

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

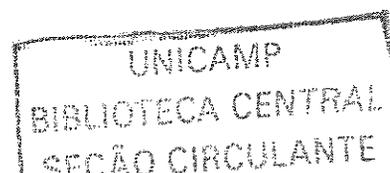
**SÍNTESE DE UM CONTROLADOR HÍBRIDO
FUZZY-PREDITIVO: APLICAÇÃO PARA
PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO**

ALESSANDRO MATTEDI

PROF. DR. RUBENS MACIEL FILHO
(Orientador)

PROF. DR. WAGNER CARADORI DO AMARAL
(Co-orientador)

Campinas - São Paulo
novembro – 2003



55104003155

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

**SÍNTESE DE UM CONTROLADOR HÍBRIDO
FUZZY-PREDITIVO: APLICAÇÃO PARA
PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO**

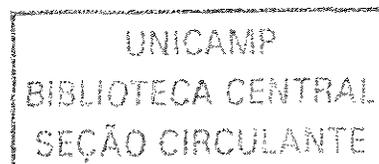
Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

ALESSANDRO MATTEDI

PROF. DR. RUBENS MACIEL FILHO
(Orientador)

PROF. DR. WAGNER CARADORI DO AMARAL
(Co-orientador)

Campinas - São Paulo
novembro - 2003



UNIDADE	BC
DEPARTAMENTO	UNICAMP
	M429s
EX	
CURSO	57156
PROG.	16-P-117/04
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	02/03/04
Nº CPU	

CM00194767-0

bib id 311513

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

M429s

Mattedi, Alessandro

Síntese de um controlador híbrido fuzzy-preditivo: aplicação para processos de polimerização / Alessandro Mattedi.--Campinas, SP: [s.n.], 2003.

Orientadores: Rubens Maciel Filho e Wagner Caradori do Amaral.

Tese (Doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Controle de processos químicos. 2. Controle preditivo. 3. Polimerização. 4. Lógica difusa. I. Maciel Filho, Rubens. II. Amaral, Wagner Caradori. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Tese de Doutorado defendida por Alessandro Mattedi e aprovada em 11 de Novembro de 2003 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



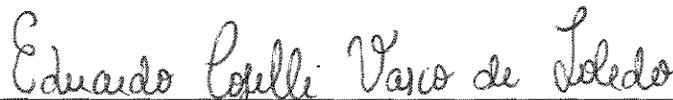
Prof. Dr. Rubens Maciel Filho - FEQ/UNICAMP
(Orientador)



Prof. Dr. Fernando José Von Zuben - FEEC/UNICAMP



Dr. Odair Araújo - Látex Brasil LTDA



Dr. Eduardo Coselli Vasco de Toledo - Pesquisador LOPCA/FEQ



Prof. Dr. Francisco Maugeri Filho - FEA/UNICAMP

Esta versão corresponde à redação final da Tese de Doutorado em Engenharia Química defendida por Alessandro Mattedi e aprovada pela comissão julgadora em 11 de novembro de 2003.

A handwritten signature in black ink, written in a cursive style, positioned above a horizontal line. The signature appears to read 'Rubens Maciel Filho'.

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho - FEQ/UNICAMP

à memória de minha avó materna Olinda Marques Ferreira

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

AGRADECIMENTOS

Quero aproveitar este espaço para registrar os meus agradecimentos a algumas pessoas que foram muito importantes para que este trabalho fosse realizado. Na verdade, é difícil descrever em poucas palavras a minha gratidão:

Profunda, ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho pela orientação segura e atenciosa deste trabalho e pelas inúmeras demonstrações de amizade e encorajamento ao longo desta jornada. As suas direções e visão sobre a importância desta tese para a Engenharia Química foram sempre fatores de grande motivação para a realização da mesma. Para mim, tem sido uma grande honra conviver com o Prof. Rubens ao longo desses últimos 7 anos! Como o tempo passa, hein?! Mas as boas amizades permanecem!

Ao Prof. Dr. Wagner Caradori do Amaral por sua co-orientação sempre muito atenciosa e criteriosa. Sinto-me de fato muito privilegiado por sua participação neste trabalho.

Aos meus colegas e amigos do LOPCA. Pelas discussões e contribuições por parte, principalmente, do Prof. Dr. Luiz Augusto Meleiro, do Dr. Eduardo Coselli, do Dr. Basilino e da Dra. Aline.

Ao Prof. Dr. Francis J. Doyle III e Dr. John R. Richards pela colaboração no desenvolvimento do programa de simulação do caso de estudo de copolimerização.

Ao Prof. Dr. Reinaldo Giudici e ao Ms. Alexandre Tresmondi pelas informações relacionadas ao caso de estudo de policondensação.

Ao Cristiano e ao Fábio pelo suporte técnico concedido em inúmeras oportunidades. Aos bibliotecários das Bibliotecas da UNICAMP (Central e Engenharia de Alimentos) e da USP (Faculdade Engenharia Química e Engenharia Elétrica), que sempre me atenderam com toda a gentileza.

Aos meus amigos muito especiais do LOPCA: Patrícia Fazzio, Cristiane Bartasson, Claudinha, João Gonzaga, Marcão, Mário e Helenise, Amilton Schiavon; e a todos colegas do LOPCA, de coração, agradeço muito pelo convívio.

À FAPESP pelo suporte financeiro e pelas correções por meio dos relatórios técnicos realizados através do processo número 98/13507-4.

Aos professores e pesquisadores da banca examinadora que contribuíram significativamente para esta versão final.

Aos professores da Faculdade de Engenharia Química/UNICAMP, em especial, à Prof^ª. Dra. Maria Regina Wolf Maciel.

Em especial, aos meus familiares, que não mediram esforços para a minha formação em todos os sentidos. Especialmente, aos meus pais, aos meus irmãos e à tia Arlete.

Acima de tudo, a Deus, pela saúde concedida, por colocar as pessoas e oportunidades certas na minha vida no tempo certo, por abrir as portas, por me conceder a capacidade de crer; também agradeço pelas dificuldades que me amadureceram mais, que me fizeram entender minhas limitações e a não mais julgar os outros. Agradeço muito ao Deus Todo Poderoso por tudo isso!

“É muito difícil você conseguir vencer numa boa. Para vencer você tem que lutar, e essa luta muitas vezes significa se indispor de certa forma com algumas pessoas, para prevalecer aquilo que você acredita: teu ponto de vista, tua cabeça, a tua personalidade acima de tudo. E se você não lutar para valer você acaba perdendo o teu próprio rumo, e se você perde o seu próprio caminho você não é ninguém. Então para conseguir manter essa linha de conduta você tem que lutar muito. E, muitas vezes, tem que brigar mesmo.”

Ayrton Senna

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um controlador preditivo baseado em modelos *fuzzy* funcionais para o controle de processos de polimerização. Estes processos apresentam um comportamento dinâmico altamente não linear, dificultando assim o desenvolvimento de controladores baseados em modelo convencionais. Para tanto, consideram-se dois casos de estudo da literatura: processo de copolimerização (Congalidis et al. 1989) e policondensação (Giudici et al. 1999). O processo de copolimerização apresenta um sistema de reciclo que ocasiona algumas perturbações na entrada do reator do processo. Soluciona-se este problema através de um controlador *feedforward* apresentado por Congalidis et al. 1989. Dessa forma, pode-se tratar o reator do processo como um sistema isolado no desenvolvimento do controlador. Para o caso do processo de policondensação, tomando-se como base o modelo estacionário do reator tubular desenvolvido por Giudici et al. 1999, foi desenvolvido um modelo dinâmico através do seqüenciamento de dez reatores de tanque agitado contínuo (CSTR). Este modelo representa satisfatoriamente o comportamento dinâmico das principais variáveis no desenvolvimento do sistema de controle. Dessa forma, cada um desses dois casos de estudo são considerados como as plantas para aplicação dos sistemas de controle. A escolha de um controlador preditivo como base de desenvolvimento do controlador proposto deve-se ao fato do sucesso na implementação dos controladores preditivos em diversos processos químicos, pois tais controladores, além apresentarem bom desempenho nos controles regulatório e servo, apresentam a possibilidade de inclusão de restrições nas variáveis manipuladas e controladas. Assim sendo, procura-se neste trabalho apresentar o desenvolvimento de uma metodologia de projeto sistemático de controlador preditivo baseando-se em modelos dinâmicos *fuzzy* funcionais (Takagi e Sugeno 1985). Estes modelos apresentam uma excelente capacidade de representação de dados dinâmicos. Além disso, apresentam a possibilidade de inclusão de informações qualitativas (ou operacionais) do processo. Tomando-se como base o modelo *fuzzy* de Takagi e Sugeno, a determinação do modelo (número de regras e parâmetros) é obtida a

partir de um conjunto de dados provenientes do processo. O tratamento desses dados para a determinação do modelo *fuzzy* é realizado por meio de algoritmos matemáticos de agrupamento (*clustering*) e mínimos quadrados. Os modelos são validados utilizando-se uma parte dos dados de identificação, denominados de dados de teste. Os resultados dessa modelagem para os dois casos de estudo considerados são apresentados com excelentes resultados. Por fim, esses modelos *fuzzy* são inseridos na metodologia de controle preditivo; emprega-se o controlador preditivo baseado em coeficientes da resposta à entrada degrau (DMC) como base comparativa nos resultados de controle. Nas simulações realizadas os resultados de controle obtidos com o controlador proposto foram superiores aos oriundos do DMC convencional, demonstrando o potencial de utilização do novo algoritmo proposto para o controle de sistemas não lineares.

ABSTRACT

This work presents the development of a new predictive controller based in functional fuzzy models for polymerization processes. These processes present a highly non-linear dynamic behavior, thus making difficult the development of controllers based on model as conventional predictive controllers. Two case studies were considered to analyse the performance of the proposed controller, to know: process of copolymerization (Congalidis et al. 1989) and polycondensation (Giudici et al. 1999). The copolymerization process presents a recycle system that leads to some disturbances in the reactor input of the process. This problem is solved through a feedforward controller, developed by Congalidis et al. 1989. In this way, the reactor can be interpreted as an isolated process system for the control system design. For the polycondensation process, a dynamic model was developed through the sequence of ten reactors CSTR. This model satisfactorily represents the dynamic behavior of the main process variables for the development of the control system. Taking this into consideration the success of some applications of predictive controllers in chemical processes, and also its ability to consider the restrictions on the manipulated and controlled variables. This type of controller was used as a basis for the development of new control algorithm coupling the fuzzy concepts together with the model predictive controllers. Thus, it explicated in this work the development of a methodology for the design the predictive controller being based on functional dynamic models fuzzy (Takagi e Sugeno 1985). These models present an excellent capacity to represent dynamic data. Moreover, they allow the inclusion of qualitative or operational information of the process. The fuzzy model determination (rules number and model parameters) is obtained from the process database. The treatment of these data for the fuzzy model determination is carried out by means of mathematical algorithms of clustering and least squares. The modeling by the fuzzy approach showed to have a good potential for representation. The fuzzy internal models were developed based on the functional dynamic fuzzy representation (Takagi e Sugeno, 1985). The proposed fuzzy based controller were compared to the dynamic matrix controller (DMC) and the obtained results showed that the proposed controller is robust and does not require step test as conventional controllers.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	MOTIVAÇÕES DO TRABALHO	1
1.2	OBJETIVOS PROPOSTOS	3
1.3	ORGANIZAÇÃO DA TESE	4
1.4	CONTRIBUIÇÕES	6
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
2.1	INTRODUÇÃO	7
2.2	PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO	7
2.3	CONTROLE DE PROCESSOS	11
2.4	SISTEMAS NEBULOSOS EM PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO	16
2.5	CONCLUSÕES DO CAPÍTULO	19
3	CASOS DE ESTUDOS	20
3.1	INTRODUÇÃO	20
3.2	DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE COPOLIMERIZAÇÃO	20
3.3	MODELO FENOMENOLÓGICO DO PROCESSO DE COPOLIMERIZAÇÃO	23
3.4	PROGRAMA DE SIMULAÇÃO DO MODELO DO PROCESSO DE COPOLIMERIZAÇÃO	35
3.5	DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE POLICONDENSAÇÃO INDUSTRIAL	38

3.6	MODELO DINÂMICO REPRESENTATIVO DO REATOR DE NYLON-6,6	40
3.7	PROGRAMA DE SIMULAÇÃO DO MODELO DO PROCESSO DE POLICONDENSAÇÃO	44
3.8	CONCLUSÕES DO CAPÍTULO	47
4	SISTEMAS <i>FUZZY</i>	48
4.1	INTRODUÇÃO	48
4.2	CONCEITOS FUNDAMENTAIS	48
4.3	CLASSIFICAÇÃO DE MODELOS <i>FUZZY</i>	55
4.4	CONCLUSÕES DO CAPÍTULO	60
5	IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS <i>FUZZY</i> FUNCIONAIS	61
5.1	INTRODUÇÃO	61
5.2	TÓPICOS DE IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS	62
5.3	DESENVOLVIMENTO DE MODELOS <i>FUZZY</i> FUNCIONAIS	64
5.4	REPRESENTAÇÃO DO MODELO DINÂMICO <i>FUZZY</i> FUNCIONAL	73
5.5	RESULTADOS DE SIMULAÇÃO EM MALHA ABERTA DO REATOR DE COPOLIMERIZAÇÃO	75
5.6	RESULTADOS DE SIMULAÇÃO EM MALHA ABERTA DO PROCESSO DE POLICONDENSAÇÃO	82
5.7	CONCLUSÕES E JUSTIFICATIVAS	86
6	CONTROLE PREDITIVO BASEADO EM MODELO (MBPC)	87

6.1	INTRODUÇÃO	87
6.2	FUNDAMENTOS TEÓRICOS DE CONTROLE PREDITIVO (MBPC)	89
6.3	CONTROLE DE MATRIZ DINÂMICA (DYNAMIC MATRIX CONTROL DMC)	93
6.4	PROJETO DE CONTROLADOR HÍBRIDO <i>FUZZY</i> -PREDITIVO (F-MPC)	99
6.5	CONCLUSÕES DO CAPÍTULO	100
7	RESULTADOS DE CONTROLE	101
7.1	INTRODUÇÃO	101
7.2	RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DO CONTROLE <i>FEEDFORWARD</i> DO REATOR DE COPOLIMERIZAÇÃO	102
7.3	RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DE CONTROLE PREDITIVO DO REATOR DE COPOLIMERIZAÇÃO	104
7.4	RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DE CONTROLE PREDITIVO DO CASO DE ESTUDO DE POLICONDENSAÇÃO	113
7.5	CONCLUSÕES DO CAPÍTULO	119
8	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	120
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	122

LISTA DE FIGURAS

2.1	Esquema genérico de controladores preditivos (MBPC)	13
3.1	Diagrama do processo de copolimerização com reciclo	21
3.2	Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular ponderado médio (M_{pw}) sob perturbações degrau de -3 e $-1,5\%$ sobre a temperatura de jaqueta (T_j) no instante 10 horas	37
3.3	Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular ponderado médio (M_{pw}) sob perturbações degrau de 3 e $1,5\%$ sobre a temperatura de jaqueta (T_j) no instante 10 horas.	37
3.4	Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular ponderado médio (M_{pw}) sob uma perturbação degrau de 4 milésimos da vazão molar total sobre a vazão molar de inibidor (F_2) no instante inicial.	38
3.5	Esquema simplificado do processo de policondensação	39
3.6	Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular do <i>nylon-6,6</i> (M_n) sob perturbações degrau de mais ou menos 10% sobre a vazão de massa de sal de <i>nylon</i> na entrada do processo de policondensação no instante inicial.	45
3.7	Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular do <i>nylon-6,6</i> (M_n) sob perturbação degrau de mais ou menos 5% sobre a vazão de massa de amina na entrada do processo de policondensação no instante inicial.	46
4.1	Ilustração da função analítica <i>gaussiana</i> de <u>temperatura média</u>	50
4.2	Ilustração da função analítica <i>gaussiana</i> de <u>peso molecular alto</u>	51
5.1	Mecanismo de manipulação da temperatura de jaqueta	76

5.2	Dados de identificação da variável de entrada	77
5.3	Dados de identificação da variável de saída	77
5.4	Validação do modelo <i>fuzzy</i> para o conjunto de dados de teste – modelo <i>fuzzy</i> com funções conseqüentes lineares	81
5.5	Validação do modelo <i>fuzzy</i> para o conjunto de dados de teste – modelo <i>fuzzy</i> com funções conseqüentes não lineares	81
5.6	Dados de treinamento e teste da variável de entrada	82
5.7	Dados de treinamento e teste da variável de saída	83
5.8	Validação do modelo <i>fuzzy</i> funcional para o sistema de policondensação	85
6.1	Esquema genérico de controladores preditivos (MBPC)	90
6.2	Estrutura de controle de modelo interno (IMC)	92
6.3	Diagrama esquemático do controlador <i>fuzzy</i> proposto	99
7.1	Variáveis manipuladas e variáveis relacionadas ao controle <i>feedforward</i> sob perturbação na taxa de descarga	104
7.2	Exemplificação da não linearidade do peso molecular ponderado médio à mudança da temperatura de jaqueta	106
7.3	Resultados comparativos de controle servo entre F-MPC e DMC para a variável controlada	107
7.4	Resultados comparativos de controle servo entre F-MPC e DMC para a variável manipulada	108
7.5	Resultados comparativos de controle servo entre F-MPC's	109
7.6	Resultados comparativos de análise do fator de supressão para o	

	F-MPC conseqüente não linear – variável controlada	110
7.7	Resultados comparativos de análise do fator de supressão para o F-MPC conseqüente não linear – variável manipulada	110
7.8	Resultados comparativos de controle servo entre F-MPC's	111
7.9	Resultados comparativos de controle regulatório entre F-MPC e DMC	112
7.10	Resultados comparativos de controle regulatório entre F-MPC e DMC	112
7.11	Resultados de controle regulatório para diferentes estruturas	113
7.12	Controle servo do processo de policondensação (9700 kg/kmol) – variável controlada	114
7.13	Controle servo do processo de policondensação (9700 kg/kmol) – variável manipulada	115
7.14	Controle servo do processo de policondensação (9200 kg/kmol) – variável controlada	115
7.15	Controle servo do processo de policondensação (9200 kg/kmol) – variável manipulada	116
7.16	Resultados de controle regulatório do processo policondensação (distúrbio +5%) – variável controlada	117
7.17	Resultados de controle regulatório do processo policondensação (distúrbio +5%) – variável manipulada	117
7.18	Resultados de controle regulatório do processo policondensação (distúrbio -5%) – variável controlada	118
7.19	Resultados de controle regulatório do processo policondensação (distúrbio -5%) – variável manipulada	118

LISTA DE TABELAS

2.1	Artigos de Ray e co-autores sobre o comportamento dinâmico de reatores contínuos de polimerização	8
3.1	Condições operacionais do reator de copolimerização	22
3.2	Parâmetros cinéticos e termodinâmicos para o modelo fenomenológico do reator de copolimerização	26
3.3	Condições iniciais do processo de copolimerização	35
3.4	Compostos químicos envolvidos na policondensação do nylon-6,6	40
3.5	Cinéticas da policondensação de nylon-6,6	42
3.6	Parâmetros do reator de policondensação	43
5.1	Parâmetros do modelo <i>fuzzy</i> com funções conseqüentes lineares para o processo de copolimerização	78
5.2	Parâmetros do modelo <i>fuzzy</i> com funções conseqüentes não lineares para o processo de copolimerização	79
5.3	Parâmetros do modelo <i>fuzzy</i> para o processo de policondensação	84
7.1	Parâmetros dos controladores preditivos para o reator de copolimerização	105

SIGLAS

AIBN	<i>AZOBISISOBUTIRONITRILA</i>
ARX	<i>AUTO-REGRESSIVE</i>
CARIMA	<i>CONTROLLER AUTO-REGRESSIVE MOVING-AVERAGE</i>
CLP	<i>CONTROLADOR LÓGICO PROGRAMÁVEL</i>
CSTR	<i>CONTINUOS STIRED TANK REACTOR</i>
DMC	<i>DYNAMIC MATRIX CONTROL</i>
DNB	<i>DINITROBENZENO</i>
EA	<i>ACETATO DE ETILENO</i>
FC	<i>FLOW CONTROLLER</i>
FLC	<i>FUZZY LOGIC CONTROL</i>
F-MPC	<i>FUZZY MODEL PREDICTIVE CONTROLLER</i>
FT	<i>FLOW TRANSMITTER</i>
GPC	<i>GENERALIZED PREDICTIVE CONTROL</i>
HDPE	<i>HIGH-DENSITY POLYETHYLENE</i>
IAE	<i>INTEGRAL OF THE ABSOLUTE ERROR</i>
IDCOM	<i>IDENTIFICATION AND COMMAND</i>
IMC	<i>INTERNAL MODEL CONTROL</i>
MAC	<i>MODEL ALGORITHM CONTROL</i>
MBPC	<i>MODEL BASED PREDICTIVE CONTROL</i>

MMA	METACRILATO DE METILA
MWD	DISTRIBUIÇÃO DE PESO MOLECULAR
PFC	<i>PREDICTIVE FUNCTIONAL CONTROL</i>
PFR	<i>PLUG-FLOW REACTOR</i>
PID	PROPORCIONAL INTEGRATIVO DERIVATIVO
PLC	<i>PROGRAMMABLE LOGIC CONTROLLER</i>
QDMC	<i>QUADRATIC DYNAMIC MATRIX CONTROL</i>
SP	<i>SET POINT</i>
TC	<i>TEMPERATURE CONTROLLER</i>
TT	<i>TEMPERATURE TRANSMITTER</i>
VA	ACETATO DE VINILA

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Esta tese apresenta o desenvolvimento de um sistema de controle preditivo não linear baseado em sistemas *fuzzy* (Zadeh, 1965) para processos de polimerização. Utiliza-se uma abordagem *fuzzy* pela possibilidade de se utilizar informações qualitativas de operação da planta química (Postlewaite, 1996), permitindo representar informações operacionais de processos químicos. Assim as estratégias de desenvolvimento de sistemas de controle procuram abordar aspectos acadêmicos e industriais, buscando soluções para os diversos desafios existentes em processos de polimerização contínuos. Uma estratégia de integração de lógica *fuzzy* e controle preditivo baseado em modelo (MBPC), desenvolvida ao longo deste trabalho, é a utilização de um modelo *fuzzy* como preditor no controle preditivo para dois casos de estudo de polimerização; ao passo que outras possíveis estratégias de integração são propostas conjuntamente ao longo da descrição dos procedimentos de implementação.

1.1. MOTIVAÇÕES DO TRABALHO

A importância de trabalhos abordando processos de polimerização deve-se à importância dos materiais poliméricos, pois através destes é produzida uma grande diversidade de produtos de utilidade no mercado mundial e nacional. Os polímeros estão presentes em diversos ramos industriais, tais como: indústria de borrachas, automóveis, embalagens, calçados, tintas, plásticos, brinquedos, alfaiataria, móveis, medicamentos, entre outros. Os produtos poliméricos são de grande utilidade e diversidade. Estão divididos em polímeros naturais (borracha, celulose, proteína e outros) e sintéticos. Estes últimos são artificiais e diversos, criados com finalidades tecnológicas específicas, sendo produzidos por diversos mecanismos e processos de reação.

Outro aspecto que motiva o enorme interesse pelo estudo dos processos de polimerização são os grandes desafios de modelagem e controle de tais processos, visto que são processos não lineares, variantes no tempo e com baixa frequência de medição (Roffel e Chin, 1991). Estas dificuldades de monitoramento e compreensão dos fenômenos presentes dificultam a modelagem matemática dos processos de polimerização; por isso, a possibilidade de inclusão de informações do processo para formulação de modelo matemático, tanto de heurísticas de operação como de dados provenientes da planta industrial, é uma alternativa bastante interessante.

Os aspectos de não linearidades dos processos de polimerização estão relacionados à complexa dinâmica existente. Para os casos de polimerização em reatores contínuos por radical livre, a complexidade dinâmica é devida, em grande parte, aos fenômenos termoquímicos presentes (Teymour e Ray 1992). Toda a complexidade dinâmica dos processos de polimerização caracterizam os mesmos como altamente não lineares.

Outro problema é o fato de um mesmo monômero gerar polímeros com propriedades diferentes, o que implica num número considerável de dificuldades encontradas durante a produção do material polimérico, de forma que, para garantir a produção de um polímero específico, são necessárias condições de reação severamente controladas e equipamentos adequados (Toledo, 1992). E associado à crescente competitividade da indústria de polímeros, novas tecnologias visando a redução de custos e maior rigor pela qualidade dos polímeros devem ser propostas. Para tanto, têm sido fundamental os trabalhos em sistemas de controle avançados (controle preditivo e adaptativo), associados a modelos internos capazes de prever as propriedades do polímero por meio das condições de operação e configuração do reator (Kiparissides, 1996). Um dos casos de estudo desta tese é o processo de copolimerização de radical livre em reator de tanque agitado contínuo (CSTR) de metacrilato de metila (MMA) e acetato de vinila (VA), com o solvente benzeno e o iniciador azobisisobutironitrila (AIBN) (Congalidis et al. 1989). Este reator contém um sistema de reciclo de

reaproveitamento de monômeros e solvente. O outro caso de estudo é um reator industrial de policondensação de *nylon-6,6* (Giudici et al. 1999).

1.2. OBJETIVOS PROPOSTOS

A proposta desta tese é a integração de sistemas *fuzzy* ao controle preditivo (MBPC) para processos de polimerização, tomando-se dois casos de estudo industriais. Este sistema de controle deve garantir a estabilidade, bem como os controles regulatório e servo do sistema. As estratégias propostas são elucidadas ao longo desta tese, mas visam, basicamente, solucionar os seguintes desafios existentes:

- Não linearidade local de ponto de operação;
- Não linearidade devido à mudança de ponto de operação;

Além destes dois desafios, algumas bases teóricas de propostas de inclusão de informações operacionais na modelagem *fuzzy* do processo são feitas ao longo desta tese (capítulo 5). Esta etapa de inclusão não é realizada neste trabalho, mas é sugerida em trabalhos futuros (capítulo 8), pois o enfoque no desenvolvimento de modelos *fuzzy* deste trabalho é enaltecido para o tratamento de informações numéricas provenientes de dados do processo.

Os dois modelos fenomenológicos dos processos de polimerização considerados como casos de estudo são provenientes da literatura. Tratam-se de processos industriais contínuos. O primeiro caso é um processo de copolimerização (Congalidis et al. 1989, Maner et al. 1997). O outro é um processo industrial de policondensação de *nylon-6,6* (Giudici et al. 1997). O estudo é realizado por meio de simulação computacional, que é uma ferramenta indispensável para o desenvolvimento dos processos industriais. O desenvolvimento de simulação computacional tem sido motivado pelo crescimento do poder de cálculo dos microcomputadores e pelo sucesso de aplicação de técnicas de simulação no projeto, definição de políticas operacionais, otimização e controle de processos. A partir de modelos matemáticos representativos de processos industriais, existe a possibilidade do conhecimento do comportamento

dinâmico e estacionário de variáveis do processo. Assim sendo, esses modelos podem ser considerados como plantas para o desenvolvimento e análise de desempenho dos algoritmos de controle.

Entretanto na realidade industrial, existem diversas dificuldades de modelagem de processos, o que leva a desconsideração de informações fenomenológicas relevantes no desenvolvimento do modelo matemático do processo, dificultando o projeto do sistema de controle.

Uma solução proposta nesta tese é a utilização de modelos *fuzzy* ou nebulosos de Takagi-Sugeno (modelos nebulosos funcionais), introduzidos por Takagi e Sugeno (1985), através da utilização de dados da planta industrial no projeto do modelo. Essa estrutura modela um sistema altamente não linear através de interpolação de funções matemáticas lineares ou não lineares.

Portanto, a aplicação de técnicas não convencionais para modelagem de processos – sistemas *fuzzy*, redes neurais, algoritmos genéticos - é uma alternativa bastante interessante para o tratamento de não linearidades existentes (Meleiro, 2002). Pois através dessas bases teóricas, pode-se considerar representações matemáticas com características não lineares. Nesta tese, a lógica *fuzzy* na modelagem de processos é explorada como alternativa para o projeto de controladores preditivos híbridos com características *fuzzy* para processos de polimerização.

1.3. ORGANIZAÇÃO DA TESE

Este capítulo apresenta uma introdução, objetivos, organização e a proposta desta tese; assim o trabalho proposto é introduzido.

O capítulo 2 procura mostrar os principais trabalhos da literatura de processos de polimerização, controle de processos e sistemas *fuzzy*. Dessa forma, enquadram-se o propósito e os desafios desta tese aos trabalhos relacionados já existentes na literatura.

O capítulo 3 apresenta os dois casos de estudo considerados como plantas de aplicação do sistema de controle desenvolvido. O primeiro caso de estudo trata-se do processo de copolimerização por radical livre de metacrilato de metila (MMA) e acetato de vinila (VA). O modelo fenomenológico é descrito, bem como o algoritmo de simulação do mesmo. O outro caso de estudo trata-se do processo de policondensação para produção de *nylon-6,6*. Tomando-se como base o modelo fenomenológico do reator tubular industrial de Giudici et al. 1999, um modelo dinâmico foi desenvolvido; este modelo é apresentado bem como o algoritmo de simulação do mesmo. Assim cada um desses dois modelos matemáticos dos casos de estudo funcionam como plataformas computacionais de aplicação dos sistemas de controle desenvolvidos.

O capítulo 4 apresenta os conceitos de sistemas *fuzzy*, bem como uma classificação de modelos *fuzzy*. Essas apresentações são importantes pois tratam de conceitos empregados no desenvolvimento dos modelos *fuzzy* deste trabalho.

O capítulo 5 apresenta alguns tópicos de identificação de sistemas no tocante à formalização da estrutura do modelo, a metodologia de determinação de dados de identificação, a taxa de amostragem; também são apresentados os métodos numéricos empregados no projeto do modelo dinâmico *fuzzy*. Por fim, apresentam-se os resultados de simulação de desenvolvimento do modelo dinâmico *fuzzy* para os dois casos de estudo considerados.

O capítulo 6 apresenta os fundamentos teóricos de controle preditivo, bem como os algoritmos de controle; neste capítulo, inicialmente, o embasamento teórico procura tratar o controle preditivo como uma metodologia genérica, e não restrito a um único tipo de controle preditivo; depois, o algoritmo do controlador de matriz dinâmica (*Dynamic Matrix Control - DMC*), aplicado nesta tese, é apresentado. Este controlador preditivo linear é empregado para comparações dos resultados obtidos dos devidos controladores. Por fim, o controlador proposto híbrido *fuzzy*-preditivo é apresentado.

O capítulo 7 apresenta os resultados de simulação de controle considerando-se os casos de estudos desta tese. Nestes resultados, realizam-se

testes de controle servo e regulatório dos controladores preditivos para os casos de estudo, com intuito de ilustrar os desempenhos de tais controladores.

Finalmente, o capítulo 8 apresenta as conclusões desta tese, bem como as sugestões de trabalhos futuros.

1.4. CONTRIBUIÇÕES

As principais contribuições deste trabalho podem ser resumidas no desenvolvimento dos seguintes algoritmos computacionais:

- 1) Simulação de plantas químicas de polimerização, considerando-se dois casos de estudo: um caso de polimerização e o outro caso de policondensação, que são duas classes de processos de polimerização de grande importância industrial.
- 2) Integração de sistemas *fuzzy* e métodos numéricos de estimação de parâmetros para desenvolvimento sistemático de modelos dinâmicos para controle preditivo do processo. Além da apresentação de algumas teorias de inserção de informações operacionais na modelagem.
- 3) Utilização de modelos *fuzzy* dinâmicos como preditores nas técnicas de controle preditivo com restrições de variáveis.

CAPÍTULO 2

MODELAGEM E CONTROLE DE PROCESSOS

2.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo, apresenta-se uma descrição bibliográfica correlacionada aos assuntos enquadrados neste trabalho. Inicialmente, alguns trabalhos de processos de polimerização, associados diretamente ou indiretamente aos casos de estudo desta tese, são apresentados. Nota-se que os problemas encontrados pelos autores tangem, em grande parte, a problemas de não linearidade. Essa apresentação considera trabalhos de polimerização e policondensação. Em seguida, um estudo bibliográfico de controle de processos é apresentado; inicialmente são apontados aspectos gerais de controle de sistemas, depois enfoca-se no controle preditivo. Finalmente, apresenta-se um estudo bibliográfico referente aos sistemas *fuzzy* aplicados na modelagem e controle de processos químicos.

2.2. PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO

Os trabalhos de Ray e co-autores (Tabela 2.1) exemplificam significativamente as não linearidades presentes em processos de polimerização, por isso seus trabalhos são brevemente apresentados a seguir: convém destacar que os casos de estudo estudados por Ray e co-autores assemelham-se ao caso de estudo da copolimerização desta tese.

Tabela 2.1. Artigos de Ray e co-autores sobre comportamento dinâmico de reatores contínuos de polimerização

Artigo	Tipo	Meio	Monômeros	Iniciador	Solvente
Jaisinghani e Ray (1977)	Polimerização	Massa	MMA, S	AIBN	-
Schmidt e Ray (1981)	Polimerização	Solução	MMA	Peróxido de benzoíla	EA
Hamer, Akramov e Ray (1981)	Polimerização e copolimerização	Massa e solução	MMA, VA	Peróxido de benzoíla	EA
Schmidt, Clinch e Ray (1984)	Polimerização	Solução	MMA, VA	AIBN	t-butanol
Teymour e Ray (1989)	Polimerização	Solução	VA	AIBN	t-butanol
Teymour e Ray (1992)	Polimerização	Solução	VA	AIBN	t-butanol
Pinto e Ray (1995)	Copolimerização	Solução	MMA, VA	AIBN	t-butanol
Pinto e Ray (1995)	Copolimerização	Solução	MMA, VA	AIBN	t-butanol

Previamente, Jaisinghani e Ray (1977) estudaram o comportamento dinâmico e estacionário de dois tipos de polimerização em massa de metacrilato de metila (MMA) e estireno (S), com o iniciador azobisisobutironitrila (AIBN) em um reator de tanque agitado contínuo (CSTR), tanto para concentração de iniciador constante como variável, numa larga faixa de condições de operação do reator. Os resultados mostraram que múltiplos estados estacionários são possíveis sob condições isotérmicas e somente ciclos limites instáveis são possíveis sob condições de alta conversão. Schmidt e Ray (1981) desenvolveram um modelo para a polimerização em solução de metacrilato de metila (MMA) em um CSTR. Os resultados desses autores mostraram a existência de múltiplos estados estacionários sob condições isotérmicas para a polimerização de radical livre de MMA em baixa concentração de solvente. Hamer et al. (1981) determinaram os possíveis tipos de comportamento dinâmico para um CSTR para polimerização de radical livre em solução e massa. Os autores realizaram um estudo de polimerização de acetato de vinila (VA) e metacrilato de metila (MMA), separadamente, e copolimerização dos dois monômeros desenvolvendo modelos matemáticos para predição de comportamento de bifurcação sob condições não isotérmicas e para vários níveis de solvente. As vazões de alimentação de monômeros, concentrações de solvente e capacidade de refrigeração do reator são variáveis para averiguação de multiplicidade de estados estacionários e ciclos limites. Co que existe uma larga faixa de condições de operação em que ocorre a multiplicidade de estados estacionários. Schmidt et al. (1984) basearam-se em resultados de Hamer et al. (1981) para estudar experimentalmente a

polimerização de MMA e VA, ilustrando a multiplicidade de estados estacionários, sob condições não isotérmicas. Teymour e Ray (1989) proveram um estudo preliminar experimental de evidências de comportamento de ciclo limite em polimerização de solução e, com isso, apresentaram uma análise detalhada das condições dos comportamentos dinâmicos encontrados em reatores de laboratório de baixa pressão para polimerização de acetato de vinila. Ao passo que Teymour e Ray (1992) complementaram o trabalho anterior através de evidências experimentais do comportamento de ciclo limite para polimerização. Pinto e Ray (1995a) desenvolveram um modelo matemático para descrever as dinâmicas de reatores contínuos de copolimerização de solução de radical livre. Estes autores mostraram experimentalmente e teoricamente que a operação de tais reatores pode ser instável em regiões do espaço paramétrico onde a operação das respectivas polimerizações seria estável. Ao passo que Pinto e Ray (1995b), baseando-se no modelo desenvolvido anteriormente, fizeram uma análise de bifurcação para o sistema em escala industrial.

