

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO

DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

UNICAMP

BIBLIOTECA CENTRAL

SEÇÃO CIRCULANTE

CONTROLE AVANÇADO DE UM REATOR QUÍMICO DE LEITO

FIXO: APLICAÇÃO PARA OXIDAÇÃO DO

ETANOL A ACETALDEÍDO

CARLOS ALEXANDRE LOURENÇO GUERRA

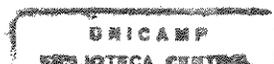
ORIENTADOR: PROF. DR. RUBENS MACIEL FILHO

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA À FACULDADE DE ENGENHARIA
QUÍMICA COMO PARTE DOS REQUISITOS EXIGIDOS PARA A OBTENÇÃO DO
TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA.**

CAMPINAS - SÃO PAULO

JANEIRO DE 2001

92840700



UNIDADE	UDC		
N.º CHAMADA:	UNICAMP		
	G937c		
V.	Ex.		
TOMBO BC/	44469		
PROC.	16-392/01		
C	<input type="checkbox"/>	D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREC@	R\$ 11,00		
DATA	16/05/01		
N.º CPD			

CM00156295-7

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

G937c Guerra, Carlos Alexandre Lourenço
Controle avançado de um reator químico de leito fixo:
aplicação para oxidação do etanol a acetaldeído /
Carlos Alexandre Lourenço Guerra.--Campinas, SP:
[s.n.], 2001.

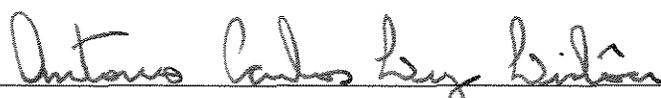
Orientador: Rubens Maciel Filho.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Reatores químicos – Controle automático. I.
Maciel Filho, Rubens. II. Universidade Estadual de
Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida por Carlos Alexandre Lourenço
Guerra e aprovada em 29 de Janeiro de 2001 pela banca examinadora constituída
pelos doutores:



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho - FEQ/UNICAMP



Prof. Dr. Antonio Carlos Luz Lisboa - FEQ/UNICAMP



Dr. Eric Camarasa - RHODIA

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em
Engenharia Química.



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Orientador

Dedico esta tese a minha esposa Carla Renata e aos meus pais Luis Antônio e Maria Isabel, por todo apoio, carinho, estímulo e dedicação a minha vida.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por tudo, pois sem Ele nada seria possível.

A toda minha família, em especial a Vó Maria, Vô Daniel, Vó Lourdes, Vô Guerra e aos meus irmãos Luis Gustavo e José Ricardo, meus sinceros agradecimentos pelo amor, carinho e amizade.

Aos novos integrantes de minha família Sr. Eduardo, Dona Anadir e Camila pelo carinho, estímulo a mim confiados.

Ao professor Rubens Maciel Filho, pela orientação, apoio, amizade e dedicação durante todo o tempo do curso.

Ao pós-doutorando Eduardo Coselli Vasco de Toledo e ao doutorando Fabiano A. N. Fernandes, pela valiosa colaboração e amizade no decorrer destes anos.

A banca examinadora pelas correções e sugestões fornecidas.

A Fapesp, pela concessão da bolsa de estudo.

Aos amigos, pelo companheirismo e amizade durante o curso.

A todos que, de alguma forma, contribuíram para realização deste trabalho.

SUMÁRIO

SUMÁRIO	xi
LISTA DE FIGURAS	xiii
LISTA DE TABELAS	xviii
NOMENCLATURA	xix
RESUMO / ABSTRACT	xxii
CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO	1
I.1 – MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO	1
I.2 – ORGANIZAÇÃO DA TESE	2
I.3 – PRINCIPAIS CONTRIBUIÇÕES DO TRABALHO	2
CAPÍTULO II – REVISÃO COMENTADA DA LITERATURA	3
II.1 – INTRODUÇÃO	3
II.2 – REATORA CATALÍTICO DE LEITO FIXO	3
II.3 – MODELAGEM DE REATORES	6
II.3.1 – Escoamento “PLUG-FLOW”	7
II.3.2 – Regime Transiente	8
II.3.3 – Dispersão radial de calor e massa	8
II.3.4 – Dispersão axial de calor e massa	8
II.3.5 – Resposta Inversa	9
II.3.6 – Sensitividade Paramétrica	10
II.4 – SIMPLIFICAÇÕES PARA MODELOS MATEMÁTICOS	11
II.5 – REAÇÃO DE OXIDAÇÃO DO ETANOL A ACETALDEÍDO	13
II.5.1 – Equação da Taxa de Reação com Catalisador de Fe-Mo	14
II.6 – MODELO PSEUDO-HOMOGÊNEO BIDIMENSIONAL DO REATOR	15
II.6.1 – Modelo Pseudo-Homogêneo Clássico	16
II.6.2 – Modelo de Toledo e Maciel Filho	17
II.7 – SOLUÇÃO DOS MODELOS	19
II.7.1 – Colocação Ortogonal	19
II.7.2 – Metodologia de Resolução Numérica	21

II.8 – CONCLUSÕES	21
CAPÍTULO III – SIMULAÇÃO DINÂMICA DO REATOR	22
III.1 – INTRODUÇÃO	22
III.2 – SIMULAÇÃO DINÂMICA	22
III.3 – CONCLUSÕES	36
CAPÍTULO IV – MODELAGEM EMPÍRICA DO REATOR	37
IV.1 – INTRODUÇÃO	37
IV.2 – PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS	37
IV.2.1 – Análise da Temperatura do Reator	41
IV.2.2 – Análise da Conversão do Reator	48
IV.3 – CONCLUSÕES	54
CAPÍTULO V – CONTROLE DO REATOR QUÍMICO	55
V.1 – INTRODUÇÃO	55
V.2 – SISTEMAS DE CONTROLE	55
V.2.1 – Controle “Feedback”	57
V.2.2 – Controle “Feedforward”	61
V.3 – CONTROLE DO REATOR QUÍMICO	62
V.3.1 – Controle do Perfil Térmico do Reator	62
V.3.2 – Controle da Conversão do Reator	74
V.4 – CONCLUSÕES	82
CAPÍTULO VI – ALGORITMO DE CONTROLE PROPOSTO PARA O REATOR	83
VI.1 – INTRODUÇÃO	83
VI.2 – CONTROLADOR ESTATÍSTICO-PID	83
VI.2.1 – Controle do Perfil Térmico do Reator	85
VI.2.2 – Controle da Conversão do Reator	92
VI.3 – CONCLUSÕES	98
CAPÍTULO VII - CONCLUSÕES E SUGESTÕES	100
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	102

LISTA DE FIGURAS

CAPÍTULO II

Figura II.1	Esquema Geral de um Reator Catalítico de Leito Fixo	4
-------------	---	---

CAPÍTULO III

Figura III.1	Malha de Pontos Gerados pela Colocação Dupla	24
Figura III.2	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação em T_{fo}	26
Figura III.3	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação em T_{fo}	26
Figura III.4	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação em T_{fo}	27
Figura III.5	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação em T_{fo}	27
Figura III.6	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação em T_{ro}	28
Figura III.7	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação em T_{fo}	29
Figura III.8	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação em T_{ro}	29
Figura III.9	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação em T_{ro}	30
Figura III.10	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação em G_i	31
Figura III.11	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação em G_i	32
Figura III.12	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação em G_i	32

Figura III.13	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação em G_i	33
Figura III.14	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação em R	34
Figura III.15	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação em R	34
Figura III.16	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator. Efeito da variação em R	35
Figura III.17	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator. Efeito da variação em R	35

