. 839 – 85, 2007.
- NG, C.W.; HUSSAIN, M. A.** Hybrid neuronal network: prior knowledge model in temperature control of a semi-batch polymerization process. Chemical Engineering and Processing, v. 43, p. 559 – 570, 2004.
- ODIAN, G.** Principles of Polymerization. Nova Jersey: John Wiley, 4ª edição, 2004.
- OGATA, K.** Discrete-time Control System. Nova Jersey: Prentice Hall, 2ª edição, 1995.
- OGATA, K.** Modern Control Engineering. Nova Jersey: Prentice Hall, 4ª edição, 2002.
- OLIVEIRA, A. L. L.; OLIVEIRA, W.; TRAZZI, R. M.; DIAS, F. T. R.; NETO, E. F.; CARDOSO, R. S.** Instrumentação: Fundamentos de controle de processo. CPM - Programa de Certificação de Pessoal de Manutenção. Vitória: SENAI-ES, 1999.
- OLIVEIRA, E. M.** Implementação de técnicas de controle avançado a uma planta piloto de controle de vazão e temperature de ar. 2008. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) – PPGEE/UFMG. Universidade Federal de Minas Gerais, Minas Gerais.

- PREISIG, H.A.** Estimation of mismatch errors of dynamic models for stirred tank-reactor equipment – I. heat exchange with jacket, impact of model reduction. *Chemical Engineering Science*, v. 44, n. 12, p. 2943 – 2955, 1989.
- RANI, K.Y.; PATWARDHAN, S.C.** Data-driven model based control of a multi-product semi-batch polymerization reactor. *ICHEME*, v. 85 (A10), p. 1397 – 1406, 2007.
- RICHARDS, J. R.; CONGALIDIS, J. P.** Measurement and control of polymerization reactors. *Computers and Chemical Engineering*, v. 30, p. 1447 – 1463, 2006.
- SANTOS, P. F. A.** Balanço de energia em tempo real para um reator de polimerização: estratégias alternativas para o filtro de Kalman. 2005. 82 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Instituto de Tecnologia. Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- SCHULER, H.; SCHMIDT, C. U.** Calorimetric-state estimators for chemical reactor diagnosis and control. Review of methods and applications. *Chem. Engng. Sci.*, v. 47, n. 4, p. 899 – 915, 1992.
- SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A.** Process dynamics and control. Nova York: John Wiley & Sons, 1989.
- SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A.** Process dynamics and control. Nova York: John Wiley & Sons, 2ª edição, 2002.
- SIMON, D.** Optimal state estimation: Kalman, H<sub>∞</sub>, and Nonlinear Approaches. Hoboken: John Wiley, 2006.
- STEPHANOPOULOS, G.** Chemical process control: An introduction to theory and practice. Englewood Cliffs: Prentice-Hall International Inc., 1984.
- SULLIVAN, G.R.; LEE, P.L.** Generic Model Control. *Comput. Chem. Engng*, v. 12, n. 6, p. 573 – 580, 1988.
- VALLIÈRE, P.; BONVIN, D.; RIPPIN, D. W. T.** Application of estimation techniques to batch reactors – I. Modelling thermal effects. *Comp. Chem. Engng*, v. 13, pp. 1 – 9, 1989.
- VALLIÈRE, P.; BONVIN, D.** Application of estimation techniques to batch reactors – II. Experimental studies in state and parameter estimation. *Comp. Chem. Engng*, v. 13, pp. 11 – 20, 1989.

- VALLIÈRE, P.; BONVIN, D.** Application of estimation techniques to batch reactors – III. Modelling refinements which improve the quality of state and parameter estimation. *Comp. Chem. Engng*, v. 14, pp. 799 – 808, 1990.
- VASANTHI, D.; PARANAVAMOORTH, B.; PAPPA, N.** Design of a self-tuning regulator for temperature control of a polymerization reactor. *Transactions*, *in press*, 2011.
- VIDAL, C.; RÉGNIER, N.; DEFAYE, G. ; CARALP, L.** Software sensor based control of exothermic batch reactors. *Chemical Engineering and Processing*, v. 51, n. 23, p. 5125 – 5136, 1996.
- WAKABAYASHI, C.** Análise e controle fuzzy de processos: estudo de caso em um reator de polimerização. 2007. Dissertação (Mestrado em Mecatrônica) – Escola Politécnica. Universidade Federal da Bahia, Bahia.
- ZEYBEK, Z. et al.** Adaptive heuristic temperature control of a batch polymerization reactor. *Chemical Engineering and Processing*, p. 1 – 10, 2003.
- ZEYBEK, Z. et al.** Adaptive heuristic temperature control of a batch polymerization reactor. *Chemical Engineering and Processing*, p. 1 – 10, 2003.

## 7 ANEXOS

### 7.1 Anexo 1 – Resultados Complementares para o Caso Base

#### 7.1.1 Caso Base, Produto A, Verão, 5ª Batelada, Controlador Mestre PI

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada5, realizada no verão com controlador mestre do tipo PI sem estimação de variáveis do processo. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B5-VE-PI-0”.

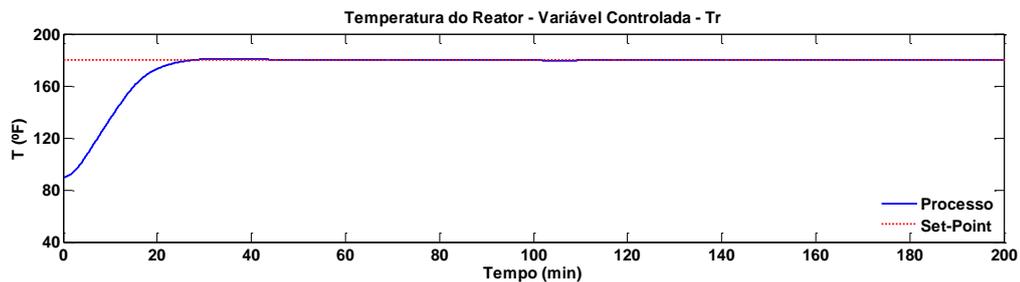


Figura 7.1: Temperatura do reator (PA-B5-VE-PI-0).

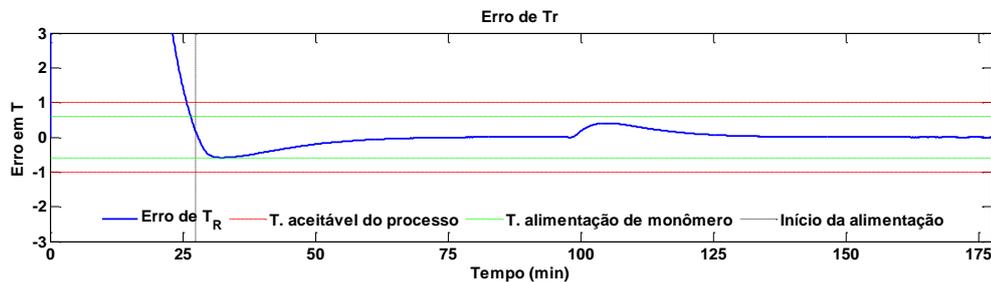


Figura 7.2: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PA-B5-VE-PI-0).

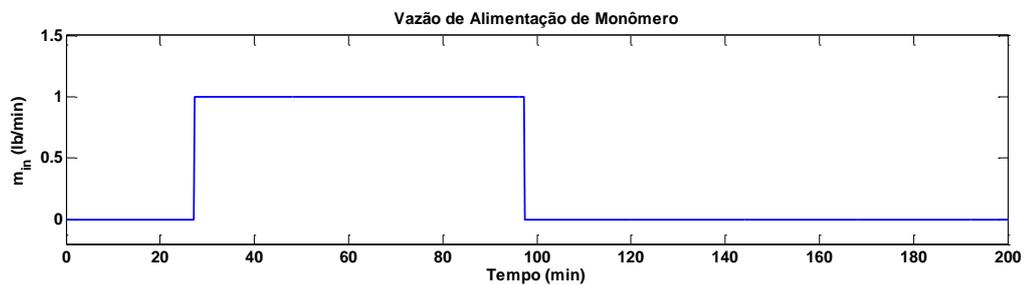


Figura 7.3: Dinâmica de alimentação do monômero (PA-B5-VE-PI-0).

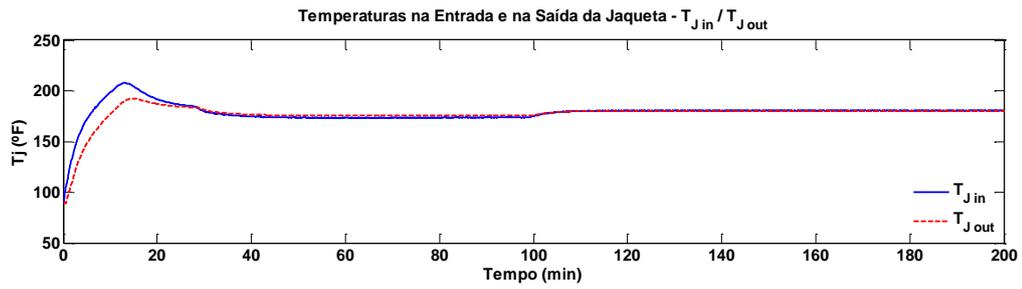


Figura 7.4: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PA-B1-VE-PI-0).

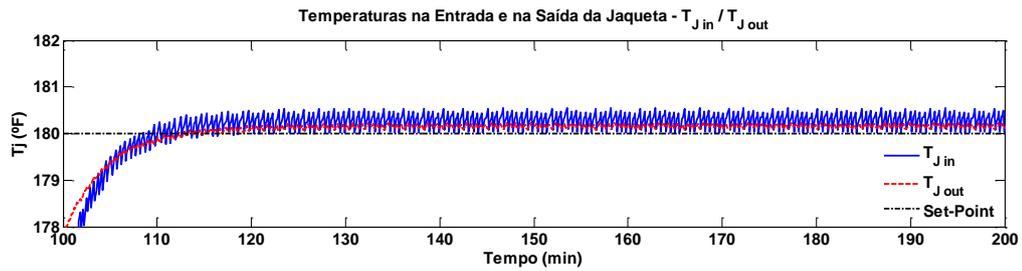


Figura 7.5: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta após período de reação (PA-B1-VE-PI-0).

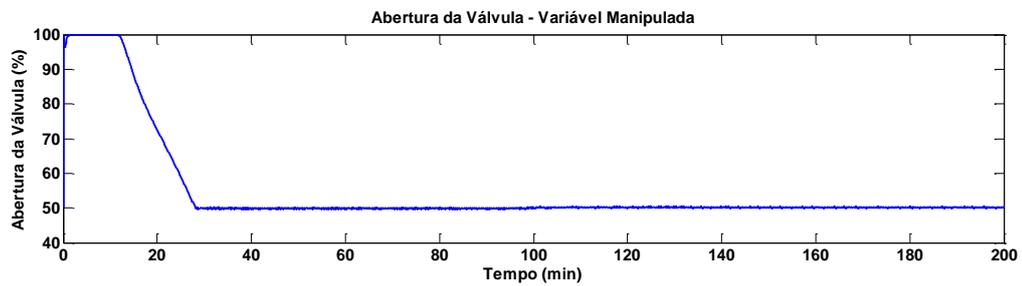


Figura 7.6: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PA-B1-VE-PI-0).

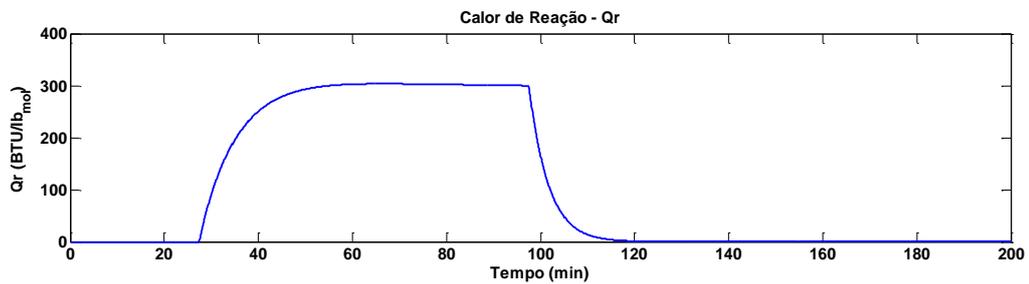


Figura 7.7: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-PI-0).

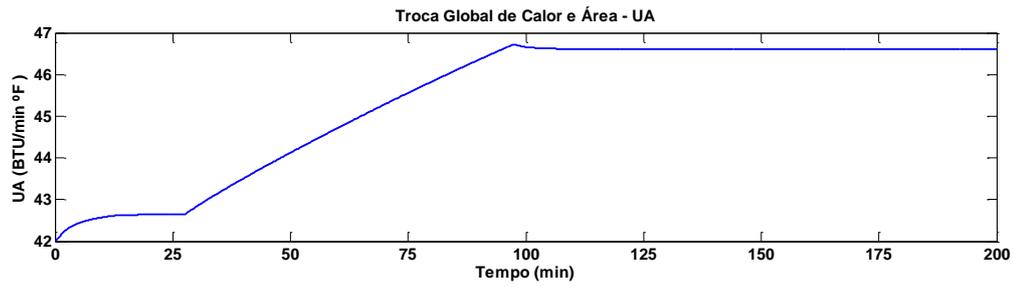


Figura 7.8: Coef. global de transferência de calor e área (PA-B1-VE-PI-0).

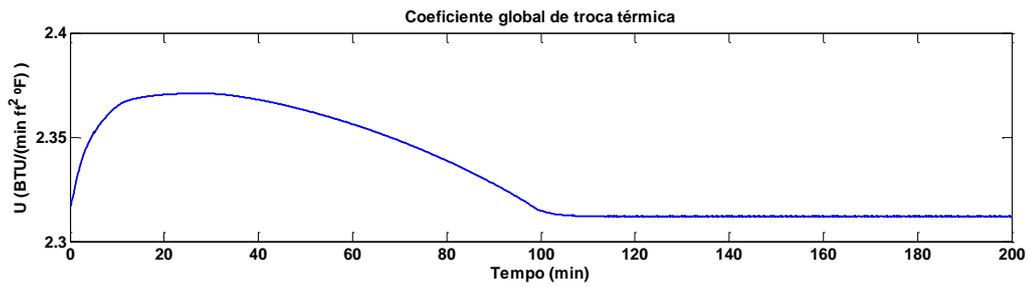


Figura 7.9: Coef. global de transferência de calor (PA-B1-VE-PI-0).