Quanto aos processos de policondensação, por diversos anos muitos pesquisadores têm se esforçado para investigar os mecanismos de reação dos processos de policondensação e suas cinéticas, como destacado nos parágrafos a seguir.

Gupta et al. (1983a, 1983b, 1987) apresentaram uma revisão dos aspectos gerais de modelagem de reação de policondensação, por meio de exemplos químicos específicos. Jacobsen e Ray (1992) publicaram um tratamento geral unificado para modelagem cinética de reações de policondensação, desenvolvendo uma técnica para modelar diversos polímeros de condensação e apresentaram uma biblioteca de mecanismos de reações possíveis. Tai et al. (1983) simularam um modelo de reator *plug-flow* (PFR) com trocadores de calor; nesse trabalho, há predição das melhores posições para os trocadores de calor no processo para garantir um desempenho otimizado. Os estudos de reatores tubulares por Gupta et al. (1983b) e Ramagopal et al. (1983) focalizaram em modelos de reatores *plug-flow* e investigaram os efeitos das vazões de reciclo e perfis de temperatura otimizados. Um outro estudo sobre perfis de temperatura

otimizado foi realizado por Ray e Gupta (1985); eles estenderam a otimização para tempos de reação variáveis. Gupta e Tjahjadi (1987) estudaram um reator industrial sob condições de estado estacionário. Esses autores usaram um modelo *plug-flow* contínuo e observaram os efeitos de várias condições de operação sobre a temperatura e a distribuição de peso molecular do polímero. Pal e Gupta (1989) e Jana e Gupta (1990) analisaram um reator tubular para a poliamida 6. O modelo desse trabalho incorpora perfis do tipo *plug-flow* e laminares, bem como difusão radial de energia. Um estudo de otimização deste reator foi realizado por Srivastava e Gupta (1991). Alguns trabalhos que tratam de aspectos de transferência de massa em processos de policondensação em reatores *thin* ou *wiped-film* são: Secor, 1969; Ault e Mellichamp, 1972; Amom e Denson, 1980; Gupta et al. (1982, 1983a, 1984). Hipp e Ray (1996) apresentaram um modelo dinâmico detalhado para modelar processos tubulares utilizando-se da distribuição de tempo de residência não ideal. A modelagem de dispersão axial foi escolhida, em vez de *plug-flow*. Dessa forma, tornou-se possível simular diversos tipos de reatores usados na indústria química. A cinética e o equilíbrio da policondensação do *nylon-6,6* foram estudados por Ogata (1960, 1961). Outros pesquisadores, como Kumar et al. (1981) e Steppan et al. (1987), propuseram expressões diferentes para a cinética baseando-se, principalmente, nos dados de Ogata (1960, 1961). O comportamento altamente não ideal faz que tanto a constante de taxa aparente como o equilíbrio de reação variem com a composição. Steppan et al. (1987) apresentaram uma correlação empírica levando-se em consideração estes efeitos. Steppan et al. (1991) também apresentaram um modelo cinético para as reações de degradação de *nylon-6,6*. Mais recentemente, Mallon e Ray (1997a, b) propuseram um novo modelo de equilíbrio cinético para a polimerização do *nylon-6,6* e *nylon-6* que considera água como elemento de ligação entre as amidas do *nylon* fundido, formando-se complexos amidos hidratados. Isto explica o decréscimo da constante de equilíbrio aparente com o conteúdo de água. Em adição, os autores também modelaram a constante de taxa aparente como uma função da constante dielétrica do sistema. Uma vez que a água incrementa a constante dielétrica do sistema, um aumento no conteúdo de água reduz a constante de taxa observada.

2.3. CONTROLE DE PROCESSOS

O primeiro requisito de desempenho de um sistema de controle é a estabilidade de suas variáveis. Esta é uma condição necessária relacionada principalmente à segurança do processo (Seborg et al.1989). Outra condição é o controle regulatório das variáveis controladas em valores estabelecidos. O controle das variáveis de interesse é desempenhado por meio do ajuste de variáveis manipuláveis. Entretanto, qualquer ação externa, denominada de distúrbio, pode perturbar o sistema levando as variáveis controladas a valores diferentes dos desejados, produzindo um erro estacionário (*offset*) ou uma variabilidade no sistema. O sistema de controle deve ser capaz de eliminar *offsets* e minimizar a variabilidade, independentemente dos distúrbios existentes. Alterações nas condições estacionárias (*set-points*) são uma realidade em processos industriais; por isso, a habilidade do controle de executar o controle servo é um outro requisito fundamental. Na verdade, um sistema de controle deve ser não somente capaz de desempenhar o controle servo, como também desempenhar o controle regulatório do processo satisfatoriamente na nova condição de operação estabelecida.

Uma das características dos processos químicos que dificulta a implantação de controladores é a não linearidade do sistema. Por isso, normalmente, os projetos de sistemas de controle são feitos em uma faixa operacional em torno de um ponto estacionário. Conseqüentemente, a operação do controlador deve ser restrita a uma faixa operacional. E, sendo os processos de polimerização classificados como altamente não lineares, essa faixa operacional pode ser razoavelmente limitada, dificultando o projeto de sistemas de controle lineares. Por isso, é interessante o desenvolvimento de metodologias de modelagem e controle que propiciem o manuseio de variáveis numa larga faixa de operação.

Inicialmente, num projeto de sistema de controle, deve ser considerada a possibilidade de resolução do problema através de controladores clássicos Proporcionais-Integrativos-Derivativos (PID), dada a facilidade de implementação e as inúmeras implementações já existentes destes controladores na indústria.

Estima-se que mais de 90% dos controladores em operação sejam PID (Ogata 2002); os custos de implementação desses controladores são baixos devido, principalmente, à possibilidade de incorporação dos mesmos em controladores lógicos programáveis (CLP), que estão normalmente presentes nos sistemas de automação e controle dos processos industriais.

Entretanto, os controladores PID podem apresentar desempenho degradado quando, por exemplo, o processo é multivariável, de ordem elevada, com atraso dominante, variante no tempo ou quando as especificações de projeto são muito rígidas. Nestes casos, a utilização de algoritmos complexos de controle digital, como as técnicas de controle preditivo, tem o objetivo de melhorar o desempenho do sistema para satisfazer aos requisitos de produção do processo industrial.

Os controladores preditivos foram desenvolvidos por métodos heurísticos no início da década de setenta. Cutler e Ramaker (1979) da Shell Oil Company desenvolveram o controlador de matriz dinâmica (*Dynamic Matrix Control - DMC*); e Richalet et al. (1978), o controle de algoritmo de modelo (*Model Algorithmic Control - MAC*).

O controle preditivo baseado em modelos de convolução tem sido largamente implementado em processos químicos a partir da década de setenta, em grande parte, devido ao encarecimento dos custos relativos à energia (Luyben 1989). Muitos processos químicos funcionam a um custo de energia muito elevado; dessa forma, por menor que seja a melhora da qualidade do desempenho do sistema sob controle, os custos são significativamente reduzidos. Devido à competitividade crescente, houve uma busca por sistemas de controle que propiciassem uma eficiência a um custo reduzido e por qualidade dos produtos, no sentido de atender aos requisitos de mercado. O modelo de convolução do controlador é obtido a partir da resposta ao degrau ou impulso, a partir do qual é possível se determinar a curva de saída num horizonte futuro de tempo baseando-se nos princípios de superposição de linearidade. Por isso, a operação numa faixa restrita em torno de um ponto de operação deve ser

razoavelmente obedecida para garantir uma certa linearidade em torno do ponto de operação.

Segundo Camacho e Bordons (1998), a classe de controladores preditivos apresenta alguns fundamentos em comum, tais como:

- i) o uso de um modelo para predição de saídas do processo em um horizonte futuro de tempo. Por isso os controladores preditivos pertencem à classe de controladores baseados em modelo (Prett e Garcia, 1987).
- ii) a função objetivo a ser minimizada (otimizada) através de um algoritmo adequado de otimização.
- iii) a estratégia de controle de horizonte deslizante (*receding horizon control*, Propoi, 1963) - em cada instante, o horizonte é direcionado ao futuro - tomando-se a aplicação apenas do primeiro sinal de controle da seqüência calculada em cada etapa.

Na Figura 2.1, é apresentado um esquema genérico de controle preditivo (MBPC). As diferentes metodologias de controle preditivo (DMC, MAC, PFC e outros) diferem entre si, normalmente, no modelo interno usado para representar o processo e os ruídos e na função objetivo a ser minimizada.

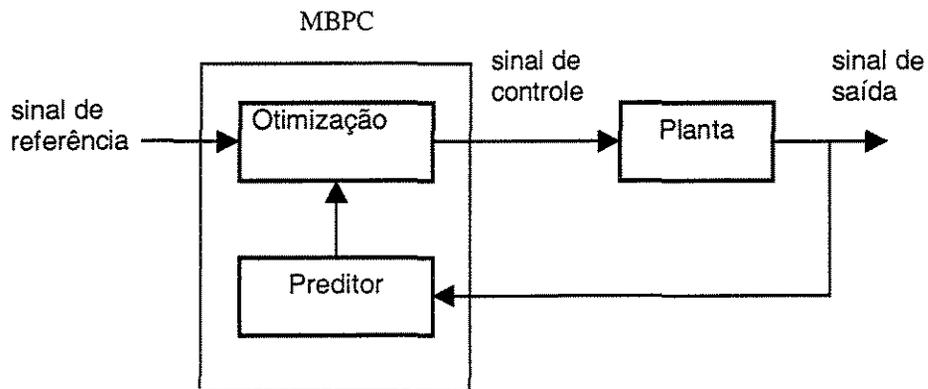


Figura 2.1. Esquema genérico de controladores preditivos (MBPC)

O sucesso dos controladores preditivos (*model based predictive controller* - MBPC) em processos industriais pode ser atribuído às suas características que atendem às necessidades dos processos industriais (otimização de uma função objetivo, tratamento de restrições e adequação a sistemas multivariáveis).

Os principais aspectos para garantia do sucesso das aplicações de controle preditivo são a capacidade de representação dinâmica do modelo interno, a definição do objetivo de controle expresso por uma função de custo (função objetivo) e a parametrização adequada do controlador. Estes aspectos necessitam de melhoramentos em muitos casos industriais para expandir-se o campo de aplicação dos controladores preditivos.

Nos parágrafos seguintes, são apresentados alguns trabalhos de controle preditivo aplicados em processos de polimerização.

Gobin et al. (1994) implementaram o controlador DMC em dois reatores CSTR em cascata para a polimerização de estireno. Sob certas condições, tal sistema exibe múltiplos estados estacionários e comportamento instável de malha aberta, o que gera sérias dificuldades para o controle de temperatura. O controle é realizado através da manipulação das taxas de vazões de fluido circulante dentro das jaquetas refrigerantes dos reatores. O projeto do controlador DMC foi baseado em uma linearização do modelo dinâmico em torno do ponto de operação estável em malha aberta. A implementação do algoritmo DMC foi realizada usando a formulação convencional.

Meziou et al. (1996) simularam e avaliaram o desempenho do controlador DMC para um reator CSTR de polimerização de etileno-propileno-dieno, por meio da manipulação das vazões dos monômeros (etileno e dieno) e do agente de transferência (hidrogênio), para controlar as saídas (composição de etileno, composição de dieno e viscosidade de Mooney). Os dois distúrbios considerados foram as mudanças da taxa de produção e a atividade catalítica do sistema. Os resultados de simulação ilustraram o desempenho do DMC para controlar a qualidade de produto durante as mudanças dos valores desejados das

especificações do produto (controle supervisorio) e mudanças na taxa de produção e atividade do catalisador (controle regulatório).

Park e Rhee (2001) desenvolveram um controlador preditivo em modelo robusto baseado em LMI (desigualdade matricial linear) para um processo de polimerização de metacrilato de metila (MMA) em CSTR. Jeong et al. (2001) desenvolveram um controlador preditivo não linear baseado no modelo de Wiener para um reator contínuo de polimerização de MMA. Este modelo consistiu de uma parte dinâmica linear em espaço de estado e uma parte estacionária polinomial não linear da saída. Vega et al. (2000) estudaram um reator tubular contínuo de polimerização com resultados experimentais e desenvolveram um controle preditivo usando um modelo interno baseado em redes neurais.

Garcia (1984) aplicou o controle de matriz dinâmica quadrático (*Quadratic Dynamic Model Control* - QDMC) para regular a temperatura da polimerização de borracha sintética em um reator semi-batelada. Este método usa uma linearização de um modelo do processo pré-determinado para prever a temperatura do reator em um horizonte de tempo.

Inglis et al. (1991) examinaram a aplicação de um controlador preditivo generalizado (GPC) para o controle de temperatura de uma planta piloto de um reator batelada de polimerização.

Saldivar e Ray (1997) desenvolveram o controlador preditivo multivariável da composição e do peso molecular de copolímeros produzidos em um reator semi-contínuo de polimerização por emulsão. Este controlador utiliza um modelo de copolimerização de emulsão e recalcula as ações de controle *on-line*, visando um controle otimizado. Os resultados obtidos, levando-se em consideração os distúrbios, foram satisfatórios. Os monômeros que fazem parte desse sistema são metacrilato de metila e acetato de vinila (que são os mesmos monômeros do caso de estudo de copolimerização desta tese).

Yuce et al. (1999) investigaram, por experimentos e simulações, a aplicação do controlador DMC em um reator batelada de polimerização em solução, para determinar a dimensão de cadeia média numérica e a conversão

num tempo mínimo. As variáveis do processo são a temperatura de reação e a concentração do iniciador. O desempenho do DMC foi comparado com outra versão de controlador de modelo interno (*Internal Model Control* - IMC). Os dois controladores DMC e IMC apresentaram bons resultados.

Peterson et al. (1992) desenvolveram um novo algoritmo de controle MBPC em um reator de polimerização semi-batelada por radical livre de metacrilato de metila. Este algoritmo de controle emprega um modelo do processo não linear e elementos básicos do controle de matriz dinâmica (DMC); onde o modelo interno do DMC é atualizado através de um vetor distúrbio que considera os efeitos não lineares no horizonte de predição. As dificuldades para o controle desse reator foram a ausência de estado estacionário (regime semi-batelada) e a complexidade do modelo processo.

2.4. SISTEMAS NEBULOSOS EM PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO

A teoria de conjuntos *fuzzy* ou nebulosos, desenvolvida por Zadeh (1965), possibilita a descrição e o tratamento matemático de expressões lingüísticas. O controlador *fuzzy* possibilita converter uma estratégia de controle lingüística, baseada no conhecimento do operador, numa estratégia de controle automática (Mahesh e Madhavan, 1993). Nas últimas décadas, diversos trabalhos de aplicação de lógica nebulosa em processos de polimerização têm sido desenvolvidos, motivados pelas complexidades e imprecisões de tais processos. Nos parágrafos seguintes, algumas aplicações de sistemas *fuzzy* em processos de polimerização são apresentadas sucintamente.

Roffel et al. (1991) aplicaram os princípios de controle *fuzzy* em um reator CSTR de polimerização. A base de conhecimento foi construída através de regras no formato de expressões lingüísticas. Foram obtidos ótimos resultados no controle do processo usando-se o controlador *fuzzy* em situações em que o modelo do processo era inviável e impraticável para posterior implementação de uma técnica de controle convencional. O desvio padrão das propriedades alvos do produto foi reduzido em mais de 40%. Porém este trabalho não apresenta detalhes de implementação do controlador *fuzzy*.

Mahesh e Chidambaram (1992) desenvolveram um estimador *fuzzy* num reator semi-batelada de copolimerização para determinar a composição do copolímero. As funções de pertinência e os conjuntos *fuzzy* das variáveis lingüísticas para entrada e saída foram definidas. Uma base de conhecimento *fuzzy* foi construída, relacionando as entradas e as saídas, baseado no conhecimento do operador. Os resultados foram comparados com valores obtidos de um modelo matemático do processo. O estimador padrão obtido foi testado e validado para diversas condições operacionais.

Chidambaram et al. (1993) prosseguiram o trabalho anterior, para o desenvolvimento de um controlador *fuzzy* baseado no conhecimento do processo, através do modelo matemático existente, manipulando a vazão do monômero mais ativo (estireno) e controlando a composição do copolímero. As variáveis lingüísticas foram escolhidas (erro da composição e a vazão) de forma a simplificar a construção da base de regras do controlador *fuzzy*. As funções de pertinência escolhidas foram triangulares, sendo oito conjuntos *fuzzy* para o erro da composição e nove para a vazão. Através das simulações, utilizando-se o modelo matemático do processo, o desempenho do controlador *fuzzy* foi melhorado. O controlador também foi testado para outras condições operacionais possíveis.

Yi et al. (1993) desenvolveram um novo algoritmo de controle *fuzzy* num sistema de controle distribuído, que é largamente utilizado na indústria, em um reator de polimerização batelada.

Goulao e Saraiva (1996) desenvolveram e testaram dois algoritmos lógicos para controlar a temperatura em um reator batelada de poli-vinil clorídrico (PVC). Um dos algoritmos de controle é baseado no perfil de conversão da reação, enquanto o outro é baseado no comportamento da temperatura. Os resultados obtidos com o controle *fuzzy* são bem satisfatórios, apresentando melhor desempenho que o controlador clássico PID.

Hanakuma (1996) implementou a estratégia de controle *fuzzy self-tuning* para um processo de polimerização da petroquímica da Idemitsu.

Hunkeler et al. (1997) desenvolveram uma estratégia de controle integrando as técnicas de controle *fuzzy* ao PID convencional num reator batelada altamente exotérmico de polimerização de acrilamida. A taxa de geração de calor interno é considerada como distúrbio. A parte do controlador, no tocante ao sistema *fuzzy*, procura compensar os distúrbios através do ajuste dos valores de referência do controlador convencional PID, sendo os parâmetros do modelo *fuzzy* determinados independentemente do modelo do processo. Esta estratégia de controle híbrida *Fuzzy*-PID é aplicada para controlar a temperatura do reator de polimerização.

Hwang et al. (1998) desenvolveram um modelo matemático para um processo de copolimerização de estireno e acrilonitrila (SAN) em um reator CSTR. Também investigaram experimentalmente parâmetros cinéticos envolvidos para a copolimerização térmica de estireno e acrilonitrila, considerando a hipótese do sistema no estado pseudo-estacionário. A partir disso, fizeram a análise dinâmica do reator e implementaram um controlador *Fuzzy*-PID mostrando os desempenhos para diferentes condições operacionais para diferentes valores de referência.

Nagarajan e Kumar (1998) desenvolveram e implementaram uma estrutura de controle chamada controle lógico *fuzzy* (*Fuzzy Logic Controller* - FLC) para a fabricação de resina em um processo de polimerização. Diversos experimentos foram realizados para acertar o desempenho do controlador FLC no controle da temperatura de reação.

Os trabalhos apresentados nos parágrafos anteriores mostram o interesse de aplicação de controle preditivo e lógica *fuzzy* em processos de polimerização.

2.5. CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Os processos de polimerização são sistemas de grande complexidade dinâmica para modelagem e controle. Tais processos apresentam uma série de problemas relacionados à implementação de sistemas de controle devido à presença de diversos tipos de não linearidades. Por isso é interesse a busca de novas metodologias de modelagem e controle de tais sistemas.

Os controladores preditivos apresentam características propícias à implantação em processos industriais, principalmente no tocante à inclusão de restrições nas variáveis do processo. No entanto, para o projeto dos mesmos, é necessário um modelo representativo das dinâmicas do sistema a ser controlado; considerando-se as não linearidades dos processos de polimerização, a utilização de técnicas não lineares de modelagem através de sistemas *fuzzy* é uma metodologia interessante a ser abordada. Considerando-se a importância do assunto, neste trabalho é realizado um estudo de integração de sistemas *fuzzy* e controle preditivo (MBPC) para dois casos de estudo de polimerização. Por isso, no próximo capítulo, os modelos fenomenológicos representativos dos casos de estudo são apresentados.

CAPÍTULO 3

CASOS DE ESTUDO

3.1. INTRODUÇÃO

Os modelos matemáticos fenomenológicos dos processos dos casos de estudo são considerados nesta tese como as plantas para implantação do sistema de controle. Estes modelos são compostos por equações algébricas e diferenciais. Estes modelos são apresentados a seguir, bem como seus respectivos mecanismos cinéticos. Os dois modelos são provenientes da literatura (Congalidis et al. 1989, Maner et al. 1997 e Giudici et al. 1999); sendo que para o caso de polincondensação, um modelo dinâmico baseado no modelo estacionário de Giudici et al. 1999 foi desenvolvido para retratar, de forma aproximada, a dinâmica do reator tubular e funcionar como planta nas aplicações de controle.

3.2. DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE COPOLIMERIZAÇÃO

A Figura 3.1 apresenta um diagrama esquemático do reator de copolimerização com uma malha de reciclo. Neste estudo, o monômero A é o metacrilato de metila, o monômero B é o acetato de vinila, o solvente é o benzeno, iniciador é o azobisisobutironitrila (AIBN), e o agente de transferência de cadeia é acetaldeído. As vazões de monômero podem também conter inibidores assim como m-dinitrobenzeno (m-DNB). Este sistema é interessante porque o metacrilato de metila apresenta-se mais reativo que o acetato de vinila em copolimerização (como indicado por suas respectivas taxas de reatividade de 26 e 0.03), apesar de ocorrer o contrário em homo-polimerização. Este fenômeno cinético característico dessa copolimerização explica, desde já, um aspecto não linear inerente deste sistema.

Os monômeros A e B são continuamente adicionados, juntamente com o iniciador, solvente, agente de transferência de cadeia e inibidor. Estas vazões de alimentação são combinadas (corrente 1) com a corrente de reciclo (corrente 2),

que é enviada ao reator (corrente 3), que é tomado como sendo um reator de tanque agitado contínuo (CSTR) com um sistema de refrigeração (jaqueta). Um refrigerante flui através da jaqueta para remover o calor das reações de polimerização. O polímero, o solvente, os monômeros não reagidos, o iniciador e o agente de transferência de cadeia saem do reator para o separador (corrente 4). Neste, o polímero é removido através da corrente de saída (corrente 6). Nesta etapa, o iniciador residual e o agente de transferência de cadeia são também removidos. Normalmente, em processos industriais, o separador é composto por várias etapas, tais como secador e colunas de destilação. Neste exemplo, monômeros não reagidos e solvente (corrente 7) são bombeados para o ponto de descarga (corrente 8), que representa uma corrente de escape e outras perdas. O escape previne acúmulos de inertes no sistema. Após o ponto de descarga, os monômeros e o solvente (corrente 9) são armazenados no tanque armazenador de reciclo, que previne mudanças bruscas na vazão de reciclo e composição. A corrente de reciclo (corrente 2) é então adicionada à corrente de alimentação.

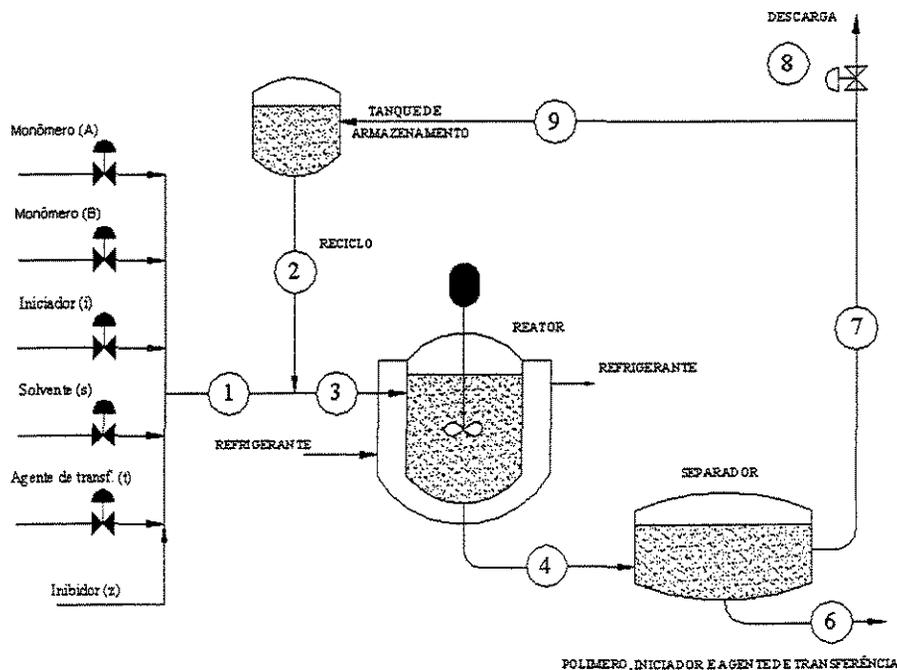


Figura 3.1. Diagrama do processo de copolimerização com reciclo

O ponto de operação estacionário escolhido por Congalidis et al. (1989) previne de problemas de instabilidade de malha aberta, sensibilidade paramétrica, dinâmicas complexas e *runaway* do processo. As condições operacionais, consideradas por Congalidis et al. (1989), são apresentadas na Tabela 3.1 :

Tabela 3.1. Condições operacionais do reator de copolimerização

Entradas	Valores
Taxa de alimentação do monômero A (MMA)	$G_{af} = 18 \text{ kg/h}$
Taxa de alimentação do monômero B (Vac)	$G_{bf} = 90 \text{ kg/h}$
Taxa de alimentação de iniciador (AIBN)	$G_{if} = 0,18 \text{ kg/h}$
Taxa de alimentação de solvente (Benzeno)	$G_{sf} = 36 \text{ Kg/h}$
Taxa de alimentação de transferência de cadeia (acetaldeído)	$G_{tf} = 2,7 \text{ Kg/h}$
Taxa de alimentação de inibidor (m-DNB)	$G_{zf} = 0,0$
Temperatura da jaqueta do reator	$T_j = 336,0 \text{ K}$
Temperatura da alimentação do reator	$T_{rf} = 353,0 \text{ K}$
Taxa de descarga	$\xi = 0,05$
Parâmetros do reator	
Volume do reator	$V_r = 1 \text{ m}^3$
Área de transferência de calor do reator	$S_r = 4,6 \text{ m}^2$
Saídas	
Taxa de produção de polímero	$G_{pi} = 23,327 \text{ Kg/h}$
Fração molar de A no polímero	$Y_{ap} = 0,559$
Peso molecular ponderal médio	$M_{pw} = 34993,37$
Temperatura do reator	$T_r = 353,016 \text{ K}$

Os valores acima foram utilizados no programa de simulação do modelo do processo de copolimerização desenvolvido nesta tese. Sob as condições estacionárias da Tabela 3.1, o tempo de residência encontrado foi 5.98 horas; e a conversão de monômero global, 20,3%. Estes valores são os mesmos encontrados por Congalidis et al. 1989.

As variáveis de saída do reator, importantes para o controle de qualidade e produção do produto, são a taxa de produção de polímero (G_{pi}), a fração molar do monômero A no copolímero (Y_{ap}), o peso molecular ponderal médio (M_{pw}), e a temperatura do reator (T_r). As entradas são as vazões de massa de monômero A (G_{af}), monômero B (G_{bf}), iniciador (G_{if}), agente de transferência de cadeia (G_{tf}),

sovente (G_{sf}), inibidor (G_{zi}), temperatura da jaqueta do reator (T_j) e temperatura de alimentação do reator (T_{rf}). O solvente puro inicial contido no reator, separador e tanque de armazenamento é pré-aquecido a 353.0 K. As entradas para o modelo não linear foram então variadas para obter valores de estado estacionário aceitáveis para as variáveis de saída. As condições de operação de estado estacionário sumarizadas na Tabela 3.1 asseguram a viscosidade do meio reacional em um nível moderado. A Tabela 3.1 também indica que a temperatura da alimentação do reator T_{rf} é praticamente igual à temperatura do reator T_r . Isso porque esses valores de temperatura foram escolhidos para simular a operação do reator com uma alimentação pré-aquecida, onde remoção de calor ocorre por meio da jaqueta.

3.3. MODELO FENOMENOLÓGICO DO PROCESSO DE COPOLIMERIZAÇÃO

O modelo fenomenológico apresentado a seguir bem como os respectivos parâmetros e constantes foram extraídos dos trabalhos de Congalidis et al. (1989) e Maner et al. (1997). O desenvolvimento deste modelo de copolimerização é uma generalização de modelos que têm aparecido na literatura e têm sido verificados experimentalmente em alguns trabalhos (Hamer et al., 1981); Schmidt e Ray (1981); Schmidt et al. (1984).

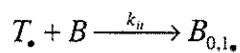
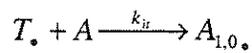
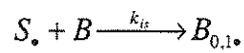
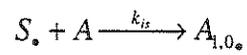
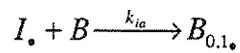
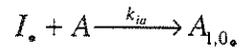
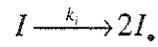
3.3.1. MECANISMO CINÉTICO

O mecanismo cinético de radical livre é postulado para a polimerização de monômeros A e B na presença de iniciador (I), solvente (S), agente de transferência de cadeia (T) e inibidor (Z). Neste mecanismo, $A_{n,m}•$ e $B_{n,m}•$ simbolizam a cadeia de polímero em formação (polímero "vivo") contendo n unidades de monômero A e m unidades de monômero B, que terminam em A e B, respectivamente. $P_{n,m}$ representa a cadeia de polímero ("morto") contendo n unidades de monômero A e m unidades de monômero B. Para o cálculo das constantes de taxa de terminação de cruzamento é suposto que:

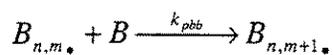
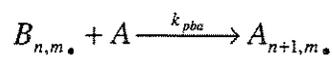
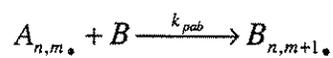
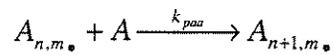
$$k_{cab} = \sqrt{k_{caa} k_{cbb}}$$

$$k_{dab} = \sqrt{k_{daa} k_{dbb}}$$

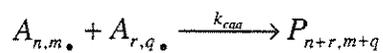
Iniciação



Propagação

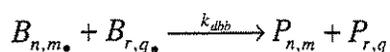
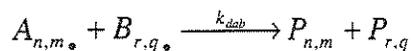
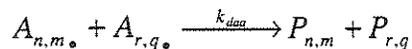


Terminação por acoplamento

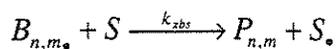
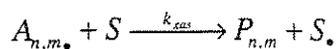




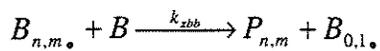
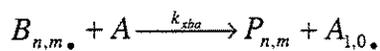
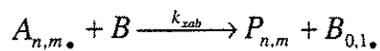
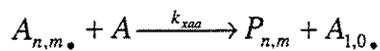
Terminação por desproporcionamento



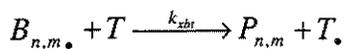
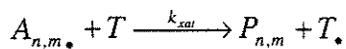
Transferência de cadeia para o solvente



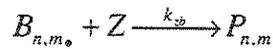
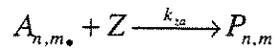
Transferência de cadeia para o monômero



Transferência de cadeia para o agente



Inibição



Cada uma das constantes cinéticas é calculada pela equação de Arrhenius:

$$k = Ae^{(-E/RT_r)} \quad (3.1)$$

em que A é o fator de Arrhenius, E é a energia de ativação e R é a constante universal dos gases.

Os valores para o fator de Arrhenius (A) e a energia de ativação (E) são apresentados na Tabela 3.2. Nesta modelagem, desconsidera-se o *efeito gel* sobre as taxas de reações, visto que este efeito apenas se torna importante para altas conversões de monômero do reator, bem como polimerizações em massa.

Tabela 3.2: Parâmetros cinéticos e termodinâmicos para o modelo fenomenológico do reator de copolimerização

Parâmetros cinéticos	Nomenclatura
$\epsilon = 1$	Eficiência de iniciador
$A_i = 4.5 \times 10^{14} \text{ 1/s}$	Fator de Arrhenius de respectiva reação
$A_{caa} = 4.209 \times 10^{11} \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	
$A_{cbb} = 1.61 \times 10^9$	
$A_{daa} = 0$	
$A_{dbb} = 0$	
$A_{paa} = 3.207 \times 10^6$	
$A_{pab} = 1.233 \times 10^5$	
$A_{pba} = 2.103 \times 10^8$	
$A_{pbb} = 6.308 \times 10^6$	
$A_{xaa} = 32.08$	
$A_{xab} = 1234$	
$A_{xas} = 86.6$	
$A_{xat} = 2085.0$	
$A_{xba} = 5257 \times 10^4$	
$A_{xbb} = 1.577$	
$A_{xbs} = 1514$	

$A_{xbt} = 4163 \times 10^5$ $A_{za} = 2.2$ $A_{zb} = 1.13 \times 10^5$ $E_i = 1.255 \times 10^5$ $E_{caa} = 2.69 \times 10^4$ $E_{cbb} = 4.00 \times 10^3$ $E_{daa} = 0.0$ $E_{paa} = 2.42 \times 10^4$ $E_{pab} = 2.42 \times 10^4$ $E_{pba} = 2.42 \times 10^4$ $E_{pbb} = 1.80 \times 10^4$ $E_{xaa} = 2.42 \times 10^4$ $E_{xab} = 2.42 \times 10^4$ $E_{xas} = 2.42 \times 10^4$ $E_{xat} = 2.42 \times 10^4$ $E_{xba} = 1.80 \times 10^4$ $E_{xbb} = 1.80 \times 10^4$ $E_{xbs} = 1.80 \times 10^4$ $E_{xbt} = 1.8 \times 10^4$ $E_{za} = 0.0$ $E_{zb} = 0.0$	Energia de ativação de respectiva reação
<p><i>Parâmetros Termodinâmicos</i></p> $-\Delta H_{paa} = 54.0 \times 10^3 \text{ kJ/kmol}$ $-\Delta H_{pba} = 86.0 \times 10^3 \text{ kJ/kmol}$ $-\Delta H_{pab} = 86.0 \times 10^3 \text{ kJ/kmol}$ $-\Delta H_{pbb} = 8.79 \times 10^2 \text{ kJ/kmol}$ $\rho_r = 8.79 \times 10^2 \text{ kg/m}^3$	Entalpia de respectiva reação
$C_r = 2.01 \text{ kJ/kg.K}$ $U_r = 6.0 \times 10^{-2} \text{ kJ/m}^2 \cdot \text{s.K}$	Densidade da massa reacional
	Calor específico da massa reacional
	Coefficiente de transferencia de calor do reator

3.3.2. BALANÇO DE ENERGIA E MASSA

Supondo-se que a copolimerização ocorre em um reator de tanque agitado contínuo (CSTR) e sem variações de volume da reação, o balanço de massa a seguir pode ser descrito para as concentrações de monômeros, iniciador, solvente, agente de transferência de cadeia e inibidor:

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{C_{kf} - C_k}{\theta_r} - R_k \quad (3.2)$$

sendo C_k a concentração do componente k , C_{kf} a concentração do componente k na alimentação do reator, R_k a taxa de reação de consumo do componente k e θ_r o tempo de residência do reator, com as respectivas condições iniciais:

$$C_k(0) = C_{k0} ,$$

para $k = a, b, i, s, t, z$.