CAPÍTULO IV

Análise da Temperatura do Reator

Figura IV.1	Gráfico dos Valores Observados vs Valores Preditos pelo Modelo	44
Figura IV.2	Superfície de Resposta para as variáveis Tf e Tr	45
Figura IV.3	Superfície de Resposta para as variáveis Tf e GM	45
Figura IV.4	Superfície de Resposta para as variáveis Tf e R	46
Figura IV.5	Superfície de Resposta para as variáveis Tr e GM	46
Figura IV.6	Superfície de Resposta para as variáveis Tr e R	47
Figura IV.7	Superfície de Resposta para as variáveis R e GM	47

Análise da Conversão do Reator

Figura IV.8	Gráfico dos Valores Observados vs Valores Preditos pelo Modelo	50
Figura IV.9	Superfície de Resposta para as variáveis Tf e Tr	51
Figura IV.10	Superfície de Resposta para as variáveis Tf e GM	51
Figura IV.11	Superfície de Resposta para as variáveis Tf e R	52
Figura IV.12	Superfície de Resposta para as variáveis Tr e GM	52
Figura IV.13	Superfície de Resposta para as variáveis Tr e R	53
Figura IV.14	Superfície de Resposta para as variáveis R e GM	53

CAPÍTULO V

Figura V.1	Malha de Controle “Feedback” – PID	58
Figura V.2	Esquema de Funcionamento do Controlador “Feedforward-Feedback”	62

Controle do Perfil Térmico do Reator

Figura V.3	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	63
Figura V.4	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator	64
Figura V.5	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	64
Figura V.6	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator	65
Figura V.7	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	66
Figura V.8	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	66
Figura V.9	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	67
Figura V.10	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	67
Figura V.11	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	68
Figura V.12	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	69
Figura V.13	Perfil Dinâmico da Vazão do Reator	70
Figura V.14	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	70
Figura V.15	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	71
Figura V.16	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	71
Figura V.17	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	72
Figura V.18	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	73
Figura V.19	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	74

Controle da Conversão do Reator

Figura V.20	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	75
Figura V.21	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator	76
Figura V.22	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	76
Figura V.23	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator	77

Figura V.24	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	78
Figura V.25	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	78
Figura V.26	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	79
Figura V.27	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	79
Figura V.28	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	80
Figura V.29	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	80
Figura V.30	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	81
Figura V.31	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	81

CAPÍTULO VI

Figura VI.1	Esquema de Funcionamento Controlador Estatístico-PID	84
-------------	--	----

Controle do Perfil Térmico do Reator

Figura VI.2	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	86
Figura VI.3	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator	87
Figura VI.4	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	87
Figura VI.5	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator	88
Figura VI.6	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	89
Figura VI.7	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	89
Figura VI.8	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	90
Figura VI.9	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	90
Figura VI.10	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	91
Figura VI.11	Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator	91

Controle da Conversão do Reator

Figura VI.12	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	93
Figura VI.13	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator	93
Figura VI.14	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	94
Figura VI.15	Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator	94

Figura VI.16	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	95
Figura VI.17	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	96
Figura VI.18	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	96
Figura VI.19	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	97
Figura VI.20	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	97
Figura VI.21	Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator	98

LISTA DE TABELAS

CAPÍTULO IV

Tabela IV.1	Perturbações das Variáveis de Manipulação	40
Tabela IV.2	Planejamento Fatorial em Estrela para o Reator	40

Análise da Temperatura do Reator

Tabela IV.3	Efeitos Principais	42
Tabela IV.4	Coefficientes de Regressão do Modelo do Sistema	42

Análise da Conversão do Reator

Tabela IV.5	Efeitos Principais	48
Tabela IV.6	Coefficientes de Regressão do Modelo do Sistema	49

CAPÍTULO V

Tabela V.1	Perturbações degrau nas variáveis para manipulação	72
------------	--	----

CAPÍTULO VI

Tabela VI.1	Valores das constantes do PID para controle da temperatura do reator	85
Tabela VI.2	Valores das constantes do PID para controle da conversão do reator	92

NOMENCLATURA

I – Modelo do Processo

B_{ih}	número de Biot térmico	
C_{pf}, C_p	calor específico mássico do gás	(kcal/kg.K)
C_{PR}	calor específico mássico do fluido refrigerante	(kcal/kg.K)
C_{ps}	calor específico do catalisador	(kcal/kg.K)
D_{ef}	difusividade efetiva radial	(m ² /h)
D_{efi}	difusividade efetiva radial intersticial	(m ² /h)
D_p	diâmetro da partícula	(m)
D_t	diâmetro do reator	(m)
f	fator de fricção de Ergun	
g_c	constante de conversão de unidades	(kg/m.h ² .atm)
GM	velocidade de fluxo mássico do gás	(kg/m ² .h)
G	velocidade de fluxo mássico superficial do gás	(kg/m ² .h)
G_i	velocidade de fluxo mássico intersticial do gás	(kg/m ² .h)
h_w	coeficiente de transferência de calor na parede interna do reator	(kcal/m ² .h.K)
K_i de R_w	“iésimo constante cinética da taxa de reação	(NI/min.gcat.atm)
L	comprimento do leito	(m)
P_i	pressão parcial da substância i	(atm)
P, p	pressão adimensional do gás	
p_o	pressão de entrada do gás	(atm)
P_{ref}	pressão de referência do gás	(atm)
PM	peso molecular da mistura reacional	(kg/kmol)
R	relação molar de alimentação ar/etanol	
r	coordenada radial adimensional	

R_t	raio do reator	(m)
R_{wv}	taxa de reação de oxidação do etanol a acetaldeído com catalisador de Fe-Mo	(Nl/min.gcat)
T	temperatura adimensional do reator	
T_{fo}	temperatura de alimentação do gás	(K)
T_R	temperatura adimensional do fluido refrigerante	(K)
T_{ro}	temperatura da alimentação do fluido refrigerante	(K)
$T(1,z,t)$	temperatura adimensional da parede do reator	
T_{ref}	temperatura de referência	(K)
V_f	velocidade superficial do gás	(m/h)
u_R	velocidade do fluido refrigerante	(m/h)
X	conversão do etanol a acetaldeído	
Z, Z_i	coordenada axial	(m)
ε	porosidade do leito	
ρ_B	densidade aparente do leito catalítico	(kgcat/m ³)
ρ_s	densidade do catalisador	(kgcat/m ³)
ρ_f	densidade do fluido reagente	(kg/m ³)
ρ_R	densidade do fluido refrigerante	(kg/m ³)
ΔH_R	entalpia de reação molar do etanol a acetaldeído	(kcal/kmol)
λ_{ef}	condutividade térmica efetiva radial	(kcal/m.h.K)
Ψ_{Mz_i}	posição axial adimensional do reator nos pontos de colocação ortogonal	

II – PID

$u(t)$ variável manipulada

K_c	constante proporcional
T_I	tempo integral
T_D	tempo derivativo
T_A	tempo de amostragem
$e(t)$	“set point” – variável controlada

RESUMO

A utilização de reatores catalíticos de leito fixo nas indústrias químicas, e a necessidade de otimização e controle dos mesmos, motivaram o estudo de modelos dinâmicos e técnicas de controle, como a utilização de controladores “Feedback-Feedforward”, funcionando simultaneamente.

Na prática, muitos sistemas de controle “feedforward” são implementados usando sistemas de controle “ratio”. O controlador “feedforward” controla as grandes e freqüentes perturbações mensuráveis e o controlador “feedback” controla quaisquer desvios que ocorram no processo devido às imprecisões do controlador “feedforward” ou outras perturbações não mensuráveis, como as alterações internas devido à desativação de catalisador.

O projeto inicial do controlador “Feedback-Feedforward” foi feito através de um modelo empírico de 2ª ordem obtido pelo planejamento fatorial, que apresentou “offsets” na variável controlada, mas boa previsibilidade para a variável manipulada. A construção de um novo controlador Estatístico-PID foi sugerida, de forma a eliminar os problemas anteriores e aproveitar a previsibilidade do modelo empírico através de um modelo dinâmico utilizando a lei de controle do PID em seu algoritmo. Assim, obteve-se um melhor desempenho quando comparado somente ao controlador convencional tipo PID.