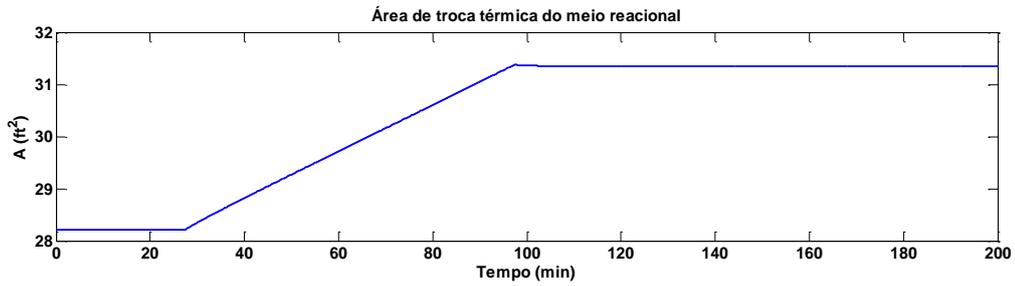


Figura 7.10: Área de troca térmica do meio reacional (PA-B1-VE-PI-0).

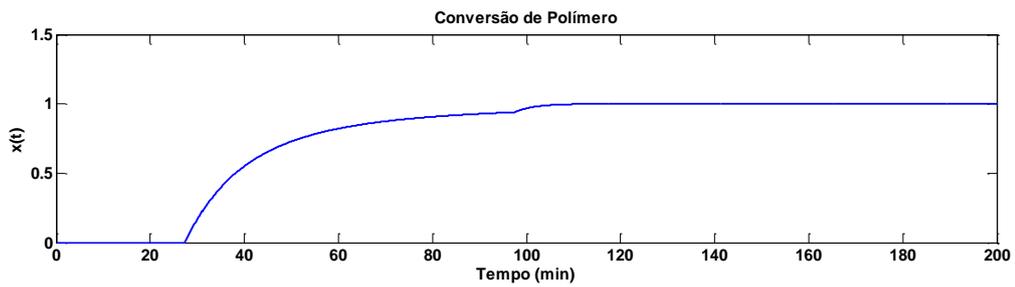


Figura 7.11: Conversão do polímero (PA-B1-VE-PI-0).

### 7.1.2 Caso Base, Produto B, Inverno, 5ª Batelada, Controlador Mestre PI

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no inverno com controlador mestre do tipo PI sem estimação de variáveis do processo. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-IN-PI-0”.

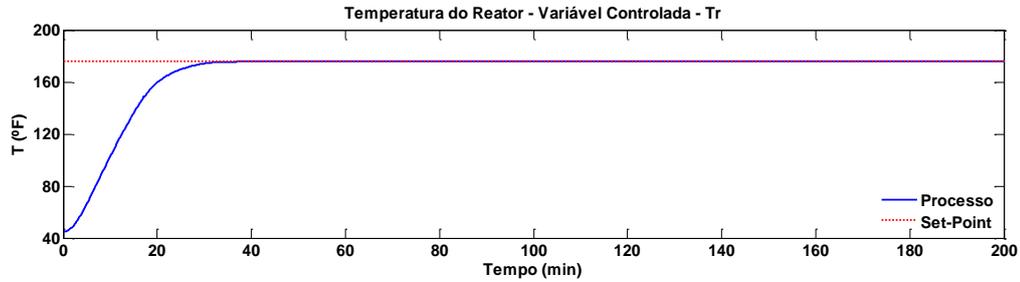


Figura 7.12: Temperatura do reator (PB-B1-IN-PI-0).

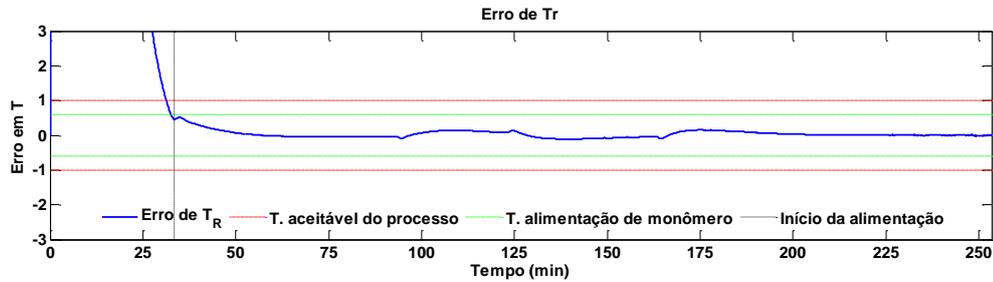


Figura 7.13: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-IN-PI-0).

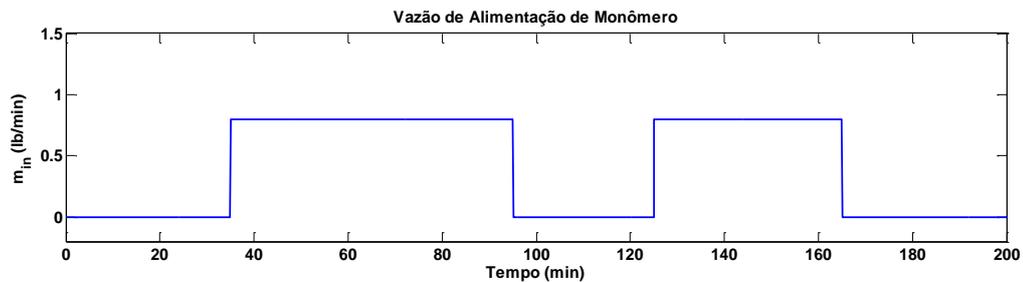


Figura 7.14: Dinâmica de alimentação do monômero (PB-B1-IN-PI-0).

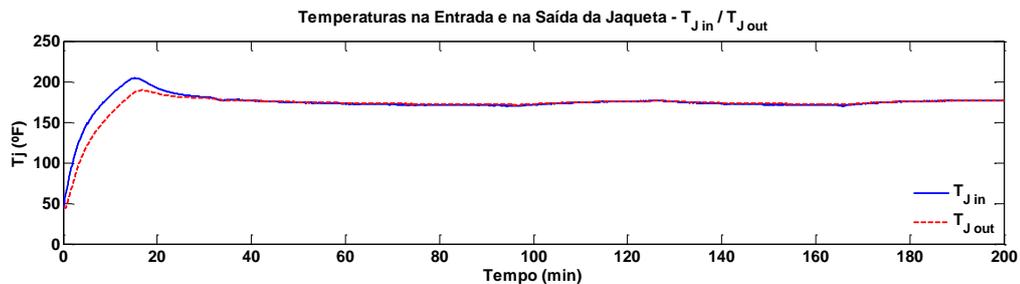


Figura 7.15: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-PI-0).

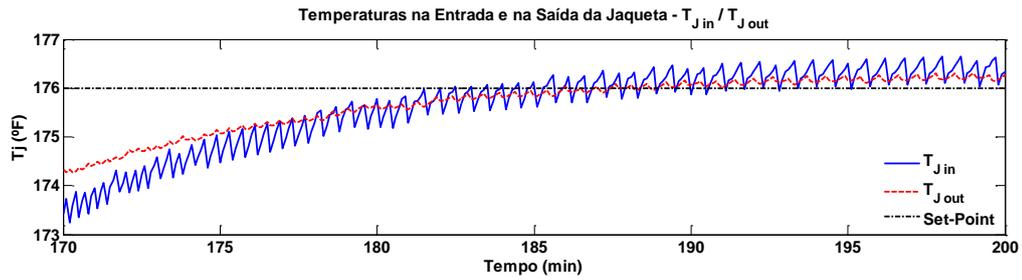


Figura 7.16: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta após período de reação (PB-B1-IN-PI-0).

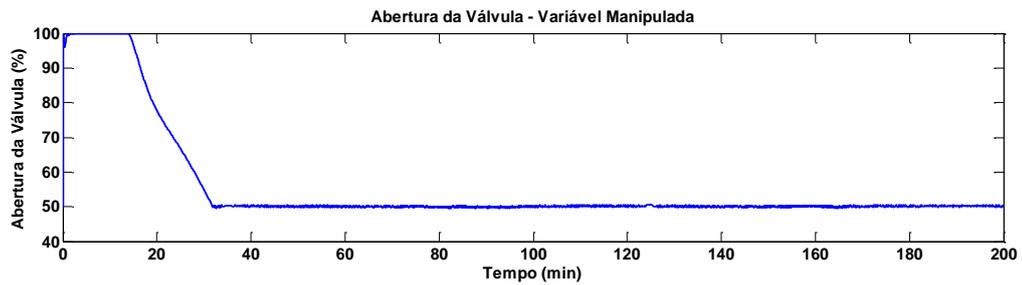


Figura 7.17: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-PI-0).

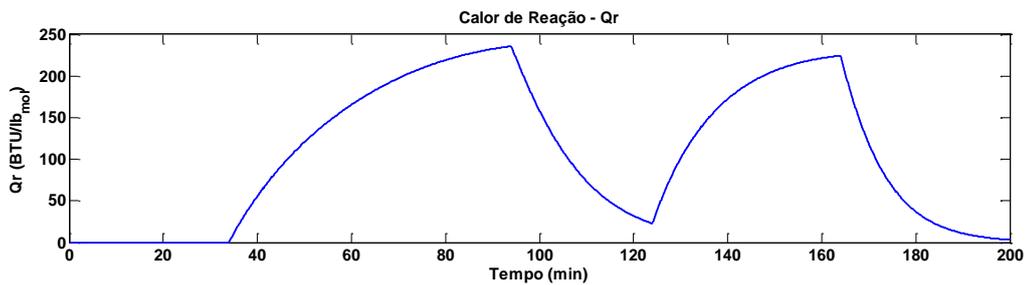


Figura 7.18: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-PI-0).

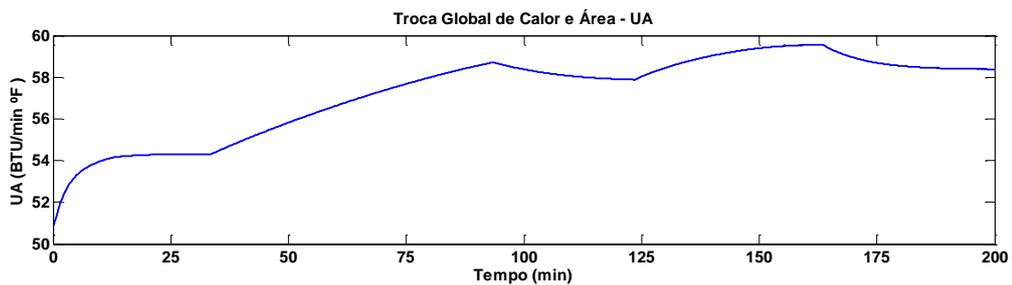


Figura 7.19: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-PI-0).

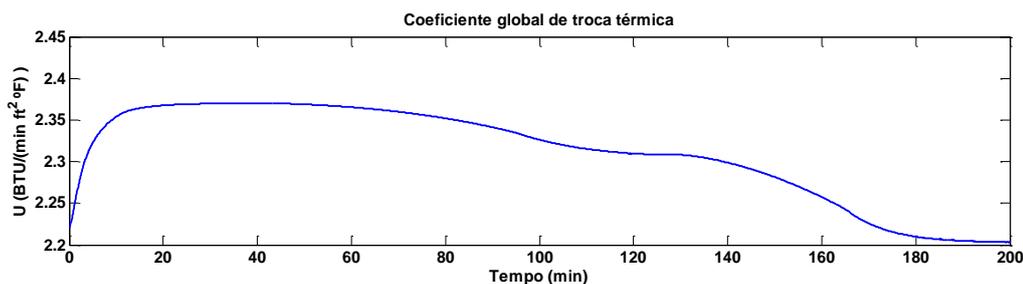


Figura 7.20: Coef. global de transferência de calor (PB-B1-IN-PI-0).

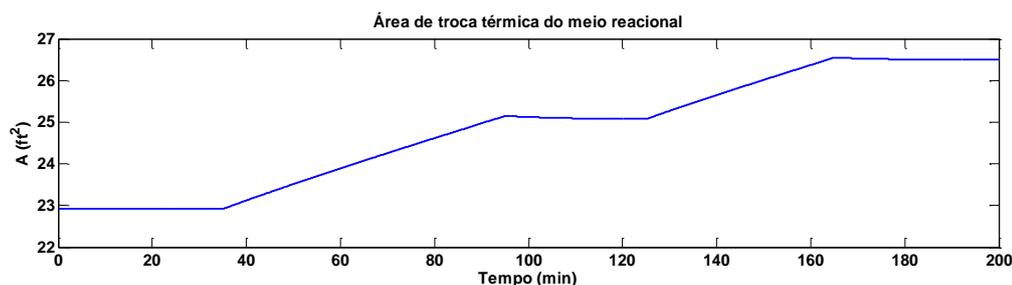


Figura 7.21: Área de troca térmica do meio reacional (PB-B1-IN-PI-0).

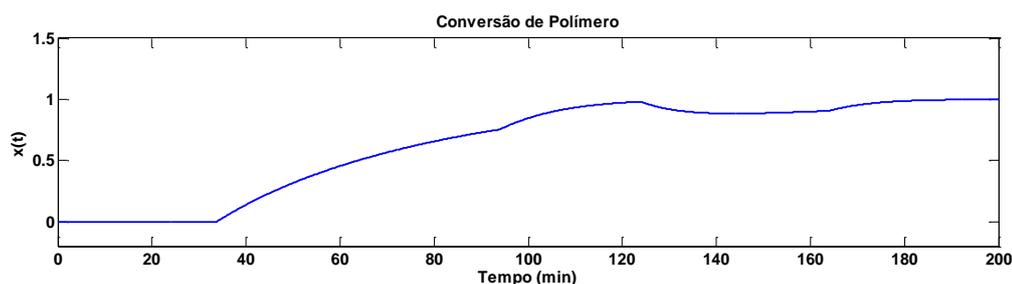


Figura 7.22: Conversão do polímero (PB-B1-IN-PI-0).

### 7.1.3 Estimação com FKE, Produto A, Verão, 5ª Batelada, Controlador Mestre PI

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão com controlador mestre do tipo PI, com estimação de variáveis do processo através do FKE e valor inicial de UA de 80 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-PI-FK-80”.

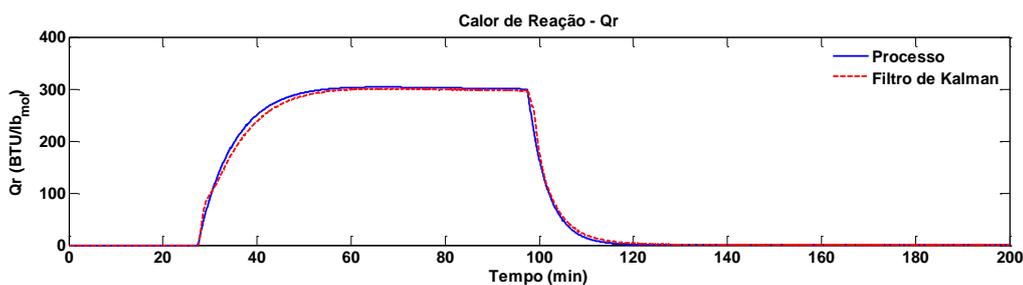


Figura 7.23: Calor de reação real e estimado (PA-B1-VE-PI-FK-80).