A taxa de vazão volumétrica de alimentação do reator (Q_f), concentrações de alimentação (C_{kf}) e tempo de residência do reator (θ_r) são calculados pelas seguintes equações:

$$Q_f = \sum_k \frac{F_{kf} M_k}{\rho_r} \quad (3.3)$$

$$C_{kf} = \frac{F_{kf}}{Q_f} \quad (3.4)$$

$$\theta_r = \frac{V_r}{Q_r} \quad (3.5)$$

Estas equações (3.2–3.5) representam os balanços de massa do reator; ao passo que a equação 3.6 representa o balanço de energia através da equação diferencial da temperatura do reator (T_r):

$$\begin{aligned} \frac{dT_r}{dt} = & \frac{T_{rf} - T_r}{\theta_r} + \frac{(-\Delta H_{paa})k_{paa}C_aC_{a\bullet} + (-\Delta H_{pba})k_{pba}C_aC_{b\bullet}}{\rho_r c_r} \\ & + \frac{(-\Delta H_{pab})k_{pab}C_bC_{a\bullet} + (-\Delta H_{pbb})k_{pbb}C_bC_{b\bullet}}{\rho_r c_r} - \frac{U_r S_r (T_r - T_j)}{V_r \rho_r c_r} \end{aligned} \quad (3.6)$$

com a seguinte condição inicial:

$$T_r(0) = T_{r0}.$$

As equações para a determinação numérica das taxas de reações (R_k , para $k = a, b, i, s, t, z$) são dadas por:

$$R_a = \{ (k_{paa} + k_{xaa})C_{a\bullet} + (k_{pba} + k_{xba})C_{b\bullet} \} C_a \quad (3.7)$$

$$R_b = \{ (k_{pbb} + k_{xbb})C_{b\bullet} + (k_{pab} + k_{xab})C_{a\bullet} \} C_b \quad (3.8)$$

$$R_i = k_i C_i \quad (3.9)$$

$$R_s = (k_{xas} C_{a\bullet} + k_{xbs} C_{b\bullet}) C_s \quad (3.10)$$

$$R_t = (k_{xat} C_{a\bullet} + k_{xbt} C_{b\bullet}) C_t \quad (3.11)$$

$$R_z = (k_{za} C_{a\bullet} + k_{zb} C_{b\bullet}) C_z \quad (3.12)$$

A taxa de produção instantânea de copolímero (G_{pi}) é dada por:

$$G_{pi} = (R_a M_a + R_b M_b) V_r \quad (3.13)$$

Considerando-se a hipótese de estado quase-estacionário (Ray, 1972), as seguintes expressões podem ser deduzidas para as concentrações do reator total de radicais livres terminando em A ou B:

$$C_{a\bullet} = \frac{-l_2 + \sqrt{l_2^2 - 4l_1 l_3}}{2l_1} \quad (3.14)$$

$$C_{b\bullet} = \beta C_{a\bullet} \quad (3.15)$$

Nas equações 3.14 e 3.15, as seguintes variáveis intermediárias são definidas por:

$$\beta = \frac{(k_{pab} + k_{xab})C_b}{(k_{pba} + k_{xba})C_a} \quad (3.16)$$

$$l_1 = k_{caa} + k_{daa} + 2\beta(k_{cab} + k_{dab}) + \beta^2(k_{cbb} + k_{dbb}) \quad (3.17)$$

$$l_2 = C_z (k_{za} + \beta k_{zb}) \quad (3.18)$$

$$l_3 = -2k_i C_i \in \quad (3.19)$$

Composição de copolímero "morto"

Os seguintes balanços molares podem ser descritos para o cálculo das concentrações molares dos dois monômeros no polímero "morto" (λ_a e λ_b):

$$\frac{d\lambda_a}{dt} = \frac{\lambda_{af} - \lambda_a}{\theta_r} + R_a \quad (3.20)$$

$$\frac{d\lambda_b}{dt} = \frac{\lambda_{bf} - \lambda_b}{\theta_r} + R_b \quad (3.21)$$

com as respectivas condições iniciais:

$$\begin{aligned} \lambda_a(0) &= \lambda_{a0} \\ \lambda_b(0) &= \lambda_{b0} \end{aligned}$$

A fração molar do monômero A no polímero "morto" (y_{ap}) é calculada por:

$$y_{ap} = \frac{\lambda_a}{\lambda_a + \lambda_b} \quad (3.22)$$

Peso molecular médio ponderado e numérico

Nesta parte, o procedimento de cálculo dos momentos de ordem 0, 1 e 2 da distribuição de peso molecular (MWD) do copolímero morto é apresentado. Estes momentos são definidos como a seguir por $k = 0, 1, \dots, \infty$:

$$\psi_k^p = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_a + mM_b)^k P_{n,m} \quad (3.23)$$

Na segunda parte desta seção, estes momentos são derivados para os momentos do MWD do copolímero "vivo", que são definidos a seguir para $k = 0, 1, \dots, \infty$:

$$\psi_k^{a*} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_a + mM_b)^k A_{n,m} \quad (3.24)$$

$$\psi_k^{b*} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_a + mM_b)^k B_{n,m} \quad (3.25)$$

Os pesos moleculares médio numérico e ponderado dos copolímeros "morto" (M_{pn} e M_{pw}) são calculados pelas seguintes equações, respectivamente:

$$M_{pn} = \frac{\psi_1^p}{\psi_0^p} \quad (3.26)$$

$$M_{pw} = \frac{\psi_2^p}{\psi_1^p} \quad (3.27)$$

Momentos do MWD do copolímero "morto"

É necessário especificar o reator de interesse para calcular os momentos do MWD para o polímero morto: para o presente caso de estudo, um reator de tanque agitado contínuo (CSTR) é considerado.

Utilizando-se das técnicas de funções generalizadas, as seguintes equações dinâmicas podem ser derivadas como em Tsoukas et. al. (1982):

$$\frac{d\psi_0^p}{dt} = \frac{\psi_{0f}^p - \psi_0^p}{\theta_r} + \frac{1}{2}k_{caa}(\psi_0^{a*})^2 + k_{cab}\psi_0^{a*}\psi_0^{b*} + \frac{1}{2}k_{cbb}(\psi_0^{b*})^2 + L_1\psi_0^{a*} + L_2\psi_0^{b*} \quad (3.28)$$

$$\frac{d\psi_1^p}{dt} = \frac{\psi_{1f}^p - \psi_1^p}{\theta_r} + k_{caa}\psi_0^{a*}\psi_1^{a*} + k_{cab}(\psi_0^{a*}\psi_1^{b*} + \psi_0^{b*}\psi_1^{a*}) + k_{cbb}\psi_0^{b*}\psi_1^{b*} + L_1\psi_1^{a*} + L_2\psi_1^{b*} \quad (3.29)$$

$$\frac{d\psi_2^p}{dt} = \frac{\psi_{2f}^p - \psi_2^p}{\theta_r} + k_{caa}((\psi_1^{a*})^2 + k_{cab}\psi_0^{a*}\psi_2^{a*}) + k_{cab}(2\psi_1^{a*}\psi_1^{b*} + \psi_2^{b*}\psi_0^{a*} + \psi_2^{a*}\psi_0^{b*}) + k_{cbb}(\psi_1^{b*})^2 + L_1\psi_2^{a*} + L_2\psi_2^{b*} \quad (3.30)$$

com as respectivas condições iniciais:

$$\psi_0^p(0) = \psi_{0o}^p$$

$$\psi_1^p(0) = \psi_{1o}^p$$

$$\psi_2^p(0) = \psi_{2o}^p$$

Nestas equações, as variáveis intermediárias L_1 e L_2 são definidas pelas seguintes equações:

$$L_1 = k_{xas} C_s + k_{xaa} C_a + k_{xab} C_b + k_{xat} C_t + k_{za} C_z + k_{daa} C_{a\bullet} + k_{dab} C_{b\bullet} \quad (3.31)$$

$$L_2 = k_{xbs} C_s + k_{xbb} C_b + k_{xba} C_a + k_{xbt} C_t + k_{zb} C_z + k_{dbb} C_{b\bullet} + k_{dab} C_{a\bullet} \quad (3.32)$$

Momentos do MWD do copolímero "vivo"

O método de gerar funções é usado para o cálculo dos momentos do copolímero, conforme descrito em Ray, 1971a, b. Estes momentos são os mesmos para todas as reações e somente dependem do equipamento de reação local. Assim, as seguintes expressões analíticas dos momentos de copolímero em formação de 1^a, 2^a e 3^a ordens podem ser obtidas:

$$\psi_0^{a\bullet} = \frac{B_3}{B_1} \quad (3.33)$$

$$\psi_1^{a\bullet} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 V_1 (M_b + M_a) + \alpha_1 c_1 M_a}{B_1} - \frac{B_2 B_3}{B_1^2} \quad (3.34)$$

$$\psi_2^{a\bullet} = \frac{-B_3 \{(\alpha_1 + \alpha_2) M_a M_b + B_2 (M_a + M_b - 1)\}}{B_1^2} + \frac{\alpha_1 \alpha_2 V_1 (M_a + M_b - 1) (M_a + M_b)}{B_1} +$$

$$\frac{\alpha_1 c_1 M_a (M_a - 1)}{B_1} + \frac{2B_2^2 B_3}{B_1^3} + \psi_1^{a\bullet} - \frac{2B_2 \{ \alpha_1 \alpha_2 V_1 (M_a + M_b) + \alpha_1 c_1 M_a \}}{B_1^2} \quad (3.35)$$

$$\psi_0^{b\bullet} = \frac{B_4}{B_1} \quad (3.36)$$

$$\psi_1^{b\bullet} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 V_2 (M_b + M_a) + \alpha_2 c_4 M_b}{B_1} - \frac{B_2 B_4}{B_1^2} \quad (3.37)$$

$$\psi_{21}^{b*} = \frac{-B_4 \{(\alpha_1 + \alpha_2)M_a M_b + B_2(M_a + M_b - 1)\}}{B_1^2} + \frac{\alpha_1 \alpha_2 V_2 (M_a + M_b - 1)(M_a + M_b)}{B_1} + \frac{\alpha_2 c_4 M_b (M_b - 1)}{B_1} + \frac{2B_2^2 B_4}{B_1^3} + \psi_1^{b*} - \frac{2B_2 \{ \alpha_1 \alpha_2 V_2 (M_a + M_b) + \alpha_2 c_4 M_b \}}{B_1^2} \quad (3.38)$$

As seguintes equações fazem relações dos parâmetros cinéticos para uso das seis equações anteriores:

$$\alpha_1 = \frac{k_{paa} C_a}{\{(k_{caa} + k_{daa})C_{a*} + (k_{cab} + k_{dab})C_{b*} + (k_{paa} + k_{xaa})C_a (k_{pab} + k_{xab})C_b + k_{xat} C_t + k_{xas} C_s + k_{za} C_z\}} \quad (3.39)$$

$$\alpha_2 = \frac{k_{paa} C_a}{\{(k_{cbb} + k_{ddb})C_{b*} + (k_{cab} + k_{dab})C_{a*} + (k_{pbb} + k_{xbb})C_b (k_{pab} + k_{xab})C_a + k_{xbt} C_t + k_{xbs} C_s + k_{zb} C_z\}} \quad (3.40)$$

$$c_1 = \frac{2k_i \in C_i + C_s (k_{xas} C_{a*} + k_{xbs} C_{b*})}{k_{paa} (C_a + C_b)} + \frac{C_t (k_{xat} C_{a*} + k_{xbt} C_{b*})}{k_{paa} (C_a + C_b)} + \frac{k_{xaa} C_{a*} + k_{xba} C_{b*}}{k_{paa}} \quad (3.41)$$

$$c_2 = \frac{2k_i \in C_i + C_s (k_{xas} C_{a*} + k_{xbs} C_{b*})}{k_{pbb} (C_a + C_b)} + \frac{C_t (k_{xat} C_{a*} + k_{xbt} C_{b*})}{k_{pbb} (C_a + C_b)} + \frac{k_{xbb} C_{b*} + k_{xab} C_{a*}}{k_{pbb}} \quad (3.42)$$

$$r_1 = \frac{k_{paa}}{k_{pab}} \quad (3.43)$$

$$r_2 = \frac{k_{pbb}}{k_{ba}} \quad (3.44)$$

$$\gamma = \frac{k_{pba}}{k_{pab}} \quad (3.45)$$

$$c_2 = c_4 r_2 \gamma \quad (3.46)$$

$$c_3 = \frac{c_1 r_1}{\gamma} \quad (3.47)$$

$$x = \frac{1}{r_1 r_2} \quad (3.48)$$

$$V_1 = c_2 x - c_1 \quad (3.49)$$

$$V_2 = c_3 x - c_4 \quad (3.50)$$

$$B_1 = 1 - (\alpha_1 + \alpha_2) + \alpha_1 \alpha_2 (1 - x) \quad (3.51)$$

$$B_2 = (M_a + M_b)(1 - x)\alpha_1 \alpha_2 - \alpha_1 M_a - \alpha_2 M_b \quad (3.52)$$

$$B_3 = \alpha_1 c_1 + \alpha_1 \alpha_2 V_1 \quad (3.53)$$

$$B_4 = \alpha_2 c_4 + \alpha_1 \alpha_2 V_2 \quad (3.54)$$

Balanço de massa do Separador e do tanque de armazenamento

O separador e o tanque de armazenamento são modelados através de representações dinâmicas de 1ª ordem das concentrações dos componentes, considerando-se os respectivos níveis constantes:

Separador:
$$\frac{dC_{ks}}{dt} = \frac{C_{ksf} - C_{ks}}{\theta_s} \quad (3.55)$$

Tanque de armazenamento:
$$\frac{dC_{kh}}{dt} = \frac{C_{khf} - C_{kh}}{\theta_h} \quad (3.56)$$

com as respectivas condições iniciais: para o separador $C_{ks}(0) = C_{kso}$, o tanque de armazenamento $C_{kh}(0) = C_{kho}$ e sendo $k = a, b, i, s, t, z$.

3.4. PROGRAMA DE SIMULAÇÃO DO MODELO DO PROCESSO DE COPOLIMERIZAÇÃO

O modelo fenomenológico do processo de copolimerização, apresentado na seção anterior, foi integrado numericamente por meio de um programa de simulação computacional desenvolvido em linguagem de programação FORTRAN (Fortran PowerStation 4.0). O sistema de equações do reator é um problema de valor inicial de equações diferenciais ordinárias e é resolvido utilizando-se a rotina IVPAG (rotinas IMSL do FORTRAN) que se baseia nos métodos de Adams-Moulton's ou Gear. As concentrações iniciais (dos monômeros, iniciador, solvente, agente de transferência e inibidor) no reator, bem como as condições operacionais na entrada do reator foram tomadas de Maner et al. 1997, conforme a Tabela 3.3.

Tabela 3.3. Condições iniciais do processo de copolimerização

Variável	Valor inicial	Unidade
C_{a0}	$2,4500 \times 10^{-1}$	kmol/m^3
C_{b0}	5,6010	kmol/m^3
C_{i0}	$1,8163 \times 10^{-3}$	kmol/m^3
C_{s0}	2,7580	kmol/m^3
C_{t0}	$3,6524 \times 10^{-1}$	kmol/m^3
C_{z0}	0,0	kmol/m^3
T_{r0}	353,0161	K
λ_{a0}	$8,3092 \times 10^{-1}$	kmol/m^3
λ_{b0}	$6,5524 \times 10^{-1}$	kmol/m^3
ψ_{00}^p	$6,6571 \times 10^{-3}$	kmol/m^3
ψ_{10}^p	$1,4133 \times 10^2$	kg/m^3
ψ_{20}^p	$4,9458 \times 10^6$	$\text{kg}^2/\text{kmol.m}^3$

C_{as0}	$2,4500 \times 10^{-1}$	kmol/m^3
C_{bs0}	5,6010	kmol/m^3
C_{is0}	$1,8163 \times 10^{-3}$	kmol/m^3
C_{ss0}	2,7580	kmol/m^3
C_{ts0}	$3,6524 \times 10^{-1}$	kmol/m^3
C_{zs0}	0,0	kmol/m^3
C_{ah0}	$2,9821 \times 10^{-1}$	kmol/m^3
C_{bh0}	6,8176	kmol/m^3
C_{ih0}	0,0	kmol/m^3
C_{sh0}	3,3571	kmol/m^3
C_{th0}	0,0	kmol/m^3
C_{zh0}	0,0	kmol/m^3
λ_{af}	0,0	kmol/m^3
λ_{bf}	0,0	kmol/m^3
ψ_{0f}^p	0,0	kmol/m^3
ψ_{1f}^p	0,0	kg/m^3
ψ_{2f}^p	0,0	$\text{kg}^2/\text{kmol.m}^3$
$R_{ibs} = F_{i1s}/F_{b3s}$	$1,0485 \times 10^{-3}$	
M_a	100,12	kg/kmol
M_b	86,09	kg/kmol
M_i	164,21	kg/kmol
M_s	78,11	kg/kmol
M_t	44,05	kg/kmol
M_z	168,11	kg/kmol

A seguir, são apresentados alguns dos resultados de simulação para o peso molecular ponderado médio deste modelo sem ações de controle, ou seja, em malha aberta. A Figura 3.2 apresenta resultados do peso molecular para o sistema submetido às perturbações do tipo degrau de -3 e $-1,5\%$ sobre a temperatura da jaqueta (T_j). Ao passo que a Figura 3.3 apresenta resultados para as mesmas variáveis, mas considerando-se degraus de 3 e $1,5\%$. Como pode ser observado nas Figuras 3.2 e 3.3, o ganho desta malha de variáveis é tanto não linear como invertido. Esta análise prévia de comportamento desta malha de variáveis em malha aberta é importante, pois será a malha de variáveis estudada nos capítulos 5 e 7, nas aplicações de modelagem e controle.

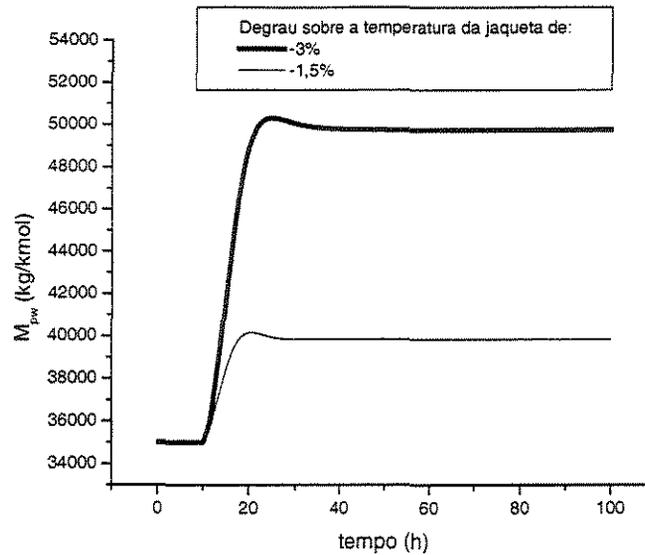


Figura 3.2. Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular ponderado médio (M_{pw}) sob perturbações degrau de -3 e $-1,5\%$ sobre a temperatura de jaqueta (T_j) no instante 10 horas.

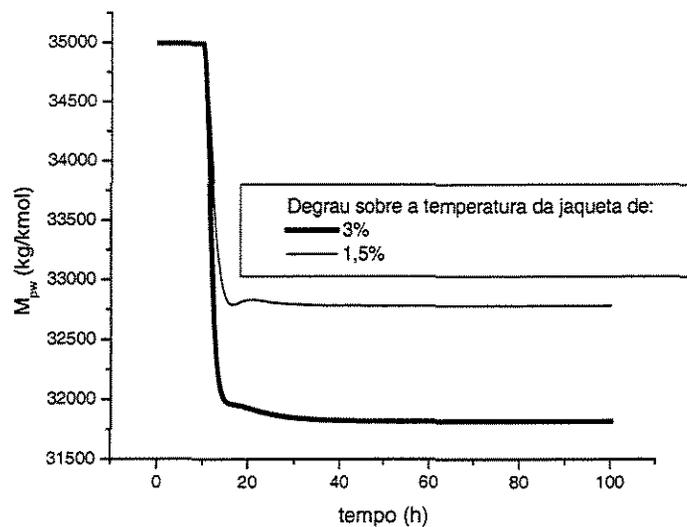


Figura 3.3. Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular ponderado médio (M_{pw}) sob perturbações degrau de 3 e $1,5\%$ sobre a temperatura de jaqueta (T_j) no instante 10 horas.

A Figura 3.4 apresenta resultados do peso molecular considerando-se uma perturbação de 4 milésimos da vazão molar total sobre a vazão molar de inibidor (F_2) no instante inicial. Essa vazão molar total é equivalente a soma das vazões molares de monômeros, iniciador, solvente e agente de transferência de cadeia na entrada do sistema. Este estudo de comportamento do peso molecular em relação a essa perturbação é relevante, pois trata-se de um possível distúrbio para o processo de copolimerização. Um estudo de análise de controle regulatório, considerando-se esse distúrbio, será realizado no capítulo 7.

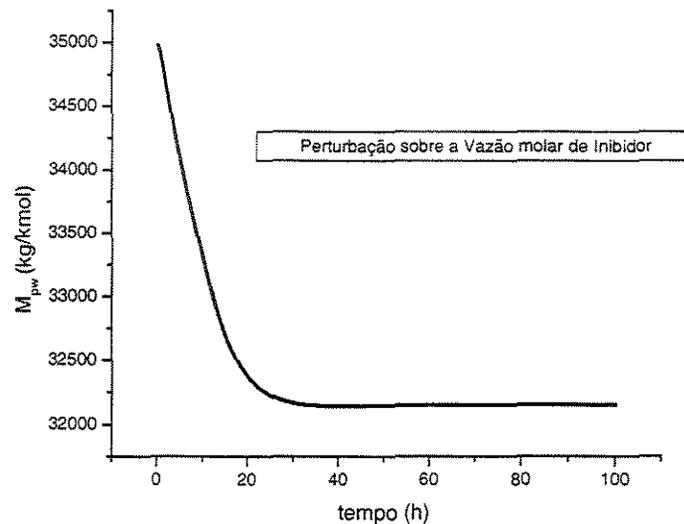


Figura 3.4. Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular ponderado médio (M_{pw}) sob uma perturbação degrau de 4 milésimos da vazão molar total sobre a vazão molar de inibidor (F_2) no instante inicial.

3.5. DESCRIÇÃO DO PROCESSO DE POLICONDENSAÇÃO INDUSTRIAL

Este caso de estudo é um reator industrial de policondensação para produção de *nylon-6,6*, empregado na produção de plásticos de engenharia. O processo é realizado principalmente em um reator tubular sob condições de duas fases, sem catalisador externo. O reator é uma bobina aquecida externamente por meio de transferência de calor. O reator é continuamente alimentado por uma solução aquosa de sal de *nylon*, que passa primeiro pelo tubo fino do reator. Após

passar por aquecimento, de acordo com as condições operacionais, o fluido começa a vaporizar, aparecendo assim a fase de vapor. O comprimento total do tubo é 1000 (mil) metros com 4 (quatro) seções de diferentes diâmetros (de 4 (quatro) a 15 (quinze) centímetros, permitindo assim a fase vapor fluir com o incremento da viscosidade da fase líquida devido à evaporação de água e à policondensação. Este tipo de reator também é chamado de “flashers” ou “flash tubes”. O reator é similar aos descritos nas patentes de DuPont (1944, 1951, 1956). A vazão da fase de vapor finaliza em um recipiente semelhante a um ciclone, chamado “melt-pool”, sob condições atmosféricas, que funciona como um separador de vapor e reator adicional. A Figura 3.5 mostra um esquema simplificado do processo industrial descrito.

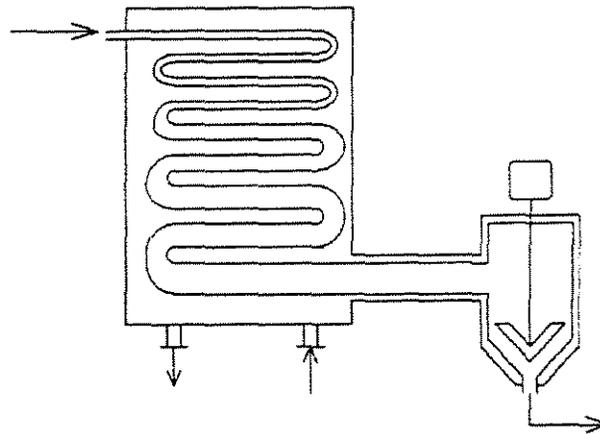


Figura 3.5. Esquema simplificado do processo de policondensação

3.6. MODELO DINÂMICO REPRESENTATIVO DO REATOR DE *NYLON-6,6*

O modelo dinâmico desenvolvido nesta tese é baseado no reator industrial apresentado por Giudici et al. 1999, sendo os parâmetros cinéticos e constantes provenientes dos trabalhos de Ogata (1960), Steppan (1987) e Hipp (1996). A modelagem dinâmica desse reator tubular é realizada através do seqüenciamento de um número mínimo de reatores CSTR capazes de representarem satisfatoriamente o comportamento das principais variáveis ao longo do tempo. Por isso, um procedimento de simulação foi realizado para se determinar esse número mínimo de reatores igual a 10. Assim, o modelo dinâmico do sistema é composto pelas equações de balanço de massa e energia de cada reator CSTR. As perdas de cargas são desconsideradas nesta modelagem.

3.6.1. CINÉTICAS DAS REAÇÕES DE *NYLON-6,6*

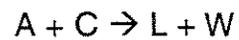
A cinética de policondensação de *nylon-6,6* considerada por Steppan et al. (1987) é empregada nesta tese. Os grupos terminais considerados na modelagem fenomenológica são aminas (A), carboxilas (C), amidas (L), água (W) – conforme apresentado na Tabela 3.4. As reações de degradação são desconsideradas neste estudo para simplificar o modelo do processo.

Tabela 3.4: Compostos químicos envolvidos na policondensação do *nylon-6,6*

Composto	Grupo terminal
A	Amina
C	Carboxila
L	Amida
W	Água

Equações adicionais são incluídas no modelo para avaliar as propriedades de transporte e aspectos físicos dos grupos terminais (capacidade de calor, densidade, viscosidade, condutividade térmica) e considerando-se algumas regras de mistura adequadas para calcular as propriedades de solução.

A reação de policondensação do *nylon-6,6* é:



As taxas de reação resultantes de produção de cada um desses compostos são:

$$R_A = -R_p \quad (3.57)$$

$$R_C = -R_p \quad (3.58)$$

$$R_L = R_p \quad (3.59)$$

$$R_W = R_p \quad (3.60)$$

sendo que R_j é a taxa de reação do grupo terminal j .

A tabela 3.5 apresenta um resumo da cinética existente e constantes utilizadas:

Tabela 3.5. Cinéticas da policondensação de *nylon-6,6*

REAÇÃO	CINÉTICAS	Constante	k_{p0} (l/h)	ΔH_p (kJ/mol)	T_0 (K)
$A + C \rightarrow L + W$	$R_p = C_t k_{1,ap} (x_A x_C - x_L x_W / K_{ap})$	k_p	Ver abaixo	89,45	473
<p>A = hexametileno diamina, C = ácido adipico, L = <i>nylon-6,6</i>, w = água</p> <p>$X_i = C_i / C_t$ onde $C_t = C_A + C_C + C_W$</p> <p>As constantes da policondensação são dadas pelas seguintes relações:</p> $k_{1,ap} = k_o \exp \left[-\frac{E_{ap}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]$ <p>onde $\frac{E_{ap}}{R} = 10770 \text{ K}^{-1}$</p> <p>e $k_o = \exp \{ 2,55 - 0,45 \tanh [25(x_w - 0,55)] \} + 8,58 \{ \tanh [50(x_w - 0,10)] - 1 \} (1 - 30,05x_c)$.</p> $K_{ap} = K_o \exp \left[-\frac{\Delta H_{ap}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right]$ <p>onde $K_o = \exp \{ [1 - 0,47 \exp(-x_w^{1/2}/0,2)] (8,45 - 4,2x_w) \}$</p> <p>e $\Delta H_{ap}/R = \{ 7650 \tanh [6,5(x_w - 0,52)] + 6500 \exp(-x_w/0,065) - 800 \} / 1,987$.</p>					

3.6.2. BALANÇOS DE MASSA E ENERGIA

As equações de balanços de massa do modelo dinâmico de cada reator CSTR para cada um dos grupos terminais são dadas por:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{(q_e C_{ie} - q C_i)}{V_r} + R_i + \sigma(i-w) \frac{\Delta W_{vap}}{V_r M_w} \quad \text{onde } \sigma(i-w) = \begin{cases} 1 & \text{se } (i-w) = 0 \\ 0 & \text{se } (i-w) \neq 0 \end{cases} \quad (3.61)$$

para $i = A, C, L, W$

sendo C a concentração, V_r volume útil do reator, M_w peso molecular da água, q a vazão volumétrica e ΔW_{vap} uma função representativa da quantidade de massa que vaporiza pelo diferencial de comprimento do reator. A taxa de vaporização depende da posição do reator (pressão do reator local), coeficiente de transferência de massa para a fase gasosa, área de contato entre as fases líquida e gasosa por unidade de volume, temperatura e fração molar de água no estado líquido (pressão de vapor), conforme descrito em Giudici et al. 1999:

Por meio do balanço térmico, obtém-se a equação 3.62.

$$(d_L V_r C_{pL} + d_G V_r C_{pG}) \frac{dT}{dt} = W_L C_{pL} T_e - W_L C_{pL} T + W_G C_{pG} T_e - W_G C_{pG} T + UA(T_{ext} - T) - V_r R_p (-\Delta H_p) - \Delta W_{vap} \Delta H_{vap} \quad (3.62)$$

sendo d a densidade, W a vazão de massa, C_p o calor específico, U o coeficiente de transferência de calor, ΔH o calor de reação e ΔH_{vap} o calor de vaporização da água. Ao passo que os parâmetros deste modelo são descritos na Tabela 3.6:

Tabela 3.6. Parâmetros do reator de policondensação

Parâmetro	Nomenclatura	Valor
d_L	Densidade da fase líquida	1000 kg/m ³
d_G	Densidade da fase gasosa	1 kg/m ³
C_{pL}	Calor específico da fase líquida	1680,3 J/kg.K
C_{pG}	Calor específico da fase gasosa	2090,3 J/kg.K
U	Coeficiente de transferência de calor	144000 J/m ² .K.h
ΔH_{vap}	Calor vaporização	3227,9 J/g (Ogata 1960)

Segundo Giudici et al. 1999, o peso molecular do *nylon-6,6* (M_n) é dado pela equação 3.63

$$M_n = \frac{2 \cdot 10^6}{C_a + C_c} \quad (3.63)$$

em que C_a e C_c são as concentrações de amina e carboxila no final do processo de policondensação.

3.7. PROGRAMA DE SIMULAÇÃO DO MODELO DO PROCESSO DE POLICONDENSAÇÃO

Um programa em ambiente de programação FORTRAN foi desenvolvido para simular este modelo dinâmico do processo de policondensação. As constantes cinéticas são provenientes da literatura. Pelo fato que algumas informações do processo não serem disponíveis por questões de privacidade do processo, algumas considerações foram feitas. Essas considerações foram baseadas em discussões com pesquisadores da empresa e resultados publicados deste reator (Giudici et al, 1999). O método de integração de Runge-Kutta foi empregado para resolver o modelo no tempo em cada reator (que representa ao longo do reator). A seguir, alguns resultados de simulação deste caso de estudo em malha aberta são apresentados. A Figura 3.6 apresenta resultados do comportamento dinâmico do peso molecular do *nylon-6,6* (M_n) quando o processo de policondensação é submetido a duas perturbações do tipo degrau (10 e -10%). Pode-se observar um comportamento não linear presente nesta malha de variáveis. Esta malha é importante pois será utilizada nos testes de modelagem e controle apresentados nos capítulos 5 e 7 desta tese.

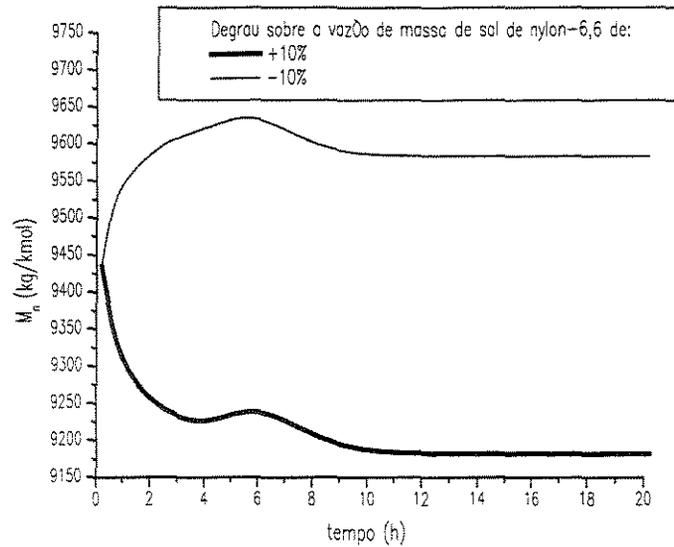


Figura 3.6. Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular do *nylon-6,6* (M_n) sob perturbações degrau de mais ou menos 10% sobre a vazão de massa de sal de *nylon* na entrada do processo de policondensação no instante inicial.

A Figura 3.7 apresenta resultados do peso molecular do *nylon-6,6*, para o sistema submetido a uma perturbação degrau de mais ou menos 5% sobre a vazão de massa de amina na entrada do processo de policondensação. Pode-se observar, para estes testes realizados, que o decremento da vazão de amina ocasionou numa resposta inversa do peso molecular. Ao passo que o incremento da vazão de amina resultou um razoável decremento do peso molecular. Estes comportamentos dinâmicos caracterizam o sistema como altamente não linear. Esta malha de variáveis é importante, pois será estudada no controle regulatório do processo de policondensação, apresentado no capítulo 7.