As variáveis de controle e manipulação foram escolhidas através de uma análise do comportamento dinâmico do reator em malha aberta, as quais permitiram a manutenção ou obtenção de um novo estado estacionário desejado. Para esta análise das variáveis também foram utilizadas técnicas estatísticas, como o planejamento de experimentos fatorial, que mostrou seus efeitos e suas interações.

Como caso estudo, será considerada a oxidação do etanol a acetaldeído tendo como catalisador o Fe-Mo, cujos dados operacionais são conhecidos. O comportamento dinâmico do reator catalítico de leito fixo será descrito pelo modelo proposto por Maciel Filho, 1989. O método de resolução consiste na aplicação do método das Linhas, utilizando-se uma combinação da colocação ortogonal (Villadsen & Michelsen, 1978) na direção radial com o método de Runge-Kutta de quarta ordem para a direção axial.

ABSTRACT

The use of fixed bed catalytic reactors in the chemical industry, and the necessity of controlling and optimizing these reactors, have motivated the studies of dynamic models and control techniques, such as the use of Feedback-Feedforward controllers, working simultaneously.

In practice, several feedforward control systems are implemented using ratio control systems. The feedforward controller controls the big and frequent perturbations and the feedback controller controls any deviation that occurs in the process due to the feedforward controller imprecision, or other non-measurable perturbations, such as internal modifications due to catalyst deactivation.

The first "Feedback-Feedforward" controller design was done using a 2nd order empirical model obtained from a factorial design that produced offsets in the controlled variable, but good predictability for the manipulated variable. The development of a new Statistical-PID controller was suggested, to eliminate the problems of the first and take advantage of the predictability of the empirical model through a dynamic model using the PID control law in the algorithm. In this way, a better performance was obtained when compared only to the conventional controller of type PID.

The control and manipulated variables were chosen through an analysis of the dynamic behavior of the reactor in open loop, which permits the maintenance or a new desired steady state. Statistical techniques, such as factorial planning experiments, were used for the analysis of these variables in order to obtain their effects and interactions.

As case study, the oxidation of ethanol into acetaldehyde over Fe-Mo catalyst will be considered. The dynamic behavior of the fixed bed catalytic reactor will be described by the model proposed by Maciel Filho, 1989. The solution method consists in the application of the Line Method, using the orthogonal collocation (Villadsen & Michelsen, 1978) in the radial direction with the fourth order Runge-Kutta in the axial direction.

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO

1.1 – MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO

Reatores químicos e bioquímicos constituem-se equipamentos de primordial importância em de muitos processos industriais de grande relevância. De fato, o desempenho global de toda a planta, depende necessariamente do desempenho do reator. Então, passa a ser necessário poder operar o reator em condições de máxima produtividade e seletividade, o que depende de uma estratégia operacional adequada, que para ser implantada necessita de algoritmos de controle convenientemente projetados.

Devido a utilização de reatores catalíticos de leito fixo, por parte das indústrias químicas, existe grande incentivo para estudos de estratégias de otimização e controle deste tipo de equipamento, visando altos níveis de desempenho. Desta forma, este trabalho terá como principais objetivos, o desenvolvimento, a implementação e o teste de algoritmos de controle com conceitos simples, mas com grande potencial de aplicação pela simplicidade e robustez.

A fim de reproduzir as principais características dinâmicas do reator, assim como a rápida solução matemática e a consequente redução do tempo computacional, utilizou-se do desenvolvimento de modelos com grande capacidade de predição, porém com hipóteses simplificadoras.

Para estudos de controle e otimização é viável ter-se modelos que possam ser resolvidos mais rápido e facilmente, que gerem respostas qualitativamente concordantes com o processo e que possam ser resolvidos por computadores de pequeno porte, Pirkle et al. (1987).

A utilização da reação de oxidação do etanol a acetaldeído, tendo como catalisador o Fe-Mo, já tendo sido estudada anteriormente e, portanto com dados operacionais conhecidos, se fez como um bom exemplo para a simulação do reator, pois se trata de um processo altamente exotérmico, típico de muitos processos industriais importantes.

Não será objetivo deste trabalho, o projeto do reator, e sim o do sistema de controle.

1.2 – ORGANIZAÇÃO DA TESE

A tese tem a seguinte proposta de organização:

- Capítulo I- Introdução geral ao assunto e objetivos do trabalho;
- Capítulo II- Revisão da literatura, composto pela modelagem matemática do reator catalítico de leito fixo e sua solução para simulações;
- Capítulo III- Simulação dinâmica e análise do comportamento dinâmico do reator;
- Capítulo IV- Construção de dois modelos empíricos de 2ª ordem para o comportamento dinâmico do reator catalítico, através de técnicas estatísticas e análise tridimensional de alguns efeitos sobre o reator;
- Capítulo V- Simulação dos modelos estatísticos funcionando como um controlador do tipo “Feedback-Feedforward”, e comparando-os com um controlador clássico PID;
- Capítulo VI- Construção e Simulação de um controlador proposto para o reator químico utilizando as técnicas demonstradas anteriormente;
- Capítulo VII- Conclusões gerais sobre o trabalho e sugestões.

1.3 – PRINCIPAIS CONTRIBUIÇÕES DO TRABALHO

O trabalho tem por finalidade desenvolver técnicas de controle para sistemas químicos de comportamentos complexos.

Desta maneira, este trabalho contribui na demonstração de técnicas de controle convencionais e modelagem empírica de sistemas através da estatística. Sendo a principal contribuição, o emprego destas técnicas na formulação e emprego de um controlador dinâmico chamado neste trabalho de Estatístico-PID.

CAPÍTULO II - REVISÃO DA LITERATURA

II.1 - INTRODUÇÃO

Nesta seção são apresentadas as características do reator catalítico de leito fixo com ênfase para a oxidação do etanol a acetaldeído, e os principais fenômenos que ocorrem neste reator.

Para o estabelecimento de estratégias operacionais e para implementação do controlador, é necessário conhecer-se o comportamento dinâmico do reator, o qual pode ser adequadamente estudado através da simulação por computador. Assim, considerações serão dadas para o desenvolvimento do modelo matemático para o sistema e sua metodologia de solução.

A simulação dinâmica de reatores químicos tem se expandido muito nos últimos anos, e estas simulações têm servido para vários propósitos: projeto de reatores, estratégias de partida e parada do reator, determinação de condições operacionais desejadas e de risco para o controle do processo, e visto que, neste trabalho serão desenvolvidas e implementadas técnicas de controle, foi utilizada a modelagem dinâmica pseudo-homogênea de reatores catalíticos de leito fixo monotubulares (leito fixo de partículas) para fins de estudos “on-line” do sistema.

Deve-se ressaltar que apesar do trabalho ter sido desenvolvido para um processo específico, os procedimentos e o modelo utilizado são obviamente de uso geral para outras reações de interesse.

II.2 - REATOR CATALÍTICO DE LEITO FIXO

Desde a descoberta e a aplicação dos catalisadores sólidos aos processos químicos no começo deste século, a indústria se diversificou e cresceu de forma espetacular. Isto se deu através do desenvolvimento de novos processos e da atualização de processos

existentes, muitos deles baseados no uso de catalisadores sólidos. A maior parte destes processos catalíticos envolvendo reagentes gasosos emprega reatores de leito fixo (Froment e Bischoff, 1990).

O reator tem a forma de um tubo cilíndrico, onde em seu interior apresenta-se uma montagem de partículas de tamanho uniforme, que são arranjadas aleatoriamente, e que são mantidas imóveis dentro de um tubo cilíndrico, para que o fluido reagente flua de uma maneira aleatória, e no caso de catalisadores porosos, dentro das partículas, sendo convertidos em produtos.