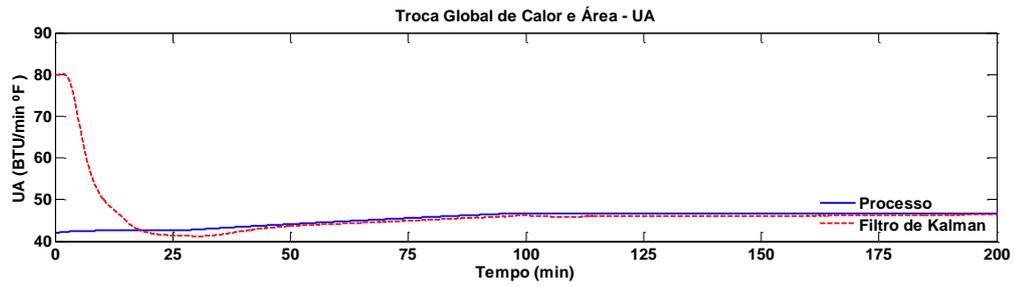


Figura 7.24: Coef. global de troca térmica e área real e estimado (PA-B1-VE-PI-FK-80).

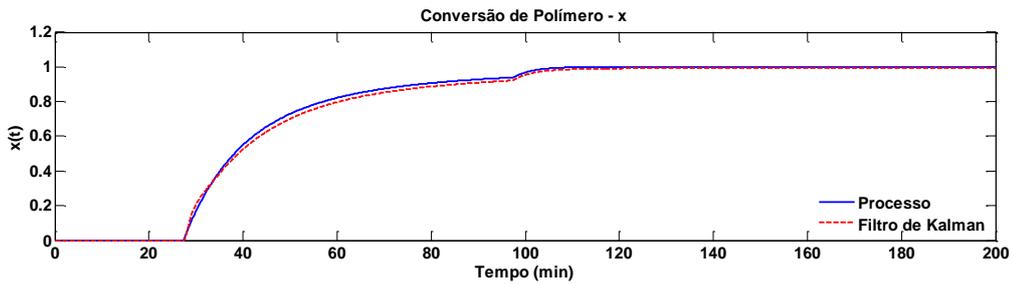


Figura 7.25: Conversão real e estimada (PA-B1-VE-PI-FK-80).

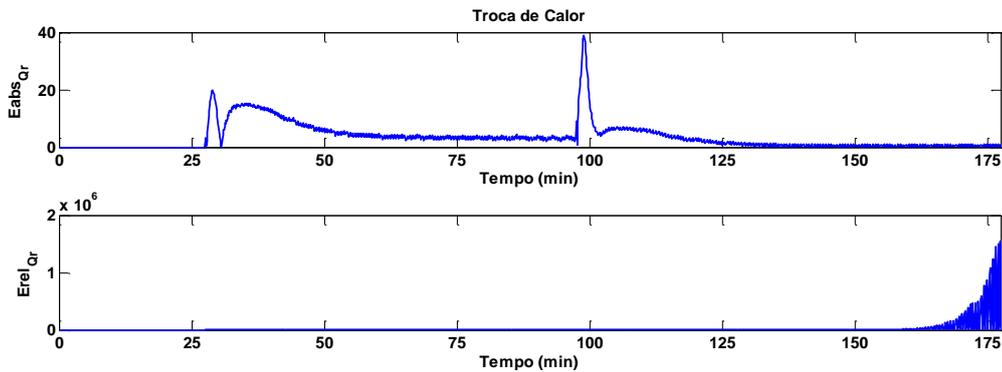


Figura 7.26: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PA-B1-VE-PI-FK-80).

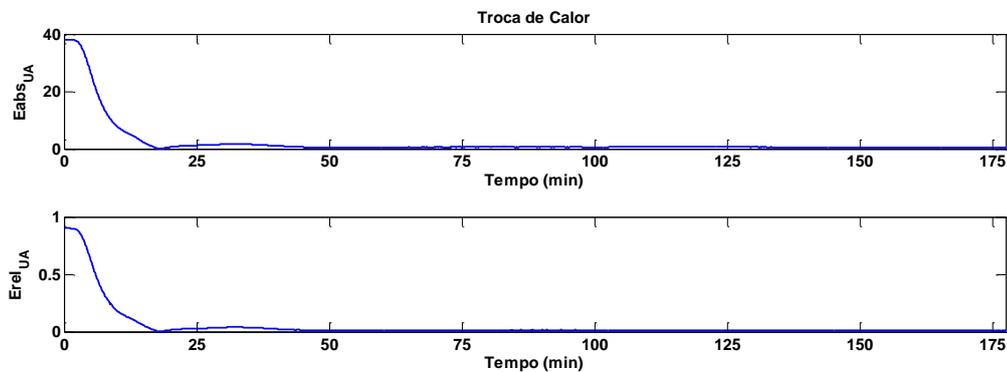


Figura 7.27: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PA-B1-VE-PI-FK-80).

### 7.1.4 Estimação com FKE, Produto B, Inverno, 5ª Batelada, Controlador Mestre PI

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no verão com controlador mestre do tipo PI, com estimação de variáveis do processo através do FKE e valor inicial de UA de 30 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-VE-PI-FK-30”.

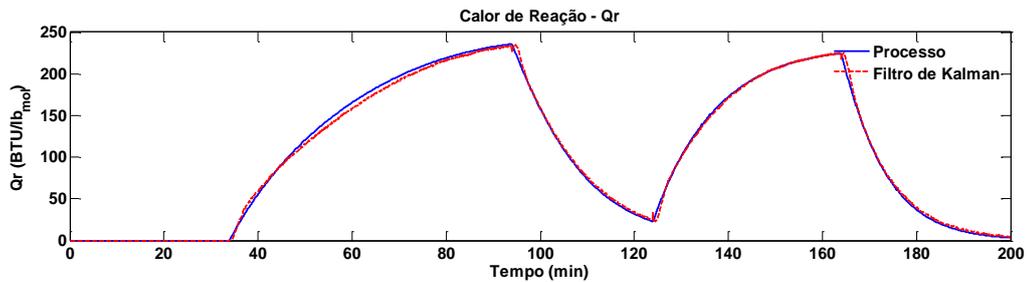


Figura 7.28: Calor de reação real e estimado (PB-B1-IN-PI-FK-30).

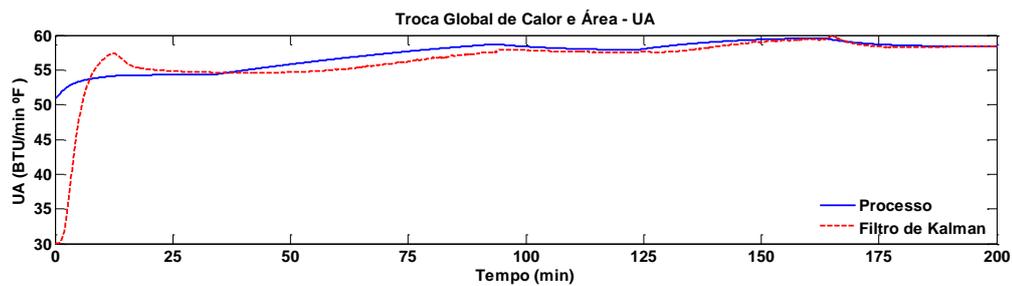


Figura 7.29: Coef. global de troca térmica e área real e estimado (PB-B1-IN-PI-FK-30).

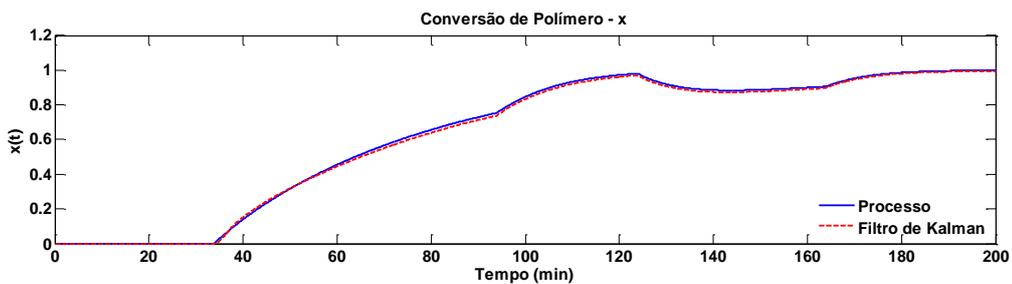


Figura 7.30: Conversão real e estimada (PB-B1-IN-PI-FK-30).

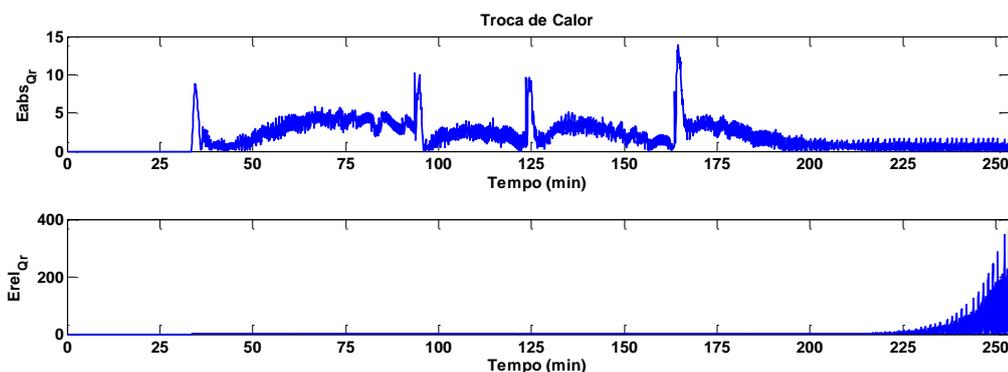


Figura 7.31: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-IN-PI-FK-30).

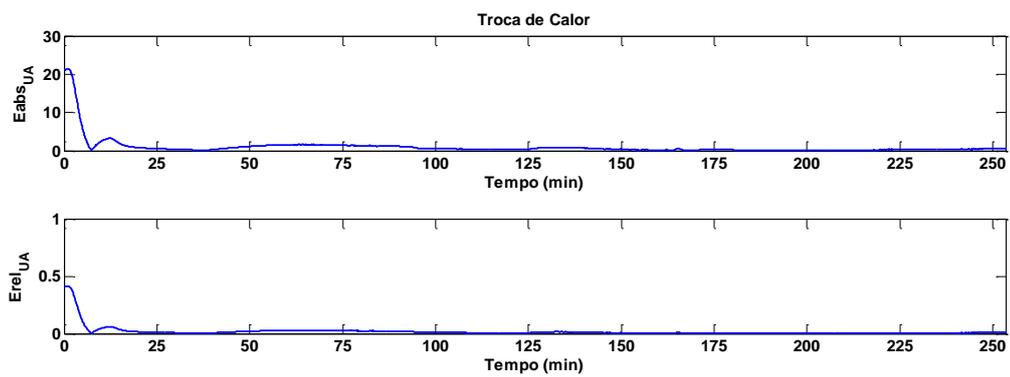


Figura 7.32: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-PI-FK-30).

## 7.2 Anexo 2 – Resultados Complementares para o Problema da Incrustação

### 7.2.1 Controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_J$

#### Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada5, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $UA$  de 30 BTU / min °F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B5-VE-FFTJ-30”.

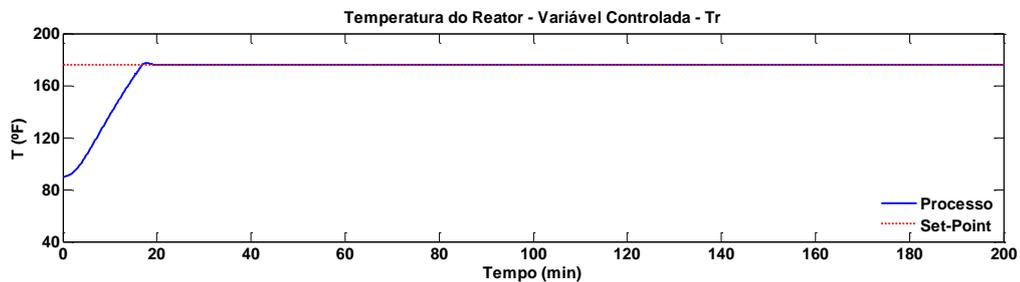


Figura 7.33: Temperatura do reator (PB-B5-VE-FFTJ-30).

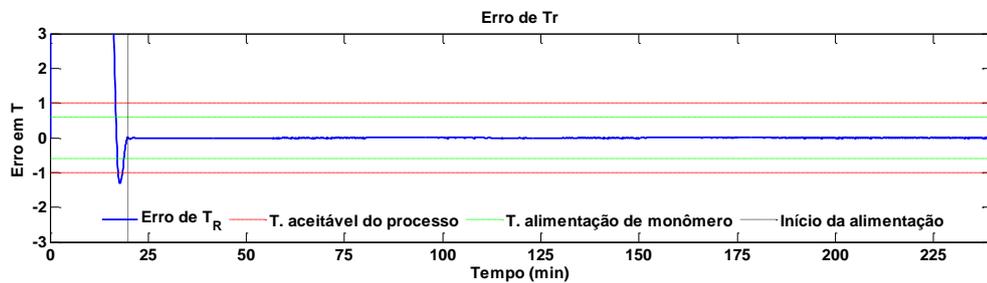


Figura 7.34: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B5-VE-FFTJ-30).

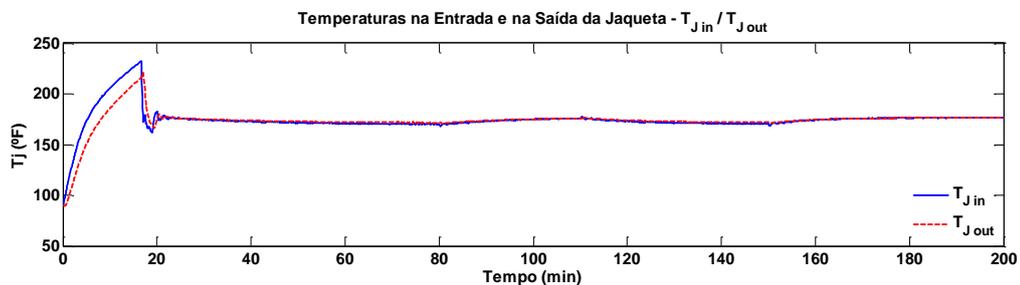


Figura 7.35: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B5-VE-FFTJ-30).

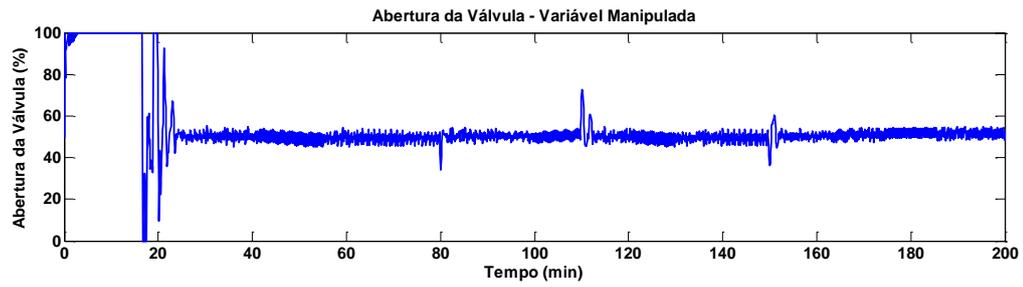


Figura 7.36: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B5-VE-FFTJ-30).