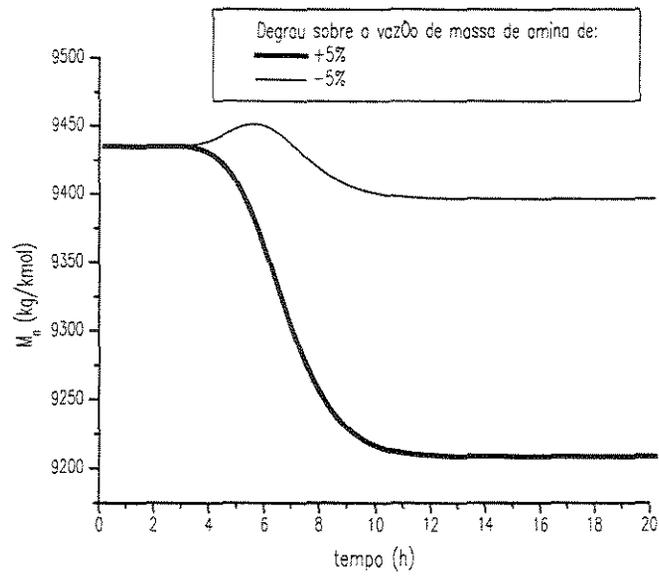


Figura 3.7. Comportamento dinâmico em malha aberta do peso molecular do *nylon-6,6* (M_n) sob perturbação degrau de mais ou menos 5% sobre a vazão de massa de amina na entrada do processo de policondensação no instante inicial.

3.8 . CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Os processos considerados como os casos de estudo desta tese foram descritos ao longo deste capítulo; conjuntamente, são apresentados os modelos matemáticos dos respectivos processos, bem como seus parâmetros e condições iniciais. Para o caso de estudo de policondensação, foi desenvolvido um modelo dinâmico baseado no modelo estacionário de Giudici et al 1999. Os resultados de simulação deste modelo são descritos nos capítulos cinco e sete desta tese e retratam de forma satisfatória o comportamento dinâmico do reator tubular industrial. Dessa forma, os programas computacionais de simulação de tais processos funcionam como plataforma de implementação (planta) dos algoritmos de controle desenvolvidos nesta tese. Estes algoritmos de controle baseiam-se nas estratégias de controle preditivo e sistemas *fuzzy*. Assim, o capítulo seguinte apresenta conceitos fundamentais de lógica *fuzzy* e uma classificação dos modelos *fuzzy*, os quais serão utilizados como modelos internos do controlador preditivo proposto.

CAPÍTULO 4

SISTEMAS FUZZY

4.1. INTRODUÇÃO

Os sistemas *fuzzy* baseiam-se na teoria de conjuntos *fuzzy*, introduzida por Zadeh (1965). Em Yager et al. (1987), pode ser encontrada uma coletânea dos principais artigos de Zadeh, e diversos são os autores que tem fundamentado os conceitos de sistemas *fuzzy* ou nebulosos, tais como: Yager e Filev (1994), Pedrycz (1989), Pedrycz e Gomide (1998), Kosko (1992), entre outros. Este capítulo apresenta os conceitos básicos da teoria de lógica nebulosa e uma apresentação das classes de sistemas nebulosos.

4.2. CONCEITOS FUNDAMENTAIS

A teoria de conjuntos *fuzzy* define um tratamento matemático de variáveis lingüísticas em relação a operações e inferências de regras **SE-ENTÃO**. Uma **variável lingüística** é uma variável cujos valores são rótulos (*labels*) de conjuntos *fuzzy*. Por exemplo, a temperatura de um processo poderia ser uma variável lingüística considerando-se rótulos baixa, média e alta. Estes rótulos são descritos matematicamente por conjuntos *fuzzy*.

A definição de **conjuntos *fuzzy*** pode ser compreendida a partir de um entendimento inicial de conjuntos clássicos. Quando se raciocina com base na teoria clássica dos conjuntos, o conceito de pertinência de um elemento a um conjunto fica bem definido. Os elementos de um conjunto A em um determinado universo X simplesmente pertencem ou não pertencem àquele conjunto. Isto pode ser expresso por uma função característica f_A :

$$f_A(x) = \begin{cases} 1 & \text{se e somente se } x \in A \\ 0 & \text{se e somente se } x \notin A \end{cases} \quad (4.1)$$

O conceito de **nebulosidade** (*fuzziness*) é introduzido generalizando-se a função característica de modo que ela possa assumir qualquer valor real no intervalo $[0,1]$. Dessa forma, um conjunto *fuzzy* A em X é um conjunto de pares ordenados:

$$A = \{\mu_A(x) / x\} \quad x \in X \quad (4.2)$$

sendo que $\mu_A(x)$ é a **função de pertinência** de x a A e é definida como o mapeamento de X no intervalo $[0,1]$:

$$\mu_A(x) : X \rightarrow [0,1] \quad (4.3)$$

A função de pertinência informa o quanto um elemento pertence a um dado conjunto.

Em particular, o elemento x em X em que $\mu_X(x) = 0.5$ é chamado de **ponto de crossover** e um conjunto *fuzzy* cujo suporte é um único ponto em X com $\mu_X(x) = 1.0$ é denominado como **fuzzy singleton**. O **conjunto suporte** de um conjunto *fuzzy* A é o conjunto de elementos no universo X para os quais $\mu_A(x) \geq 0$. Dessa forma, um conjunto *fuzzy* também pode ser visto como o mapeamento do conjunto suporte no intervalo $[0,1]$, o que implica em expressar o conjunto *fuzzy* por sua função de pertinência.

Uma função de pertinência pode ser definida através de um conjunto de pares ordenados $\{\mu_A(x) / x\}$ ou por funções analíticas (triangulares, trapezoidais, *gaussianas*, etc). Por exemplo: a função analítica *gaussiana* que mapeia o conjunto suporte no intervalo $[0,1]$ é :

$$\mu(x) = \exp(-(x - c)^2 / 2\sigma^2) \quad (4.4)$$

sendo que *exp* é uma função exponencial, c é centro e σ é o desvio padrão da função *gaussiana*.

Na Figura 4.1 é apresentada uma ilustração da função de pertinência *gaussiana* para a variável lingüística temperatura representativa do rótulo

temperatura média, com um universo de discurso no intervalo $[0,100]$. Da mesma forma, na Figura 4.2 é apresentado uma ilustração para variável lingüística peso molecular, no caso, a função de pertinência peso molecular alto com um conjunto suporte no intervalo $[20000,50000]$.

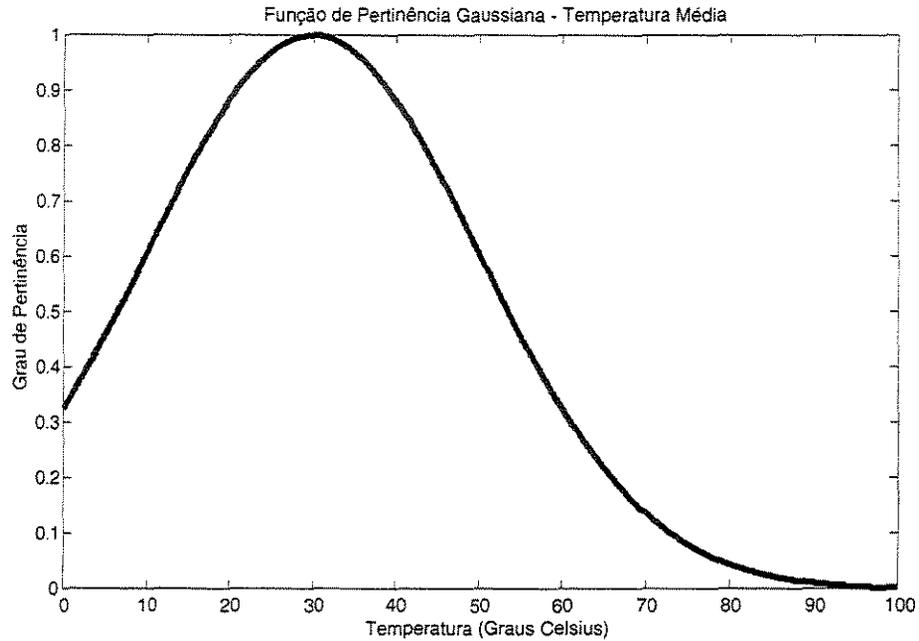


Figura 4.1. Ilustração da função analítica *gaussiana* de temperatura média

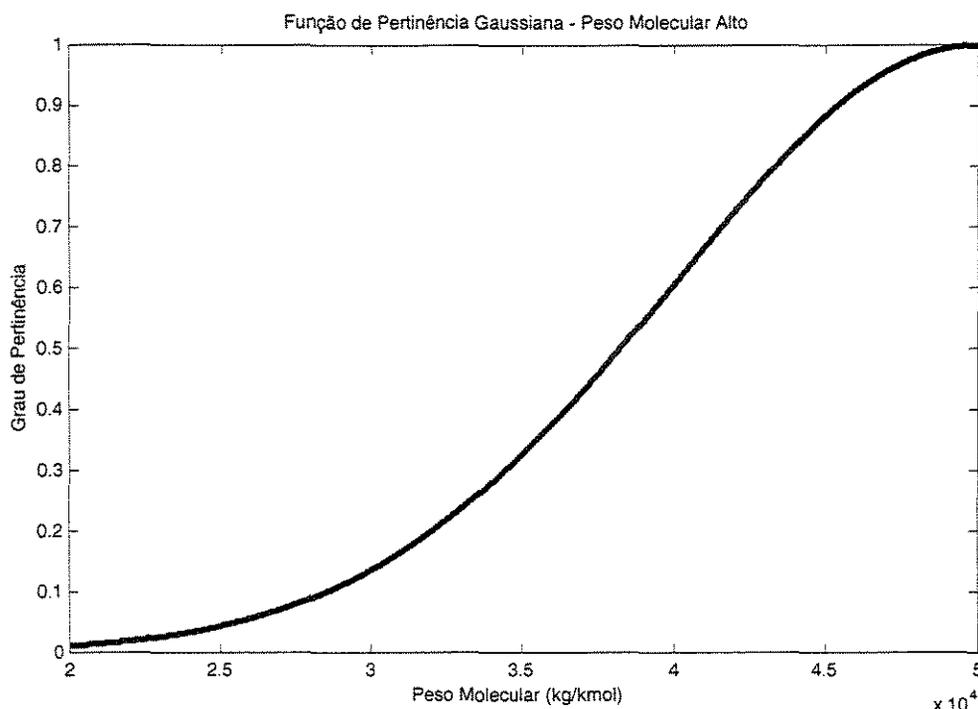


Figura 4.2. Ilustração da função analítica *gaussiana* de peso molecular alto

Esta função *gaussiana* de pertinência é utilizada para o desenvolvimento de modelos *fuzzy* desta tese. Uma vantagem desta função analítica é a existência da função derivada $\left(\frac{d\mu(x)}{dx}\right)$ para todo o domínio; isto pode ser necessário quando o modelo é empregado em uma etapa de otimização, que é o caso das técnicas de controle preditivo.

O mecanismo de inferência de um sistema *fuzzy* é baseado em uma base de regras SE-ENTÃO. Por exemplo:

SE (*temperatura é média*) **ENTÃO** (*peso molecular é alto*)

SE (*temperatura é NÃO baixa*) **ENTÃO** (*peso molecular é baixo*)

SE (*temperatura é baixa*) **OU** (*peso molecular é médio*) **ENTÃO** ...

SE (*temperatura é baixa*) **E** (*peso molecular é médio*) **ENTÃO** ...

e assim por diante.

Primeiramente, deve-se realizar a interface de *fuzzificação*, já que as informações de entrada do sistema *fuzzy* são sinais numéricos (*crisp*), que devem ser codificados em “linguagem *fuzzy*” (rótulos) através da geração dos respectivos graus de pertinência, utilizando-se das funções de pertinência (discretas ou analíticas).

Na base de regras acima, existem operadores de conexão {E, OU} e negação {NÃO}; além da base de regras de inferência (SE-ENTÃO) existente. Dessa forma, é interessante definir operadores matemáticos que possam implementar tais operadores e realizar o mecanismo de inferência do sistema.

O conector {E} pode ser tratado matematicamente por uma **norma triangular**.

Uma **norma triangular**, representada genericamente por $*$, é uma função $*$: $[0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$, e inclui as operações de intersecção, definidas para todo $x, y \in [0,1]$, tais como:

mínimo	$x \wedge y = \min\{x,y\}$
--------	----------------------------

produto algébrico	$x \cdot y = x.y$
-------------------	-------------------

produto limitado	$x \otimes y = \max\{0, x + y - 1\}$
------------------	--------------------------------------

O conector {OU} pode ser tratado matematicamente por uma **co-norma triangular**.

Uma **co-norma triangular**, representada genericamente por $\dot{+}$, é uma função $\dot{+}: [0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$, e inclui as operações de união, definidas para todo $x, y \in [0,1]$, tais como:

$$\text{máximo} \quad x \vee y = \max\{x, y\}$$

$$\text{soma algébrica} \quad x \hat{+} y = x + y - xy$$

$$\text{soma limitada} \quad x \oplus y = \min\{1, x+y\}$$

$$\text{soma disjunta} \quad x \Delta y = \max\{\min(x, 1 - y), \min(1 - x, y)\}$$

Ao passo que o operador de negação pode ser definido pelo complemento de um conjunto *fuzzy* A , definido para todo $x \in X$:

$$\mu_{\bar{A}}(x) = 1 - \mu_A(x) \quad (4.5)$$

As normas triangulares são empregadas para definir conjunções em raciocínio aproximado, enquanto que co-normas triangulares desempenham o mesmo papel para as disjunções.

O tratamento matemático do mecanismo de inferência, para mapeamento de entrada e saída, pode ser formulado por produto cartesiano, relação *fuzzy* ou norma triangular. Em sistemas de modelagem e controle de processos, esses mapeamentos são fundamentais.

O **produto cartesiano** de A_1, \dots, A_n é um conjunto *fuzzy* no espaço $X_1 \times \dots \times X_n$ definido pela função de pertinência:

$$\mu_{A_1 \times \dots \times A_n}(x_1, \dots, x_n) = \min\{\mu_{A_1}(x_1) \cdot \dots \cdot \mu_{A_n}(x_n)\}, \quad (4.6)$$

sendo que A_1, \dots, A_n são conjuntos *fuzzy* em X_1, \dots, X_n , respectivamente.

Uma **relação fuzzy** sobre os universos X e Y é definida com um conjunto *fuzzy* do produto cartesiano $X \times Y$. Por exemplo: se $X = \{a, b, c\}$ e $Y = \{1, 2\}$, então:

$$A = \{0,1/(a,1); 0,6/(a,2); 0,9/(b,1); 1,0/(b,2); 0/(c,1), 0,2/(c,2)\}$$

é uma relação *fuzzy* sobre os universos $X \times Y$.

Genericamente, se X_1, X_2, \dots, X_n são uma coleção de conjuntos, uma relação *fuzzy* n -ésima é um conjunto *fuzzy* sobre o produto cartesiano, $X_1 \times X_2 \times \dots \times X_n$

Cabe também apresentar que uma **implicação fuzzy** (ENTÃO) está associada a alguns tipos de funções de implicação *fuzzy*, definidas a seguir:

- 1) Implicação material: $A \rightarrow B = (\text{not } A) \dot{+} B$
- 2) Cálculo proposicional: $A \rightarrow B = (\text{not } A) \dot{+} (A * B)$
- 3) Cálculo proposicional estendido: $A \rightarrow B = (\text{not } A \times \text{not } B) \dot{+} B$
- 4) Generalização de Modus Ponens: $A \rightarrow B = \sup\{c \in [0, 1], A * c \leq B\}$
- 5) Generalização de Modus Tollens: $A \rightarrow B = \inf\{t \in [0, 1], B \dot{+} t \leq A\}$

Por fim, realiza-se a etapa de *defuzzificação*, que é exatamente o inverso da *fuzzificação*. Para este procedimento existem alguns métodos, tais como:

i) Método do critério máximo: fornece como resposta o valor numérico no qual a função de pertinência toma o valor máximo.

ii) Método da média dos máximos: fornece uma resposta obtida pelo valor médio de todos os valores locais onde a função de pertinência toma o valor máximo. Especificamente, no caso de um universo discreto, a ação de controle pode ser expressa por:

$$z_0 = \sum_{j=1}^l \frac{w_j}{l}, \quad (4.7)$$

sendo que w_j é o valor de suporte no qual a função de pertinência $\mu_z(w_j)$ assume o seu valor máximo, e l é o número de valores suporte.

iii) Método da média ponderada (centro de gravidade): é o método mais empregado e baseia-se no cálculo do centro de gravidade da função de pertinência resultante da inferência; pode ser interpretado como uma média ponderada na qual os pesos são as pertinências das premissas de cada uma das regras. Para o caso de universo de discurso discreto é dado por:

$$z_0 = \frac{\sum_{j=1}^n \mu_z(w_j) w_j}{\sum_{j=1}^n \mu_z(w_j)} \quad (4.8)$$

em que n é o número de elementos discretos da saída.

4.3. CLASSIFICAÇÃO DE MODELOS FUZZY

Na seção anterior foram introduzidos alguns dos conceitos fundamentais de lógica *fuzzy*. Nesta seção, apresentam-se as diferentes representações de modelos *fuzzy*. Segundo Babuska e Verbruggen (1996), os modelos *fuzzy* podem ser classificados por modelos *fuzzy* lingüísticos, relacionais e funcionais, este último também denominado por Takagi-Sugeno.

4.3.1. MODELOS NEBULOSOS LINGÜÍSTICOS

As regras de um modelo lingüístico seguem a seguinte forma geral:

$$\mathbf{SE} (x \text{ é } A) \mathbf{ENTÃO} (y \text{ é } B) \quad (4.9)$$

A proposição 'x é A' é o antecedente da regra, e a proposição 'y é B' é o conseqüente. As variáveis lingüísticas x e y são tomadas em valores lingüísticos, definidos como conjuntos *fuzzy* sobre domínios $\chi \subset R^n$ e $y \subset R^m$ respectivamente. A e B são termos lingüísticos constantes que usualmente exprimem um significado para variáveis lingüísticas dadas, tais como: 'temperatura baixa', 'pressão alta', entre outros. Já que estes conjuntos *fuzzy* definem certos 'pontos de referência' nos espaços dados, estes são chamados de conjuntos *fuzzy* de referência. As funções de pertinência para os conjuntos *fuzzy* de referência precisam ser definidas em uma base de dados que é uma parte dos sistemas *fuzzy* (usualmente na forma paramétrica ou como uma tabela). Tipicamente, diversos termos A_i são

definidos sobre o domínio de uma variável, e a coleção destes conjuntos *fuzzy* $[A_1, A_2, \dots, A_M]$ é chamada de partição *fuzzy*. O número de termos lingüísticos na partição, denotado como *granulosidade* do modelo, está relacionado com o nível de precisão em cujo processo é representado.

A base de regras e a base de dados formam a base de conhecimento do sistema *fuzzy*. O mapeamento entrada-saída é realizado pelo mecanismo de inferência *fuzzy* de um conjunto *fuzzy* de entrada que deriva um conjunto *fuzzy* de saída, usando as regras e os conjuntos *fuzzy* de referência. Um sistema *fuzzy* consiste de um mapeamento de entrada-saída $S: \chi \subset R^n \rightarrow y \subset R^m$.

Existem vários números de graus de liberdade para realização de um sistema *fuzzy*, tais como: estrutura e número das regras, definições dos conjuntos *fuzzy* de referência e escolha do mecanismo de inferência *fuzzy*. Adicionalmente, em muitas aplicações, as entradas e saídas são valores numéricos, e não conjuntos *fuzzy*. Para fazer esse tratamento, o sistema *fuzzy* precisa ser equipado com interfaces de conversão, chamadas unidades de *fuzzificação* e *defuzzificação*. Os conjuntos *fuzzy* A e B na regra (4.9) são geralmente conjuntos *fuzzy* multidimensionais. Como isso pode ser impraticável para o usuário, as condições do antecedente são usualmente definidas em uma forma decomposta, usando simples proposições para componentes individuais do vetor de entrada x. As proposições empregam conjuntos *fuzzy* univariável e são combinadas por meio de conectivos lógicos **E** (conjunções) e **OU** (disjunções). A forma conjuntiva é mais usualmente empregada:

$$\mathbf{SE} (x_1 \text{ é } A_1) \mathbf{E} \dots \mathbf{E} (x_n \text{ é } A_n) \mathbf{ENTÃO} \dots \quad (4.10)$$

Neste caso, o conjunto *fuzzy* multidimensional A resulta como uma interseção das extensões cilíndricas dos conjuntos *fuzzy* univariável A_i e a respectiva entrada. O número de regras necessário para encobrir todo o domínio é uma função exponencial da dimensão do espaço de entrada. Embora o número de regras possa ser reduzido empregando também operadores de disjunção ou negação, um sistema *fuzzy* de camada simples não pode ser diretamente aplicado para problemas de altas dimensões. Modelos com muitas variáveis de entrada

podem ser adequadamente estruturados de forma hierárquica; pois uma alta dimensionalidade do problema pode dificultar uma interpretação lingüística. Uma outra solução empregada nesta tese é a aplicação de algoritmos de agrupamento (*clustering*) de entrada e saída do sistema. Esta estratégia é apresentada em pormenores no capítulo seguinte.

Em uma variante do modelo lingüístico, os conjuntos *fuzzy* conseqüentes B_i são reduzidos para *singletons fuzzy* que podem ser representados como número real b_i . O número de *singletons* distintos na base de regras é usualmente não limitado, isto é, cada regra pode ter seu próprio conseqüente *singleton*, que é um grau adicional de liberdade útil para re-sintonizar o modelo para dados.

4.3.2. MODELOS NEBULOSOS RELACIONAIS

Em modelos relacionais *fuzzy*, o mapeamento de conjuntos *fuzzy* de entrada A_i para conjuntos *fuzzy* de saída B_i é representado por uma relação *fuzzy*. Como um simples exemplo, supõe-se um modelo estático com uma entrada $x \in \mathcal{X}$ e uma saída $y \in Y$. Denotando A uma coleção de M termos lingüísticos - conjuntos *fuzzy* - definidos sobre o domínio \mathcal{X} , e uma coleção B de N conjuntos *fuzzy* definidos sobre Y :

$$A = \{A_1, A_2, \dots, A_M\} \quad (4.11)$$

$$B = \{B_1, B_2, \dots, B_N\} \quad (4.12)$$

Uma relação *fuzzy* $R = \{r_{ij}\}_{M \times N}$ define um mapeamento do conjunto de termos lingüísticos de entrada A para o conjunto de rótulos de saída B , $R: A \rightarrow B$.

Para uma entrada numérica particular x , o conjunto *fuzzy* $X = \{\dots\}$ representa o grau de pertinência da entrada com cada um dos termos lingüísticos. O conjunto *fuzzy* de saída correspondente $Y = \{\dots\}$ é derivado usando a composição relacional:

$$Y = X \circ R \quad (4.13)$$

Se um valor numérico é requerido na saída do modelo, o conjunto *fuzzy* Y deve ser *defuzzificado*, normalmente, usando o método de *defuzzificação* do centro de gravidade dos conjuntos *fuzzy* B_i :

$$b_i = \frac{\sum_{q=1}^{N_q} \mu_{B_i}(y_q) y_q}{\sum_{q=1}^{N_q} \mu_{B_i}(y_q)} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.14)$$

em que N_q é um número de elementos discretos da saída numérica do modelo relacional y_0 é calculada pela média ponderada dos b_i 's:

$$y_0 = \frac{\sum_{i=1}^N \mu_i b_i}{\sum_{i=1}^N \mu_i} \quad (4.15)$$

A relação *fuzzy* expressa em termos de regras **SE-ENTÃO** é equivalente para uma base de regras completa com antecedentes na forma conjuntiva. Cada regra inclui todos os conjuntos conseqüentes possíveis B_i , tendo cada qual um peso diferente. Através dessa ponderação, pode-se sintonizar os conseqüentes das regras sem mudar os conjuntos *fuzzy* de referência. Uma vez que cada conseqüente pode de fato tomar qualquer valor no domínio Y , como oposto para modelos lingüísticos, onde é restringido para um conjunto finito de pontos dados pelos centróides dos conjuntos *fuzzy* de referência de saída. Para este grau adicional de liberdade, existe algum custo para haver mais parâmetros livres, sem imposição de qualquer restrição sobre estes parâmetros. Além do mais, a forma dos conjuntos *fuzzy* de saída não tem influência sobre o valor defuzzificado resultante, já que somente os centróides destes conjuntos são considerados na *defuzzificação*. Em termos computacionais, um modelo *fuzzy* relacional pode ser mudado por um modelo equivalente com conseqüentes *singleton*. O modelo lingüístico é um caso especial de modelo relacional *fuzzy*, sendo que a relação é uma restrição de relação binária tal que somente algum elemento não nulo é permitido em cada linha de R (uma regra tem somente algum conseqüente).

4.3.3. MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS (TAKAGI-SUGENO)

Uma desvantagem que pode ser notada nos modelos lingüísticos e relacionais é que eles não possuem, de forma explícita, uma abertura para incorporação de algum possível conhecimento fenomenológico do processo. Este tipo de conhecimento é, em alguns casos, disponível na forma dos princípios físicos e químicos e condições gerais da estrutura física do sistema; por exemplo: balanços de massa e energia, perdas de cargas, etc. Takagi e Sugeno (1985) propuseram uma nova formulação para a estrutura nebulosa, que é denominada de modelo *fuzzy* de Takagi-Sugeno (modelo *fuzzy* funcional), que permite, de certa forma, a inserção de equacionamentos no modelo *fuzzy*. O modelo *fuzzy* de Takagi-Sugeno é associado com uma base de regras em uma estrutura especial que é caracterizada com a parte conseqüente formada por funções analíticas, conforme (4.16):

SE (x_1 é A_{11}) **E** (x_2 é A_{21}) **E**, ..., **E** (x_n é A_{n1}) **ENTÃO** $f_1 = a_{10} + a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1n} \cdot x_n$

TAMBÉM

...

SE (x_1 é A_{1i}) **E** (x_2 é A_{2i}) **E**, ..., **E** (x_n é A_{ni}) **ENTÃO** $f_i = a_{i0} + a_{i1} \cdot x_1 + a_{i2} \cdot x_2 + \dots + a_{in} \cdot x_n$

...

TAMBÉM

SE (x_1 é A_{1R}) **E** x_2 is A_{2R} **E**, ..., **E** x_n is A_{nR} **ENTÃO** $f_R = a_{R0} + a_{R1}x_1 + a_{R2}x_2 + \dots + a_{Rn}x_n$ (4.16)

sendo que R é o número de regras, n é o número de variáveis de entrada, $x = [x_1, \dots, x_n]$, A_{ij} , $i = 1, \dots, n$ e $j = 1, \dots, R$ são rótulos definidos com conjuntos *fuzzy* sobre os espaços de entrada X_1, X_2, \dots, X_n de um sistema de múltiplas entradas e simples saída (MISO); x_1, x_2, \dots, x_n são os valores das variáveis de entrada. Cada

uma das funções lineares pode ser considerada como modelos lineares com entradas numéricas x_1, x_2, \dots, x_n , saída numérica y_i e parâmetros a_{ij} , $i = 1, \dots, R$ e $j = 0, \dots, n$. A saída numérica y inferida pelo modelo *fuzzy* sob as técnicas de Takagi-Sugeno é definida pela média ponderada das saídas numéricas y_i de cada uma das funções locais.

$$y = \frac{\sum_{i=1}^R \mu_i}{\sum_{j=1}^R \mu_j} y_i = \frac{\sum_{i=1}^R \mu_i}{\sum_{j=1}^R \mu_j} (a_{i0} + a_{i1}x_1 + \dots + a_{in}x_n) \quad (4.17)$$

e τ_i é o grau de inferência da i -ésima regra:

$$\tau_i = A_{1i}(x_1) \wedge \dots \wedge A_{ni}(x_n) \quad (4.18)$$

Genericamente, as regras do modelo de Takagi-Sugeno correspondem a uma aproximação do mapeamento $X_1 \times \dots \times X_n \rightarrow Y$ por uma função linear de ajuste. De uma forma geral, as funções lineares da parte conseqüente podem ser transformadas para funções não lineares. Assim, o modelo de Takagi-Sugeno poderia ser representado conforme (4.19):

$$\mathbf{SE } x_1 \text{ é } A_{1i} \mathbf{ E } \dots \mathbf{ E } x_n \text{ é } A_{ni} \mathbf{ ENTÃO } y_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (4.19)$$

sendo que as saídas dos subsistemas não lineares são combinadas analogamente ao caso linear, conforme a equação 4.17.

4.4. CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Este capítulo apresenta os conceitos fundamentais de lógica *fuzzy* e uma classificação de modelos *fuzzy*. O capítulo seguinte apresenta em pormenores o desenvolvimento de modelos dinâmicos *fuzzy* empregando o modelo *fuzzy* funcional. Por isso, este capítulo contém conceitos e formalizações relevantes para melhor compreensão do capítulo seguinte.

CAPÍTULO 5

IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS *FUZZY* FUNCIONAIS

5.1. INTRODUÇÃO

A estratégia empregada na concepção do controlador híbrido proposto consiste na integração de lógica *fuzzy* e controle preditivo, e requer o uso de modelo interno *fuzzy* funcional para previsão de variáveis na metodologia de um controle preditivo. A representação de modelos *fuzzy* funcionais (Takagi e Sugeno, 1985), bem como o mecanismo de inferência foram descritos no capítulo 4. Os modelos *fuzzy* funcionais que empregam funções de saída lineares podem ser visualizados como modelos lineares em uma dada região do sistema. Todavia, considerando-se as interpolações das regras e sobreposições apresentadas pelos conjuntos *fuzzy* das premissas, os modelos *fuzzy* funcionais são uma representação não linear de sistemas, sendo que este grau pode variar de acordo os graus de pertinência de cada uma das regras do sistema. Além dessa abordagem de funções lineares locais no modelo *fuzzy*, uma estratégia que usa funções exponenciais nas funções conseqüentes do modelo funcional é proposta e empregada nesta tese. Este recurso tem como objetivo captar as não linearidades provenientes da equação de Arrhenius (equação 3.1) . Uma melhora no desempenho de controle foi obtida com este procedimento, como será apresentado no capítulo 7.

5.2. TÓPICOS DE IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS

A identificação de sistemas é um procedimento que busca o desenvolvimento de modelos baseando-se em dados experimentais ou industriais do processo em estudo. Neste desenvolvimento, existe uma série de escolhas subjetivas que devem ser feitas, tais como: estrutura do modelo, metodologia de determinação dos dados empíricos, tempo de amostragem, entre outros. Apesar do panorama subjetivo de engenharia do campo de identificação de sistemas, existem algumas observações relevantes de projeto para cada escolha, as quais são apresentadas a seguir.

5.2.1. ESTRUTURA DO MODELO

A escolha da estrutura do modelo refere-se à escolha das variáveis do sistema bem como às funções representativas das mesmas. Estas funções podem ser numéricas, lógicas ou ambas. A escolha das variáveis do modelo deve considerar a necessidade do problema em questão. Por exemplo, para um problema de controle preditivo, que usa um modelo interno de previsão, deve-se buscar a determinação de um modelo da variável controlada em função da variável manipulada do sistema. Outro aspecto na escolha das variáveis do modelo é a correlação significativa entre as variáveis de entrada e saída do sistema; ou seja, deve existir uma relação de causa e efeito entre as entradas e as saídas.

Na escolha da estrutura do modelo, deve-se considerar o âmbito de utilização do modelo. Certas aplicações podem requerer uma representação mais precisa e global do sistema, que leve em consideração um maior número de variáveis, maior faixa de operação, comportamento estacionário ou transiente. Em aplicações de controle de processos, existe a necessidade de desenvolvimento de modelos de previsão, que contemplem as variáveis de saída no tempo em função de mudanças passadas das variáveis de entrada do sistema. Já para certas aplicações de otimização existe a necessidade de modelos estacionários que representem as variáveis de interesse do processo de tal forma a obter valores

ótimos de operação; estes valores desejados podem ser enviados aos controladores do processo.

Em muitas aplicações de engenharia de controle, determinam-se modelos transientes em torno de um ponto operacional. Tal consideração, de certa forma, assegura uma certa linearidade local do sistema, o que simplifica o desenvolvimento do modelo do processo bem como o projeto do controlador. Como estruturas representativas de sistemas lineares pode-se usar funções de transferência, espaço de estados e representações discretas (resposta ao impulso e degrau, ARX, ARMAX, Box-Jenkins, entre outros). Porém outras aplicações podem requerer um modelo em que as variáveis de entrada operem numa larga faixa operacional do processo. Neste caso, pode ser necessário o emprego de técnicas não convencionais para modelagem de processos – sistemas *fuzzy*, redes neurais, algoritmos genéticos e formulações híbridas – que são alternativas interessantes para o tratamento de não linearidades existentes.

5.2.2. METODOLOGIA DE DETERMINAÇÃO DE DADOS DE IDENTIFICAÇÃO

O projeto de excitação das variáveis de entrada do sistema refere-se principalmente a aspectos de frequência e amplitudes das mudanças nas mesmas. Para exemplificar cabe lembrar que a inversão de matriz é um procedimento numérico muitas vezes presente na etapa de determinação de parâmetros de um modelo. E problemas numéricos podem surgir no caso da existência de uma matriz mal condicionada (que apresenta problemas numéricos de inversibilidade). Este problema pode ser causado por uma frequência de excitação reduzida sobre a variável de entrada. Pelo contrário, deve-se determinar uma frequência máxima de excitação que assegure ao modelo a capacidade de modelar os valores estacionários. No que tange aos valores da amplitude de excitação, deve-se considerar a faixa operacional do modelo. Cabe ressaltar que, mesmo relevando-se as capacidades de interpolação de modelos, não há nenhuma garantia de desempenho satisfatório para valores que extrapolem as faixas de operação consideradas na determinação dos dados de identificação.

Para a etapa de validação de modelo é utilizado um conjunto de dados de teste, que deve ser diferente do conjunto empregado para o treinamento do modelo. Para tanto, deve-se excitar as mesmas variáveis de entrada em condições diferentes de frequência e amplitude.

5.2.3. DETERMINAÇÃO DE TAXA DE AMOSTRAGEM

A taxa de amostragem deve atentar para os tempos de respostas do modelo, bem como a taxa de ação do controlador. Como regra definida por Astrom e Wittermak (1997), a razão entre o tempo de resposta para atingir o estado estacionário e o intervalo de tempo de amostragem deve estar compreendido entre 4 e 10. Porém, para casos de sistemas multivariáveis, nem sempre é possível seguir esta regra. Para o caso de um sistema multivariável, deve-se considerar todas as relações possíveis de entradas e saídas. Sendo que o tempo de amostragem escolhido deve procurar atender a todos os tempos de resposta existentes nas relações entrada-saída. No caso da escolha de uma taxa de amostragem excessiva existe a possibilidade de problemas de mal condicionamento numérico, pois as variações entre passos podem ser desprezíveis. Porém no caso de uma taxa de amostragem reduzida existe o problema da falta de representação das dinâmicas de espectros maiores de frequência (teorema de amostragem de Shannon, Astrom e Wittermak, 1997).

5.3. DESENVOLVIMENTO DE MODELOS FUZZY FUNCIONAIS

Nesta seção são apresentados os procedimentos de desenvolvimento de modelos *fuzzy* funcionais, métodos numéricos e, por fim, resultados de simulação dos casos de estudo abordados nesta tese, como exemplificação.