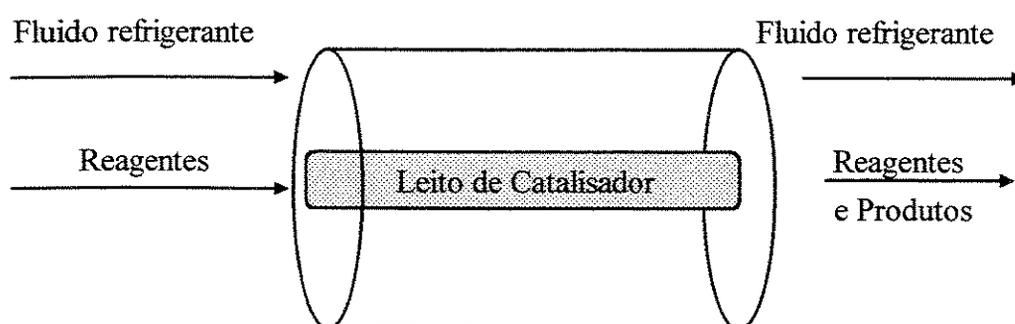


Figura II.1 - Esquema Geral de um Reator Catalítico de Leito Fixo

O reator de leito fixo apresenta um custo de construção, operação e manutenção baixos, em relação aos outros tipos de reatores, graças justamente à fixação das partículas no leito, o que não exige unidades custosas de separação a jusante, e a larga flexibilidade de operação. A principal desvantagem do reator de leito fixo, se refere a transferência de calor, isto porque a taxa de liberação ou consumo de energia ao longo do comprimento do reator não é uniforme e a maior parte da reação normalmente ocorre nas proximidades da entrada do reator.

Em reações exotérmicas, a taxa de liberação de calor será relativamente maior perto da entrada, devido a alta concentração de reagentes. Nos reatores não adiabáticos com estas reações exotérmicas, a temperatura no eixo do leito pode ser muito diferente da que ocorre na parede, aumentando a taxa de reação local, e reforçando cada vez mais esta diferença até o esgotamento local dos reagentes. Isto pode acarretar a ocorrência de pontos quentes (“hot spot”), ou mesmo na desativação parcial do catalisador. O uso de diluentes

inertes na alimentação, assim como a diluição do catalisador com material sólido inerte, permite reduzir os efeitos térmicos da reação. O controle da temperatura do refrigerante externo e a divisão do leito em seções independentes pode ser uma possível solução para o problema, como também o fato de que tubos com diâmetro excessivamente grandes prejudicam a transferência radial de calor (Domingues, 1992). Independentemente do projeto mecânico do reator, a operação do reator em altos níveis de desempenho, requerem a utilização de estratégias de controle com controladores adequados, Toledo (1999).

Sendo os reatores de leito fixo em grande parte equipamentos de grande capacidade, houve um crescimento de demanda do mercado nas últimas décadas, que se refletiu em progresso tecnológico. Portanto, pode-se esperar para o futuro, o uso crescente de reatores de leito fixo na indústria sobretudo devido à (Domingues, 1992):

- o incremento do conhecimento dos dados fundamentais que se têm assistido nos últimos anos;
- o aumento da preditividade na obtenção dos parâmetros de transporte de massa e de calor que se têm verificado através do grande número de trabalhos publicados;
- a melhoria na sistematização da coleta de dados experimentais;
- a robustez, desempenho e adequação crescentes dos métodos de análise de dados e métodos de solução numérica de sistemas de equações diferenciais;
- a facilidade de acesso aos computadores de alto desempenho cujo preço continua a cair tão vertiginosamente quanto cresce sua velocidade;
- a redução do custo físico dos reatores, integração destes com o processo à jusante e montante, resultando em economia tanto de despesas fixas como das despesas proporcionais, segurança de operação, qualidade dos produtos assegurada pelo bom desempenho do sistema de controle destes equipamentos, segurança operacional, etc.

Também se deve enfatizar que as principais deficiências na modelagem dos processos catalíticos com reatores de leito fixo se originam de cinéticas químicas incompletas ou imprecisas, o que é insuficientemente reconhecido pelos engenheiros químicos. Assim, uma resposta eficaz à necessidade crescente de bem modelar é a exigência de qualidade nos estudos cinéticos, condição principal para o sucesso dos estudos subseqüentes, Froment e Hofmann (1987).

Mais informações sobre reatores catalíticos de leito fixo podem ser obtidas nas referências a seguir, que estão apresentadas em ordem cronológica: Bird et al. (1960), Aris (1965), Amundson (1966), Himmelblau e Bischoff (1968), Aris e Amundson (1973), Finlayson (1974), Carberry e But (1974), Karanth e Hughes (1974), Aris (1975a), Aris (1975b), Carberry (1976), Hill (1977), Lapidus e Amundson (1977), Pereira et al. (1979), Holland e Anthony (1979), Biscaia Jr. (1980), Incropera e Witt (1981), Varma (1981), McGreavy (1983), Levenspiel (1983a), Levenspiel (1983b), Westerterp et al. (1984), Duarte e Lemcoff (1984), Doraiswamy e Sharma (1984), Maciel Filho (1985), Froment (1986), Fogler (1986), Froment e Hofmann (1987), Khanna e Seinfeld (1987), Villadsen e Michelsen (1987), Nauman (1987), Levenspiel (1989), Jorgensen e Jensen (1989), Maciel Filho (1989), Azevedo et al. (1990), Luyben (1990), Santos (1990), Froment e Bischoff (1990), Domingues (1992), Tresmondi (1995), Azeredo (1996) e Toledo (1999).

II.3 - MODELAGEM DE REATORES

O conceito de modelagem de reatores tem sido empregado por diferentes pesquisadores para diferentes propósitos. Estes modelos possuem diferentes níveis de sofisticação, capazes de fornecer respostas suficientemente precisas com relação aos fenômenos reais.

Modelos matemáticos de reatores de leito fixo são necessários para a descrição do comportamento estacionário e dinâmico para fins de estudo de projeto, otimização e controle do processo. Embora insuficientes detalhes podem levar a um modelo incapaz de representar precisamente a resposta do reator à mudanças nas variáveis de operação, excessivo detalhamento pode levar a modelos que são computacionalmente impraticáveis e/ou contém parâmetros cujos valores não podem ser determinados precisamente pelos dados de operação. Portanto, o tipo de modelo e seu nível de complexidade na representação do sistema dependem do uso para o qual o modelo será desenvolvido (Khanna e Seinfeld, 1987).

Um modelo geral para reatores de leito fixo deve levar em conta os transportes interfacial e intrapartícula de calor e massa, sendo os modelos heterogêneos os mais

complexos, por distinguir entre as condições de concentração e temperatura no fluido e na superfície das partículas de catalisador, ou até mesmo no interior das partículas.

Os modelos desenvolvidos para o reator catalítico de leito fixo podem ser agrupados em pseudo-homogêneos e heterogêneos, dependendo de como é tratado o meio formado pelas partículas de catalisador e mistura reagente.

No modelo pseudo-homogêneo, utilizado para este trabalho, as partículas do catalisador e o fluido reagente são tratados como um único meio contínuo; assume-se que o fluido dentro de um elemento de volume associado a uma partícula de catalisador pode ser caracterizado por uma certa temperatura, pressão e composição, e estas grandezas variam continuamente com a posição dentro do reator (Hill,1977). O uso do modelo pseudo-homogêneo reduz o número de equações a serem resolvidas, já que não é feita distinção entre as concentrações e temperaturas do fluido e do sólido, como acontece no modelo heterogêneo.