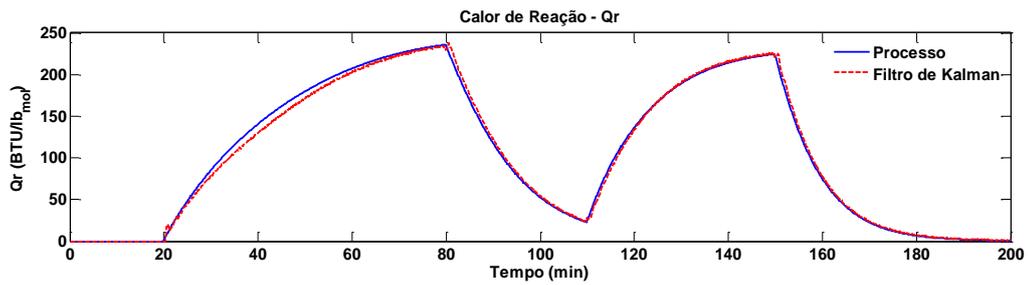


Figura 7.37: Evolução do calor de reação (PB-B5-VE-FFTJ-30).

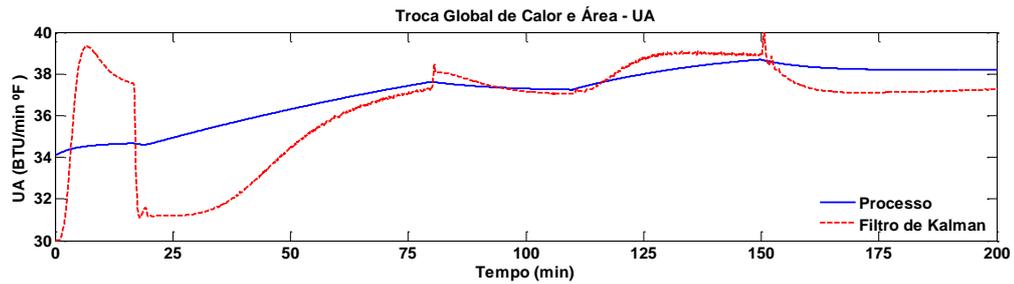


Figura 7.38: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B5-VE-FFTJ-30).

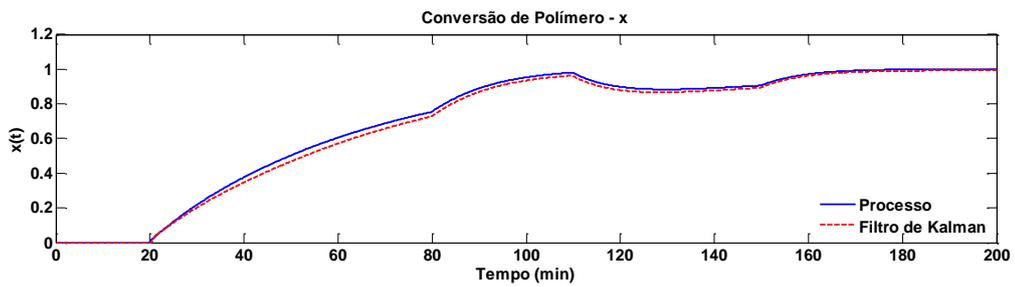


Figura 7.39: Conversão do polímero (PB-B5-VE-FFTJ-30).

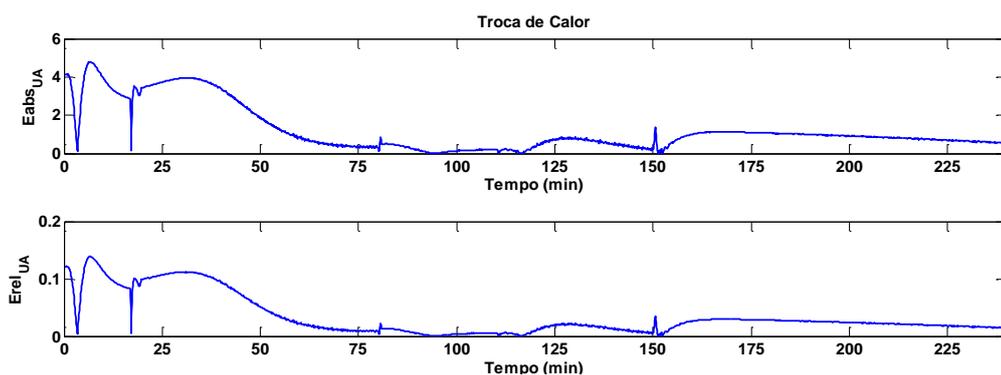


Figura 7.40: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B5-VE-FFTJ-30).

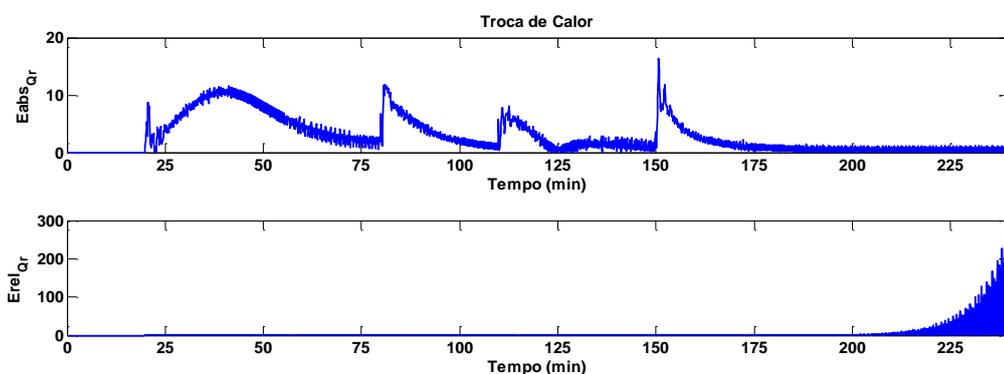


Figura 7.41: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B5-VE-FFTJ-30).

### 7.2.2 Controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_{Jmédio}$

#### Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada5, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_{Jmédio}$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $UA$  de 30 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B5-VE-FFTM-30”.

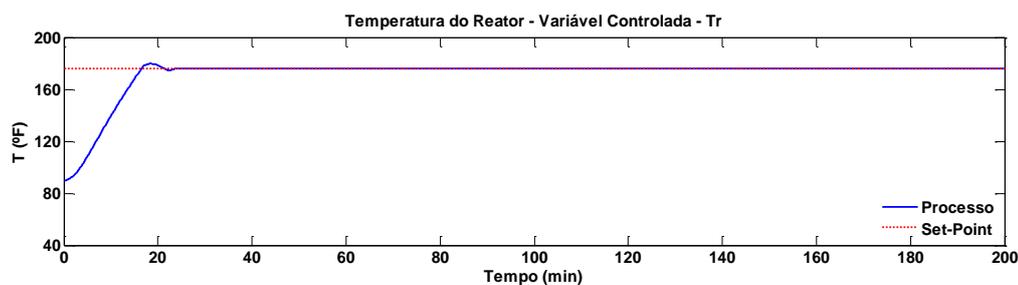


Figura 7.42: Temperatura do reator (PB-B5-VE-FFTM-30).

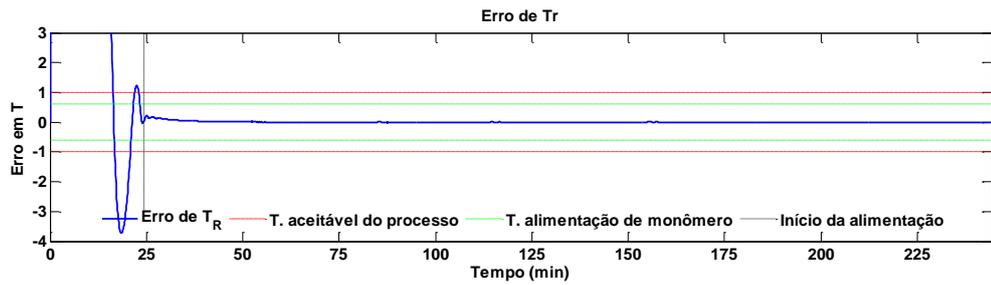


Figura 7.43: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B5-VE-FFTM-30).

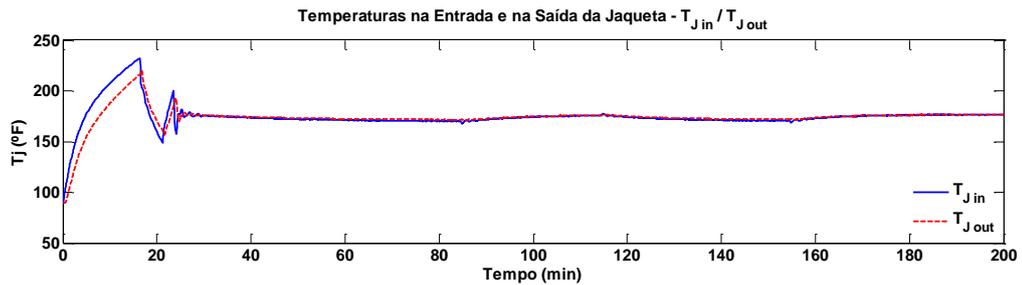


Figura 7.44: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B5-VE-FFTM-30).

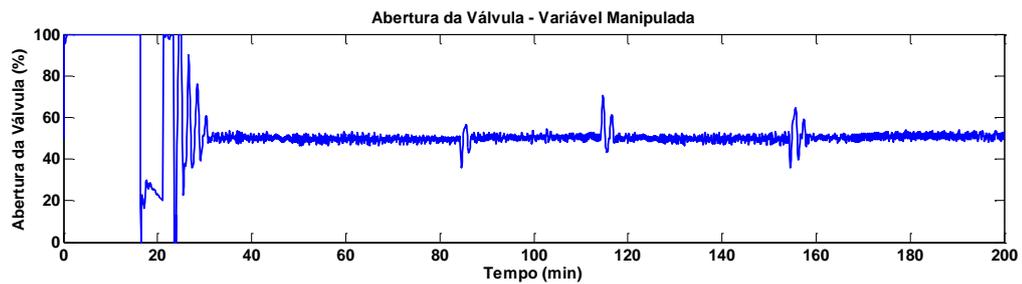


Figura 7.45: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B5-VE-FFTM-30).

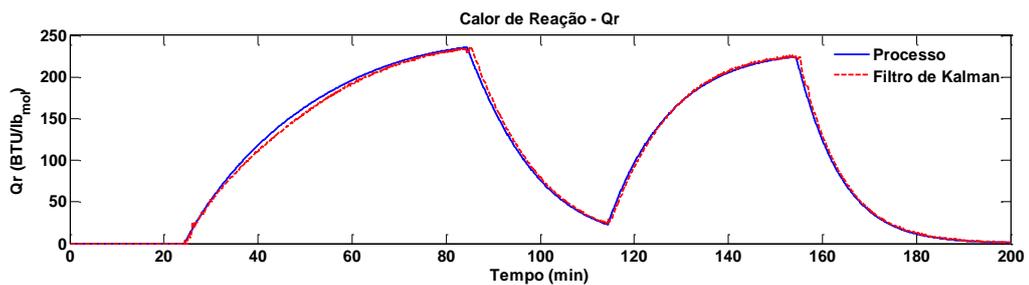


Figura 7.46: Evolução do calor de reação (PB-B5-VE-FFTM-30).

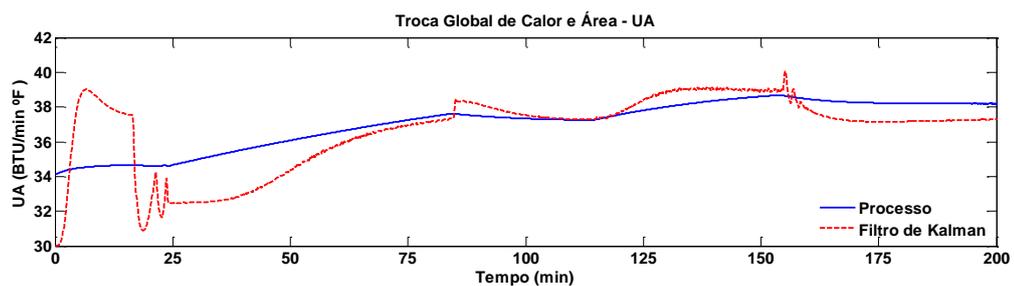


Figura 7.47: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B5-VE-FFTM-30).

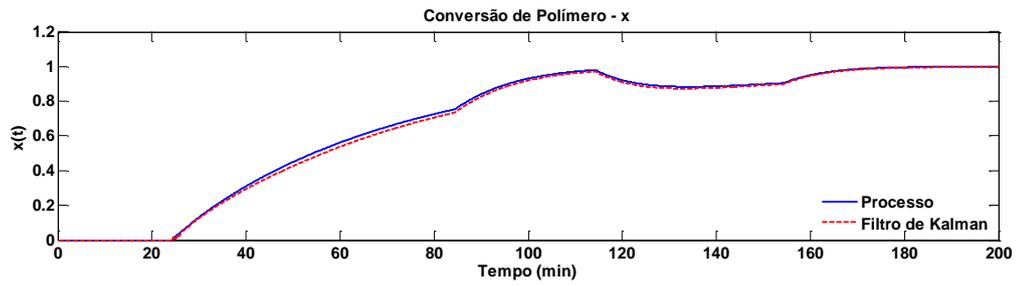


Figura 7.48: Conversão do polímero (PB-B5-VE-FFTM-30).

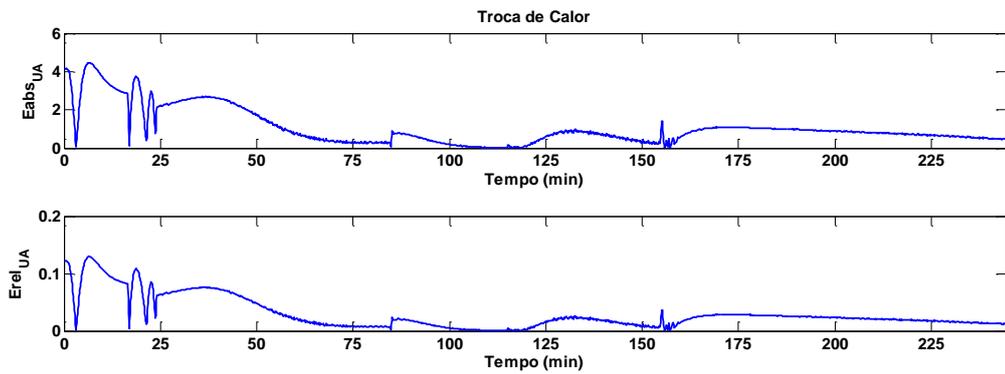


Figura 7.49: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B5-VE-FFTM-30).