Previamente, deve-se considerar as etapas de determinação de dados de identificação (dados de treinamento e teste). Essa etapa deve atentar para os tópicos elucidados da seção anterior.

A seguir é descrita a estrutura de modelo *fuzzy* funcional (Takagi e Sugeno, 1985), que é a representação de modelagem explorada nesta tese.

SE (x_1 é A_{11}) **E** (x_2 é A_{21}) **E**, ..., **E** (x_n é A_{n1}) **ENTÃO** $f_1 = a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \dots + a_{1n} \cdot x_n$)

...

SE (x_1 é A_{1i}) **E** (x_2 é A_{2i}) **E**, ..., **E** (x_n é A_{ni}) **ENTÃO** $f_i = a_{i1} \cdot x_1 + a_{i2} \cdot x_2 + \dots + a_{in} \cdot x_n$)

...

SE (x_1 é A_{1R}) **E** x_2 is A_{2R} **E**, ..., **E** x_n is A_{nR} **ENTÃO** $f_R = a_{R1}x_1 + a_{R2}x_2 + \dots + a_{Rn}x_n$

Os conjuntos *fuzzy* A_{ij} , onde $i = 1, \dots, n$ e $j = 1, \dots, R$ são representados pelas funções de pertinência *gaussianas* com seus respectivos parâmetros. Dessa forma, pode-se realizar a etapa de *fuzzificação* através de uma função analítica.

O mecanismo de inferência utiliza-se da norma triangular 'produto algébrico' e co-norma triangular 'soma algébrica'. Assim, pode-se assegurar a existência da função derivada do modelo *fuzzy*, que é um aspecto importante para a etapa de otimização existente nas técnicas de controle preditivo.

A etapa de *defuzzificação* é realizada pela média ponderada das saídas de cada uma das funções conseqüentes, considerando-se os respectivos graus de pertinência resultantes da parte das premissas como pesos. Assim, obtém-se a seguinte equação para a saída:

$$f(x) = \frac{\sum_{i=1}^R f_i(x) \mu_i(x)}{\sum_{i=1}^R \mu_i(x)} = \frac{\sum_{i=1}^R (a_{i0} + a_{i1}x_1 + \dots + a_{in}x_n) \mu_i(x)}{\sum_{i=1}^R \mu_i(x)} \quad (5.1)$$

sendo R o número de regras, n o número de variáveis de entrada, $x = [x_1, \dots, x_n]$, $f_i(x)$ a função consequente vetor de entrada x relativa à regra i e $\mu_i(x)$ a função de pertinência do vetor de entrada x relativa à regra i .

Entretanto, a dimensão desse modelo não é inicialmente conhecida (número de regras e número funções de pertinência associada a cada variável lingüística). Para tanto, deve-se estabelecer algoritmos capazes de dimensionar o modelo *fuzzy* e determinar os parâmetros relacionados (às funções de pertinência). Por isso, as metodologias abordadas a seguir enfocam o desenvolvimento de modelos *fuzzy* funcionais no tocante a dimensionalização e parametrização dos mesmos.

Assim sendo, o desenvolvimento de modelos *fuzzy* funcionais pode ser enquadrado nos seguintes aspectos de projeto:

1. Determinação da parte de premissas do modelo *fuzzy* funcional
2. Determinação dos parâmetros das funções consequentes;
3. Inclusão de informações operacionais do processo;

5.3.1. DETERMINAÇÃO DA PARTE DE PREMISSAS DO MODELO FUZZY FUNCIONAL

O método matemático de agrupamento subtrativo (*subtractive clustering*) é utilizado para determinar o número de regras R , bem como os parâmetros das funções de pertinência (c , σ), que são representadas pela função *gaussiana* (descrita no capítulo 4):

$$\mu(x) = \exp\left[\frac{-(x-c)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (5.2)$$

em que exp é a função exponencial, c é o centro e σ é o desvio padrão da função *gaussiana*.

O método de agrupamento subtrativo (Chiu, 1994, 1996) consiste no agrupamento de dados e trata-se de uma extensão do método “*grid-based montain clustering*” introduzido por Yager e Filev (1994). Os métodos de agrupamento propiciam ferramentas matemáticas para classificação e modelagem de sistemas.

Para a modelagem de modelos dinâmicos *fuzzy* funcionais a partir de um conjunto de dados de treinamento, tal método possibilita realizar um particionamento das variáveis premissas do modelo bem como fornecer os parâmetros iniciais das funções de pertinência das premissas. A seguir o algoritmo da metodologia de agrupamento subtrativo (*clustering subtractive*), utilizado neste trabalho, é descrito:

Considerando-se um conjunto de m dados $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ em um espaço de dimensão m , deve-se inicialmente normalizar os dados de modo que as faixas de cada uma de suas coordenadas em cada dimensão seja igual. Feito isso, considera-se cada dado como um *centro de grupo em potencial* e define-se o valor do potencial de cada dado pela equação 5.3:

$$P_i = \sum_{j=1}^m e^{-\alpha \|x_i - x_j\|^2} \quad (5.3)$$

em que

$$\alpha = \frac{4}{r_a^2} \quad (5.4)$$

e r_a é uma constante positiva. Assim, a medida de potencial de um dado é uma função da distância do mesmo para todos os demais dados. Analisando-se a equação 5.3, percebe-se que um dado com muitos dados vizinhos terá um potencial alto. A constante r_a é o raio que define uma zona de vizinhança, sendo

que dados excluídos desta zona apresentam fraca influência sobre o potencial calculado.

Após o cálculo de todos os potenciais, seleciona-se o dado com o maior potencial como o primeiro centro de grupo. Denotando-se x_1^* como sendo o dado escolhido como primeiro centro de grupo e P_1^* como sendo o seu respectivo potencial, executa-se um processo de redução dos potenciais calculados anteriormente através da equação 5.5:

$$P_i = P_i - P_1^* e^{-\beta \|x_i - x_1^*\|^2} \quad (5.5)$$

em que

$$\beta = \frac{4}{r_b^2} \quad (5.6)$$

e r_b é uma constante positiva. Dessa forma, ocorre uma subtração de cada potencial dos dados como função da distância do dado que está sendo calculado e do primeiro centro de grupo. Os dados próximos ao primeiro centro de grupo terão uma maior redução de seus respectivos potenciais e, portanto, pouco provavelmente serão selecionados como o próximo centro de grupo. A constante r_b é um raio que define uma zona de vizinhança em que os dados sofrerão considerável redução no potencial. Após essa atualização dos potenciais dos dados, escolhe-se o dado com maior potencial como sendo o segundo centro de grupo. Então, repete-se o procedimento de alteração dos potenciais, de forma análoga à anterior, como função do segundo centro de grupo escolhido.

De forma generalizada, após a escolha do k -ésimo dado como centro de grupo, repete-se o procedimento de alteração dos potenciais através da equação 5.7:

$$P_i = P_i - P_k^* e^{-\beta \|x_i - x_k^*\|^2} \quad (5.7)$$

sendo que x_k^* é o k -ésimo dado escolhido como centro de grupo e P_k^* é o seu respectivo potencial. O critério de parada é estabelecido através do seguinte algoritmo:

Se $P_k^* > \bar{\varepsilon} P_1^*$ então aceita-se x_k^* como sendo centro de grupo e continua;

Se não e se $P_k^* < \underline{\varepsilon} P_1^*$ então rejeita-se x_k^* e finaliza o processo de agrupamento;

Se não

Se $\frac{d_{\min}}{r_a} + \frac{P_k^*}{P_1^*} \geq 1$ então aceita-se x_k^* como o centro de grupo e continua;

Se não

Rejeita-se x_k^* e anula-se o potencial de x_k^*

Seleciona-se o dado com maior potencial como o novo x_k^* e faz-se o procedimento.

Neste algoritmo $\bar{\varepsilon}$ especifica um limiar para o potencial acima do qual, sem dúvida, aceitará o dado como centro de grupo; $\underline{\varepsilon}$ especifica um limiar abaixo do qual, sem dúvida, rejeitará o dado.

Considera-se normalmente $\bar{\varepsilon} = 0.5$ e $\underline{\varepsilon} = 0.15$. Se o potencial recair na região duvidosa, deve-se verificar se o dado garante uma boa compensação entre ter um potencial razoável e ser suficientemente distante dos centros de grupo existentes.

Dessa forma, o número de regras do sistema *fuzzy* é igual ao número de centros de grupos (x_k^*) determinados pelo método de agrupamento descrito. Pode-se concluir que esta metodologia de desenvolvimento de modelos *fuzzy* simplifica notavelmente o número de regras do sistema de inferência *fuzzy*. A

seguir (na seção 5.5) serão apresentados os modelos *fuzzy* dos respectivos casos de estudo.

5.3.2. DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DAS FUNÇÕES CONSEQÜENTES

Nesta seção, apresenta-se o método matemático dos mínimos quadrados enfocado para determinação dos parâmetros conseqüentes do modelo *fuzzy* funcional (Passino e Yurkovich, 1998). Considerando-se g como o processo que se deseja identificar, G um conjunto de dados proveniente do processo g e $f(x/\theta)$ o modelo *fuzzy* funcional o qual se deseja identificar, onde θ representa um vetor de parâmetros do modelo *fuzzy*. Considerando-se como base as equações 5.1 e 5.2, pode-se deduzir a equação 5.8 que representa o modelo *fuzzy* funcional, que é linear em relação aos parâmetros contidos em θ :

$$f(x/\theta) = \theta^T \xi(x) \quad (5.8)$$

onde

$$\xi_k(x) = \frac{\mu_k(x)}{\sum_{i=1}^R \mu_i(x)} \quad (5.9)$$

$$\xi(x) = [\xi_1(x), \dots, \xi_R(x), x_1 \xi_1(x), \dots, x_1 \xi_R(x), \dots, x_n \xi_1(x), \dots, x_n \xi_R(x)]^T \quad (5.10)$$

$$\theta = [a_{10} \ a_{20} \ \dots \ a_{R0} \ a_{11} \ a_{21} \ \dots \ a_{R1} \ \dots \ a_{1n} \ a_{2n} \ \dots \ a_{Rn}]^T \quad (5.11)$$

Considera-se que seja fornecido o conjunto de dados provenientes do processo (G):

$$Y(m) = [y^1, y^2, \dots, y^m]^T \quad (5.12)$$

como um vetor de dados da saída $m \times 1$.

Considerando-se a matriz de dimensão $n.R \times m$:

$$\Phi(m) = [\xi(x^1) \ \xi(x^2) \ \dots \ \xi(x^m)] \quad (5.13)$$

onde os vetores de dados $\xi(x^i)$ são determinados pela equação 5.10 .

Dessa forma, pode-se formalizar a seguinte equação:

$$\varepsilon_i = y^i - \theta^T \xi(x^i) \quad (5.14)$$

que representa erro entre os dados da planta (G) e o modelo *fuzzy* ($f(x/\theta)$).

Assim sendo, a equação 5.15 representa um vetor dos erros definidos pela equação 5.14:

$$E(m) = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_m]^T \quad (5.15)$$

Considera-se o critério de custo representado pela equação 5.16, que quantifica a qualidade da aproximação do modelo *fuzzy* com parâmetros θ para todos os dados.

$$V(\theta) = \frac{1}{2} E^T E \quad (5.16)$$

Dessa forma, o problema consiste em determinar θ para minimizar a função $V(\theta)$, dada pela equação 5.16. Sendo a função $V(\theta)$ convexa em θ , pode-se assegurar que um mínimo local seja um mínimo global.

Denotando-se $\hat{\theta}$ como o vetor θ que possibilita a minimização de V , pode-se deduzir a equação matricial 5.17 para o cálculo de $\hat{\theta}$:

$$\hat{\theta} = (\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T Y \quad (5.17)$$

Dessa forma, os parâmetros das funções conseqüentes do modelo *fuzzy* funcional, contidos em $\hat{\theta}$, podem ser calculados a partir de um conjunto de dados do processo (G).

5.3.3. INCORPORAÇÃO DE INFORMAÇÃO LINGÜÍSTICA

Em Passino e Yurkovich (1998) são sugeridas algumas abordagens de inclusão de informações lingüísticas (tais como: heurísticas de operação) ao modelo *fuzzy* obtido das técnicas de identificação, que são descritas sucintamente a seguir:

Seja o sistema *fuzzy* construído através das técnicas apresentadas anteriormente (a partir de dados numéricos) denotado por $f(x/\theta)$. Nesta sub-seção, é suposto que haja informação lingüística e que se possa construir um outro modelo *fuzzy* (f_L) baseado nestas informações lingüísticas. Existem muitas formas para combinar a informação lingüística contida em f_L com o modelo *fuzzy* $f(x/\theta)$. Uma alternativa para integrar as duas bases de regras é tratar a base combinada com uma base de regras simples. Uma outra solução seria realizar uma interpolação das saídas dos dois sistemas *fuzzy*. A seguir, explica-se como integrar os dois modelos *fuzzy* através da utilização de uma base de regras simples unificada:

Supondo-se que a informação lingüística seja descrita pelo sistema *fuzzy*:

$$f_L(x) = \frac{\sum_{i=1}^{R_L} b_i^L \mu_i^L(x)}{\sum_{i=1}^{R_L} \mu_i^L(x)} \quad (5.18)$$

em que

$$\mu_i^L(x) = \prod_{j=1}^n \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x_j - \bar{c}_j^i}{\sigma_j^i}\right)^2\right) \quad (5.19)$$

Este modelo *fuzzy* tem R_L regras, b_i^L 's são os centros das funções de pertinência de saída, \bar{c}_j^i 's são os centros das funções de pertinência de entrada, e σ_j^i são parâmetros relacionados ao espaçamento das funções de pertinência.

O sistema *fuzzy* combinado (f_C) pode ser definido por:

$$f_c(x) = \frac{\sum_{i=1}^R g_i \mu_i(x) + \sum_{i=1}^{R_L} b_i^L \mu_i^L(x)}{\sum_{i=1}^R \mu_i(x) + \sum_{i=1}^{R_L} \mu_i^L(x)} \quad (5.20)$$

Este sistema *fuzzy* é obtido pela concatenação das bases de regras dos dois sistemas *fuzzy*. A equação 5.20 provê uma descrição matemática de como isto pode ser realizado. Às vezes, pode ser muito benéfico incluir informação heurística através de uma escolha criteriosa de f_L . Na verdade, em alguns casos, pode ser a diferença entre o sucesso ou a falha dos métodos apresentados nas seções anteriores. A facilidade de incorporação de conhecimento lingüístico através de f_L é uma das vantagens do sistema *fuzzy* em relação à identificação convencional ou neural e métodos convencionais de estimação.

5.4. REPRESENTAÇÃO DO MODELO DINÂMICO FUZZY FUNCIONAL

Nesta tese, o enfoque do estudo é a identificação de modelos dinâmicos. O modelo dinâmico *fuzzy* funcional empregado nesta tese baseia-se no modelo *fuzzy* de Takagi e Sugeno (1985). Dessa forma, cada variável de saída é descrita matematicamente em função das entradas passadas mais a entrada presente (nu) e as saídas passadas (ny) do sistema; ou seja, a determinação da variável de saída do modelo baseia-se na evolução passada do sistema (Juditsky et al. 1995).

O modelo dinâmico *fuzzy* configurado por funções conseqüentes lineares pode ser apresentado genericamente da seguinte forma:

SE ($u(k)$ é $A_{1,1}$) **E**, ..., **E** ($u(k-nu+1)$ é $A_{nu,1}$) **E** ($y(k-1)$ é $B_{1,1}$) **E**, ..., **E** ($y(k-ny)$ é $B_{ny,1}$) **ENTÃO** $y_1(k+1) = a_{11}.u(k) + \dots + a_{1nu}.u(k-nu+1) + b_{11}.y(k) + \dots + b_{1ny}.y(k-ny+1) + c_1$

...

SE ($u(k)$ é $A_{1,i}$) **E**, ..., **E** ($u(k-nu+1)$ é $A_{nu,i}$) **E** ($y(k-1)$ é $B_{1,i}$) **E**, ..., **E** ($y(k-ny+1)$ é $B_{ny,i}$) **ENTÃO** $y_i(k+1) = a_{i,1}.u(k) + \dots + a_{i,nu}.u(k-nu+1) + b_{i,1}.y(k) + \dots + b_{i,ny}.y(k-ny+1) + c_i$

...

SE ($u(k)$ é $A_{1,R}$) **E**, ..., **E** ($u(k-nu+1)$ é $A_{nu,R}$) **E** ($y(k-1)$ é $B_{1,R}$) **E**, ..., **E** ($y(k-ny+1)$ é $B_{ny,R}$) **ENTÃO** $y_i(k+1) = a_{R,1}.u(k) + \dots + a_{R,nu}.u(k-nu+1) + b_{R,1}.y(k) + \dots + b_{R,ny}.y(k-ny+1) + c_R$

Ao passo que o modelo dinâmico *fuzzy* configurado por funções conseqüentes não lineares (funções exponenciais) pode ser apresentado genericamente da seguinte forma:

SE ($u(k)$ é $A_{1,1}$) **E**, ..., **E** ($u(k-nu+1)$ é $A_{nu,1}$) **E** ($y(k-1)$ é $B_{1,1}$) **E**, ..., **E** ($y(k-ny)$ é $B_{ny,1}$) **ENTÃO** $y_1(k+1) = a_{11}.exp(u(k)) + \dots + a_{1nu}.exp(u(k-nu+1)) + b_{11}.y(k) + \dots + b_{1ny}.y(k-ny+1) + c_1$

...

SE ($u(k)$ é $A_{1,i}$) **E**, ..., **E** ($u(k-nu+1)$ é $A_{nu,i}$) **E** ($y(k-1)$ é $B_{1,i}$) **E**, ..., **E** ($y(k-ny+1)$ é $B_{ny,i}$) **ENTÃO** $y_i(k+1) = a_{i,1}.exp(u(k)) + \dots + a_{i,nu}.exp(u(k-nu+1)) + b_{i,1}.y(k) + \dots + b_{i,ny}.y(k-ny+1) + c_i$

...

SE ($u(k)$ é $A_{1,R}$) **E**, ..., **E** ($u(k-nu+1)$ é $A_{nu,R}$) **E** ($y(k-1)$ é $B_{1,R}$) **E**, ..., **E** ($y(k-ny+1)$ é $B_{ny,R}$) **ENTÃO** $y_i(k+1) = a_{R,1}.exp(u(k)) + \dots + a_{R,nu}.exp(u(k-nu+1)) + b_{R,1}.y(k) + \dots + b_{R,ny}.y(k-ny+1) + c_R$

considerando-se que $i = 1, \dots, R$; $j = 1, \dots, nu$ e $k = 1, \dots, ny$, tem-se que $u(k)$ e $y(k)$ são a entrada e a saída, respectivamente, no instante k ; y_i a função conseqüente referente à i -ésima regra; $A_{j,i}$ e $B_{k,i}$ são os conjuntos *fuzzy* das premissas representados por funções de pertinência *gaussianas*; a_{ij} , b_{ik} e c_i são os parâmetros das funções conseqüentes. Obviamente, os parâmetros relativos à parte conseqüente dos dois modelos apresentarão diferenças.

Neste trabalho, para o reator de copolimerização, empregam-se modelos *fuzzy* funcionais com funções conseqüentes lineares e não lineares. Ao passo que para o sistema de policondensação, emprega-se o modelo *fuzzy* com funções

conseqüentes lineares. Para garantir o efeito integral do controle (Camacho e Bordons, 1998), consideram-se as entradas e as saídas do regressor na forma incremental (delta).

Os resultados de validação dos modelos são ilustrados através de figuras e quantificados através de um erro quadrático médio, dado pela equação 5.21, entre o modelo de predição (*fuzzy*) e a saída do processo:

$$erro = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^m (\bar{y}_k - y_k)^2}{m}} \quad (5.21)$$

sendo que k representa o instante considerado, m o número de instantes discretos considerados, \bar{y}_k a saída predita do modelo *fuzzy* no instante k e y_k a saída do processo no instante k .

5.5. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO EM MALHA ABERTA DO REATOR DE COPOLIMERIZAÇÃO

Para este caso de estudo, considera-se uma malha simples tomando-se o peso molecular ponderado médio como variável de saída (controlada) e a temperatura da jaqueta como variável de entrada (manipulada).

O mecanismo de manipulação da temperatura da jaqueta realiza-se pelo controle em configuração cascata, utilizando-se do controle da vazão de refrigerante, conforme ilustrado na Figura 5.1 (ver tabela de siglas):

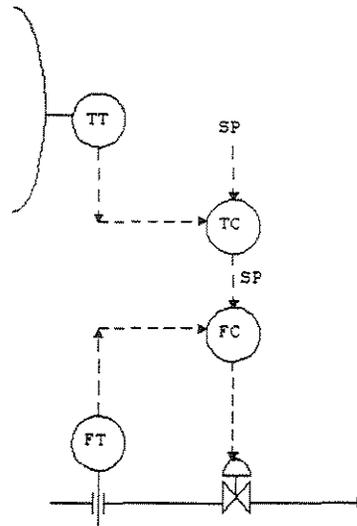


Figura 5.1. Mecanismo de manipulação da temperatura de jaqueta

As Figuras 5.2 e 5.3 apresentam os dados de identificação das variáveis de entrada e saída da malha simples considerada do reator de copolimerização. Pode-se notar que os dados de treinamento e teste foram obtidos para condições diferentes de operação; sendo considerado um tempo de amostragem igual a 0,25 horas. Esses dados de identificação podem ser divididos em dados de treinamento e teste, conforme mostrados nas respectivas figuras. Os dados de treinamento são utilizados para a determinação dos parâmetros do modelo *fuzzy*, ao passo que os dados de testes, para a validação do modelo *fuzzy*. Esses mesmos dados foram utilizados para o treinamento e teste das diferentes versões de modelo *fuzzy* (funções conseqüentes lineares e não lineares).

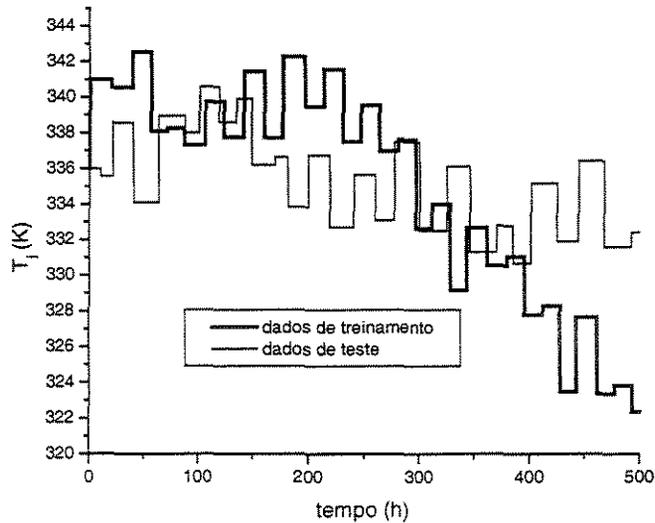


Figura 5.2. Dados de identificação da variável de entrada (Temperatura da Jaqueta, T_j).

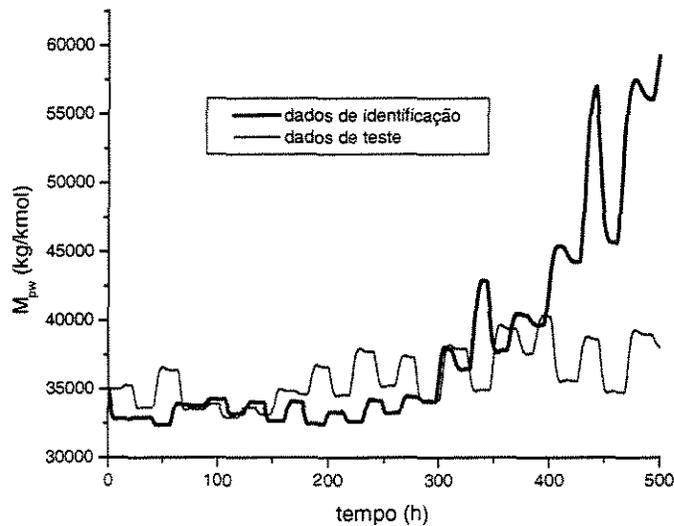


Figura 5.3. Dados de identificação da variável de saída (Peso molecular Ponderado Médio, M_{pw}).

As tabelas 5.1 e 5.2 mostram os parâmetros dos modelos *fuzzy* com funções conseqüentes lineares e não lineares, respectivamente. Estes parâmetros foram obtidos por meio de algoritmos baseados nos métodos de agrupamento subtrativo e mínimos quadrados. O modelo *fuzzy* é formado por três regras e

consideram-se quatro entradas e uma saída passadas (ou seja, $R=3$, $n_u=4$ e $n_y=1$). Estes parâmetros do modelo *fuzzy* foram obtidos através de simulações para a melhor configuração representativa do modelo *fuzzy* em relação aos dados de identificação.

Tabela 5.1. Parâmetros do modelo *fuzzy* com funções conseqüentes lineares para o processo de copolimerização

Parte premissa – funções de pertinência gaussiana					
Regra 1		Regra 2		Regra 3	
Centro	Sigma	Centro	Sigma	Centro	Sigma
$\Delta u(k), \Delta u(k-1), \Delta u(k-2), \Delta u(k-3)$ (iguais para todas as entradas)					
0	$2,52 \cdot 10^{-2}$	0	$2,52 \cdot 10^{-2}$	0	$2,52 \cdot 10^{-2}$
$\Delta y(k-1)$					
$7,33 \cdot 10^{-6}$	$9,98 \cdot 10^{-4}$	$1,02 \cdot 10^{-3}$	$9,98 \cdot 10^{-4}$	$-9,88 \cdot 10^{-4}$	$9,98 \cdot 10^{-4}$
Parte conseqüente – funções lineares					
i	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	a_{i4}	b_{i1}
Regra $i=1$	$1,17 \cdot 10^{-1}$	$-5,4 \cdot 10^{-3}$	$-1,59 \cdot 10^{-2}$	$-6,43 \cdot 10^{-3}$	$8,52 \cdot 10^{-1}$
Regra $i=2$	$-9,50 \cdot 10^{-2}$	$-4,12 \cdot 10^{-4}$	$1,49 \cdot 10^{-3}$	$6,11 \cdot 10^{-4}$	1,0
Regra $i=3$	$-1,14 \cdot 10^{-1}$	$-6,48 \cdot 10^{-3}$	$4,57 \cdot 10^{-4}$	$-7,59 \cdot 10^{-4}$	$9,94 \cdot 10^{-1}$

Tabela 5.2. Parâmetros do modelo *fuzzy* com funções conseqüentes não lineares para o processo de copolimerização

Parte premissa – funções de pertinência gaussiana					
Regra 1		Regra 2		Regra 3	
Centro	Sigma	Centro	Sigma	Centro	Sigma
$\Delta u(k), \Delta u(k-1), \Delta u(k-2), \Delta u(k-3)$ (iguais para todas as entradas)					
0	$2,52 \cdot 10^{-2}$	0	$2,52 \cdot 10^{-2}$	0	$2,52 \cdot 10^{-2}$
$\Delta y(k-1)$					
$7,33 \cdot 10^{-6}$	$9,98 \cdot 10^{-4}$	$1,02 \cdot 10^{-3}$	$9,98 \cdot 10^{-4}$	$-9,88 \cdot 10^{-4}$	$9,98 \cdot 10^{-4}$
Parte conseqüente – funções não lineares					
i	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	a_{i4}	b_{i1}
Regra $i = 1$	$-4,38 \cdot 10^{-2}$	$2,18 \cdot 10^{-2}$	$6,19 \cdot 10^{-3}$	$1,58 \cdot 10^{-2}$	1,22
Regra $i = 2$	$3,45 \cdot 10^{-2}$	$-1,95 \cdot 10^{-2}$	$-9,6 \cdot 10^{-3}$	$-5,56 \cdot 10^{-3}$	1,04
Regra $i = 3$	$2,59 \cdot 10^{-2}$	$-1,61 \cdot 10^{-2}$	$-4,56 \cdot 10^{-3}$	$-4,91 \cdot 10^{-3}$	1,04

Dessa forma, o modelo *fuzzy* funcional tomando-se funções conseqüentes lineares do processo de copolimerização é assim descrito:

SE ($\Delta u(k)$ é $A_{1,1}$) **E** ($\Delta u(k-1)$ é $A_{2,1}$) **E** ($\Delta u(k-2)$ é $A_{3,1}$) **E** ($\Delta u(k-3)$ é $A_{4,1}$) **E** ($\Delta y(k)$ é B_1) **ENTÃO** $y_1(k+1) = a_{11} \cdot \Delta u(k) + a_{12} \cdot \Delta u(k-1) + a_{13} \cdot \Delta u(k-2) + a_{14} \cdot \Delta u(k-3) + b_{11} \cdot \Delta y(k)$

SE ($\Delta u(k)$ é $A_{1,2}$) **E** ($\Delta u(k-1)$ é $A_{2,2}$) **E** ($\Delta u(k-2)$ é $A_{3,2}$) **E** ($\Delta u(k-3)$ é $A_{4,2}$) **E** ($\Delta y(k)$ é B_2) **ENTÃO** $y_2(k+1) = a_{21} \cdot \Delta u(k) + a_{22} \cdot \Delta u(k-1) + a_{23} \cdot \Delta u(k-2) + a_{24} \cdot \Delta u(k-3) + b_{21} \cdot \Delta y(k)$

SE ($\Delta u(k)$ é $A_{1,3}$) **E** ($\Delta u(k-1)$ é $A_{2,3}$) **E** ($\Delta u(k-2)$ é $A_{3,3}$) **E** ($\Delta u(k-3)$ é $A_{4,3}$) **E** ($\Delta y(k)$ é B_3) **ENTÃO** $y_3(k+1) = a_{31} \cdot \Delta u(k) + a_{32} \cdot \Delta u(k-1) + a_{33} \cdot \Delta u(k-2) + a_{34} \cdot \Delta u(k-3) + b_{31} \cdot \Delta y(k)$

sendo que as funções de pertinência A_{ij} e B_j ($i = 1, \dots, 4$ e $j = 1, 2, 3$) são representadas por funções *gaussianas* com os respectivos parâmetros apresentados na tabela 5.1, bem como os outros parâmetros.

Já o modelo *fuzzy* funcional tomando-se funções conseqüentes não lineares do processo de copolimerização é assim descrito:

$$\text{SE } (\Delta u(k) \text{ é } A_{1,1}) \text{ E } (\Delta u(k-1) \text{ é } A_{2,1}) \text{ E } (\Delta u(k-2) \text{ é } A_{3,1}) \text{ E } (\Delta u(k-3) \text{ é } A_{4,1}) \text{ E } (\Delta y(k) \text{ é } B_1) \text{ ENTÃO } y_1(k+1) = a_{11} \cdot \exp(\Delta u(k)) + a_{12} \cdot \exp(\Delta u(k-1)) + a_{13} \cdot \exp(\Delta u(k-2)) + a_{14} \cdot \exp(\Delta u(k-3)) + b_{11} \cdot \Delta y(k)$$

$$\text{SE } (\Delta u(k) \text{ é } A_{1,2}) \text{ E } (\Delta u(k-1) \text{ é } A_{2,2}) \text{ E } (\Delta u(k-2) \text{ é } A_{3,2}) \text{ E } (\Delta u(k-3) \text{ é } A_{4,2}) \text{ E } (\Delta y(k) \text{ é } B_2) \text{ ENTÃO } y_2(k+1) = a_{21} \cdot \exp(\Delta u(k)) + a_{22} \cdot \exp(\Delta u(k-1)) + a_{23} \cdot \exp(\Delta u(k-2)) + a_{24} \cdot \exp(\Delta u(k-3)) + b_{21} \cdot \exp(\Delta y(k))$$

$$\text{SE } (\Delta u(k) \text{ é } A_{1,3}) \text{ E } (\Delta u(k-1) \text{ é } A_{2,3}) \text{ E } (\Delta u(k-2) \text{ é } A_{3,3}) \text{ E } (\Delta u(k-3) \text{ é } A_{4,3}) \text{ E } (\Delta y(k) \text{ é } B_3) \text{ ENTÃO } y_3(k+1) = a_{31} \cdot \exp(\Delta u(k)) + a_{32} \cdot \exp(\Delta u(k-1)) + a_{33} \cdot \exp(\Delta u(k-2)) + a_{34} \cdot \exp(\Delta u(k-3)) + b_{31} \cdot \Delta y(k)$$

sendo que as funções de pertinência A_{ij} e B_j ($i = 1, \dots, 4$ e $j = 1, 2, 3$) são representadas por funções *gaussianas* com os respectivos parâmetros apresentados na tabela 5.2, bem como os outros parâmetros.

As Figuras 5.4 e 5.5 apresentam os resultados de validação do modelo *fuzzy* com as funções conseqüentes lineares e não lineares, respectivamente, para o conjunto de dados de teste. Nesta formulação, a saída do modelo é realimentada pela saída da planta a cada cinco passos (ou seja, o teste é realizado cinco passos para frente); este valor (cinco) foi considerado pois é igual ao horizonte de predição do controlador preditivo. Nota-se que o modelo apresenta uma excelente capacidade de predição da saída do processo. O erro quadrático médio para os dois modelos foram iguais a 37,69 e 57,10 kg/kmol respectivamente; considerando-se a ordem de grandeza da saída, pode-se afirmar que esses valores de erro são razoavelmente reduzidos. No entanto, o erro do modelo com funções conseqüentes lineares foi menor ao do modelo com funções conseqüentes não lineares, ao passo que, como será apresentado no capítulo 7, o desempenho do controlador preditivo usando o modelo *fuzzy* com funções conseqüentes não lineares foi superior ao preditivo com modelo *fuzzy* de funções conseqüentes lineares.

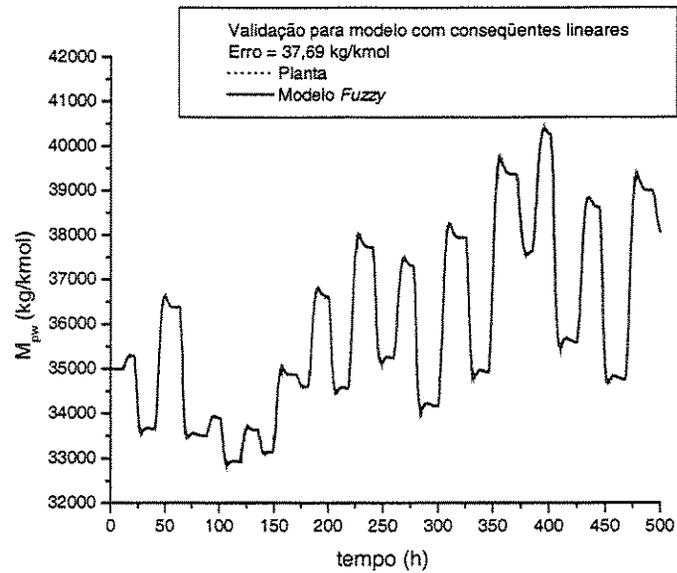


Figura 5.4. Validação do modelo *fuzzy* para o conjunto de dados de teste – modelo *fuzzy* com funções consequentes lineares.