Os modelos bidimensionais heterogêneos exigem um tempo de computação muito grande, o que tornaria inviável para aplicação em tempo real. As dificuldades aumentam com a transferência de calor, que em contraste com a transferência de massa, ocorre tanto na fase fluida como também na fase sólida. Por outro lado, os modelos pseudo-homogêneos modificados baseado nas discussões apresentadas por Maciel Filho (1989), levam em conta a presença do sólido. De fato, para altas vazões de reagente, típica de situações operacionais industriais, as diferenças entre temperatura e concentração para as fases fluida e sólida são relativamente pequenas de forma que a formulação pseudo-homogênea passa a ser uma representação interessante para os reatores de leito fixo.

II.3.1 - Escoamento “PLUG-FLOW”

Para esta idealização de escoamento do fluido, supõe-se que as propriedades variem ao longo da direção do escoamento (ponto a ponto), porém para uma mesma posição em todas as direções, exceto a do escoamento, as propriedades são assumidas constantes.

Esta consideração pode ser utilizada especialmente a altas vazões, característica dos reatores industriais.

II.3.2 – Regime Transiente

Este regime representa o comportamento dinâmico do reator, sendo importante principalmente para fins de controle do reator.

Sem um modelo dinâmico, não é possível prever a chamada “resposta inversa” do reator, que ocorre em regiões de alta sensibilidade.

II.3.3 - Dispersão radial de calor e massa

Para a difusão radial de massa, Hill (1977) salienta que para altos números de Reynolds pode-se desprezar os efeitos da difusão molecular, e assim a difusividade efetiva radial pode ser calculada como função do produto da velocidade de escoamento pelo diâmetro da partícula.

Segundo Froment e Bischoff (1990), a transferência de calor na direção radial pode ser estudada através da decomposição da resistência total do leito em duas partes. A resistência nas proximidades da parede do reator é aquela representada por um coeficiente de película na parede interna do tubo. A outra resistência seria constante na direção radial e representada pela condutividade térmica efetiva. Afirmam ainda, que a primeira resistência é maior que a segunda, conseqüência das variações radiais da velocidade do fluido, da porosidade e da densidade do leito.

Quando a dispersão é considerada na direção radial, por causa da ocorrência de gradientes de concentração e temperatura, o modelo torna-se bidimensional.

II.3.4 - Dispersão axial de calor e massa

A dispersão axial de calor e massa leva em conta a influência nos valores de parâmetros de transferência de calor e massa, mas tanto Hill (1977), como Froment e Bischoff (1990), concordaram que para reatores industriais nos quais altas velocidades são utilizadas, o efeito da dispersão axial de massa na conversão é insignificante, quando a relação comprimento do reator/diâmetro da partícula excede 50, e quando esta relação for

superior a 300 o efeito da dispersão axial de calor pode também ser desprezada (Varma, 1981).

Entretanto, para reatores de porte industrial, geralmente operados a altas vazões, os fenômenos de dispersão axial de calor e massa podem ser desprezados sem afetar a qualidade das predições. Apenas em reatores muito curtos com altas conversões e baixas velocidades, este efeito poderia ser significativo (Azeredo, 1996).

Muitos autores, entre eles Paterson e Carberry (1983) criticam os modelos nos quais a dispersão axial não é considerada, atribuindo a esta desconsideração os altos valores de temperatura (“hot spots”) obtidos pelos modelos. Entretanto, para reatores industriais, nos quais a relação comprimento do reator/diâmetro das partículas e o número de Reynolds são altos, pode-se desconsiderar a dispersão axial, já que o seu valor é insignificante quando comparado à dispersão radial. Este é o caso considerado no desenvolvimento de modelos objetivando o controle do reator.

II.3.5 - Resposta Inversa

Um sistema de parâmetro distribuído pode exibir uma resposta inversa, isto é, ao se introduzir uma perturbação numa variável de entrada do reator, o comportamento dinâmico da variável dependente analisada inicialmente é contrário do esperado, no entanto, na seqüência da análise o comportamento dinâmico muda e volta a ter a trajetória esperada.

A resposta inversa é uma das características dinâmicas dos reatores de leito fixo, que pode levar a problemas inesperados na operação e controle, e mesmo a um “runaway” de temperatura.

Certamente o fenômeno de resposta inversa é o que causa maiores problemas para a implementação de uma malha de controle. Este fenômeno ocorre principalmente devido a diferença das capacidades térmicas do sólido e do fluido reagente no reator catalítico de leito fixo. Este é um fenômeno físico observado na prática.

Por exemplo, se há um aumento da temperatura de alimentação do fluido reagente, T_{fo} , espera-se um aumento da temperatura do reator numa determinada posição axial do reator. No entanto, inicialmente a temperatura do reator diminui contrariando o comportamento esperado. Depois de algum tempo a temperatura do reator começa a

aumentar até atingir um valor superior ao da temperatura do reator neste ponto antes do aumento em T_{fo} . Este comportamento é chamado de resposta inversa, e é uma característica do comportamento dinâmico de muitos reatores catalíticos de leito fixo reportado tanto na literatura como na prática. Este fenômeno, resposta inversa, pode ser explicado por que o catalisador tendo uma capacidade térmica, $(\rho C_p)_s$, maior que a do fluido refrigerante, $(\rho C_p)_f$, inicialmente absorve o calor introduzido no reator pelo aumento em T_{fo} e promove a diminuição da temperatura do reator, comportamento não esperado. Entretanto, na seqüência, devido à reação química extremamente exotérmica que ocorre dentro da partícula de catalisador, há uma liberação de energia para o meio fluido e há o esperado aumento de temperatura do reator. Mais detalhes sobre o fenômeno da resposta inversa consultar McGreavy (1983), Maciel Filho (1989), McGreavy e Maciel Filho (1989).

II.3.6 - Sensitividade Paramétrica

Em condições industriais, é sabido que para reações altamente exotérmicas, a temperatura do reator tende a aumentar até um valor máximo, conhecido como “hot spot”, geralmente situado perto da entrada do reator levando a causar danos à operação do reator, como a rápida desativação do catalisador, e até mesmo a sua deterioração.

Esta sensibilidade da temperatura para pequenas variações nos parâmetros operacionais e/ou físico-químicos do sistema, foi chamado por Bilous e Amundson (1956) de sensibilidade paramétrica. Desde então, muitos trabalhos têm estudado este fenômeno, procurando obter informações que garantam a estabilidade do sistema.

Mais informações sobre modelagem de reatores catalíticos de leito fixo podem ser obtidas nas referências a seguir: Bilous e Amundson (1956), Hill (1977), Lerou e Froment (1977), Ahmedi e Fahien (1980a e 1980b), Paterson e Carberry (1983), Hagan et al. (1987, 1988a e 1988b), Khanna e Seinfeld, (1987), Khesghi et al. (1988), Froment e Bischoff (1990), Maciel Filho (1989), Maciel Filho et al. (1990), Quinta Ferreira et al. (1992), Azeredo (1996), Toledo (1992 e 1999), Toledo e Maciel Filho (1994, 1996, 1998c, 1999a e 1999b).

II.4 – SIMPLIFICAÇÕES PARA MODELOS MATEMÁTICOS

Com o intuito da utilização do modelo para simulações em estudos de otimização e controle, as simplificações na modelagem física devem ser avaliadas para cada sistema em particular, afim de não comprometerem o comportamento geral do modelo.

Um procedimento geral para a escolha de um modelo pode ser resumido da seguinte maneira (Azevedo et al., 1990):

- o modelo não deve ser mais detalhado do que o absolutamente necessário para o propósito envolvido;
- o modelo deve conter um número mínimo possível de parâmetros;
- devem existir correlações disponíveis para os parâmetros do modelo;
- o esforço matemático/computacional necessário para a solução do modelo deve ser razoável.

O último item merece uma especial atenção, devido aos cálculos de otimização e controle, onde equações do modelo devem ser resolvidas várias vezes, e o tempo adicional, pode tornar-se dispendioso, sem grandes ganhos para a representatividade do comportamento do reator.