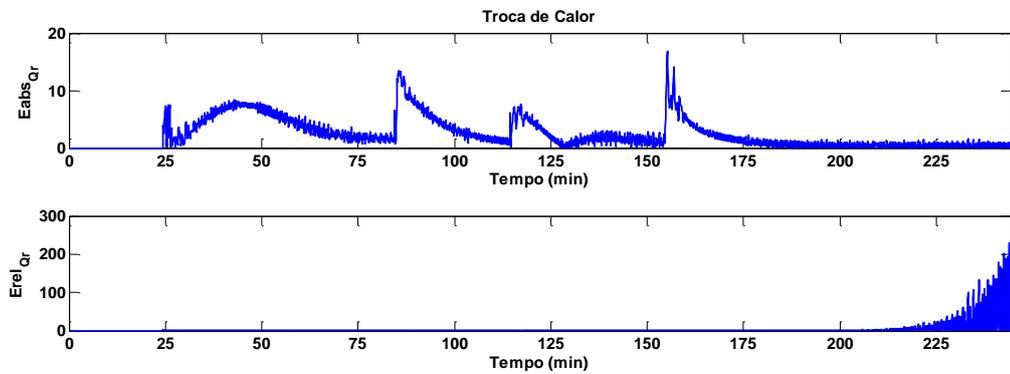


Figura 7.50: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PB-B5-VE-FFTM-30).

### 7.3 Anexo 3 – Resultados Complementares para o Problema da Mudança Climática

#### 7.3.1 Controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_J$

##### Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no inverno, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $UA$  de 30 BTU / min °F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-IN-FFTJ-30”.

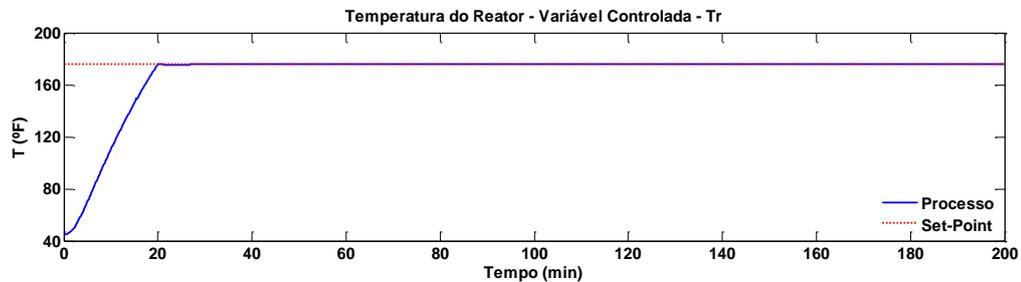


Figura 7.51: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTJ-30).

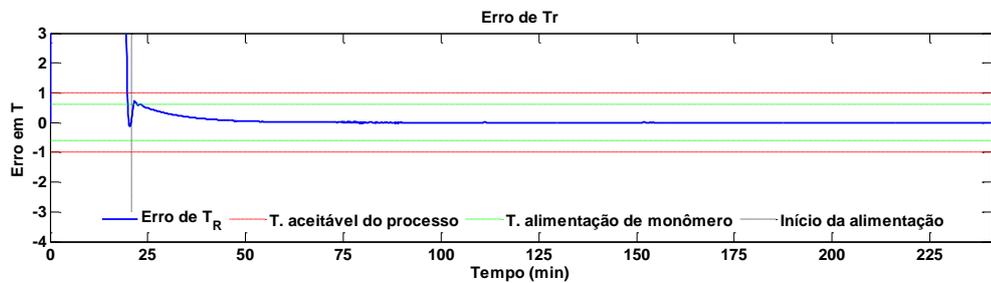


Figura 7.52: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-IN-FFTJ-30).

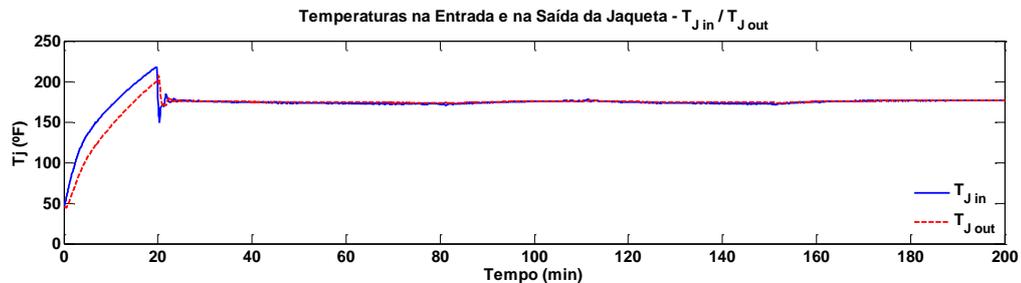


Figura 7.53: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTJ-30).

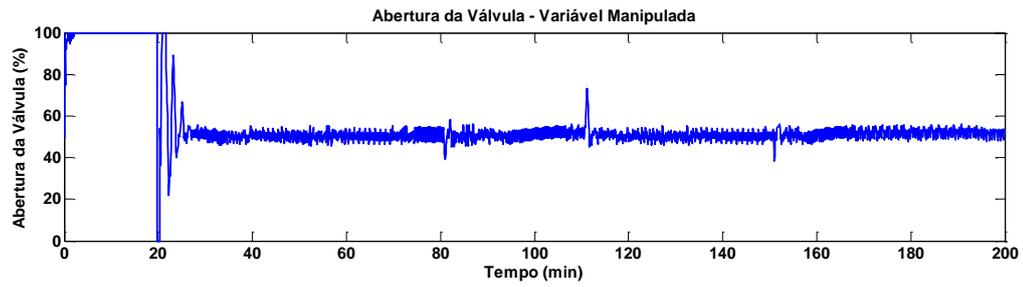


Figura 7.54: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTJ-30).

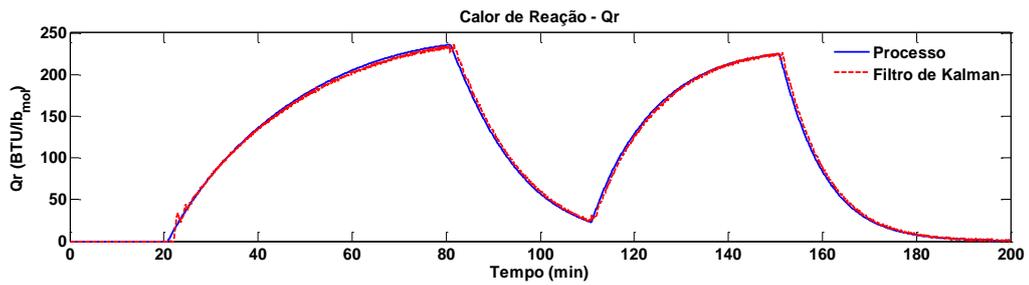


Figura 7.55: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30).

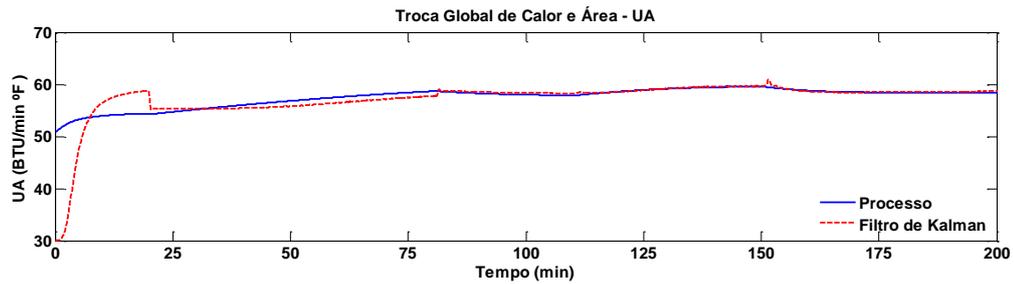


Figura 7.56: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTJ-30).

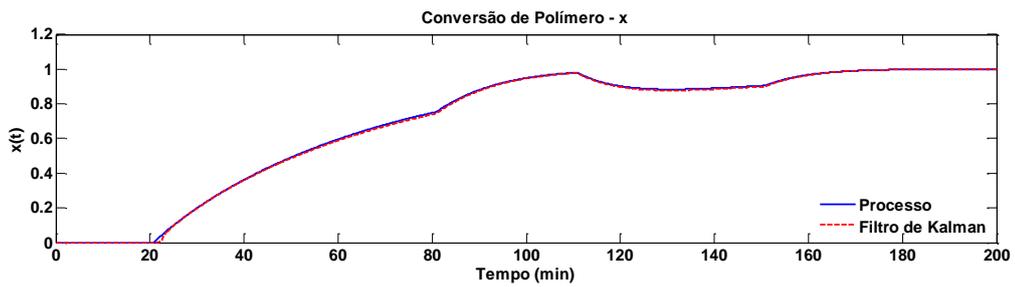


Figura 7.57: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTJ-30).

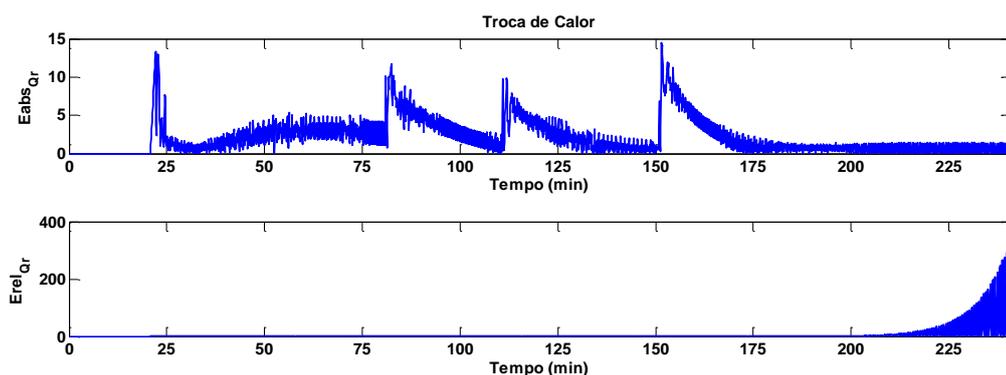


Figura 7.58: Erro absoluto e relativo do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30).

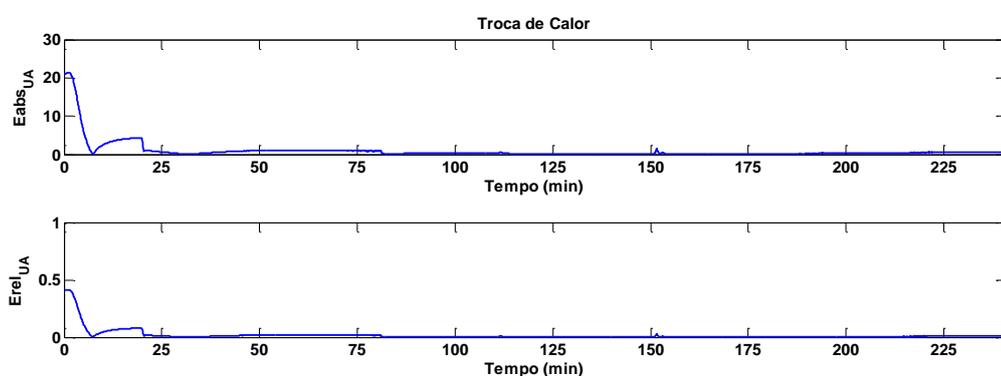


Figura 7.59: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTJ-30).

### 7.3.2 Controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_{J\text{médio}}$

#### Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no inverno, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_{J\text{médio}}$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de  $UA$  de 30 BTU / min $^{\circ}$ F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-IN-FFTM-30”.

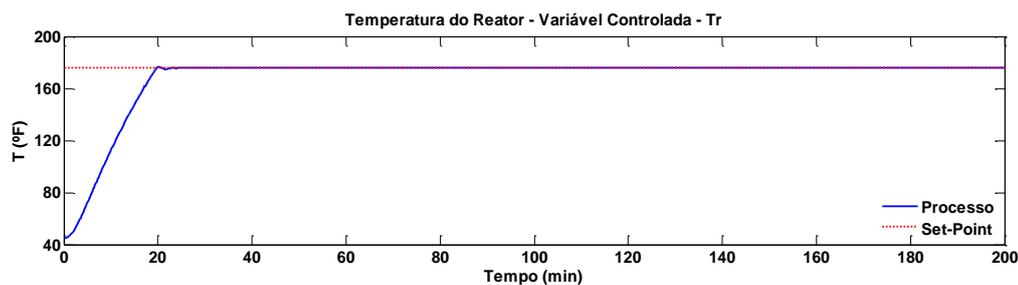


Figura 7.60: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTM-30).

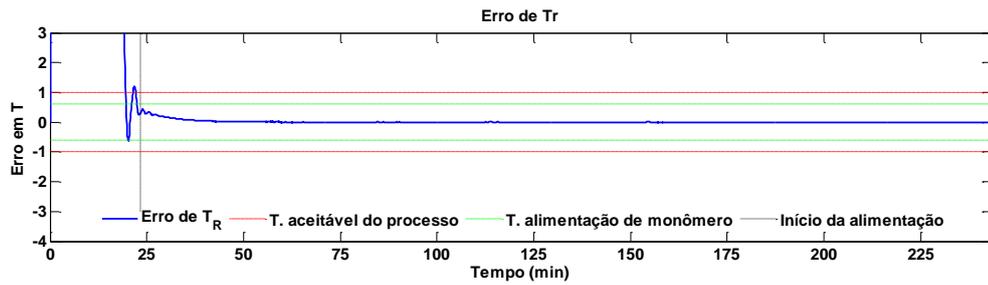


Figura 7.61: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-IN-FFTM-30).

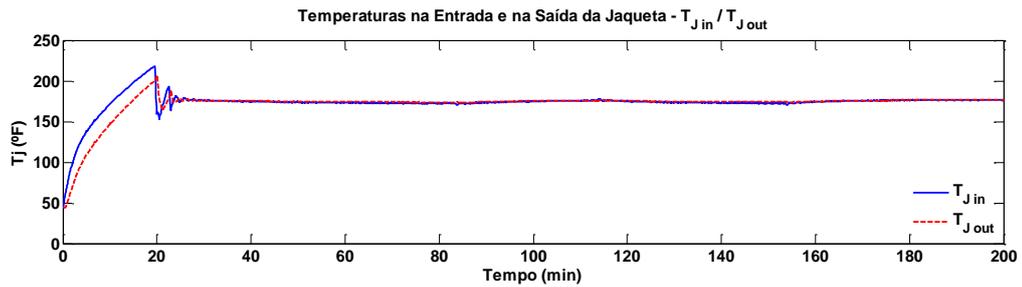


Figura 7.62: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTM-30).