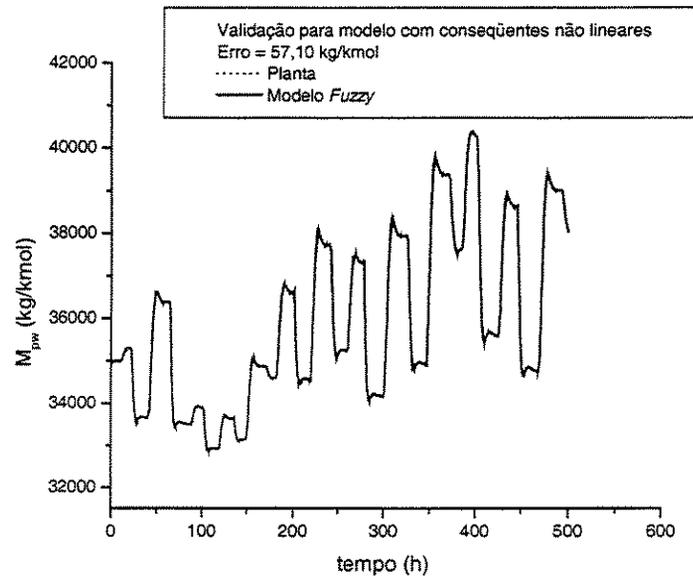


Figura 5.5. Validação do modelo *fuzzy* para o conjunto de dados de teste – modelo *fuzzy* com funções consequentes não lineares.

5.6. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO EM MALHA ABERTA DO PROCESSO DE POLICONDENSAÇÃO

Apresentam-se a seguir alguns resultados em malha aberta do processo de policondensação. Na malha simples em estudo deste processo, é considerado o peso molecular do *nylon-6,6* como variável de saída (controlada) e a vazão de entrada de sal de *nylon-6,6* do sistema como variável de entrada (manipulada). Este processo é caracterizado pela presença de dinâmicas não lineares.

Os resultados das Figuras 5.6 e 5.7 mostram dados de entrada e saída, respectivamente, de treinamento e teste, ao longo do tempo, para a determinação do modelo dinâmico do sistema. Pode-se notar que os dados de treinamento e teste foram obtidos para condições diferentes de operação. O tempo de amostragem considerado é igual a 0,2 horas, buscando atender às condições de taxa de amostragem (Astrom e Wittermak, 1997).

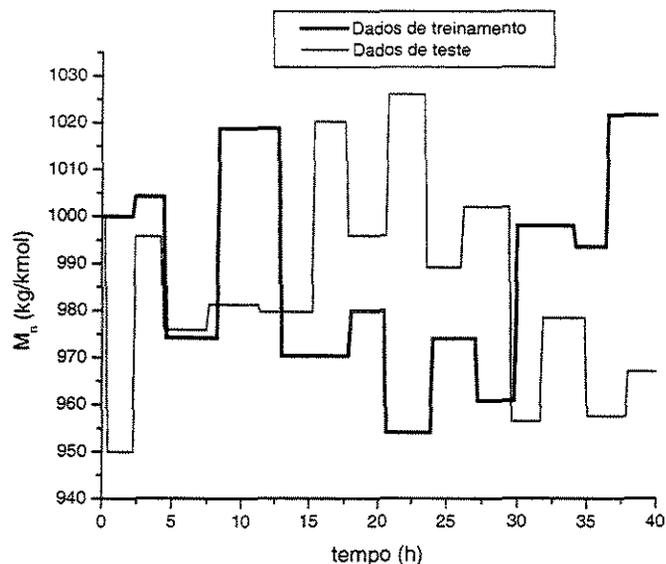


Figura 5.6. Dados de treinamento e teste da variável de entrada (vazão de massa da fase líquida na entrada do reator, W_L).

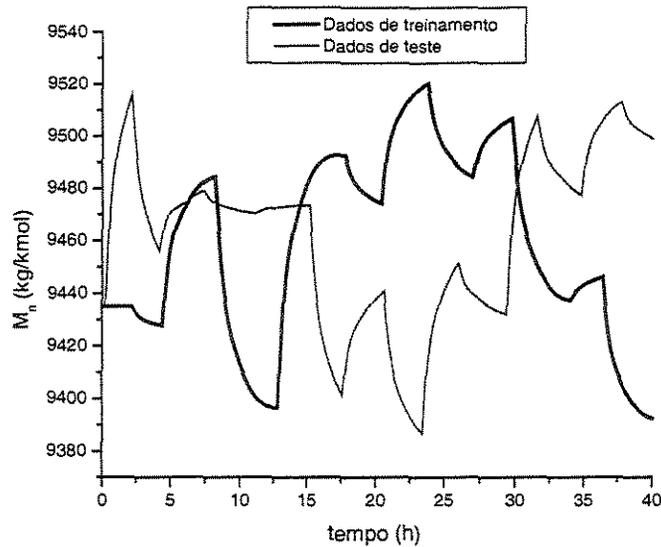


Figura 5.7. Dados de treinamento e teste da variável de saída (peso molecular do *nylon* na saída do reator, M_n).

A tabela 5.3 apresenta os parâmetros do modelo dinâmico *fuzzy* para o sistema de policondensação. O modelo *fuzzy* é formado por três agrupamentos (ou regras) determinados pelo método de agrupamento subtrativo. Considera-se no modelo um valor passado de entrada e saída. Esta configuração paramétrica foi determinada através de simulações de forma a maximizar o desempenho representativo do modelo *fuzzy* em relação aos dados de identificação do processo.

Tabela 5.3. Parâmetros do modelo *fuzzy* para o processo de policondensação

Parte premissa – funções de pertinência gaussiana					
Regra 1		Regra 2		Regra 3	
Centro	Sigma	centro	Sigma	centro	Sigma
Referente à entrada					
0	$2,05 \cdot 10^{-2}$	0	$2,05 \cdot 10^{-2}$	0	$2,05 \cdot 10^{-2}$
Referente à saída					
$-8,82 \cdot 10^{-4}$	$8,50 \cdot 10^{-4}$	$-4,07 \cdot 10^{-5}$	$8,50 \cdot 10^{-4}$	$8,35 \cdot 10^{-4}$	$8,50 \cdot 10^{-4}$
Parte conseqüente – funções lineares					
a_{11}	b_{11}	a_{21}	b_{21}	a_{31}	b_{31}
$-6,59 \cdot 10^{-3}$	$6,83 \cdot 10^{-1}$	$6,45 \cdot 10^{-3}$	$9,23 \cdot 10^{-1}$	$-7,13 \cdot 10^{-3}$	$6,66 \cdot 10^{-1}$

Dessa forma, o modelo *fuzzy* funcional do processo de policondensação é assim descrito:

$$SE (\Delta u(k) \text{ é } A_1) \ E (\Delta y(k) \text{ é } B_1) \ \text{ENTÃO } y_1(k+1) = a_{11} \cdot \Delta u(k) + b_{11} \cdot \Delta y(k)$$

$$SE (\Delta u(k) \text{ é } A_2) \ E (\Delta y(k) \text{ é } B_2) \ \text{ENTÃO } y_2(k+1) = a_{21} \cdot \Delta u(k) + b_{21} \cdot \Delta y(k)$$

$$SE (\Delta u(k) \text{ é } A_3) \ E (\Delta y(k) \text{ é } B_3) \ \text{ENTÃO } y_3(k+1) = a_{31} \cdot \Delta u(k) + b_{31} \cdot \Delta y(k)$$

sendo que as funções de pertinência A_j e B_j ($j = 1, 2, 3$) são representadas por funções *gaussianas* com os respectivos parâmetros apresentados na tabela 5.3, bem como os outros parâmetros do modelo.

A Figura 5.8 mostra resultados de validação desse modelo *fuzzy* funcional para o caso do processo de policondensação, para o conjunto de dados de teste, apresentado acima. Neste teste, o modelo é realimentado pela saída da planta a cada vinte passos (ou seja, o teste é realizado vinte passos para frente). Este valor foi considerado pelo mesmo motivo do modelo do caso do reator de copolimerização. Nota-se que o modelo apresentou uma excelente capacidade de

predição da variável de saída com erro médio quadrático igual a 27,07 kg/kmol, conforme pode ser visualizado na Figura 5.8.

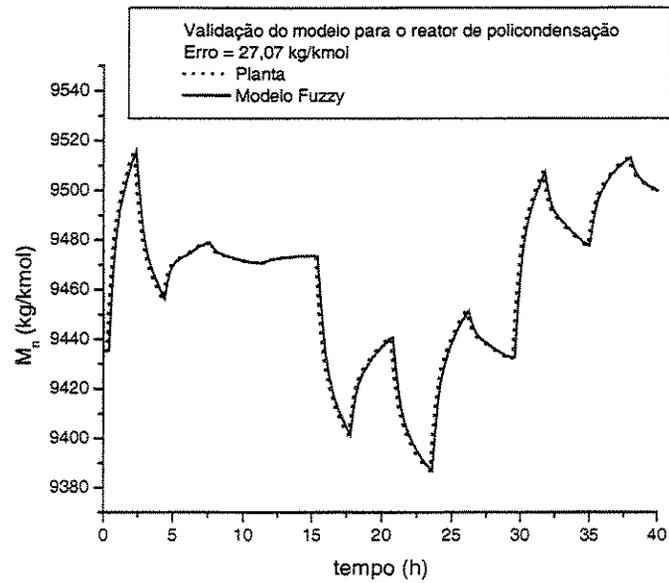


Figura 5.8. Validação do modelo *fuzzy* funcional para o sistema de policondensação.

5.7. CONCLUSÕES E JUSTIFICATIVAS

Neste capítulo, foram apresentados os conceitos empregados no desenvolvimento de modelos *fuzzy* funcionais, assim como estes modelos foram construídos. Estes fundamentos formam a base de desenvolvimento de modelos *fuzzy* a partir de um conjunto de dados provenientes do processo. Metodologias de tratamento de dados para prover modelos representativos do processo é de suma importância industrial, pois estes dados normalmente estão disponíveis e precisam ser adequadamente tratados para se obter uma representação válida do processo. No entanto, é fundamental que exista uma metodologia correta de determinação de dados, principalmente no tocante ao desenvolvimento de modelos dinâmicos para controle. Uma grande vantagem da teoria de lógica *fuzzy* é a possibilidade de integração de informações de dados do processo com informações operacionais do processo, através de regras heurísticas. Os modelos dinâmicos *fuzzy* para os casos de estudo foram desenvolvidos e foram apresentados os parâmetros dos mesmos, bem como os resultados dos respectivos casos de estudo abordados. Os modelos desenvolvidos neste capítulo serão utilizados como modelos internos para o controlador preditivo não linear proposto no capítulo 6 e os resultados do desempenho deste controlador são apresentados no capítulo 7.

CAPÍTULO 6

CONTROLE PREDITIVO BASEADO EM MODELO

6.1. INTRODUÇÃO

O termo controle preditivo baseado em modelo (MBPC¹) descreve uma classe de algoritmos de controle que controla o comportamento futuro de uma planta através do uso de um modelo explícito do processo (Qin e Badgwell 1997). A cada intervalo de tempo de ação de controle, o algoritmo de controle preditivo calcula uma seqüência em malha aberta de ajuste da variável manipulada para otimizar o comportamento futuro da planta. O primeiro valor da seqüência otimizada é aplicado na planta, e a otimização completa é repetida nos intervalos de controle subseqüentes. Este é o princípio conhecido como controle de horizonte deslizante (*receding horizon control*), que foi originalmente proposto por Propoi (1963). As técnicas de controle preditivo baseado em modelo foram originalmente desenvolvidas para aplicações de controle de plantas de refinarias de petróleo, mas podem ser atualmente encontradas em uma larga variedade de indústrias, incluindo indústrias químicas, alimentícias, automobilísticas, aeroespaciais, metalúrgicas e de papel.

O sucesso das técnicas de controle preditivo no controle de processos pode ser atribuído a três importantes fatores: primeiro, a incorporação de um modelo explícito do processo dentro do cálculo de controle: isto permite que o controlador, em princípio, trate diretamente com todos os aspectos significativos das dinâmicas do processo. Segundo, a consideração do comportamento da planta num horizonte futuro de tempo: isto significa que os efeitos de distúrbios e imprecisões de modelagem sejam removidos, permitindo que o controlador direcione a planta para o comportamento mais próximo do desejado. Finalmente, a consideração de restrições sobre as variáveis do processo diretamente no cálculo de controle. Isto significa que violações nas restrições são pouco prováveis, resultando em um controle rigoroso no estado estacionário ótimo do processo. A

inclusão de restrições na formulação do projeto do controlador também distinguem as técnicas de controle preditivo de outras classes de controle.

Embora processos industriais sejam inerentemente não lineares, a grande maioria de aplicações de controle preditivo são baseadas em modelos dinâmicos lineares estruturados (CARIMA) e não estruturados (modelos de resposta ao impulso ou degrau). Existem alguns motivos para isso: modelos empíricos lineares podem ser obtidos, de forma direta, de dados de identificação do processo. Em adição, grande parte das aplicações tem se realizado em refinarias, onde o objetivo é principalmente manter o processo em um estado estacionário desejado (controle regulatório) do que mudar rapidamente o processo de uma condição operacional para outra (controle servo). Um modelo linear identificado é suficientemente exato nas proximidades de um único ponto de operação para tais aplicações, especialmente se medições de alta qualidade são disponíveis. Finalmente, usando modelos lineares e uma função objetivo quadrática, a determinação da seqüência otimizada do controlador preditivo é um problema convexo, para o qual existem algoritmos de soluções ótimas. Isto é importante porque o algoritmo de solução precisa convergir confiavelmente para um ponto operacional otimizado em um tempo relativamente curto para ser útil em aplicações industriais. Por essas razões, em muitos casos um modelo linear proverá a maioria dos benefícios possíveis com a estratégia de controle preditivo.

Contudo, existem casos onde os efeitos de não-linearidade são significativos o suficiente para justificar o uso de técnicas de controle preditivo não linear. Estes incluem ao menos duas grandes categorias de aplicações:

- Problemas de controle regulatório em que o processo é altamente não linear e sujeitos a largos distúrbios significativos e freqüentes;
- Problemas de controle servo em que os pontos de operação mudam freqüentemente e estendem-se sobre larga faixa das dinâmicas de processo não lineares;

Os primeiros artigos de controle preditivo descrevem as formas de inserir o comportamento não linear do processo ainda usando um modelo dinâmico linear

no algoritmo de controle. Richalet et al. (1978), por exemplo, descreve como o comportamento não linear devido a mudanças de cargas em uma aplicação de planta de potência de vapor foi tratado pela execução do algoritmo de controle IDCOM (*Identification and Command*) em uma frequência variável. Prett e Gillette (1980) descrevem a aplicação do algoritmo DMC (*Dynamic Matrix Control*) para controlar uma unidade de craqueamento catalítico fluidizada. Ganhos de desempenho de modelo foram obtidos em cada iteração de controle pela perturbação de um modelo de estado estacionário não-linear.

Segundo Qin e Badgwell (1997), a maioria das aplicações de controle preditivo linear estão alocadas em plantas de petroquímicas e refinarias. O controle preditivo não linear pode ser mais encontrado em processos de indústria de gás, papel e polímeros, sendo este último, o caso abordado nesta tese.

6.2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS DE CONTROLE PREDITIVO (MBPC)

O projeto de controladores preditivos pode ser dividido nas seguintes etapas principais:

- i) Modelagem do processo. Este modelo é utilizado para prever o comportamento da variável controlada num horizonte de predição.
- ii) Definição de uma função objetivo. O desempenho do controlador preditivo em malha fechada é especificado através de uma função objetivo que considera a saída predita, o sinal de referência e o esforço de controle.
- iii) Otimização da função objetivo. Esta função é otimizada em relação a uma seqüência de futuros sinais de controle.
- iv) Aplicação do sinal de controle. Somente o primeiro sinal de controle resultante da otimização da função objetivo é aplicado ao processo e, no instante seguinte de amostragem, o procedimento é repetido (controle de horizonte deslizante).

A figura 6.1 ilustra um esquema genérico para controladores preditivos (MBPC). As diferenças dos controladores preditivos estão normalmente no modelo (preditor) e na função objetivo empregada na etapa de otimização.

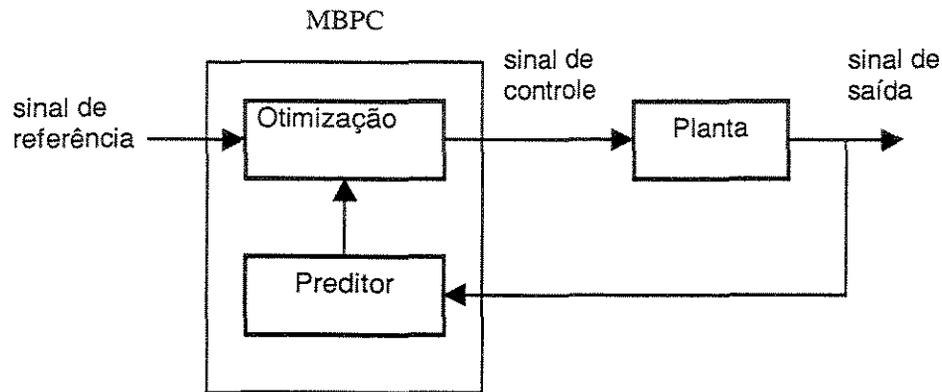


Figura 6.1. Esquema genérico de controladores preditivos (MBPC)

Os controladores preditivos podem ser divididos em lineares e não lineares, conforme o modelo utilizado como preditor. A seguir são apresentadas as bases teóricas de desenvolvimento de controle preditivo baseado em um modelo dinâmico descrito em função de valores de entrada e saída passados.

Considere que a planta a ser controlada seja descrita pelo seguinte modelo genérico (φ) (equação 6.1):

$$y(k+j/k) = \varphi[u(k+j), \dots, (u(k+j-nu+1)), y(k+j-1/k), \dots, y(k+j-ny/k)] \quad (6.1)$$

sendo k o instante presente, nu e ny os números dos valores passados da entrada e saída respectivamente, j o número de intervalos de tempo futuros, $u(k+j)$ a entrada no instante j passos à frente do instante k e $y(k+j/k)$ a predição da saída em j passos a frente no instante k (calculada utilizando-se do modelo (φ)).

A lei de controle dos MBPC é obtida através da minimização de uma função objetivo que, normalmente, é definida em função do erro entre a predição da saída e a referência num horizonte de tempo futuro (nr - horizonte de predição) e dos esforços de controle do presente a um possível horizonte de tempo futuro, sendo que somente a ação de controle presente é aplicada (controle de horizonte

deslizante). Este horizonte de tempo considerado nas ações de controle está relacionado ao horizonte de controle (nl). Dessa forma, a função objetivo é descrita pela equação 6.2:

$$J_{MPC} = \sum_{j=1}^{nr} (y(k+j/k) - w(k+j))^2 + \sum_{j=1}^{nl} \lambda \Delta u^2(k+j-1/k) \quad (6.2)$$

sendo que:

nr é o horizonte de predição da saída

nl é o horizonte de controle

λ é o fator de supressão do sinal de controle

$y(k+j/k)$ é a predição da saída j passos a frente, calculada em k .

$w(k)$ é o sinal de referência;

$\Delta(q^{-1}) = 1 - q^{-1}$, sendo q^{-1} o operador atraso;

$\Delta u(k+j/k)$ é a variação² do sinal de controle no instante $k+j$, calculada em k ;

Assim a formulação do problema de otimização pode ser apresentada através do seguinte equacionamento (6.3):

$$\begin{aligned} u(k) = & \min J_{MPC} \\ & \Delta u(k/k), \Delta u(k+1/k), \dots, \Delta u(k+nl-1/k) \\ \text{s.a. } & \Delta u(k+j/k) = 0 \quad \forall j \geq nl \\ & u_{min} \leq u(k+j-1/k) \leq u_{max} \\ & \Delta u_{min} \leq \Delta u(k+j-1/k) \leq \Delta u_{max} \\ & y_{min} \leq y(k+j/k) \leq y_{max} \end{aligned} \quad (6.3)$$

em que $u(k) = u(k-1) + \Delta u(k/k)$

A rotina de otimização utilizada para minimizar a função objetivo do controle preditivo foi a NCONF da biblioteca IMSL do FORTRAN. Esta rotina baseia-se no algoritmo de programação quadrática sucessiva (SQP) e cálculo de gradiente por diferenças finitas.

O efeito de realimentação (*feedback*) no controle preditivo pode ser entendido do ponto de vista da estrutura de controle de modelo interno (IMC). Considera-se uma correção degrau sobre a entrada do controlador – erro entre as saídas da planta e do modelo - conforme ilustrado na figura 6.2:

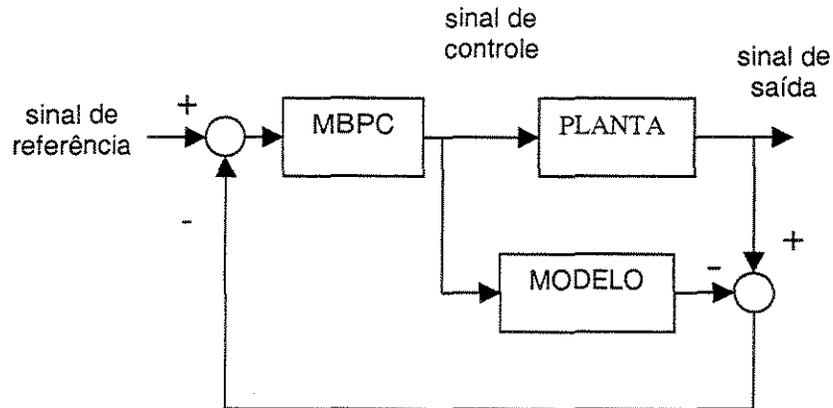


Figura 6.2. Estrutura de controle de modelo interno (IMC)

Então essa correção é constante no horizonte de predição e pode ser equacionada por um termo parcial:

$$b_k = y_k^m - y(k+1/k) \tag{6.4}$$

em que y_k^m é o valor medido da saída da planta no instante k .

Assim, a entrada do controlador preditivo (MBPC) é igual à trajetória de referência subtraída do termo b_k parcial:

$$r_{k+j} = r_{k+j} - b_k \tag{6.5}$$

O fato de se resolver um problema de controle de malha fechada através de uma seqüência de otimizações em malha aberta já era conhecido por meio da teoria de controle ótimo. A solução de controle preditivo não-linear pode ser vista como uma forma de tornar um cálculo de malha fechada intratável em uma seqüência de cálculos de malha aberta tratáveis (Qin e Badgwell 1997).

Em princípio, o método de controle preditivo não linear é limitado àqueles problemas cuja solução ótima global para a otimização dinâmica possa ser encontrada em um período. Com um modelo linear e um objetivo quadrático o problema de otimização resultante toma forma de um programa quadrático convexo estruturado, para o qual existe uma solução ótima única. Diversos algoritmos de solução padrão confiáveis existem para este problema. A introdução de um modelo não linear leva, de uma forma geral, a uma perda na convexidade. Isto significa que é muito mais difícil encontrar uma solução, e uma vez achada, não se pode garantir que seja ótima global. Para ambos casos, esforços de pesquisa recentes são direcionados a explorar a estrutura para melhorar a eficiência e a confiabilidade de códigos de solução. Um outro problema relacionado é em relação à estabilidade, pois sabe-se da teoria de controle ótimo que uma vez o problema de otimização solucionado, não existe garantia de estabilidade, mesmo quando o modelo representa perfeitamente o processo (Kalman, 1960).

A seguir, apresenta-se o controle de matriz dinâmica (DMC), bem como um algoritmo do DMC implementado neste trabalho. Este controlador é utilizado como controlador preditivo linear nas análises de resultados realizadas no capítulo seguinte.

6.3. CONTROLE DE MATRIZ DINÂMICA (*DYNAMIC MATRIX CONTROL* DMC)

O algoritmo MBPC denominado Controlador de Matriz Dinâmica (*Dynamic Matrix Controller* – DMC) (Cutler e Ramaker, 1979, 1983) é baseado na otimização de uma função objetivo quadrática, como mostrada pela equação 6.6:

$$J_{DMC} = \sum_{j=1}^{nr} (y(k+j/k) - w(k+j))^2 + \sum_{j=1}^{nl} \lambda \Delta u^2(k+j-1/k) \quad (6.6)$$

As variáveis são denotadas conforme em J_{MPC} , definido pela equação 6.2.

A modelagem é realizada utilizando-se da resposta ao impulso do processo, truncado em ns (horizonte de modelo) coeficientes, dada por:

$$y(k) = \sum_{i=1}^{ns} h_i q^{-i} u(k) \quad (6.7)$$

sendo que:

$y(k)$ é o sinal de saída;

$u(k)$ é o sinal de controle;

$h_i, i = 1, \dots, ns$; são os i -ésimos coeficientes da resposta ao impulso.

A partir do modelo (6.7), tem-se o modelo de resposta ao degrau dado pela equação 6.8:

$$y(k) = \sum_{i=1}^{ns-1} g_i q^{-i} \Delta u(k) + g_{ns} q^{-ns} u(k) \quad (6.8)$$

em que $g_i, i = 1, \dots, ns$ são os i -ésimos coeficientes da resposta ao degrau do processo. Este modelo é utilizado no DMC para o cálculo das previsões da saída $y(k+j/k)$ no horizonte de predição especificado em Garcia et. al. 1989.

Utilizando a predição da saída, o sinal de controle é obtido minimizando a função objetivo (6.6) em relação a $\Delta u(k/k), \Delta u(k+1/k), \dots, \Delta u(k+nl-1/k)$, isto é:

$$u(k) = \min_{\Delta u(k/k), \Delta u(k+1/k), \dots, \Delta u(k+nl-1/k)} J_{DMC} \quad (6.9)$$

sujeito a

$$\Delta u(k+j/k) = 0 \text{ para todo } j \geq nl$$

$$u_{min} \leq u(k+j-1/k) \leq u_{max}$$

$$\Delta u_{min} \leq \Delta u(k+j-1/k) \leq \Delta u_{max}$$

$$y_{min} \leq y(k+j/k) \leq y_{max}$$

sendo que

$$u(k) = u(k-1) + \Delta u(k/k)$$

O algoritmo DMC tem sido utilizado com sucesso no controle de processos industriais, sobretudo na área de processos químicos. A seguir, apresenta-se um algoritmo específico de controle de matriz dinâmica:

6.3.1. ALGORITMO DE CONTROLE DE MATRIZ DINÂMICA

O controle de matriz dinâmica (DMC) utiliza-se de um modelo interno de predição em forma de uma matriz dinâmica formada a partir dos coeficientes da resposta ao degrau. Ou seja, este modelo é obtido da coleta de coeficientes da resposta de uma saída a uma mudança degrau de uma dada entrada do sistema. Assim a matriz dinâmica contém informações de comportamento dinâmico de variáveis de saída e entrada.

A matriz dinâmica permite calcular o efeito das ações de controle futuras sobre o vetor de predição da variável controlada. Assim sendo, a equação matricial 6.10 representa o cálculo do vetor de predição no DMC segundo Cutler (1983):

$$\begin{bmatrix} y_{1,k+N_1}^p \\ \vdots \\ y_{nc,k+N_1}^p \\ \vdots \\ y_{1,k+N_2}^p \\ \vdots \\ y_{nc,k+N_2}^p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1,1}^1 & \dots & a_{nm,1}^1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{1,nc}^1 & \dots & a_{nm,nc}^1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{1,1}^{nr} & \dots & a_{nm,1}^{nr} & a_{1,1}^{nr-1} & \dots & a_{nm,1}^{nr-1} & \dots & a_{1,1}^{nr-nl+1} & \dots & a_{nm,1}^{nr-nl+1} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{1,nc}^{nr} & \dots & a_{nm,nc}^{nr} & a_{1,nc}^{nr-1} & \dots & a_{nm,nc}^{nr-1} & \dots & a_{1,nc}^{nr-nl+1} & \dots & a_{nm,nc}^{nr-nl+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u_{1,k} \\ \vdots \\ \Delta u_{nm,k} \\ \vdots \\ \Delta u_{1,k+nl-1} \\ \vdots \\ \Delta u_{nm,k+nl-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_{1,k+1}^{pa} \\ \vdots \\ y_{nc,k+1}^{pa} \\ \vdots \\ y_{1,k+nr}^{pa} \\ \vdots \\ y_{nc,k+nr}^{pa} \end{bmatrix} \quad (6.10)$$

Nesta equação, $y_{i,k+n}^p$ é o valor predito da variável controlada i ($i = 1, 2, \dots, n_c$) no tempo discreto $k+n$, em que k é o instante de amostragem presente e n varia de N_1 até N_2 , sendo:

$$nr = N_2 - N_1 + 1 \quad (6.11)$$

O elemento da matriz $a_{i,j}^k$ corresponde ao k -ésimo coeficiente da resposta degrau da j -ésima variável controlada a i -ésima variável manipulada.

$\Delta u_{i,k+n}$ é a mudança da i -ésima variável manipulada no instante de amostragem $k+n$. As constantes n_c e n_m correspondem ao número de variáveis controladas e manipuladas, respectivamente. Os parâmetros n_r e n_l são os horizontes de predição e controle, respectivamente.

A equação 6.12 é uma equação matricial resumida da equação 6.10:

$$\underline{Y}^p = \underline{A} \underline{\Delta u} + \underline{Y}^{pa} \tag{6.12}$$

A dimensão dos vetores \underline{Y}^p e \underline{Y}^{pa} é igual ao produto de n_c por n_r , e a do vetor $\underline{\Delta u}$ é igual ao produto de n_m por n_l .

O vetor de predição de variáveis controladas referente às ações passadas (\underline{Y}^{pa}) é armazenado em memória e atualizado a cada tempo de amostragem. Segundo a formulação descrita por Cutler (1983) do algoritmo DMC, esta atualização acontece através das seguintes etapas:

- i) o efeito do vetor de ação de controle do instante presente é considerado;

$$\begin{bmatrix} \underline{A}^1 \\ \underline{A}^2 \\ \dots \\ \underline{A}^n \end{bmatrix} \cdot \underline{\Delta u}_k$$

o termo acima é adicionado ao vetor \underline{Y}^{pa} corrente.

- ii) adição de um vetor correção obtido do erro entre o vetor da primeira predição e dos valores medidos de cada uma das variáveis controladas:

$$\begin{bmatrix} \underline{d}_{k+1} \\ \underline{d}_{k+2} \\ \dots \\ \underline{d}_{k+n} \end{bmatrix}$$

Supondo-se que a correção seja igual em todos os instantes:

$$\underline{d}_{k+j} = \underline{y}_{k+1} - \underline{y}_{k+1}^p$$

em que \underline{y}_{k+1} é o vetor de medidas das saídas do sistema.

- iii) translação de um período de amostragem sobre o vetor \underline{Y}^{pa} ; é recomendável que o horizonte de modelo (ns) seja maior ou igual ao tempo de resposta da malha de controle mais lenta;

$$\underline{y}_{ns+1}^p \Big|_k = \underline{y}_{ns}^p \Big|_k$$

A equação 6.13 representa as etapas descritas de cálculo do vetor \underline{Y}^{pa} :

$$\begin{bmatrix} \underline{y}_{k+1}^{pa} \\ \underline{y}_{k+2}^{pa} \\ \dots \\ \underline{y}_{k+n}^{pa} \end{bmatrix} = \underline{M} \begin{bmatrix} \underline{A}^1 \\ \underline{A}^2 \\ \dots \\ \underline{A}^n \end{bmatrix} [\Delta \underline{u}_k] + \begin{bmatrix} \underline{y}_{k+1}^{pa} \\ \underline{y}_{k+2}^{pa} \\ \dots \\ \underline{y}_{k+n}^{pa} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \underline{d}_{k+1} \\ \underline{d}_{k+2} \\ \dots \\ \underline{d}_{k+n} \end{bmatrix} \quad (6.13)$$

sendo que :

$$\underline{M} = \begin{bmatrix} \underline{0} & \underline{I}_{nc} & \underline{0} & \underline{0} & \dots & \underline{0} \\ \underline{0} & \underline{0} & \underline{I}_{nc} & \underline{0} & \dots & \underline{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \underline{0} & \underline{0} & \underline{0} & \dots & \underline{0} & \underline{I}_{nc} \\ \underline{0} & \underline{0} & \underline{0} & \dots & \underline{0} & \underline{I}_{nc} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \underline{y}_{k+j}^{pa} = \begin{bmatrix} y_{1,k+j}^{pa} \\ \vdots \\ y_{nc,k+j}^{pa} \end{bmatrix} \quad \text{para } j = 1, n,$$

e a ordem da matriz quadrada \underline{M} é igual ao produto de n_c por ns .

O objetivo do DMC é calcular o vetor $\underline{\Delta u}$ de tal forma a minimizar o erro entre o vetor de predição e a referência. Este cálculo pode ser formulado como um problema de otimização conforme (6.14):

$$\min_{\underline{\Delta u}} \sum_{j=N_1}^{N_2} \delta(j) [y_{k+j/k}^p - y_{k+j}^{sp}]^2 + \sum_{j=1}^{nl} \lambda(j) [\Delta u(k+j-1)]^2 \quad (6.14)$$

sujeito às seguintes restrições:

$$\begin{aligned} u_{min} &\leq u(k) \leq u_{max} && \forall k \\ \Delta u_{min} &\leq \Delta u \leq \Delta u_{max} && \forall k \\ y_{min} &\leq y(k) \leq y_{max} && \forall k \end{aligned}$$

em que δ é o vetor de fatores de ponderação das saídas, ao passo que λ é o vetor de fatores de supressão.

No caso de não haver restrições, o vetor $\underline{\Delta u}$ pode ser determinado pelo método dos mínimos quadrados, resultando na equação matricial 6.15:

$$\underline{\Delta u} = (\underline{A}^T \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} \underline{A} + \underline{\Lambda}^T \underline{\Lambda})^{-1} \cdot \underline{A}^T \cdot \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} \cdot (\underline{Y}^{sp} - \underline{Y}^{pa}) \quad (6.15)$$

em que Γ e Λ são matrizes diagonais, denominadas matrizes de ponderação e supressão, respectivamente.

6.4. PROJETO DE CONTROLADOR HÍBRIDO FUZZY-PREDITIVO (F-MPC)

O controlador *fuzzy* proposto neste trabalho utiliza um modelo dinâmico *fuzzy* como preditor no controle preditivo (MBPC) e é baseado na otimização de uma função objetivo quadrática, como mostrada pela equação 6.16:

$$J_{FMPC} = \sum_{j=1}^{nr} (y(k+j|k) - w(k+j))^2 + \sum_{j=1}^{nl} \lambda \Delta u^2(k+j-1|k) \quad (6.16)$$

As variáveis são denotadas conforme em J_{MPC} definido pela equação 6.2.

O modelo dinâmico *fuzzy* foi descrito no capítulo anterior, bem como validações do mesmo para as aplicações consideradas. Em síntese, o modelo faz as previsões da variável de saída em função dos sinais de entrada passados e presente e sinais de saída passados. Esta seqüência de sinais de entradas e saídas formam o vetor denominado de *vetor regressor*.