As simplificações comumente aceitas são, Azevedo et al. (1990), Khanna e Seinfeld (1987):

1. pressão constante no reator;
2. condutividade térmica da partícula constante;
3. valores médios constantes para propriedades físicas e de transporte;
4. perfil de temperatura de entrada plano;
5. temperatura de refrigeração constante;
6. porosidade do leito constante;
7. perfil de velocidade radial plano;
8. atividade catalítica constante;
9. negligenciar dispersão axial mássica e térmica;
10. estado quasi-estacionário para a concentração;
11. negligenciar o termo de acúmulo de energia para a fase fluída;
12. isotermicidade interna da partícula catalítica;

13. propriedades do gás são função da temperatura, pressão e número de moles total como ditado pela lei do gás ideal;
14. utilização do fator de efetividade.

As suposições (1), (2) e (3) são empregadas em muitos casos. Entretanto, variações na pressão, condutividade térmica da partícula e propriedades físicas e de transporte são relativamente fáceis de incluir se o modelo está sendo resolvido numericamente. O grau de dificuldade de tais implementações varia com a técnica numérica específica adotada.

Porosidade constante do leito e escoamento “plug flow” são utilizados frequentemente, embora vários pesquisadores tenham considerado variações das mesmas. Com relação ao caso (8), se mudanças na atividade catalítica são levadas em consideração, um modelo apropriado de desativação tem que ser encontrado e ajustado para o caso particular envolvido.

No caso (9), em geral difusão axial de massa e energia tem sido negligenciadas em muitos estudos de reatores catalíticos de leito fixo. Isto é feito através de critérios desenvolvidos pelo conhecimento teórico/prático que indicam quando a dispersão axial é desprezível em face de outros fenômenos.

O estado quasi-estacionário, (10), para o balanço de massa é justificado por que qualquer resposta transiente de transporte de massa é cerca de três ordens de magnitude menor do que o observado para o transporte térmico. Outra potencial simplificação envolve assumir negligenciável o acúmulo de energia na fase gasosa quando comparada à fase sólida, a qual pode ser avaliada pela seguinte relação:

$$Relação = \frac{(\rho C_p)_g \varepsilon}{(\rho C_p)_s (1 - \varepsilon)}$$

A consideração de isothermicidade interna da partícula catalítica, (12), é geralmente aceita para a maioria das reações catalíticas gás-sólido (Pereira et al., 1979; McGreavy e Maciel Filho, 1989; Maciel Filho, 1989).

Com relação a utilização da lei do gás ideal, (13), esta é uma prática muito comum, sem maiores detalhes, e quanto à utilização do fator de efetividade, (14), este pode reduzir muito a complexidade em relação ao tratamento reação/difusão à nível de partícula.

Concluindo, estas são algumas das simplificações feitas, ressaltando que estas devem ser avaliadas para cada sistema em particular para saber de sua utilidade.

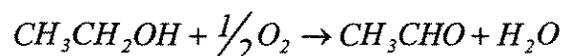
II.5 - REAÇÃO DE OXIDAÇÃO DO ETANOL A ACETALDEÍDO

O acetaldeído tem ampla utilidade num complexo industrial químico, sendo a oxidação do álcool etílico sua principal fonte de obtenção por via não petroquímica.

Esta reação é estudada desde do século XIX, e seus catalisadores são de alto valor agregado, como a prata e o cobre, e que não obtinham altos índices de conversão e seletividade.

Desta maneira, vários trabalhos já foram realizados, como a utilização de catalisador de cobre oxidado para obtenção do acetaldeído via oxidação do etanol por Moura (1984), e sendo explorada por Maciel Filho (1985), com a utilização do catalisador de Ferro-Molibdênio. Nesta última, verificou-se que para temperaturas relativamente baixas (180 - 240 °C), obtinha-se conversões altas (por volta de 98 %) e seletividade completa em acetaldeído.

A equação geral de oxidação do etanol ao acetaldeído é escrita:



Nesta linha de pesquisa, Domingues (1992) e Maciel Filho e Domingues (1992) estudaram aspectos de projeto para reatores de leito fixo monotubulares e multitubulares e, face aos resultados de seletividade e conversão obtidos, constataram a viabilidade técnico-econômica da produção do acetaldeído a partir da oxidação catalítica do etanol sobre Fe-Mo. Continuando, Tresmondi (1995) fez um estudo para a estimativa de parâmetros cinéticos e de transferência de calor em reatores de leito fixo; Azeredo (1996) desenvolveu um “software” para estudo do comportamento dinâmico de reatores de leito fixo, embora o tempo computacional necessário para a solução do modelo foi proibitivo para aplicações em tempo real; Stinghen (1998) promoveu estudos da aplicação de diferentes técnicas de otimização no reator catalítico de leito fixo para obtenção da operação ótima do sistema em

regime estacionário, e mais recentemente Toledo (1999) trabalhou no desenvolvimento e avaliação do desempenho do comportamento dinâmico de diferentes modelos, bi e unidimensionais, objetivando a aplicação dos mesmos para controle em tempo real.

Estes trabalhos ressaltam a importância desta reação, pois trata-se de uma reação exotérmica típica de muitos sistemas industriais, que revela o interesse nos estudos de simulação, controle e otimização.

II.5.1 – Equação da Taxa de Reação com Catalisador de Fe-Mo

Na dedução da equação da taxa, o mecanismo de Temkin (Temkin, 1979) foi usado para interpretar os dados experimentais. Este mecanismo considera a reação catalítica heterogênea em superfície do catalisador (Domingues, 1992). O mecanismo considera duas rotas, sendo que uma representa a reação química de oxidação do etanol à acetaldeído, e a outra rota vazia.

A taxa de oxidação de etanol à acetaldeído sobre catalisador de Fe-Mo (R_w), sugerida por Maciel (1985):

$$R_w = \frac{(R+1)2K_1K_2P_{O_2}P_{ET}}{K_3K_1P_{ET}P_{AC} + K_1P_{ET} + 2K_2P_{O_2} + K_3K_4P_{AC}P_{H_2O}}$$

$$P_{N_2} = \frac{0,79RP}{R+1+0,5X}$$

$$P_{O_2} = \frac{(0,21R - 0,5X)P}{R+1+0,5X}$$

$$P_{H_2O} = \frac{XP}{R+1+0,5X}$$

$$P_{ET} = \frac{(1-X)P}{R+1+0,5X}$$

$$P_{AC} = \frac{XP}{R+1+0,5X}$$

onde P_{N_2} , P_{O_2} , P_{ET} , P_{H_2O} e P_{AC} são pressões parciais do nitrogênio, oxigênio, etanol, água e acetaldeído respectivamente, P a pressão do reator, K_i as constantes cinéticas na forma de Arrhenius, X a conversão do etanol, R a relação molar de alimentação ar/etanol e R_w está expresso nas unidades de (NI/min.gcat).

II.6 – MODELO PSEUDO-HOMOGÊNEO BIDIMENSIONAL DO REATOR

Como o objetivo deste trabalho é desenvolver estratégias de controle para reatores de leito fixo, o modelo pseudo-homogêneo bidimensional apresentado por Toledo (1999), além de atual, tem ótima representabilidade do reator.

Desta forma, o modelo desenvolvido é baseado nos trabalhos de Maciel Filho (1989), os quais incorporaram as capacidades térmicas do fluido e do sólido, $(\rho C_p)_f$ e $(\rho C_p)_s$ respectivamente, e na formulação clássica do modelo pseudo-homogêneo, Froment e Bischoff (1990).

A formulação dinâmica determinística destes modelos consiste de equações diferenciais parciais para o balanço de massa, energia, “momentum” e continuidade com apropriadas condições iniciais e de contorno. Os modelos incorporam variações nas propriedades físicas, nos parâmetros de transferência de calor e massa, na temperatura de refrigeração e pressão do reator, aspectos estes normalmente não considerados na literatura.