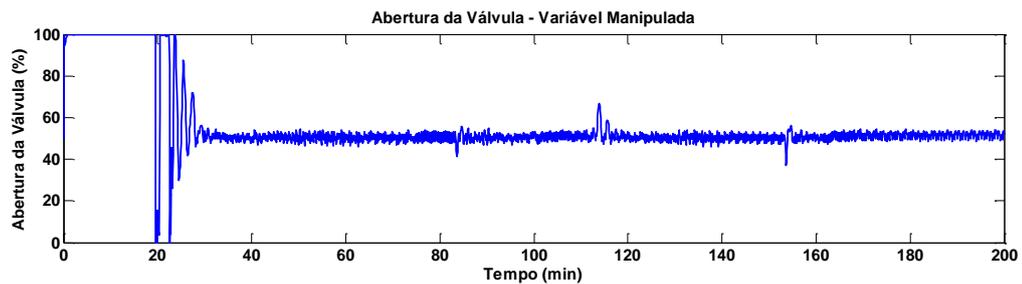


Figura 7.63: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTM-30).

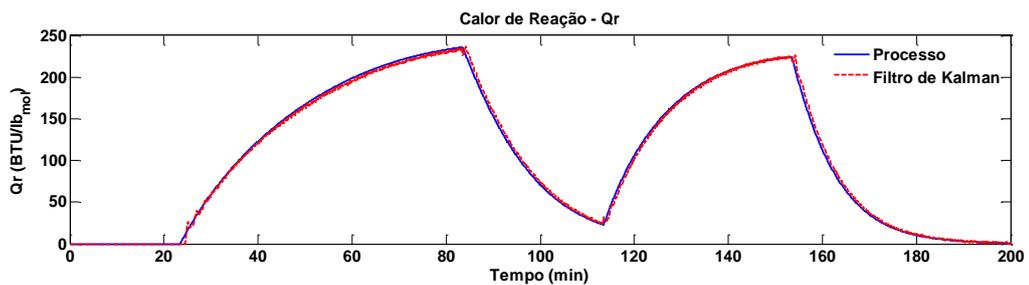


Figura 7.64: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTM-30).

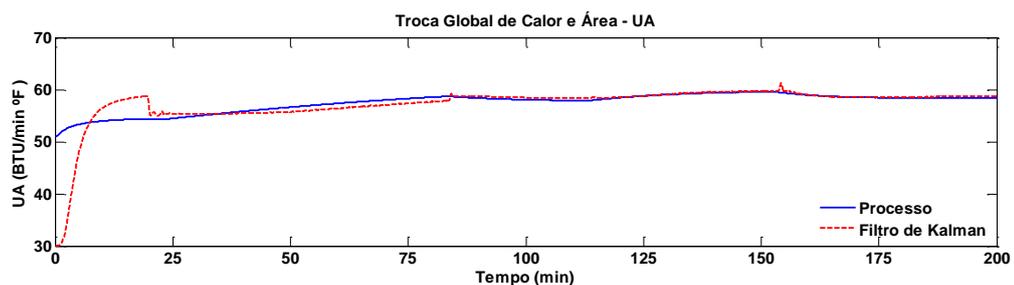


Figura 7.65: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTM-30).

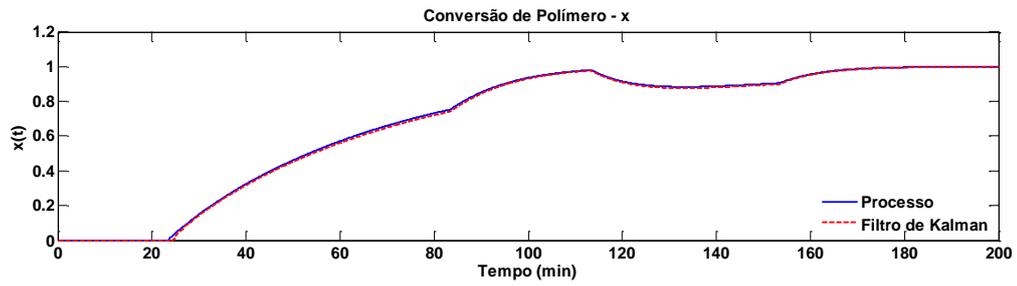


Figura 7.66: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTM-30).

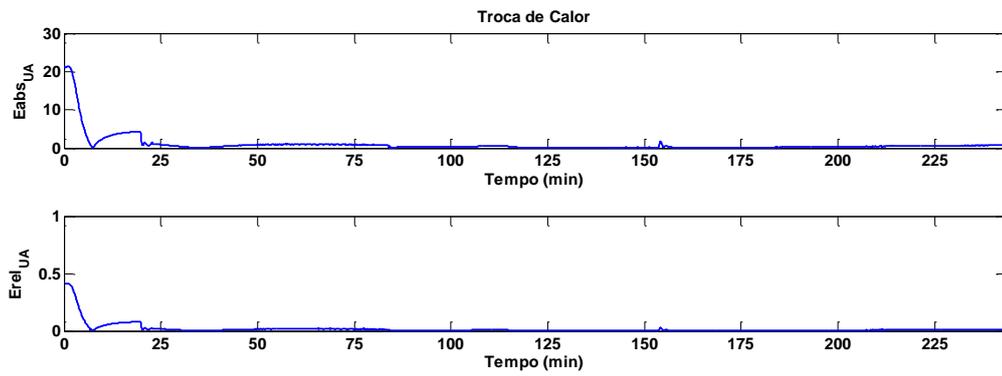


Figura 7.67: Erro absoluto e relativo da estimativa do calor de reação (PB-B1-IN-FFTM-30).

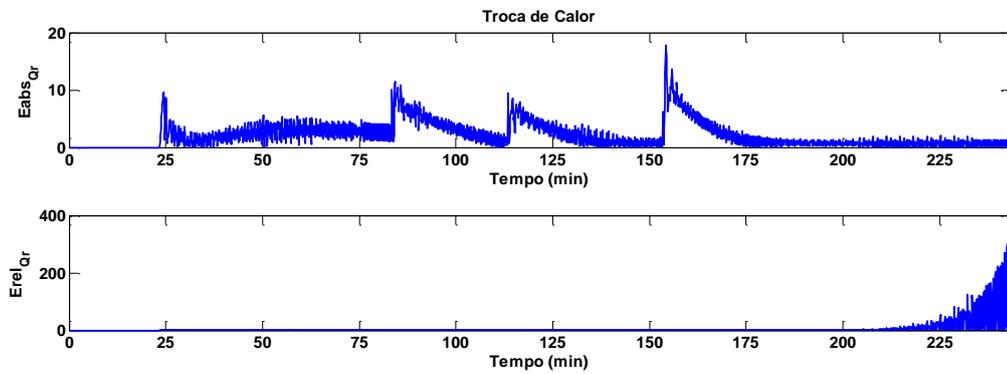


Figura 7.68: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTM-30).

## 7.4 Anexo 4 – Resultados Complementares para o Problema da Alteração dos Tempos Mortos

### 7.4.1 Controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_J$

#### Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, valor inicial de  $UA$  de 80 BTU / min °F e mudança dos tempos mortos. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-VE-FFTJ-80-TM”.

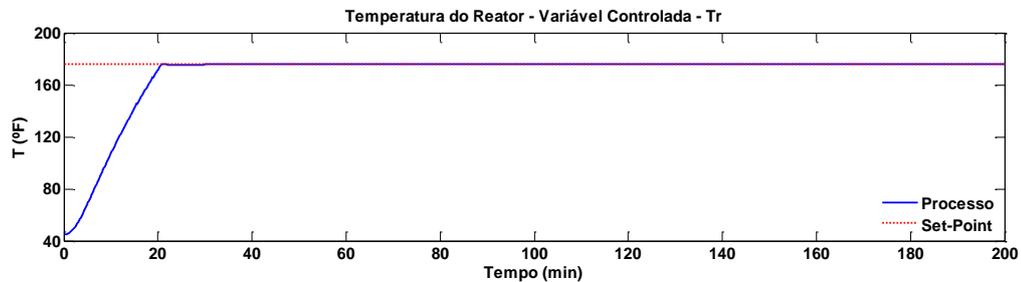


Figura 7.69: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

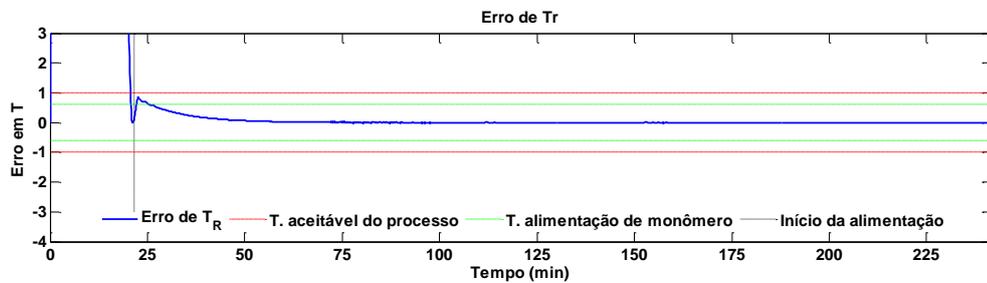


Figura 7.70: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

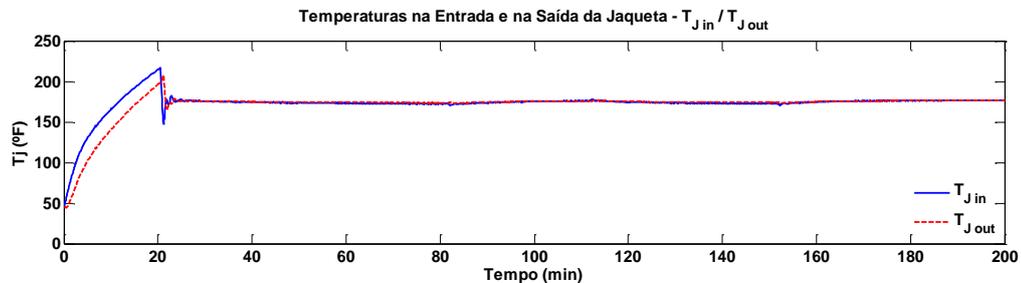


Figura 7.71: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

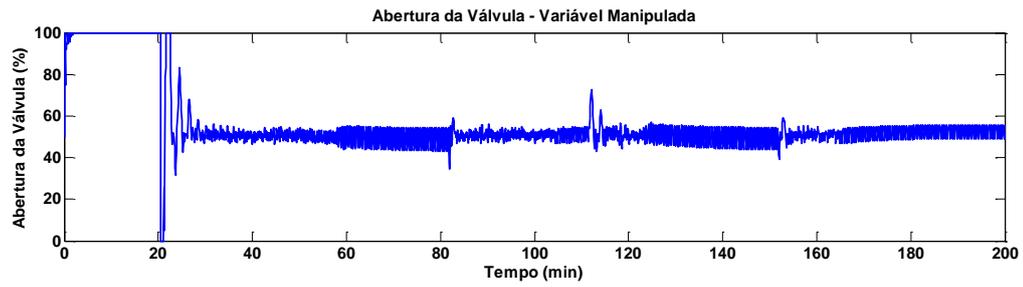


Figura 7.72: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

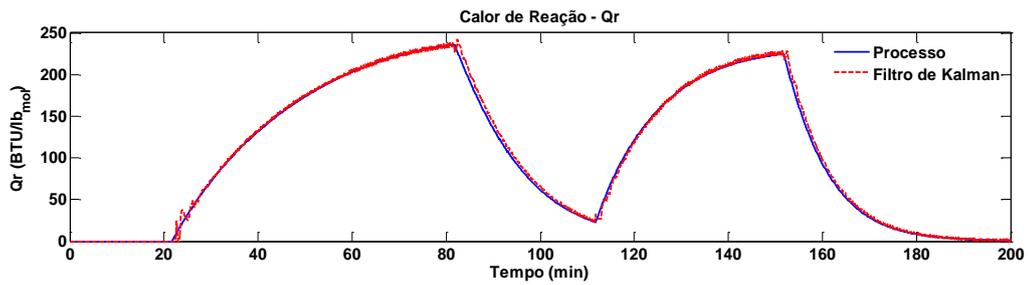


Figura 7.73: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

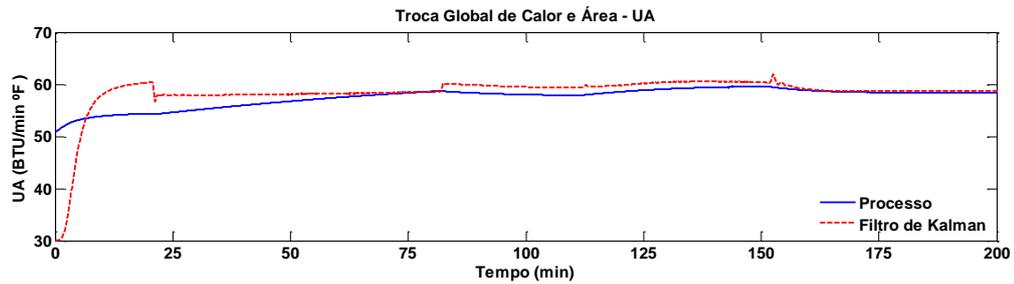


Figura 7.74: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

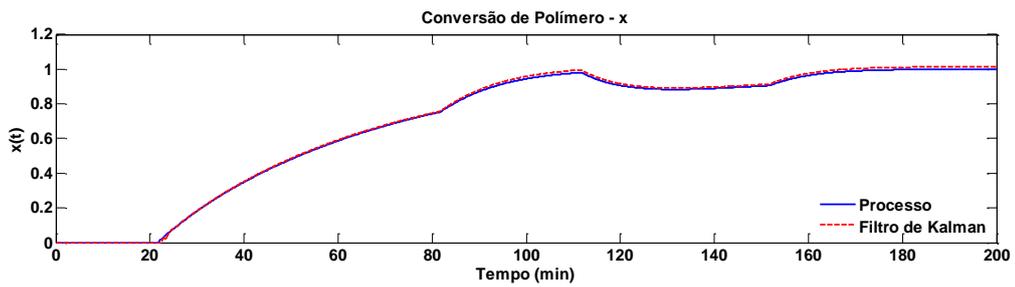


Figura 7.75: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

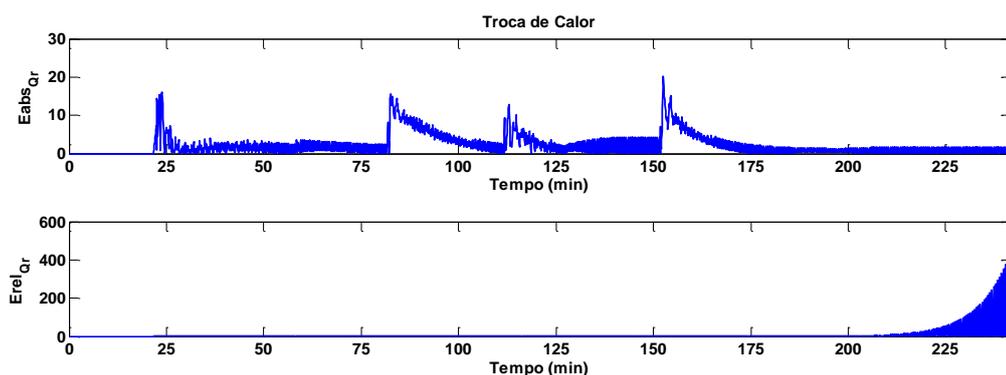


Figura 7.76: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

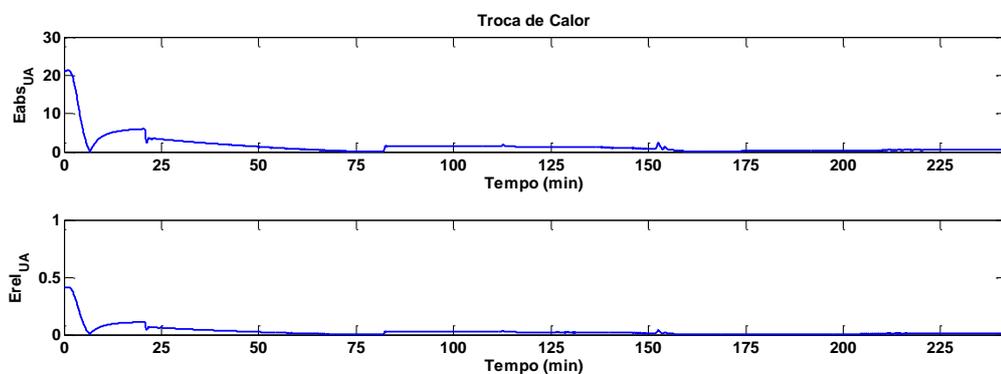


Figura 7.77: Erros absoluto e relativo do coef. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-TM).