Na figura 6.3, é ilustrado um esquema geral do controlador proposto. No bloco de cálculo da saída predita, é utilizado um modelo dinâmico *fuzzy* de Takagi-Sugeno (modelo *fuzzy* funcional). Os sinais de entrada e saída passados são realimentados na entrada do modelo que faz a previsão para o passo adiante. E em seguida, o bloco de otimização, que representa a determinação das ações de controle a partir da função objetivo a ser minimizada. O sinal de saída da planta é realimentado no otimizador, conforme a estrutura IMC abordada anteriormente.

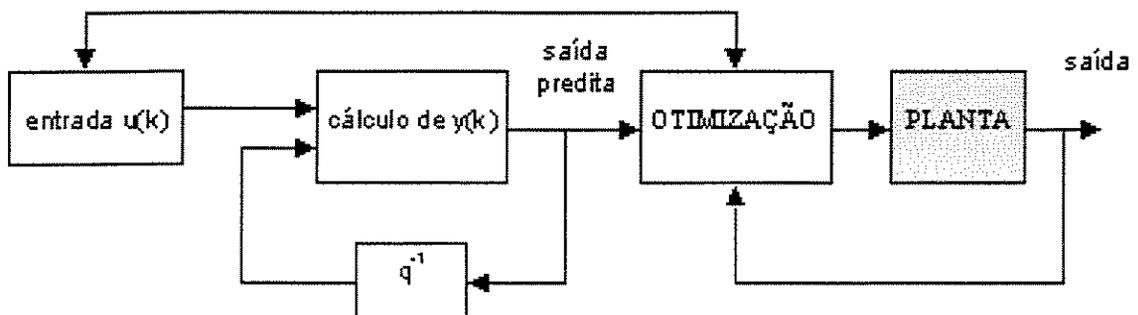


Figura 6.3. Diagrama esquemático do controlador *fuzzy* proposto

O algoritmo de controle F-MPC pode ser sintetizado nos seguintes procedimentos:

- i) inicializações de parâmetros do controlador (nr, nl) e do otimizador;
- ii) Cálculo das previsões da saída $y(k+j/k)$, baseando-se no modelo *fuzzy*, para $j = 1, \dots, nr$;
- iii) incorporação da correção sobre a trajetória predita;
- iv) cálculo da função objetivo conforme 6.16;
- v) cálculo, a partir do otimizador, da seqüência de entradas para minimizar a função objetivo do controlador;

6.5. CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Os diversos aspectos do controle preditivo são sucintamente apresentados; e muitas são as vantagens desta estratégia para melhorar o desempenho de controle em processos industriais. O controle de matriz dinâmica (DMC) é apresentado visto que é a representação de controle preditivo linear empregada nas análises de resultados do capítulo seguinte. No entanto, em processos altamente não lineares, o controle preditivo linear pode apresentar resultados insatisfatórios, tais como: tempo de reposta lento, comportamento oscilatório, instabilidade, entre outros. Uma alternativa é o uso de um modelo não linear de previsão interno ao controlador; esta solução pode introduzir alguns problemas numéricos de otimização, pois trata-se de um caso de otimização não convexa. A sugestão de projeto desta tese é o uso de um modelo não linear, por meio das técnicas de modelagem *fuzzy* funcional. Assim, o capítulo seguinte apresenta resultados de análise de resultados dos controladores preditivos para os casos de estudo considerados.

CAPÍTULO 7

RESULTADOS DE CONTROLE

7.1. INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta resultados de simulação em malha fechada dos casos de estudo abordados no capítulo 3, com o controlador híbrido mostrado no capítulo 6, com os respectivos modelos desenvolvidos no capítulo 5. Na seção 7.1 são apresentados resultados de controle *feedforward* do processo de copolimerização. Esta estratégia de controle, desenvolvida por Congalidis et al. 1989, procura solucionar o problema do sistema de reciclo do processo de copolimerização. Dessa forma, pode-se tratar, isoladamente, o reator de copolimerização nas aplicações de controle. Na seção 7.2 são apresentados resultados de controle do peso molecular ponderado médio do copolímero do reator de copolimerização. Na seção 7.3 são apresentados resultados de simulação de controle do peso molecular do *nylon-6,6* do processo de policondensação. Por fim, na seção 7.4, são apresentadas as conclusões deste capítulo.

Cabe descrever que os resultados de desempenho dos sistemas de controle são ilustrados por meio de figuras e quantificados por meio da integral do erro absoluto, ao longo do tempo (equação 7.1); sendo que o erro é dado pela diferença entre o valor desejado e atual da variável de saída (controlada):

$$IAE = \sum_{k=1}^N ||e(k)|| \quad (7.1)$$

sendo k o instante considerado, N o número de discretizações considerado e $e(k)$ o erro entre a variável de saída e o valor desejado. Sendo que o número N deve ser tal que o sistema atinja a estabilização no teste de controle requisitado.

7.2. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DO CONTROLE *FEEDFORWARD* DO REATOR DE COPOLIMERIZAÇÃO

Um dos desafios de controle do processo de copolimerização é o sistema de reciclo. Congalidis et al. (1989) empregaram o controle *feedforward* para compensar os distúrbios introduzidos pela vazão de reciclo. Isto é realizado através da manipulação das vazões de entrada do sistema para manter as vazões e composições constantes na entrada do reator. As equações de controle *feedforward* foram obtidas através do balanço de massa em torno do ponto de adição de reciclo. O balanço molar para o monômero A (metacrilato de metila) é dado por:

$$F_{a3} = F_{a1} + y_{a2} \cdot F_2 \quad (7.2)$$

Como se deseja manter a vazão de monômero A para o reator constante, a equação 7.2 pode ser resolvida, para a vazão de monômero A na entrada do sistema, da seguinte forma:

$$F_{a1} = F_{a3} - y_{a2} \cdot F_2 \quad (7.3)$$

As equações de controle *feedforward* correspondentes para as alimentações na entrada do sistema para o monômero B (acetato de vinila) e o solvente (benzeno) são:

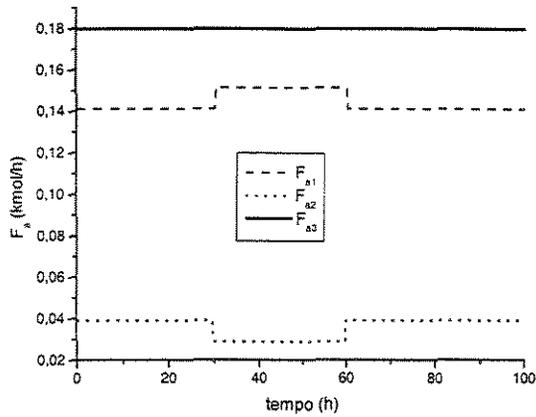
$$F_{b1} = F_{b3} - y_{b2} \cdot F_2 \quad (7.4)$$

$$F_{s1} = F_{s3} - y_{s2} \cdot F_2 \quad (7.5)$$

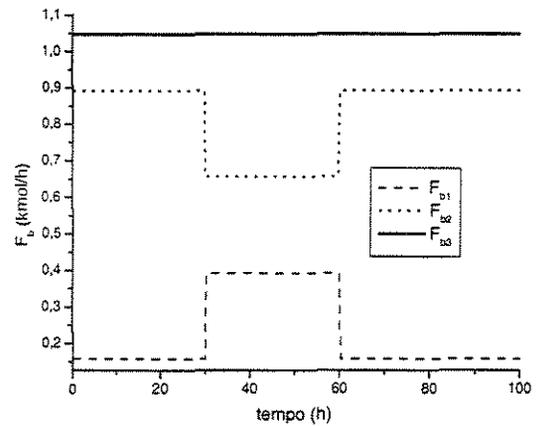
Se qualquer uma das equações de controle produzir um valor de vazão de alimentação (1) negativo, o valor deve ser saturado em zero.

Para a análise do controle *feedforward*, a taxa de descarga é alterada do valor estacionário, que é igual a 0.05 (Tabela 2.1), para 0.30 entre os instantes 30 e 60 horas; após o instante 60 horas, retorna ao seu valor estacionário. Esta perturbação é a mesma considerada por Congalidis et al. 1989.

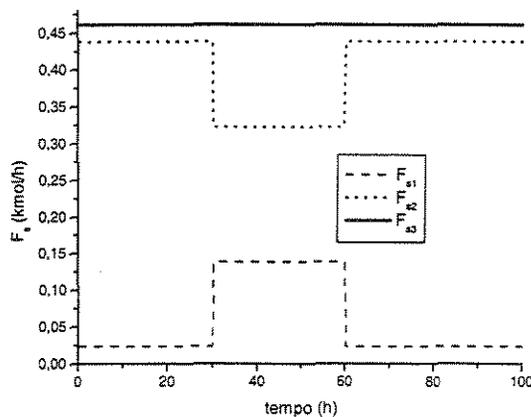
Os resultados na Figura 7.1 mostram os comportamentos das vazões molares no controle *feedforward*. Como pode ser notado, as vazões na entrada do reator são todas constantes. Para isso, ocorre uma manipulação das vazões molares na entrada do sistema (indicados com índice 1), que anulam o efeito das vazões provenientes do reciclo (indicados com índice 2). Como esperado, os resultados das variáveis de saída são mantidos constantes com a atuação do controle *feedforward* sob a perturbação da taxa de descarga. Uma importante conclusão é que o controle *feedforward* possibilita separação do controle do reator do restante do sistema. Por isso, considerando-se este recurso de controle adotado por Congalidis et al. 1989, o desenvolvimento de controle abordado neste trabalho, para este sistema, focaliza no reator de tanque agitado contínuo (CSTR) de copolimerização do processo.



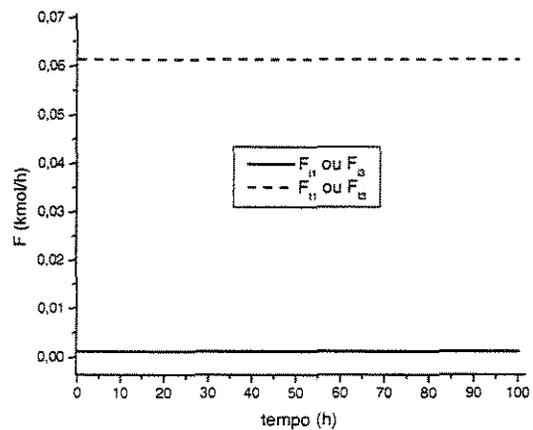
a. vazão molar de monômero A (metacrilato de metila).



b. vazão molar de monômero B (acetato de vinila).



c. vazão molar de solvente (benzeno).



d. vazão molar de iniciador (AIBN) e agente de transferência de cadeia (acetaldeído).

Figura 7.1. Variáveis manipuladas e variáveis relacionadas ao controle *feedforward* sob perturbação na taxa de descarga

7.3. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DE CONTROLE PREDITIVO DO REATOR DE COPOLIMERIZAÇÃO

Nesta seção, são analisados os resultados de aplicação do controlador F-MPC (definido no capítulo 6) para o reator de copolimerização, considerando-se o peso molecular ponderado médio como variável controlada e a temperatura de jaqueta como variável manipulada. A escolha desta malha de controle deve-se, principalmente, à forte não linearidade presente, adequando assim a aplicação

das metodologias não lineares de identificação de modelo dinâmico. Emprega-se o DMC como controlador preditivo linear para estudo comparativo nas análises.

Um aspecto importante no tocante à confiabilidade de estudo dos resultados é a sintonia dos controladores; por isso, os parâmetros em comum dos controladores preditivos (DMC e F-MPC) foram sintonizados em valores para maximizar o desempenho.

Para os testes seguintes, os parâmetros do DMC e F-MPC são apresentados na Tabela 7.1. O número de *clusters* pode ser alterado em função dos parâmetros do método de agrupamento empregado (sub-seção 5.2.1). O tipo das funções de pertinência e funções conseqüentes, bem como os respectivos parâmetros estão descritos no capítulo 5.

Tabela 7.1. Parâmetros dos controladores preditivos para o reator de copolimerização

Parâmetros	DMC	F-MPC
Degrau para determinação da matriz dinâmica	-3%	-
Fator de supressão	1,0	1,0
Horizonte de predição	5	5
Horizonte de controle	1	1
Intervalo de tempo de ação do controlador	0,25 h	0,25 h
Número de entradas passadas e presente do modelo dinâmico <i>fuzzy</i>	-	4
Número de saídas passadas do modelo dinâmico <i>fuzzy</i>	-	1
Número de <i>clusters</i> (número de regras)	-	3
Tipo e parâmetros das funções de pertinência	-	Capítulo 5
Tipo e parâmetros das funções conseqüentes	-	Capítulo 5

As variáveis de entrada e saída foram normalizadas nas respectivas faixas operacionais para promover uma qualidade numérica com relação ao condicionamento numérico da matriz, conforme mencionado na seção 5.1. A faixa de entrada do modelo (temperatura da jaqueta) é de 315 à 350 K, ao passo que a saída é de 30000 a 100000 kg/kmol. Estes limites são os mesmos adotados nas restrições dos controladores preditivos.

Os resultados da Figura 7.2 em malha aberta mostram a caracterização de não linearidade do peso molecular em relação à temperatura da jaqueta,

através da visível assimetria de ganho. Este tipo de comportamento não linear está presente em alguns casos de processos químicos, apesar de que, na maioria dos projetos de sistemas de controle, considera-se um ponto operacional, de onde se aproximam modelos lineares locais. Este tipo de não linearidade pode condicionar o sistema de controle linear a uma perda de desempenho e estabilidade, como é apresentado nos resultados seguintes.

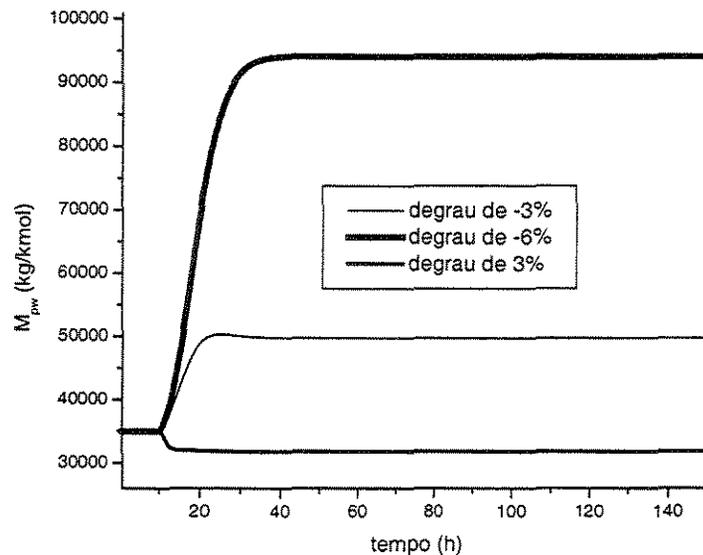


Figura 7.2. Exemplificação da não linearidade do peso molecular ponderado médio quando sujeito à mudança da temperatura de jaqueta.

A seguir, são apresentados os resultados de testes de controle servo, ou seja, mudanças de valores desejados (*setpoint*) ou operacionais do processo. Procuram-se testar duas abordagens de controle F-MPC:

- i) F-MPC que emprega o modelo *fuzzy* com as funções conseqüentes lineares;
- ii) F-MPC que emprega o modelo *fuzzy* com funções conseqüentes não lineares (exponenciais);

7.3.1. RESULTADOS DE CONTROLE SERVO

Os resultados das Figuras 7.3 e 7.4 comparam os desempenhos dos controladores F-MPC com funções consequentes não lineares e DMC para testes de mudanças de *setpoints*. Os desempenhos destes controladores foram razoavelmente semelhantes e satisfatórios, sendo que o F-MPC apresentou uma resposta levemente mais rápida e oscilatória que o DMC nas mudanças desejadas. Pode-se notar também que o valor da integral do erro absoluto para o F-MPC e DMC foram praticamente iguais.

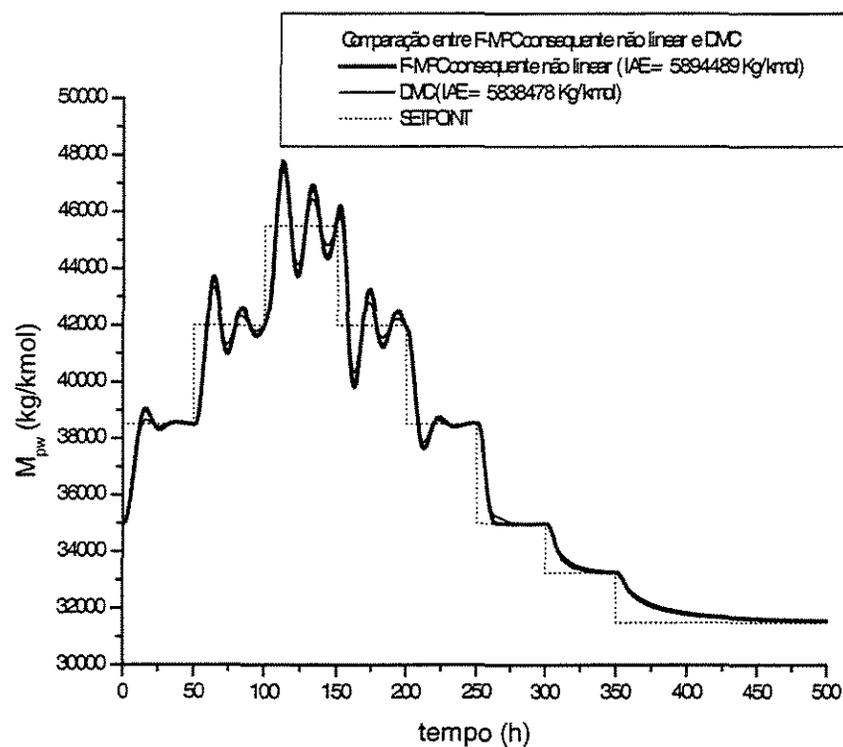


Figura 7.3. Resultados comparativos de controle servo entre F-MPC e DMC para a variável controlada.

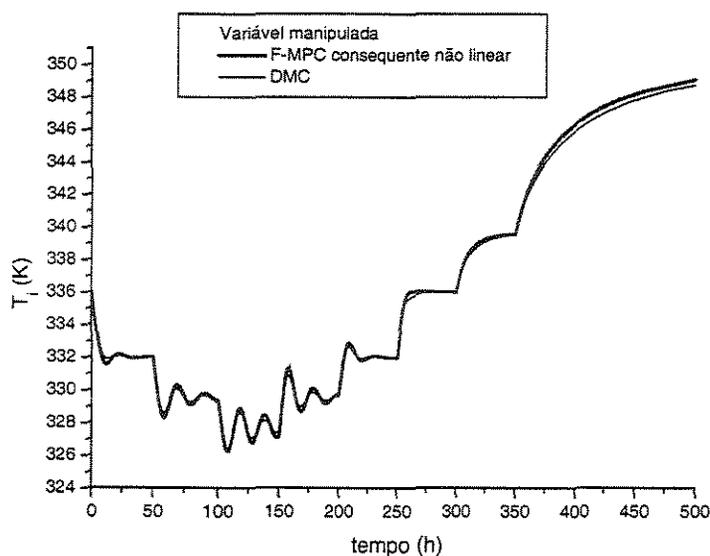


Figura 7.4. Resultados comparativos de controle servo entre F-MPC e DMC para a variável manipulada.

Os resultados da Figura 7.5 permitem fazer uma análise dos desempenhos dos controladores F-MPC para as diferentes estruturas de modelo *fuzzy* propostas no capítulo 5 na parte consequente. Apesar do melhor desempenho do modelo *fuzzy* com consequentes lineares em relação ao modelo com consequentes não lineares (mostrado no capítulo 5), constatou-se que o F-MPC com funções consequentes não lineares apresentou melhores resultados de desempenho no tocante ao tempo de resposta e sobre-elevação (*overshoot*); além do valor da integral do erro absoluto ser menor para F-MPC com funções consequentes não lineares. Esta melhora de desempenho pode ser atribuída à relação entre a equação de Arrhenius (conhecimento fenomenológico¹) e o modelo *fuzzy* proposto (com funções consequentes exponenciais).

¹ As constantes das taxas das reações dependem exponencialmente da temperatura do sistema.

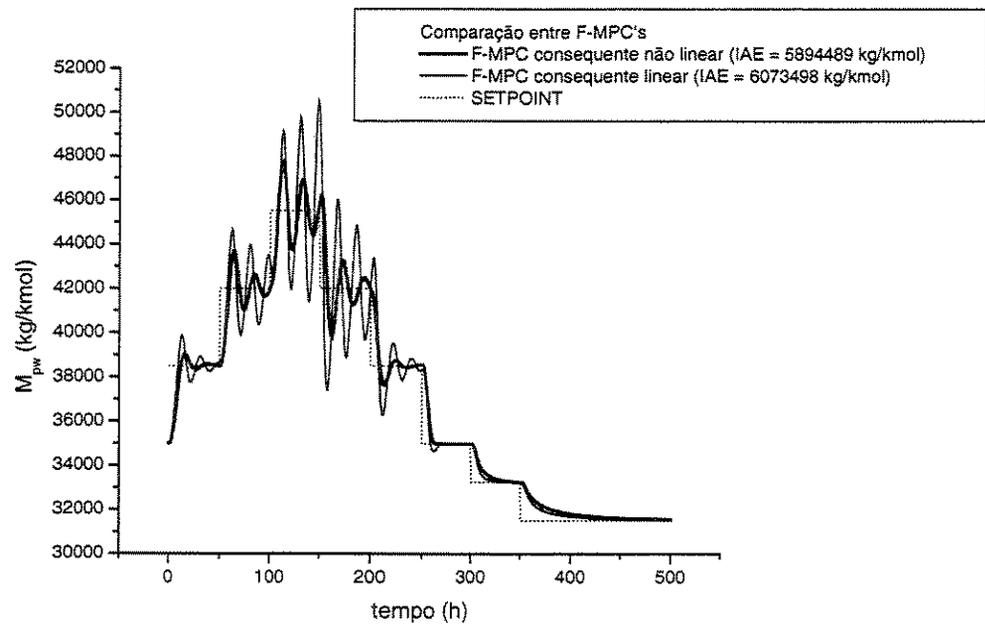


Figura 7.5. Resultados comparativos de controle servo entre F-MPC's.

Os resultados das Figuras 7.6 e 7.7 mostram uma análise de resultados no tocante ao fator de supressão para o F-MPC com funções consequentes não lineares. Observa-se um comportamento dinâmico fortemente oscilatório para um fator de supressão igual a 0,5. Considerando-se que o fator de supressão é um parâmetro para amortecimento das ações de controle. Assim, quando reduzido o fator de supressão, o comportamento oscilatório é devido às ações bruscas na variável manipulada, como pode ser claramente visto na Figura 7.7.

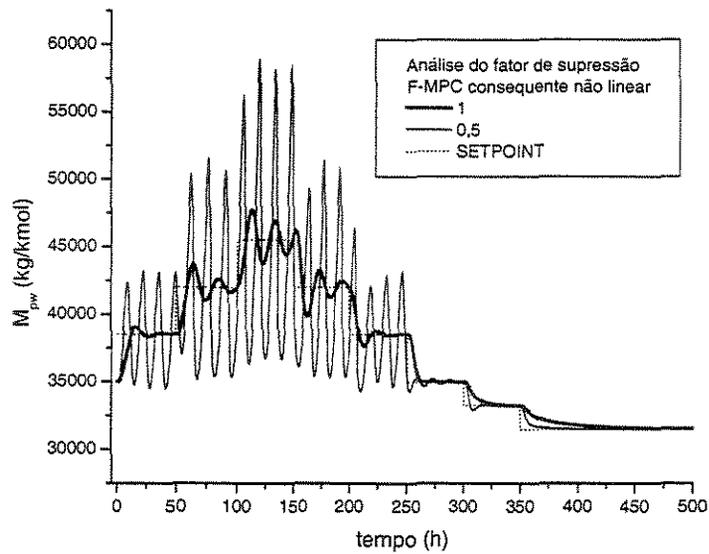


Figura 7.6. Resultados comparativos de análise do fator de supressão para o F-MPC consequente não linear – variável controlada.

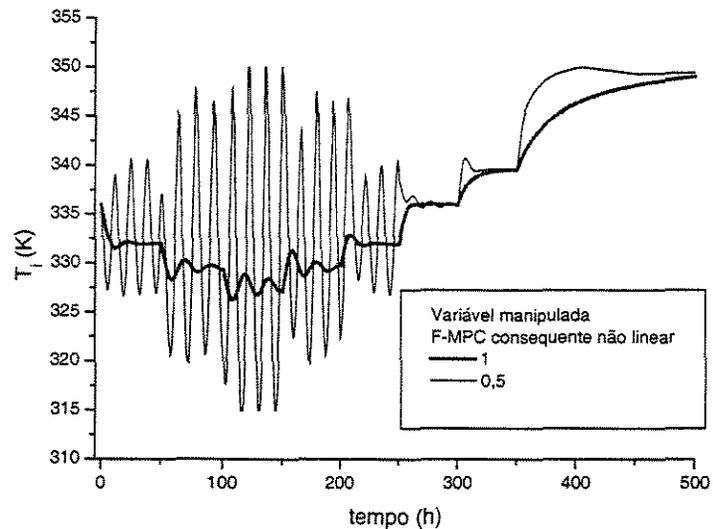


Figura 7.7. Resultados comparativos de análise do fator de supressão para o F-MPC consequente não linear – variável manipulada.

Os resultados da Figura 7.8 mostram a significativa diferença de desempenhos dos F-MPC's para diferentes configurações em relação ao número

de *clusters* (número de regras). O F-MPC com um (1) agrupamento apresentou um desempenho insatisfatório, representado por um tempo de resposta significativamente alto. Isto exemplifica a importância do particionamento em forma de regras do modelo *fuzzy* funcional.

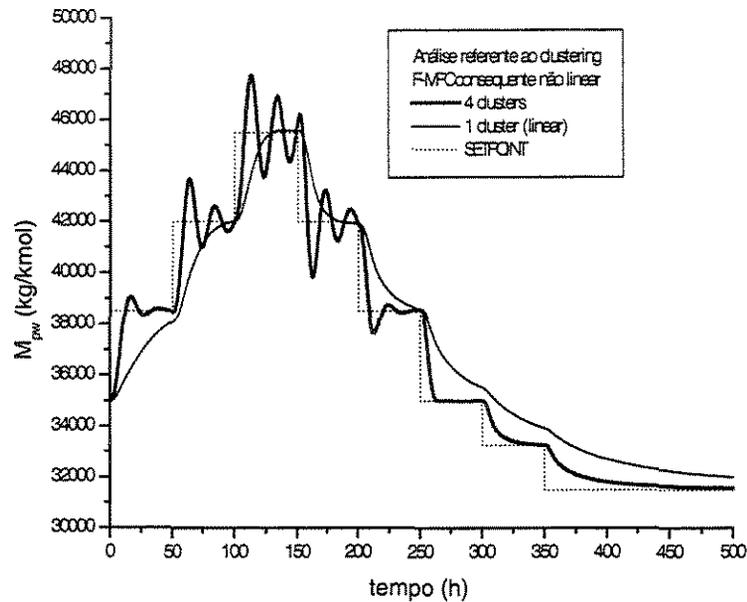


Figura 7.8. Resultados comparativos de controle servo entre F-MPC's.

7.3.2. RESULTADOS DE CONTROLE REGULATÓRIO

Nesta sub-seção são analisados alguns dos resultados de controle regulatório; o distúrbio escolhido foi a vazão molar de inibidor igual a 4 milésimos da vazão molar total, a mesma considerada por Congalidis et. al. 1989.

Os resultados da Figura 7.9 mostram os desempenhos do F-MPC com funções conseqüentes não lineares e DMC; sendo que o desempenho do F-MPC foi levemente superior ao DMC, avaliando-se o tempo de resposta e o desvio do valor estacionário (produzido pelo distúrbio) e considerando-se que o valor da integral do erro absoluto para o F-MPC foi levemente inferior ao DMC. Com relação a oscilação presente nestes resultados, podem-se melhorar os resultados através do aumento do fator de supressão, porém nota-se um tempo de resposta maior do sistema (Figura 7.10):

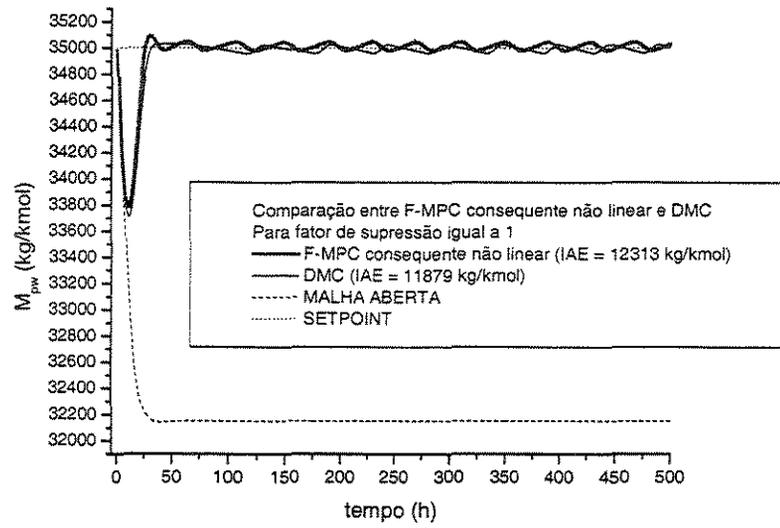


Figura 7.9. Resultados de comparativos de controle regulatório entre F-MPC e DMC.

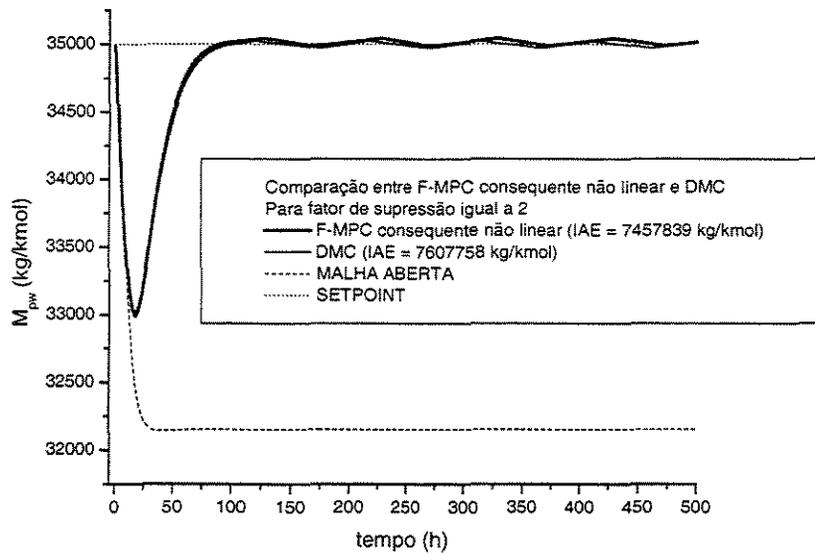


Figura 7.10. Resultados de comparativos de controle regulatório entre F-MPC e DMC.

Os resultados da Figura 7.11 mostram os desempenhos dos F-MPC's para as diferentes estruturas do controlador F-MPC nos testes de controle regulatório. Nota-se que o F-MPC com funções consequentes lineares, para este teste, apresentou um desempenho levemente superior em relação ao outro F-MPC, considerando-se que o valor da integral do erro absoluto para o F-MPC com funções consequentes lineares foi menor que no caso do outro F-MPC.

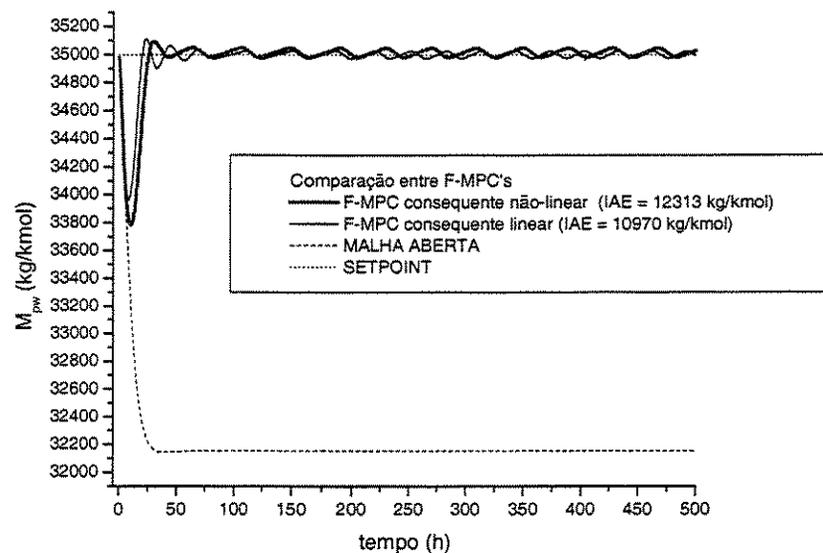


Figura 7.11. Resultados de controle regulatório para diferentes estruturas.

7.4. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DE CONTROLE PREDITIVO DO CASO DE ESTUDO DE POLICONDENSAÇÃO

O sistema de controle desenvolvido nesta tese foi também implementado para o caso de estudo de policondensação, abordado no capítulo 3. Como descrito no capítulo anterior, o peso molecular do *nylon-6,6* é a variável controlada, ao passo que a vazão de massa do sal de *nylon-6,6* na entrada do sistema é a variável manipulada. O sistema de controle é testado para os controles regulatório e servo. Para o caso de controle regulatório, representa-se o distúrbio por um degrau no instante 2 horas de mais ou menos 5% sobre a concentração de amina na entrada do reator, que é uma possível perturbação industrial. Para o controle servo, consideram-se duas mudanças de valores desejados (9700 e 9200 kg/kmol), que representa a faixa de operação desejada.

Os controladores preditivos foram sintonizados para horizonte de predição igual a 20, horizonte de controle igual a 1 e fator de supressão igual a 1 ($n_r = 20$, $n_l = 1$ e $\lambda = 1$). A variável de entrada foi normalizada para uma faixa operacional de 800 a 1200 kg/h e a saída de 8000 a 12000 kg/kmol.

As Figuras 7.12 a 7.15 mostram resultados de controle servo para as variáveis controlada e manipulada, para mudanças de valores desejados de 9700 e 9200 kg/kmol. Nota-se que os dois controladores foram capazes de realizar o controle servo, sendo que o tempo de resposta do controlador preditivo *fuzzy* foi razoavelmente menor. Pode-se notar também que o valor da integral do erro absoluto para o F-MPC foi menor do que para o DMC. Os valores da variável manipulada foram proporcionais aos valores das saídas dos respectivos controladores.

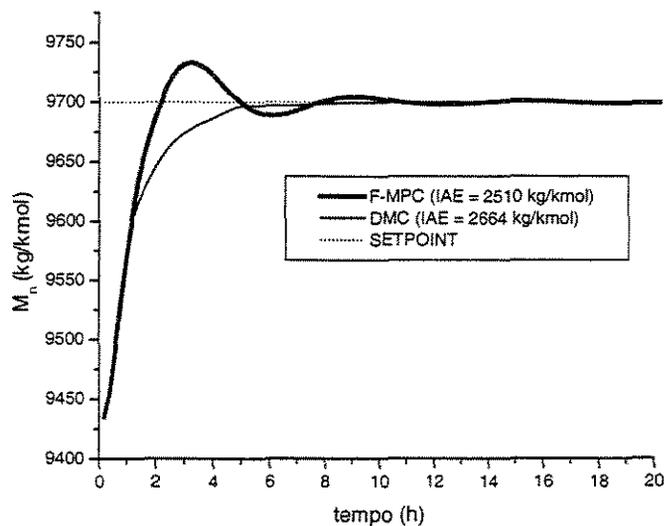


Figura 7.12. Controle servo do processo de policondensação (9700 kg/kmol) – variável controlada.