Na formulação destes modelos foram assumidas as seguintes considerações:

- variação das propriedades físicas do fluido (densidade, viscosidade, condutividade térmica, capacidade calorífica, entalpia de reação, peso molecular, velocidade superficial), e coeficientes de transferência de calor e massa ao longo do reator;
- perfil de velocidade “plug-flow”;
- dispersão axial desprezível;
- perfil de temperatura na entrada do leito plano;
- fluido reagente escoando cocorrente com o fluido refrigerante;
- porosidade uniforme.

Inicialmente é apresentado o modelo pseudo-homogêneo clássico, depois o modelo aplicado neste trabalho de Toledo e Maciel Filho baseado em Maciel Filho (1989). Estes modelos são apresentados para a equação da taxa de reação de Maciel Filho (1985).

II.6.1 - Modelo Pseudo-Homogêneo Clássico

Esta formulação matemática de Froment e Bischoff (1990), para modelar o reator catalítico de leito fixo, considera a condução de calor e massa na direção radial através de parâmetros efetivos.

A seguir, são apresentadas as equações adimensionalizadas do modelo clássico com a equação da taxa de reação R_W de Maciel Filho (1985):

Balanco de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial \alpha} = \frac{D_{ef}}{R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial X}{\partial r} \right] - \frac{G}{\rho_g L} \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{PM\rho_B}{\rho_g} R_W$$

Balanco de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial \alpha} = \frac{\lambda_{ef}}{\rho_g C_p R_t^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{G}{\rho_g L} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\rho_B (-\Delta H_R)}{\rho_g C_p T_{ref}} \frac{R_W}{(R+1)}$$

Balanco da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial \alpha} = -\frac{G}{\rho_g L} \left[\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G^2 L}{\rho_g D_p p_{ref} g_c} f \right]$$

Equação Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0$$

Equação do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial \alpha} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_W}{\rho_R C_{PR}} (T(1, z, t) - T_R)$$

Condições iniciais e de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria})$$

$$r = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = Bi_h(T_R - T(1, z, t)) \quad (\text{para todo } z)$$

$$z = 0 \quad X=0, T = \frac{T_{f0}}{T_{ref}}, p = \frac{p_0}{p_{ref}}, T_R = \frac{T_{r0}}{T_{ref}} \quad (\text{para todo } r)$$

onde B_{ih} é o número de Biot térmico, C_p e C_{PR} são os calores específicos do fluido reagente e do fluido refrigerante, (kcal/kg.K), g_c é uma constante de conversão de unidades, (kg/m.h².atm), D_p diâmetro da partícula, (m), D_{ef} difusividade efetiva radial, (m/h), f fator de fricção da equação de Ergun, (Froment e Bischoff, 1990), G velocidade de fluxo mássico, (kg/m².h), h_w coeficiente de transferência de calor na parede interna do reator, kcal/(h.m².K). L comprimento do reator, (m), p a pressão total adimensional do reator, p_0 a pressão na entrada do reator, (atm), p_{ref} a pressão de referência, (atm). PM é o peso molecular médio, (kg/kmol), r o comprimento radial adimensional do reator, R relação de alimentação ar/etanol e R_t raio do reator, (m).

T é a temperatura adimensional do reator, T_{f0} a temperatura de alimentação, (K), $T(1,z,t)$ a temperatura adimensional da parede do reator, T_R a temperatura adimensional do fluido refrigerante, T_{r0} a temperatura do fluido refrigerante na alimentação, (K), T_{ref} a temperatura de referência, (K), u_R a velocidade do fluido refrigerante, (m/h), V_f a velocidade superficial, (m/h), X a conversão, z o comprimento axial adimensional do reator, λ_{ef} a condutividade efetiva radial, (kcal/m.h.K), ΔH_R a entalpia de reação molar, (kcal/kmol), ρ_g e ρ_R são as densidades do gás e do fluido refrigerante, respectivamente, (kg/m³), ρ_B densidade aparente do leito, (kgcat/m³) e R_{W1} é a taxa de reação de oxidação do etanol a acetaldeído sobre catalisador de Fe-Mo, (NI/min.gcat.), Maciel Filho (1985).

II.6.2 - Modelo de Toledo e Maciel Filho

Esse é um modelo pseudo-homogêneo modificado, que incorpora de forma implícita a presença do sólido no seu equacionamento, o que permite superar as

dificuldades de representar satisfatoriamente o comportamento dinâmico do reator catalítico de leito fixo utilizando o modelo pseudo-homogêneo clássico. Estes modelos modificados possibilitam reproduzir o comportamento dinâmico, além de alguns fenômenos como a resposta inversa, e permitem uma análise rápida e confiável do desempenho de algoritmos de controle avançados em tempo real, Toledo (1999).

A seguir, são apresentadas as equações adimensionalizadas do Modelo de Toledo e Maciel Filho desenvolvidas em Toledo (1999), e que serão utilizadas neste trabalho:

Balanco de Massa:

$$\frac{\partial X}{\partial \tau} = \frac{D_{ef}}{R_i^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial X}{\partial r} \right] - \frac{G_i}{\rho_f L} \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon)PM\rho_S}{\varepsilon\rho_f} R_W$$

Balanco de Energia:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\lambda_{ef}}{C_m R_i^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial T}{\partial r} \right] - \frac{\varepsilon G_i C_{pf}}{C_m L} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{(1-\varepsilon)\rho_S(-\Delta H_R)}{C_m T_{ref}} \frac{R_W}{(R+1)}$$

$$\text{onde: } C_m = \varepsilon(\rho_f C_{pf}) + (1-\varepsilon)(\rho_S C_{pS})$$

Balanco da Variação da Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial p}{\partial \tau} = -\frac{G_i}{\rho_g L} \left[\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{G_i^2 L}{\rho_g D_p p_{ref} g_c} f \right]$$

Equação Continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\rho_f V_f) = 0$$

Equação do Fluido Refrigerante:

$$\frac{\partial T_R}{\partial \tau} = \frac{-u_R}{L} \frac{\partial T_R}{\partial z} + \frac{h_W}{\rho_R C_{PR}} (T(1, z, t) - T_R)$$

Condições iniciais e de contorno:

$$r = 0 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{simetria})$$

$$r = 1 \quad \frac{\partial X}{\partial r} = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = Bih(T_R - T(1, z, t)) \quad (\text{para todo } z)$$

$$z = 0 \quad X=0, T = \frac{T_{f0}}{T_{ref}}, P = \frac{P_0}{P_{ref}}, T_R = \frac{T_{r0}}{T_{ref}} \quad (\text{para todo } r)$$

onde G_i é a velocidade de fluxo mássico intersticial, ($\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{h}$), e D_{ef} a difusividade efetiva radial intersticial, (m/h), as demais variáveis e parâmetros seguem a nomenclatura já citada.

II.7 - SOLUÇÃO DOS MODELOS

II.7.1 – Colocação Ortogonal

Os modelos dinâmicos de um reator catalítico de leito fixo representam um sistema “stiff” de equações diferenciais parciais parabólica/elíptica (EDPs) devido à grande razão de capacidade calorífica sólido/fluido, tipicamente ao redor de 100.

A solução numérica deste tipo de sistemas envolve normalmente uma discretização das variáveis espaciais tal que as EDPs são convertidas dentro de um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs). As técnicas de discretização mais populares são diferenças finitas e colocação ortogonal.

As vantagens de empregar diferenças finitas encontram-se na sua facilidade de implementação computacional e na confiança e estabilidade da solução correspondente. Entretanto, para descrever o comportamento dinâmico de um reator catalítico de leito fixo é necessário empregar muitos pontos de malhas para alcançar a requerida estabilidade e convergência. Isto é muito dispendioso em termos de tempo computacional e impraticável para estudos de controle/otimização.