#### 7.4.2 Controlador mestre *feedforward* baseado na estimação de parâmetros com modelo para $T_{J\text{médio}}$

##### Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de UA de 30 BTU / min<sup>o</sup>F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-IN-FFTM-30-TM”.

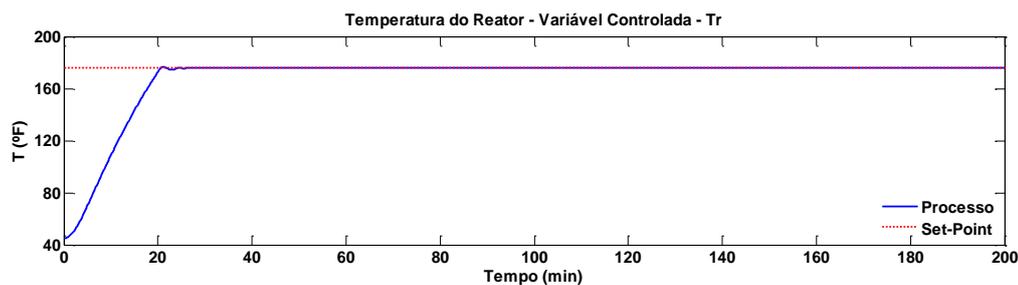


Figura 7.78: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

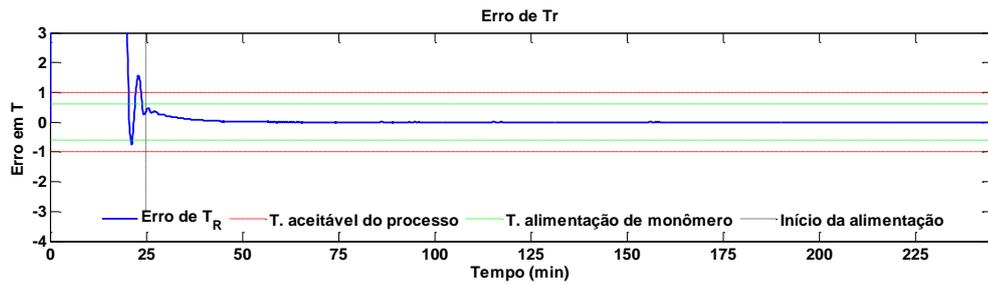


Figura 7.79: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

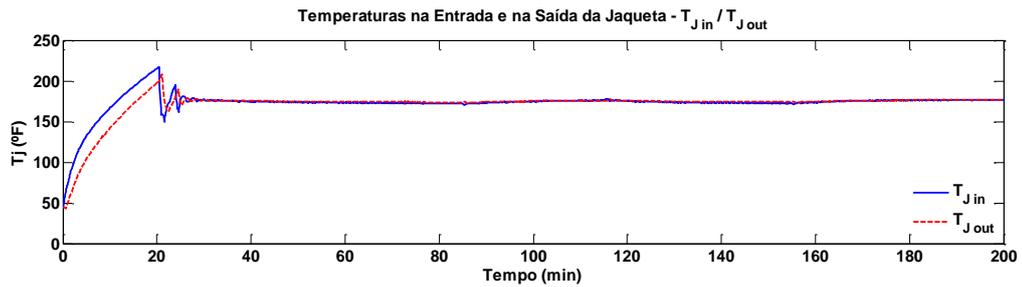


Figura 7.80: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

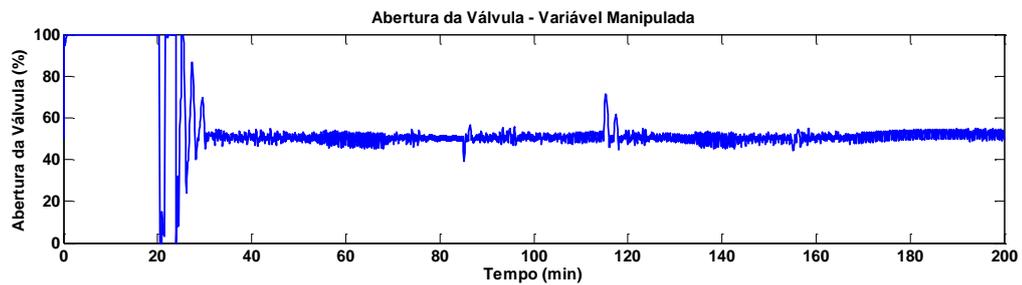


Figura 7.81: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

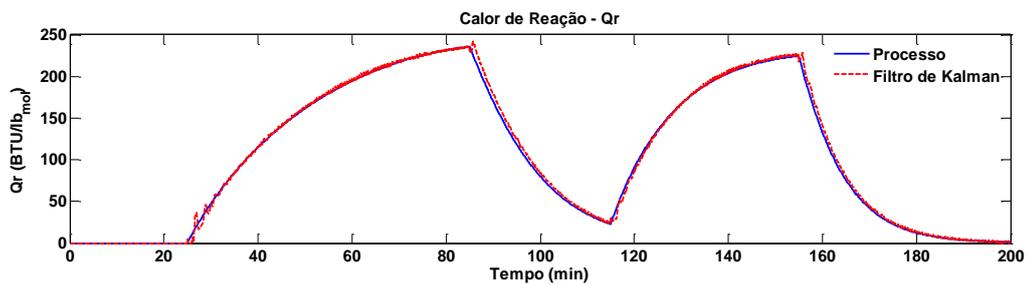


Figura 7.82: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

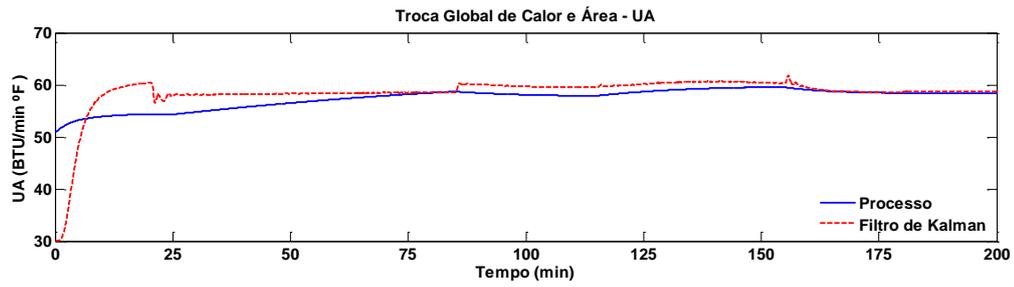


Figura 7.83: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

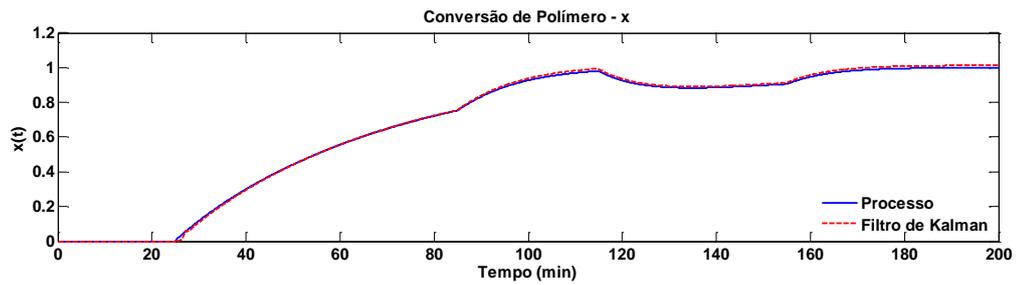


Figura 7.84: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

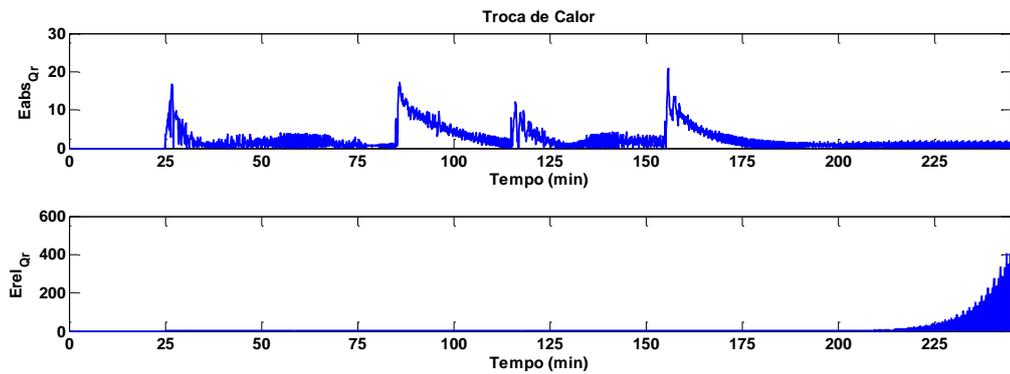


Figura 7.85: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

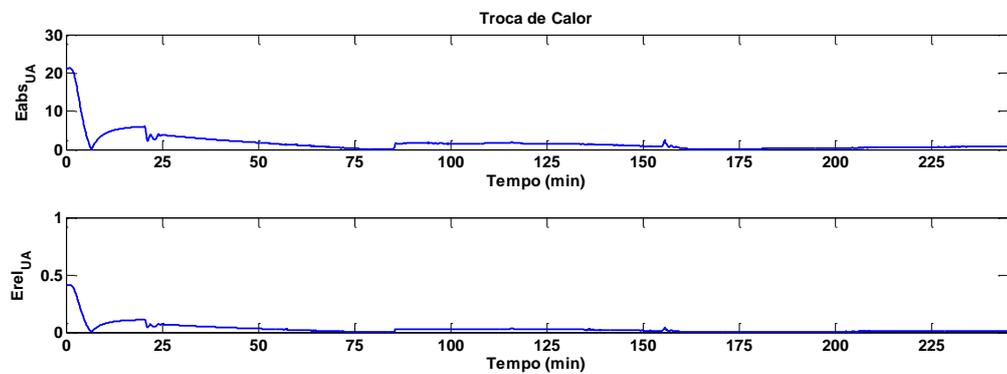


Figura 7.86: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTM-30-TM).

## 7.5 Anexo 5 – Resultados Complementares para o Problema da Incerteza no Calor Específico

### Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de UA de 80 BTU / min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-”.

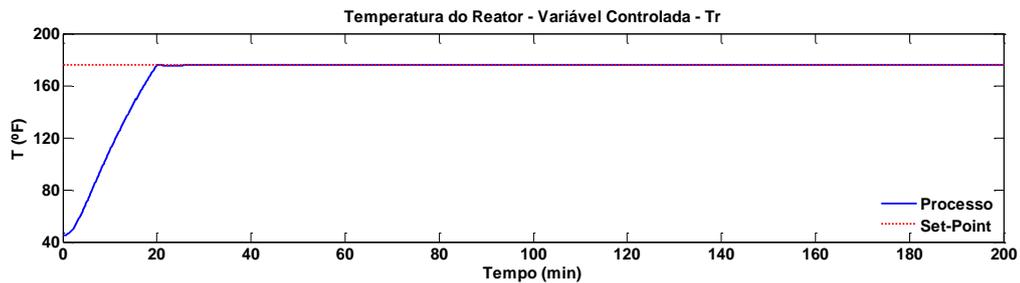


Figura 7.87: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

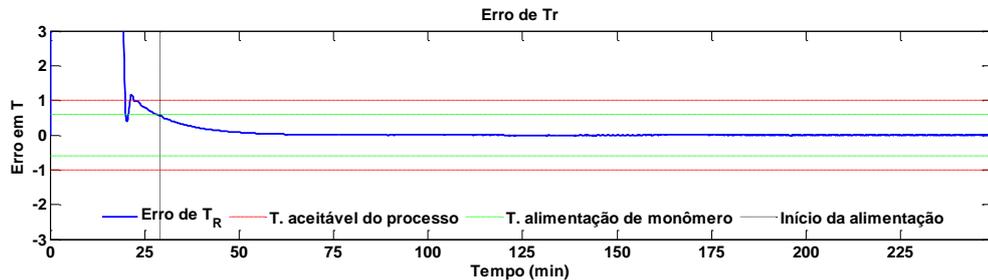


Figura 7.88: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint* (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

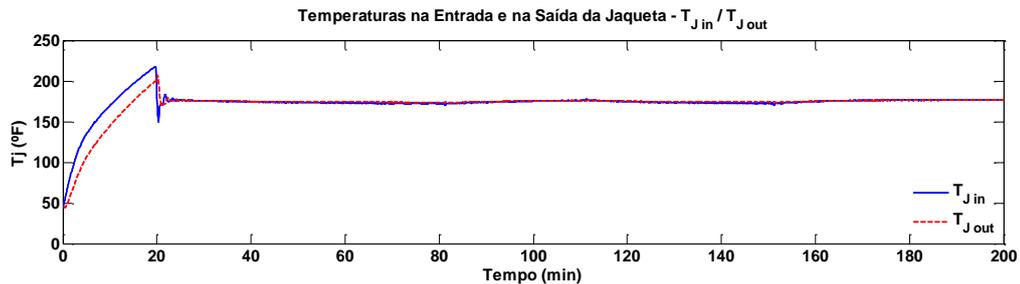


Figura 7.89: Temperaturas de entrada e saída da jaqueta (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