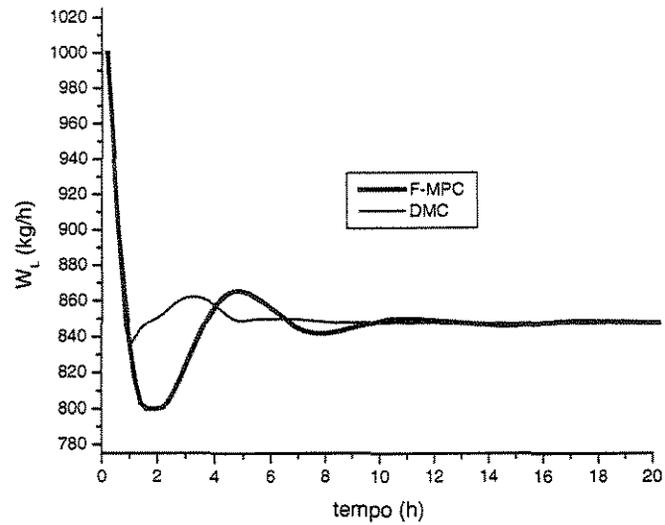


Figura 7.13. Controle servo do processo de policondensação (9700 kg/kmol) – variável manipulada.

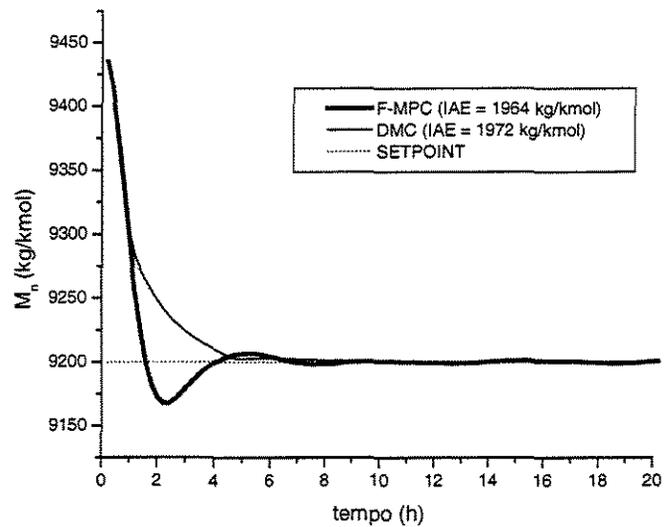


Figura 7.14. Controle servo do processo de policondensação (9200 kg/kmol) – variável controlada.

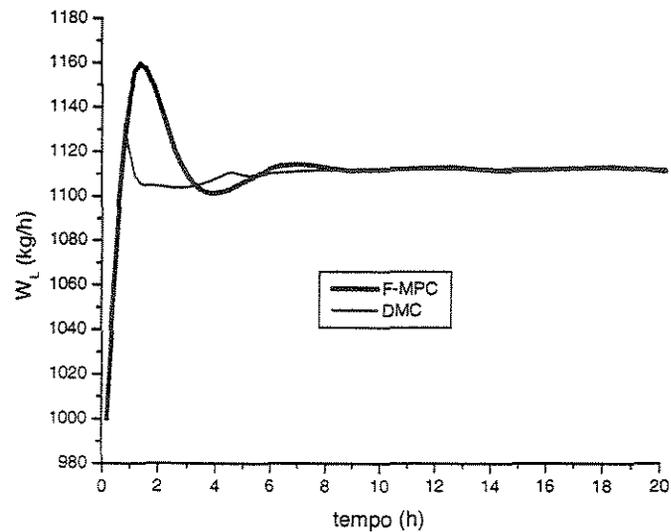


Figura 7.15. Controle servo do processo de policondensação (9200 kg/kmol) – variável manipulada

Considerando-se o distúrbio citado anteriormente, nas Figuras de 7.16 a 7.19, são apresentados resultados de controle regulatório das variáveis manipulada e controlada para o sistema de policondensação. Os controladores preditivos foram capazes de realizar o controle regulatório, sendo que o controlador *fuzzy* apresentou um tempo de resposta menor; sendo que o valor da integral do erro absoluto para o F-MPC foi razoavelmente inferior ao DMC.

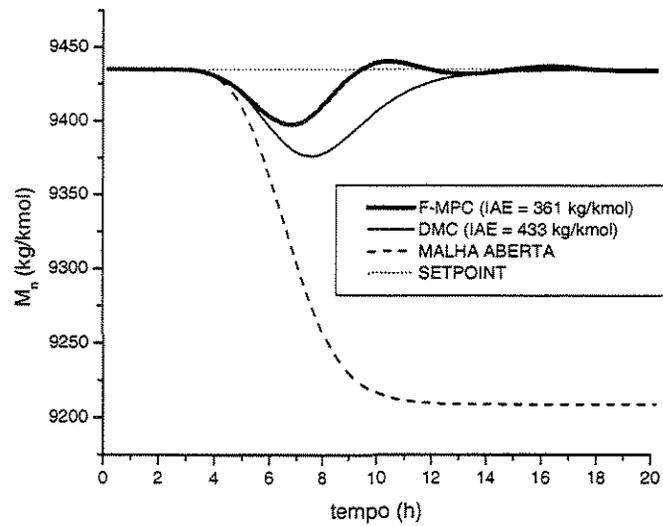


Figura 7.16. Resultados de controle regulatório do processo policondensação (distúrbio +5%) – variável controlada

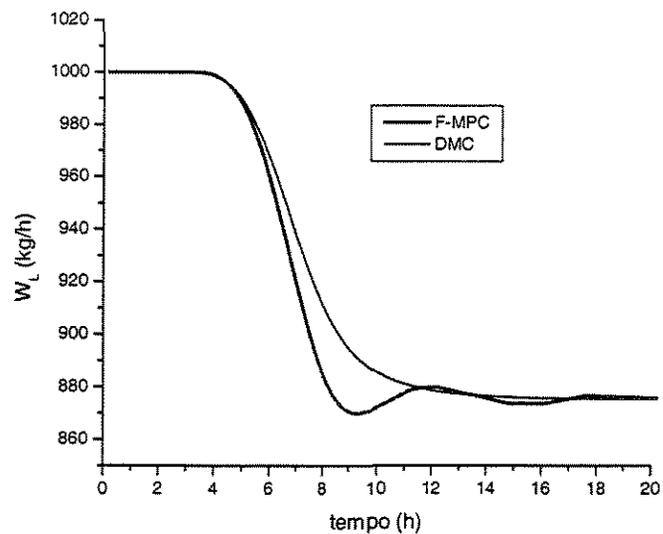


Figura 7.17. Resultados de controle regulatório do processo policondensação (distúrbio +5%) – variável manipulada

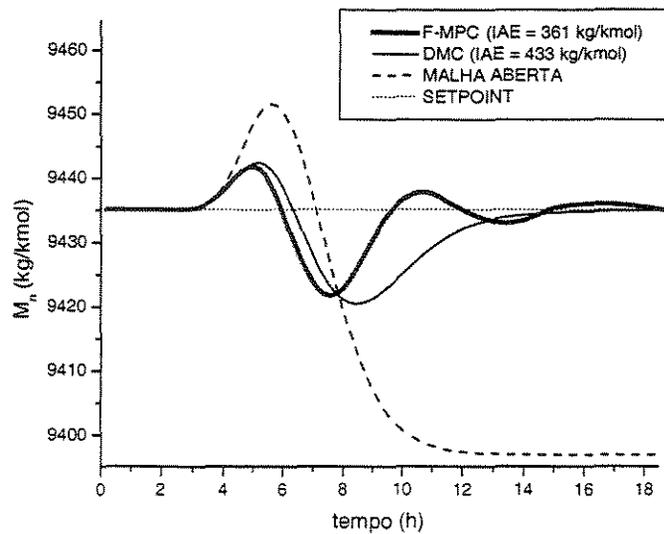


Figura 7.18. Resultados de controle regulatório do processo policondensação (distúrbio -5%) – variável controlada

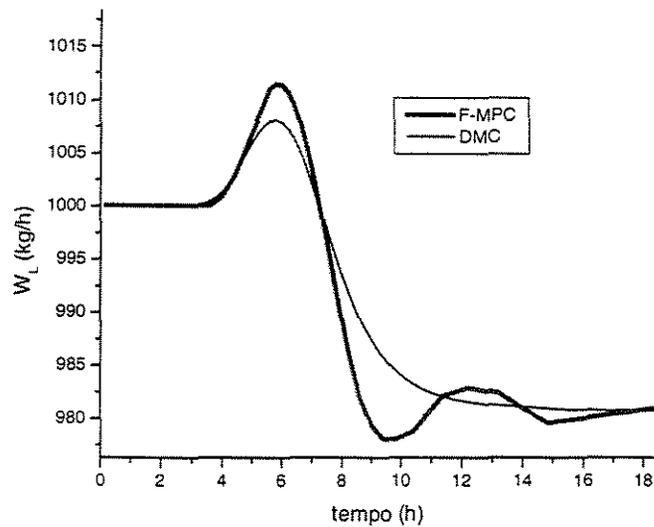
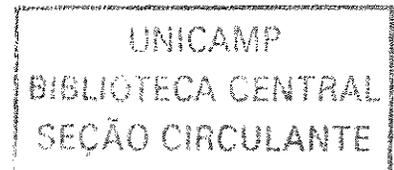


Figura 7.19. Resultados de controle regulatório do processo policondensação (distúrbio -5%) – variável manipulada

7.5 . CONCLUSÕES DO CAPÍTULO

Este capítulo apresenta resultados de simulação em malha fechada dos casos de estudo abordados nesta tese. Os resultados do controlador *fuzzy*-preditivo são interessantes por representarem uma nova metodologia de projeto de controladores baseando-se em dados do processo. Muitas vezes, as não-linearidades presentes podem trazer problemas de instabilidade nos controladores, o que inviabiliza a implantação de técnicas lineares de projeto. Dessa forma, o projeto de controladores preditivos não lineares é uma alternativa interessante de projeto de controladores. Os resultados de controle do processo de copolimerização exemplificaram um bom desempenho da abordagem de controle preditivo não linear desenvolvida, baseando-se na modelagem dinâmica *fuzzy* funcional. Os resultados de controle do processo de fabricação de *nylon-6,6* mostraram um desempenho melhor do controlador preditivo *fuzzy* em relação ao DMC. Considerando-se todas as análises comparativas dos resultados expostos, essa classe de controle preditivo não linear proposta neste trabalho surge como uma nova metodologia de projeto de controladores preditivos não lineares, baseando-se em dados dinâmicos da planta, com um significativo potencial para implementação em processos industriais.



CAPITULO 8

CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Os algoritmos de simulação dos modelos fenomenológicos dos casos de estudo apresentaram um bom desempenho se comparados aos resultados existentes na literatura. Para o caso de copolimerização, os algoritmos computacionais foram perfeitamente representáveis quando comparados aos trabalhos de Congalidis et al. 1989 e Maner et al. 1997. Para o reator de policondensação, um modelo dinâmico formado por um conjunto de dez reatores de tanque agitado contínuo (CSTR) foi utilizado para as simulações dinâmicas. Este modelo representou satisfatoriamente as principais dinâmicas do processo. Por isso, foram utilizados como plantas nas implementações dos sistemas de controle preditivo. Estes processos apresentam comportamentos dinâmicos altamente não lineares, o que justifica a busca por controladores não lineares.

Os controladores preditivos (MBPC) apresentam características propícias quando aplicados aos processos químicos, principalmente no tocante à inclusão de restrições no projeto do sistema de controle. Além disso, tais controladores são projetados a partir do uso de um modelo interno, o que, de forma geral, garante uma melhora nos desempenhos dos controles regulatório e servo. Por isso, o desenvolvimento de metodologias não lineares de modelagem para atuar junto às técnicas de controle preditivo é uma alternativa interessante de projeto de controladores.

Dentro deste contexto, neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia sistemática de projeto de controladores preditivos baseados em modelos dinâmicos *fuzzy* funcionais (Takagi e Sugeno, 1985). A inserção de um modelo *fuzzy* dinâmico nas técnicas de controle preditivo foi realizada. A integração de conceitos de lógica *fuzzy*, métodos numéricos de agrupamento (*clustering*) e mínimos quadrados foi feita de forma sistêmica para a determinação de modelos *fuzzy* dinâmicos a partir de um conjunto de dados de identificação.

As técnicas foram empregadas para o desenvolvimento dos modelos *fuzzy* para os dois casos de estudo, com resultados bem representativos das dinâmicas das malhas das variáveis consideradas.

A inserção de funções não lineares do tipo exponencial nas funções conseqüentes foi realizada (para o processo de copolimerização). Esta possibilidade estrutural de modelo *fuzzy* funcional foi mais uma alternativa de projeto de modelos testada, buscando relacionar o problema ao modelo fenomenológico do processo (lei de Arrhenius). Algumas melhoras de desempenhos de controle foram encontradas para alguns dos testes realizados.

O algoritmo de controle de matriz dinâmica (DMC) foi apresentado e aplicado aos casos de estudo para as análises comparativas de resultados.

Dessa forma, os controladores F-MPC e DMC foram testados para os controles regulatório e servo para os casos de estudo. No geral, o controlador preditivo *fuzzy* (F-MPC) apresentou um desempenho melhor que o DMC.

Finalizando, como trabalhos futuros de controle preditivo baseado em modelos *fuzzy* para processos de polimerização pode-se sugerir:

- 1) Implantação do controlador proposto em plantas industriais.
- 2) Extensão do controlador F-MPC para malhas multivariáveis;
- 3) Estudo de inserção de informações operacionais na modelagem *fuzzy*;
- 4) Estudo de inserção de outras informações fenomenológicas dos casos de estudo no modelo *fuzzy* funcional;
- 5) Análise de estabilidade do controlador F-MPC;
- 6) Utilização das técnicas de modelagem *fuzzy* desenvolvidas para desenvolvimento de modelo estacionário na determinação de valores operacionais ótimos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AMON, M., DENSON, C. (1980) Simplified Analysis of the Performance of Wiped Film Polycondensation Reactors. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **19**, 415
- ASTROM K.J., WITTENMARK, B. (1997). Computer-Controlled Systems. 3ed. Prentice-Hall. New Jersey.
- AULT, J.W., MELLICHAMP, D.A. A (1972) Diffusion and Reaction Model for Simple Polycondensation. *Chem Engng Sci*, **27**, 1141
- BABUSKA, R., VERBRUGGEN, H.B.(1996) An Overview of Fuzzy Modeling for Control. *Control Eng Practice*. **4**, 11 PP 1593-1606
- CAMACHO, E.F.; BORDONS, C. (1998). Model Predictive Control. Springer Verlag, Berlin/New York.
- CHIDAMBARAM, M.; MAHESH, M. M., MADHAVAN, K. P. (1993) Fuzzy Control of a Semi-Batch Copolymerization Reactor. *Chemical Engineering and Processing*. v.32, n.6, P.327-331.
- CHIU, S. (1994). A Cluster Estimation Method with Extension to Fuzzy Model Identification. *IEEE*. Pp. 1240-1245.
- CHIU, S. (1996). Method and Software for Extracting Fuzzy Classification Rules by Subtractive Clustering. *IEEE*, pp.461-465.
- CONGALIDIS, J.P.; RICHARDS, J.R., RAY, W.H., (1989) Feedforward and Feedback Control of a Solution Copolymerization Reactor; *Aiche Journal* **35**: (6) 891-907.
- CUTLER, C.R. AND B.L.RAMAKER (1979) 'DMC – A COMPUTER CONTROL ALGORITHM' *AIChE Annual Meeting*, Houston.

- CUTLER, CR. (1983) Dynamic Matrix Control: An optimal multivariable control algorithm with constraints, *Ph.D. Dissertation*, Univ. of Houston
- DUPONT (1944) U.S. Patent 2,361,717 (Taylor, G.B.)
- DUPONT (1951) U.S. Patent 2,689,839 (Hechert, W.W.)
- DUPONT (1956) Canada Patent No 527.473 (Hull, D.R.)
- GARCIA, C.E., PRETT, D.M., MORARI, M. (1989). Model Predictive Control: Theory and Practice Survey. *Automatica*. Vol. 25, No. 3, pp. 335-348.
- GARCIA, C. E. (1984) *AIChE Annual Meeting*, Chicago.
- GIUDICI, R; DO NASCIMENTO, CAO; TRESMONDI A., DOMINGUES, A., PELLICCIOTTA R. (1999) Mathematical Modeling of an Industrial Process of Nylon-6,6 Polymerization in a Two-Phase Flow Tubular Reactor. *Chemical Engineering Science* 54: 3243-3249.
- GOBIN F. ZULLO LC, CALVET JP. (1994) Model-Predictive Control of an Open-loop Unstable Train of Polymerization Reactors. *Comput Chem Eng*, v.18, S525-S528 Suppl.S.
- GOULAO, M. L.; SARAIVA, P. (1996) Fuzzy Temperature Control of a Simulated PVC Polymerization Reactor, *ChemE Res. Event*, V.2 P.766-768.
- GUPTA, S.K., GHOSH, A.K., GUPTA, S.K., KUMAR, A. (1984) Analysis of Wiped Film Reactors Using the Orthogonal Collocation Technique. *J. Appl. Polym. Sci.*, 29, 3217.
- GUPTA, S.K., KUMAR, A., AGRAWAL, K.K. (1982) Simulation of Three Stage Nylon 6 Reactors With Intermediate Mass Transfer at Finite Rates. *J. Appl. Polym. Sci.* , 27, 3089.
- GUPTA, S.K., KUMAR, A. (1987) Reaction Engineering of Step Growth Polymerization. Plenum Press. New York.

- GUPTA, S.K., KUMAR, A., GHOSH, A.K. (1983a) Simulation of Reversible AA + B'B" Polycondensation in Wiped Film Reactors. *J. Appl. Polym Sci* 28, 1063.
- GUPTA, S.K., KUNZRU, D., KUMAR, A., AGARWAL, K.K. (1983b) Simulation of Nylon-6 Polymerization in Tubular Reactors With Recycle. *J. Appl. Polym Sci*, 28, 1625.
- GUPTA, S.K., TJAHJADI, M. (1987) Simulation of an Industrial Nylon-6 Tubular Reactor. *J. Appl Polym Sci*, 33, 933.
- HAMER, J.W.; AKRAMOV, T.A.; RAY, W.H. (1981). The Dynamic of Continuous Polymerization Reactor – II. Nonisothermal Solution Homopolymerization and Copolymerization in a CSTR. *Chemical Eng. Science* Vol. 36, No. 12, 1897-1914.
- HANAKUMA Y; (1996) Design of Process Control System and its Application to the Chemical Process Industry. *Kagaku Kogaku Ronbunshu*. V.22; n.6 pp.1263-1272.
- HIPP, A., RAY, W.H., (1996) A Dynamic Model for Condensation Polymerization in Tubular Reactors. *Chem Engng Sci*, v. 51, n.2, pp281-294.
- HUNKELER, D.; NI, H.; DEBELAK K.; (1997) Temperature Control of Highly Exothermic Batch Polymerization Reactors. *J Appl Polym Sci*, v.63, n.6, p.761-772.
- HWANG WH, CHEIY JI, RHEE HK; (1998) Modeling and Control of Continuous Stirred Tank Reactor of Thermal Copolymerization. *J appl Polym Sci*. v.67, n.5, pp.921-931.
- INGLIS MP, CLUETT WR, PENLIDIS A (1991) Long-range Predictive Control of a Polymerization Reactor. *Canadian Journal of Chemical Engineering*. V.69, n.1, pp.120-129.

- LUYBEN, W.L. (1989) *Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers*, 2ª edição, McGraw Hill.
- JAISINGHANI R., RAY, W.H. (1977). On the Dynamic Behaviour of a Class of Homogeneous Continuous Stirred Tank Polymerization Reactors. *Chemical Engineering Science*. 32, 811-825
- JACOBSEN LL, RAY WH. (1992) Unified Modeling for Polycondensation Kinetics. *J. Macrom Sci. - Rev Macrom. Chem Phys*. v.32 n.3&4, 407.
- JANA A., GUPTA, S.K. (1990) Nylon 6 Polymerization in Tubular Reactors: Orthogonal Collocation Results. *J. Polym Engng* 9 (1), 23
- JEONG, B.G., YOO, K.Y., RHEE, H.K. (2001). Nonlinear Model Predictive Control Using a Wiener Model of a Continuous Methyl Methacrylate Polymerization Reactor. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 40 (25: 5968-5977.
- JUDITSKY, A., HJALMARSSON, H., BENVENISTE, A. et al. (1995). Non-linear Black-Box Models in System Identification: Mathematical Foundations. *Automatica*, vol. 31, No. 12, pp. 1725-1750.
- KALMAN, R.E. (1960). A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems. *Transaction of the ASME – Journal of Basic Engineering*. pp. 35-45. Março 1960.
- KARAGOZ AR, OZKAN G, ERDOGAN S, (1997) Modelling, Optimization and Control of Batch Polymerization Reactor of Styrene. *Control Comput*. V.25, n.1, p.21-26.
- KIPARISSIDES C. (1996) Polymerization Reactor Modeling: A Review of Recent Developments and Future Directions. *Chemical Engineering Science*, V.51. n.10, pp.1637-1659.
- KOSKO, B. (1992). *Neural Networks and Fuzzy Systems*. Prentice Hall, New Jersey.

- KUMAR A.; KURUVILLE S. ; RAMAN A R; GUPTA S K. (1981) Simulation of Reversible Nylon-6,6 Polycondensation. *Polymer* ; 22, 387-390.
- LUYBEN, W.L. (1989). Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers. McGraw Hill Text; 2^a ed.
- MAEDA, M.; MAEDA Y.; MURAKAMI S. (1991) Fuzzy Drive Control of a Autonomous Mobile Robot. *Fuzzy Sets and Systems, Amsterdam*, v.39, n.2, p.195-204.
- MAHESH, M. M.; CHIDAMBARAM, M. (1992) Fuzzy State Estimator for a Semibatch Copolymerization Reactor. *Chemical Engineering & Technology*, v.15, n.6, P.395-400.
- MAHESH. M.M., MADHAVAN, K.P., CHIDAMBARAM, M. (1993). Fuzzy Control of a Semi-Batch Copolymerization Reactor. *Chemical Engineering Science*. Vol. 32, pp. 327-331.
- MALLON, F.K., BEERS, K.J., RAY, W.H. (1997a) Some Issues in Modeling Condensation Polymerization Processes. *Polymer Reaction Engineering III, Engineering Foundation Conference*. Palm Coast, FL.
- MALLON, F.K., RAY, W.H. (1997b). *J. Appl. Polym Sci*. Submitted
- MANDANI, E. H. (1974) Application of Fuzzy Algorithm for Control of Simple Dynamic Plant. *IEEE Proceedings*, London, Part D, v.121, n.12j.
- MANDIC, N.J.; SCHARF, E.M.; MANDANI, E.H. (1985) Pratical Application of a Heuristic Fuzzy Rule-Based Controller to the Dynamic Control of a Robot arm. *IEE Proceedings*, London, Part D, v.132, n.4, p.19-203.
- MANER, B.R.; DOYLE III, F.J. (1997). Polymerization Reactor Control Using Autoregressive-Plus Volterra-Based MPC. *AICHE Journal*. Vol. 43, No.7, pp.1763-1784.

- MATTEDI, A. (1999) . Projeto de um Controlador DMC para o processo CARE; *Tese de Mestrado DPQ/FEQ/UNICAMP*, Campinas SP.
- MELEIRO, L.A.C. (2002). Projeto e Aplicação de Controladores Baseados em Modelos Lineares, Neurais e Nebulosos. *Tese de Doutorado DPQ/FEQ/UNICAMP*, Campinas SP.
- MEZIOU AM, DESHPANDE PB, COZEWITH C. (1996) Dynamic Matrix Control of an Ethylene-Propylene-Diene Polymerization Reactor. *Ind Eng Chem Res*, v.35, n.1, p.164-168.
- MORARI, M. (1983). Design of Resilient Processing Plants: III. A General Framework for Assessment of Dynamic Resiliences. *Chem. Eng. Science*. 38, 1881.
- NAGARAJAN R, KUMAR RN; (1998) Fuzzy Logic Controlled Reactor Calorimeter for the Determination of Heat of Polymerization Reactions. *Eur Polym J*; v.34, n.12, pp.1801-1807.
- OGATA, K. (2002). Modern Control Engineering. 4^a ed. Prentice Hall, New Jersey.
- OGATA N. (1960) Studies on Polycondensation Reactions of Nylon Salt. I. The Equilibrium in the System of Poly Hexamethylene Adipamide and Water. *Kakromol. Chem.*42, 52-67.
- OGATA N. (1961) Studies on Polycondensation Reactions of Nylon Salt. II. The Rate of Polycondensation Reaction of Nylon-66 Salt in the Presence of Water. *Makromol. Chem.* 43, 117-131
- PAL, D., GUPTA, S.K. (1989) Simulation of Non-Vaporizing Tubular Nylon-6 Reactors With Radial Gradients: Finite-Difference Computations. *Polymer* 30, 1918
- PARK, M.J., RHEE, H.K. (2001). LMI-based Robust Model Predictive Control for a Continuous MMA Polymerization Reactor. *Computers Chem. Eng.* Vol. 25, No.11-12, pp. 1513-1520.

- PASSINO, K.M., YURKOVICH, S. (1997). *Fuzzy Control*. Addison Wesley. Menlo Park, California.
- PEDRYCZ, W. (1989). *Fuzzy Control and Fuzzy Systems*. John Wiley and Sons Inc, New York.
- PEDRYCZ, W. , GOMIDE, F. A. C. (1998). *An Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design*, MIT Press.
- PETERSON, T; HERNANDEZ, E; ARKUN, Y; A (1992) Non-linear DMC Algorithm and its Application to a Semibatch Polymerization Reactor. *Chem Eng Sci*. V.47, n.4, p.737-753.
- PINTO, J.C.; RAY, W.H. (1995). The Dynamic of Continuous Polymerization Reactors – VII. Experimental Study of a Copolymerization Reactor. *Chemical Engineering Science*. Vol. 50, No. 4, pp. 715-736.
- PINTO, J.C.; RAY, W.H. (1995). The Dynamic of Continuous Polymerization Reactors – VIII. A Full Bifurcation Analysis of a Lab-Scale Copolymerization Reactor. *Chemical Engineering Science*. Vol. 50, No. 6, pp. 1041-1056.
- POSTLEWAITE, B.E. (1996) Building a Model-Based Fuzzy Controller. *Fuzzy Sets and Systems*. 79, 3-13
- PRETT, D.M.,GARCIA, C.E. (1987) Design of Robust Process Controllers. In: IFAC TRIENAL WORLD CONGRERSS, 10., Munique, *Proceedings*. P.275-280.
- PROPOI, A.I. (1963). Use of LP Methods for Synthesizing Sampled-Data Automatic Systems. *Automn Remote Control*, 24.
- QIN, S.J.; BADGWELL, T.A. (1997). An Overview of Industrial Model Predictive Control Technology, In: J. C. Kantor, C. E. Garcia & B. Carnahan (Eds.). *Chemical Process Control V*. (pp. 232-256). Austin, TX: CACHE. A.I.C.H.E.

- RAMAGOPAL, A., KUMAR, A. GUPTA, S.K. (1983) Optimal Temperature Profiles for Nylon 6 Polymerization in Plug Flow Reactors. *J Appl Polym Sci*, 28, 2261
- RAY, W.H. (1971a). Molecular Weight Distribution in Copolymer Systems. I. Living Copolymers. *Macrom.*, Vol. 4, 162.
- RAY, W.H., DOUGLAS, T.L., GODSALVE, E.W. (1971b). Molecular Weight Distributions in Copolymer Systems: II. Free Radical Copolymerization. *Macrom.*, Vol. 4, 166.
- RAY, W.H. (1972). *J. Macro. Sci.-Revs in Macro. Chem.* C8 1.
- RAY A., GUPTA, S.K. (1985) Optimization of Nonvaporizing Nylon 6 Reactors with Stopping Conditions. *J. Appl Polym Sci*, 30, 4529
- RICHALET, J., RAULT, A., TESTUD, J.L., PAPON, J. (1978) Model Predictive Heuristic Control: Applications to Industrial Process. *Automatica*. 14 (5): 413-428
- ROFFEL, B; CHIN, P. A. (1991) Fuzzy Control of a Polymerization Reactor. *HYDROCARBON PROCESSING (HOUSTON, USA)*, v.70, n.6, P.47-49.
- SALDIVAR E, RAY WH. (1997). Control of Semicontinuous Emulsion Copolymerization Reactors. *AICHE J*, v.43, n.8, p.2021-2033.
- SCHMIDT, A.D.; RAY, W.H. (1981). The Dynamic of Continuous Polymerization Reactors – I. Isothermal Solution Polymerization in a CSTR. *Chemical Engineering Science*. Vol. 36, pp. 1401-1410
- SCHMIDT, A.D.; CLINCH, A.B.; RAY, W.H. (1984). The Dynamic of Continuous Polymerization Reactors – III. An Experimental Study of Multiple Steady States in Solution Polymerization. *Chemical Engineering Science*. 39(3), 419-432
- SEBORG, D.E., EDGAR T.F. AND MELLICHAMP, D.A. (1989) Process Dynamics and Control, John Willey.

- SECOR, R.M. (1969) The Kinetics of Polycondensation Polymerization, *AICHE. J*, 15, 861.
- SOUZA J.M., BABUSKA R., VERBRUGGEN, H.B. (1997) Fuzzy Predictive Control Applied to Air-Conditioning System. *Control Eng. Practice*, vol 5, no 10, pp.1395-1406.
- SRIVASTAVA, D., GUPTA, S.K. (1991) Optimization of a Tubular Nylon 6 Reactor with Radial Gradients. *Polym Engng Sci*, 31, 596
- STEPPAN, DD; DOHERTY, MF; MALONE, MF; (1987) A Kinetic and Equilibrium Model for Nylon 6,6 Polymerization *J Appl Polym Sci* 33: (7) 2333-2344.
- STEPPAN, DD; DOHERTY, MF; MALONE, MF (1991) A Simplified Degradation Model for Nylon 6,6 Polymerization *J Appl Polym Sci* 42: (4) 1009-1021.
- SUGENO, M.; MURAKAMI, K. (1984) Fuzzy Parking Control of Model Car. In: IEEE CONF. ON DECISION AND CONTROL, 23., Las Vegas, *Proceedings*. New York.
- SUGENO, M., MUROFUSHI, T.; MORI., T.; TATEMATSU, T.; TANAKA, J. (1989) *Fuzzy Sets and Systems*, Amsterdam, v.32, n.2, p.207-19.
- VERBRUGGEN H.B.; BRUIJN, P.M. (1997). Fuzzy Control and Conventional Control: What is (and can be) the real contribution of Fuzzy Systems? *Fuzzy Sets and Systems*. 90, 151-160
- WONG, C.C., FAN C.S. (1999) Rule Mapping Fuzzy Controller Design. *Fuzzy Sets and Systems*, 108, pp.253-261
- TAI, K. ARAI, Y, TAGAWA,T. (1983a) The Simulation of Hydrolytic Polymerization of ϵ -Caprolactam in Various Reactors: a Simulation Model for the Tubular Reactor with Heat Exchanger and its Numerical Solution. *J. Appl Polym Sci*, 28, 2527.

- TAI, K. ,TAGAWA,T. (1983b) Simulation of Hydrolytic Polymerization of ϵ -Caprolactam in Various Reactors: a Review on Recent Advances in Reaction Engineering of Polymerization. *Ind. Engng Chem Product Res Develop*, 22, 192.
- TAKAGI, T., SUGENO, M. (1985) Fuzzy Identification of Systems and its Applications to Modeling and Control. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, New York, v.15, n.1, p.116-33.
- TEYMOUR, F.; RAY, W.H. (1989). The Dynamic of Continuous Polymerization Reactors – IV. Dynamic Stability and Bifurcation Analysis of an Experimental Reactor. *Chemical Engineering Science*. Vol. 44, No. 9, pp. 1967-1982.
- TEYMOUR, F.; RAY, W.H. (1992). The Dynamic of Continuous Polymerization Reactors – V. Experimental Investigation of Limit-Cycle Behavior for Vinyl Acetate Polymerization. *Chemical Engineering Science*. Vol. 47, No. 15/16, pp. 4121-4132.
- TEYMOUR, F.; RAY, W.H. (1992). The Dynamic of Continuous Polymerization Reactors – VI. Complex Dynamics in Full-Scale Reactors. *Chemical Engineering Science*. Vol. 47, No. 15/16, pp. 4133-4140.
- TOLEDO, E. C. V.(1992); Modelagem e Controle de um reator de Polimerização CSTR Acoplado a um Controlador Horizontal Semi-Inundado;. Rio de Janeiro, *Tese de mestrado* – COPE / UFRJ, Rio de Janeiro.
- TSOUKAS, A., TIRRELL, M., STEPHANOPOULOS, G. (1982). Multiobjective Dynamic Optimization of Semibatch Copolymerization Reactors. *Chemical Engineering Science*. Vol. 37, No. 12, pp. 1785-1795.
- VEJA, M.P., LIMA, E.L., PINTO, J.C. (2000). Control of a Loop Polymerization Reactor Using Neural Networks. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*. 17: (4-7) 471-481.

- VERBRUGGEN H.B., BRUIJN, P.M. (1987) Fuzzy Control and Conventional Control: What is (and can be) the Real Contribution of Fuzzy Systems? *Fuzzy Sets and Systems*, V. 90, (2), pp. 151-160.
- YAGER, R.R., OVCHINNIKOV, S., TONG, R., NGUYEN, H. (1987). *Fuzzy Sets and Applications: Selected Papers by L.A. Zadeh*. Wiley: New York.
- YAGER, R.R.; FILEV, D.P. (1994). *Essentials of Fuzzy Modeling and Control*, Wiley, New York.
- YI S.K., PARK S.W. (1993). A New Fast Fuzzy Algorithm. *Fuzzy Set Syst.* v.60, n.1, pp.33-40.
- YUCE S, HASALTUN A, ERDOGAN S, ALPBAZ M (1999) Temperature Control of a Batch Polymerization Reactor. *Chem Eng Res Des* . V.77: (A5) pp. 413-420.
- ZADEH L.A. (1965), Fuzzy Sets. *Information and Control*, New York, v.8, n.3, p.338-353.
- ZADEH L, A. (1968) Fuzzy Algorithms. *Information and Control*, v.12, n.1-6, p.94-102.
- ZADEH, L.A (1972) A Rationale of Fuzzy Control. *Transactions of ASME: Journal of Dynamics Systems, Measurement and Control*, série G, New York, v.94, p.3-4.
- ZADEH, L.A (1973) Outline of a New Approach to the Analysis of Complex Systems and Decision Processes. *IEEE Transactions on Systems, Man. And Cybernetics*, New York, v.3, n.1, p.28-44.