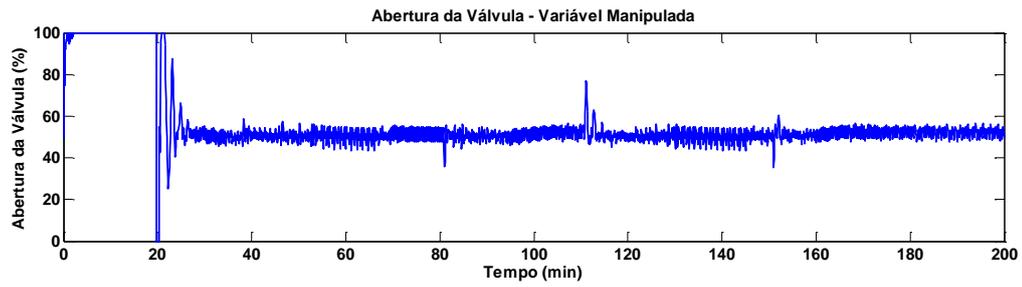


Figura 7.90: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

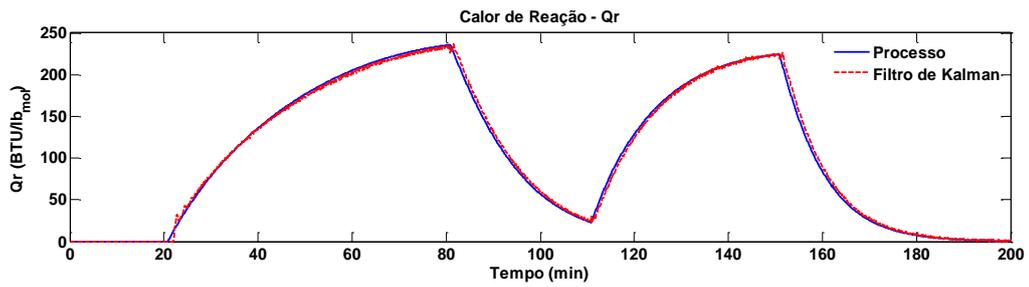


Figura 7.91: Evolução do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

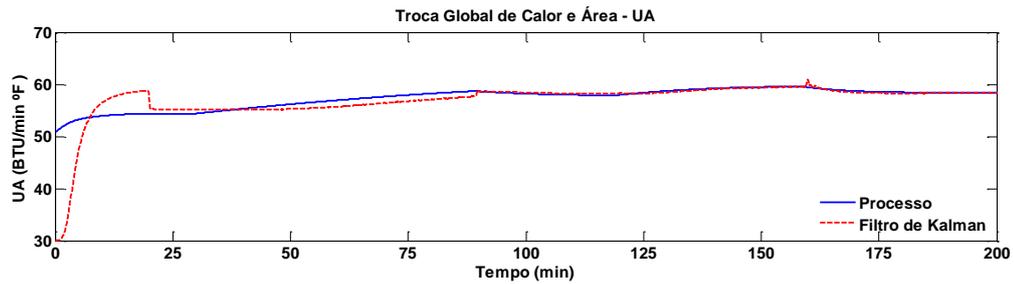


Figura 7.92: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

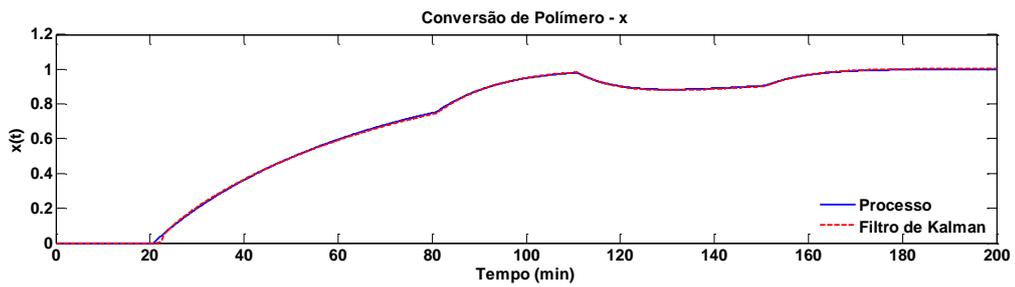


Figura 7.93: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

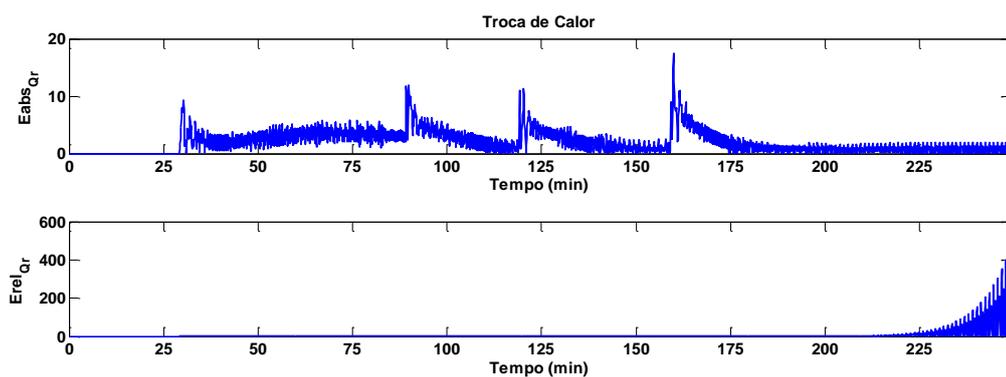


Figura 7.94: Erro absoluto e relativo da estimação do calor de reação (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

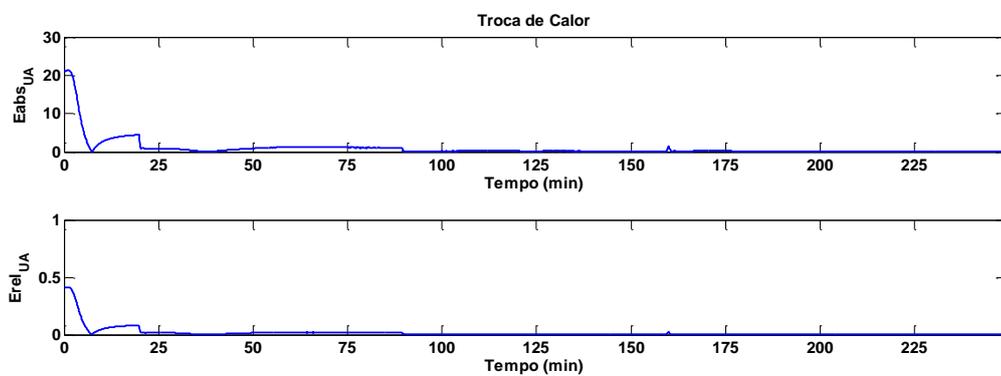


Figura 7.95: Erros absoluto e relativo do coefic. global de troca térmica e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-CP-).

## 7.6 Anexo 6 – Resultados Complementares para o Problema da Incerteza na Taxa de Calor Perdido

### Resultados para o produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto B, batelada 1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para  $T_J$ , a estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso, e valor inicial de UA de 80 BTU/min°F. Esta simulação foi codificada da forma “PB-B1-IN-FFTJ-30-UAlo”.

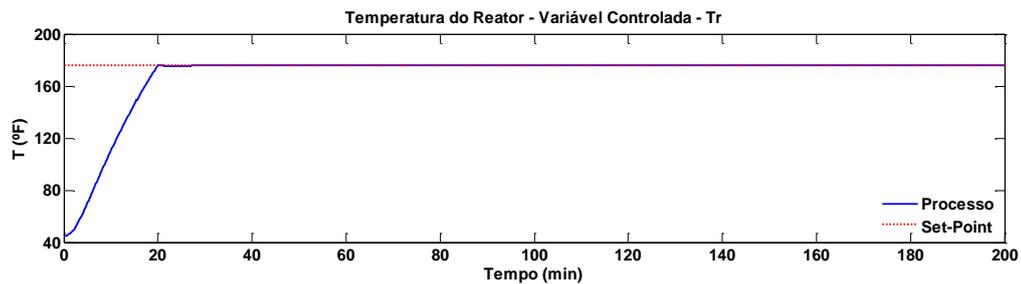


Figura 7.96: Temperatura do reator (PB-B1-IN-FFTJ-30-UAlo).

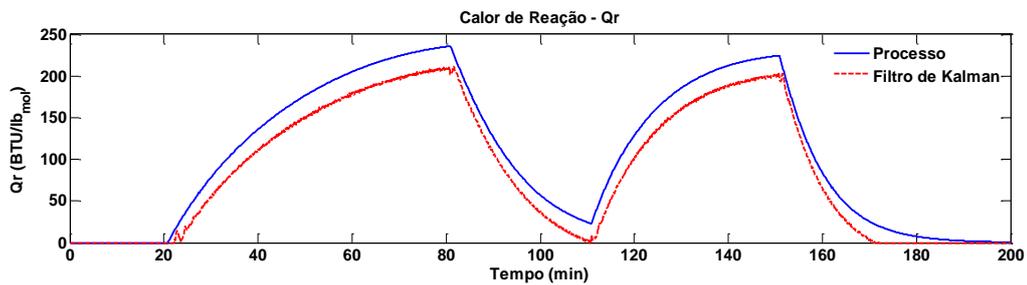


Figura 7.97: Evolução do calor de reação (PA-B1-VE-FFTJ-80-UAlo).

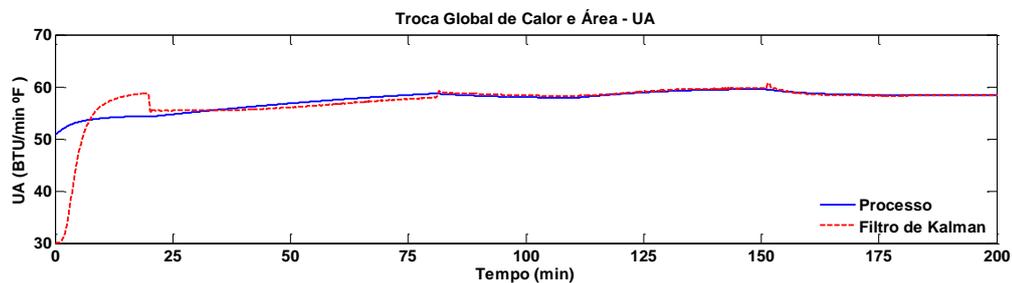


Figura 7.98: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B1-IN-FFTJ-30-UAlo).

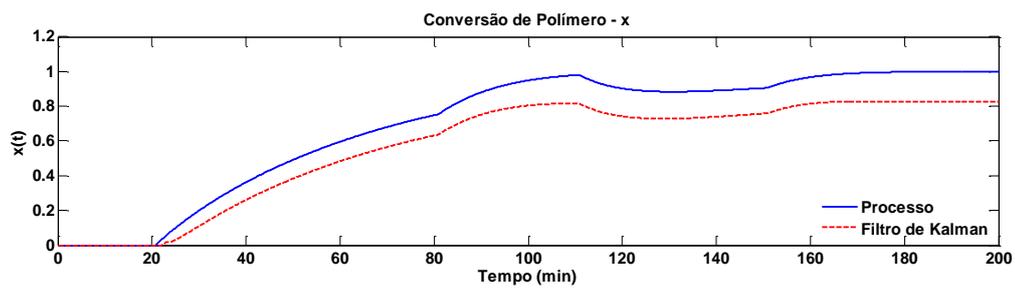


Figura 7.99: Conversão do polímero (PB-B1-IN-FFTJ-30-UAlO).

## 7.7 Anexo 7 – Informações dos produtos e do reator

### 7.7.1 Dados para o produto A

Tabela 7.1 – Dados para o produto A conforme Chylla e Haase (1993).

PRODUTO A		
ITENS	VALOR	UNIDADE
$k_0$	3.300	1/min
$H_p$	30.160	BTU/lbmol
$MWM$	104	lb/lbmol
$Com$	0,4	BTU/lb °F
$CpW$	1,0	BTU/lb °F
$CpS$	0,8	BTU/lb °F
$\rho_m$	0,90	-
$\rho_w$	1,00	-
$\rho_s$	1,04	-
$S(0)$	119,0	Lb
Fração de sólidos	0,208	-
Fração de água	0,792	-
Fração de monômero	0,000	-
$TR$	180	°F

Obs.: Alimentação do monômero no reator é feita a 1,0 lb/min durante 70 min e depois do período de adição de monômero a reação é mantida por 60 min a mesma temperatura.

### 7.7.2 Dados para o produto B

Tabela 7.2 – Dados para o produto B conforme Chylla e Haase (1993).

PRODUTO B		
ITENS	VALOR	UNIDADE
$k_0$	1.200	1/min
$H_p$	28.200	BTU/lbmol
$MWM$	106	lb/lbmol
$Com$	0,4	BTU/lb °F
$CpW$	1,0	BTU/lb °F
$CpS$	0,8	BTU/lb °F
$\rho_m$	0,90	-
$\rho_w$	1,00	-
$\rho_s$	1,04	-
$S(0)$	93,3	lb
Fração de sólidos	0,204	-
Fração de água	0,796	-
Fração de monômero	0,000	-
$TR$	176	°F

Obs.: Alimentação do monômero no reator é feita a 0,8 lb/min durante 60 min e depois do 1º período de adição de monômero a reação é mantida por 30 min a mesma temperatura. Uma segunda alimentação é feita por 40 min e ao término do 2º período a reação é mantida por 45 min a mesma temperatura.

### 7.7.3 Dados do Reator

Tabela 7.3 – Dados do Reator, sistemas e processo conforme Chylla e Haase (1993).

<b>REATOR</b>		
<b>ITENS</b>	<b>VALOR</b>	<b>UNIDADE</b>
Diâmetro do reator	19,5	in
Altura	21,0	in
Volume de trabalho	30,0	gal
Volume da jaqueta	5,7	gal
Área do fundo da jaq.	1,8	ft <sup>2</sup>
Área lateral da jaq.	5,23 x alt.	ft <sup>2</sup>
<i>T</i> água de reposição (inverno)	42,0	°F
<i>T</i> água de reposição (verão)	70,0	°F
<i>Tamb</i> (inverno)	45,0	°F
<i>Tamb</i> (verão)	90,0	°F
<i>UA</i> <sub>loss</sub>	10,74	BTU/h°F
<i>W</i> <sub><i>cj</i></sub>	47,3	BTU/h°F
<i>F</i> <sub><i>w</i></sub>	124,5	lbs/min
<i>C</i> <sub><i>pw</i></sub>	1,00	BTU/lb°F
<i>θ</i> <sub>1</sub>	0,38	min
<i>θ</i> <sub>2</sub>	0,25	min
<i>τ</i> <sub><i>p</i></sub>	0,67	min
<i>τ</i> <sub><i>c</i></sub>	0,55	min