Com relação a colocação ortogonal, este método está contido dentro da classe geral de técnicas de aproximação conhecidas como método dos resíduos ponderados, o qual também incluem os métodos de Galerkin, Integral, Mínimos Quadrados e Momentos como casos especiais. As variáveis envolvidas são expandidas em termos de uma função tentativa polinomial e as EDPs são satisfeitas nos pontos discretos ou pontos de colocação os quais

resultarão num conjunto de EDOs. Estas EDOs são expressas normalmente em termos do valor da solução nos pontos de colocação, e a colocação ortogonal pode ser aplicada em uma das duas ou em ambas direções espaciais.

O método da colocação ortogonal é um método dos resíduos ponderados para aproximação polinomial de funções incógnitas. O método se baseia em estabelecer resíduos nulos em pontos bem determinados, que neste caso, serão as raízes dos polinômios de Jacobi (Domingues, 1992), na direção espacial onde as grandezas são aproximadas por colocação.

Para modelos de estado estacionário, na qual dispersão axial não é normalmente considerada, a variável espacial radial é discretizada e as equações, agora um sistema de EDOs, podem ser integradas ao longo da direção axial. Se dispersão axial é incluída, colocação ortogonal pode ser aplicada em ambas direções radial e axial, a chamada colocação dupla e as equações do modelo são transformadas dentro de um sistema de equações algébricas não-lineares.

Para a simulação do comportamento dinâmico há necessidade da aplicação da colocação dupla, transformando o modelo num conjunto de EDOs, as quais são integradas no tempo, Método das Linhas.

Obter a solução por colocação ortogonal é geralmente mais rápido do que pelo método das diferenças finitas para equivalente precisão devido ao uso de um número reduzido de pontos de malha (pontos de colocação). Entretanto, se polinômios de alta ordem são empregados como funções tentativas, a solução computada pode ser ondulada e desde que as formulas da colocação ortogonal são usadas para aproximar derivadas, os problemas com este comportamento podem ser significantes (Toledo, 1999).

Froment e Bischoff (1990) mostraram que o método da colocação ortogonal foi cerca de 30% mais rápido que dois métodos de diferenças finitas testados. Finlayson (1971) também demonstrou que o método da colocação ortogonal é mais rápido que o método das diferenças finitas quando aplicado a um reator bidimensional “plug-flow”.

Mais informações sobre solução de modelos podem ser obtidas nas referências a seguir: Carnahan et al. (1969), Finlayson (1971 e 1974), Carey e Finlayson (1975), Mihael e Iordache (1976), Constantinides (1978), Villadsen e Michelsen (1978), Kubicek e Hlavacek (1983), Davis (1984), Segall et al. (1984), Kuno e Seader (1988), Chapra e Canale (1989), Froment e Bischoff (1990), Schiesser (1991), Domingues (1992), Cunha (1993), Kwong (1993), Rice e Do (1995) e Toledo e Maciel Filho (1995), Toledo (1999).

II.7.2 – Metodologia de Resolução Numérica

A solução das equações, descritas anteriormente, foi feita pelo Método das Linhas, utilizando-se o método da colocação ortogonal (Villadsen & Michelsen, 1978) na direção radial com o método de Runge-Kutta de quarta ordem para a direção axial. Este método vai reduzir um sistema de equações diferenciais parciais de segunda ordem com duas variáveis independentes em um sistema de equações diferenciais ordinárias, pela substituição de cada uma das diferenciais parciais por um conjunto de tantas equações diferenciais ordinárias quantas forem os pontos de colocação estabelecidos (Azeredo, 1996).

Para as respostas do modelo, utilizou-se 8 pontos axiais e 5 pontos radiais no reator, sendo que nos 5 pontos radiais são feitas médias para haja uma única saída axial, tendo como base para isto o fluxo “plug-flow”.

II.8 – CONCLUSÕES

Neste capítulo comentou-se sobre os princípios da modelagem e simulação de reatores catalíticos de leito fixo, objetivando demonstrar a base teórica e prática dos estudos que seguiram nos próximos capítulos.

Os modelos de reatores tubulares de leito fixo têm sido amplamente estudados, com diferentes níveis de sofisticação, podendo desta forma concluir que o modelo empregado neste trabalho, desenvolvido por Toledo e Maciel Filho, e as simplificações empregadas para representar o comportamento dinâmico do reator apresentam bom potencial para se atingir os propósitos do trabalho.

Também se comentou neste capítulo, o método numérico utilizado para simulação do modelo do reator, sendo os resultados obtidos apresentados nos próximos capítulos.

CAPÍTULO III - SIMULAÇÃO DINÂMICA DO REATOR

III.1 – INTRODUÇÃO

Neste capítulo apresentam-se simulações dinâmicas do modelo pseudo-homogêneo bidimensional de Toledo e Maciel Filho desenvolvidas em Toledo (1999), que foi apresentado no Capítulo II.

As figuras representam o comportamento dinâmico do reator em malha aberta frente a mudanças nas variáveis de entrada, de modo que possibilita ter uma compreensão destas e como elas afetam o desempenho do reator. Esta análise permite determinar quais variáveis devem ser escolhidas para serem controladas e/ou manipuladas com a finalidade de manter ou alterar o ponto de operação do reator.

III.2 – SIMULAÇÃO DINÂMICA

Esta etapa do trabalho é muito importante para o conhecimento e definição de condições operacionais do reator, possibilitando analisar o efeito e a sensibilidade das variáveis imposta no reator.

Para as simulações que são mostradas neste trabalho, foram utilizados os seguintes parâmetros de projeto:

Propriedades do Catalisador Fe-Mo

$$C_{ps} = 0.15 \text{ kcal/kgcat.K}$$

$$\rho_s = 3857 \text{ kgcat/m}^3$$

$$\rho_B = 2314 \text{ kgcat/m}^3$$

onde:

$$C_{ps} = \text{calor específico do catalisador, (kcal/kgcat.K)}$$

ρ_s = densidade do catalisador, (kgcat/m³)

ρ_B = densidade aparente do leito, (kgcat/m³)

Parâmetros Operacionais e de Projeto do Reator Catalítico de Leito Fixo

$T_{fo} = T_{ro} = 437.15K;$

$R = 28;$

$GM = G = G_i = 7000kg/m^2.h;$

$u_R = 3.0 m/h;$

$p_o = 1 atm;$

$D_t = 0.017m;$

$D_p = 0.002m;$

$L = 2m;$

$\varepsilon = 0.4.$

Neste trabalho não se considera a variação das propriedades físicas, dos coeficientes de transferência, da pressão e nem da temperatura do fluido refrigerante ao longo do comprimento do reator. Estas suposições foram adotadas, devido ao fato que este trabalho tem por princípio o estudo de um sistema de controle, e que a variação dos elementos citados acima, acarretam mudanças quantitativas e não qualitativas, como já mostrado em trabalhos anteriores (Toledo, 1999).

Já o estudo dos efeitos e sensibilidades das variáveis de entrada do reator são de extrema necessidade para fins de controle. Desta forma, fez-se variações de grau nas variáveis de entrada (independentes), no caso temperatura do fluido reagente, temperatura do fluido de refrigeração, concentração de reagente e vazão do fluido reagente, de modo que possibilite a análise das variáveis dependentes, como a conversão do reagente em produto e a temperatura do reator.

As variáveis de entrada escolhidas a serem perturbadas foram as seguintes:

- T_{fo} = temperatura de alimentação dos reagentes, K;
- T_{ro} = temperatura de alimentação do fluido refrigerante, K;
- T_r = temperatura do fluido refrigerante ao longo do reator, K;

- R = razão molar de alimentação ar/etanol;
- GM = G = G_i = velocidade de fluxo mássico, kg/m².h.

Deve-se ressaltar que o modelo bidimensional foi simulado utilizando 5 pontos de colocação radiais internos e 8 pontos de colocação axiais internos. Estes números foram escolhidos após extensivo estudo por Toledo (1999), procurando-se obter a mínima realização do sistema. Isto é, uma malha de discretização com o mínimo de pontos e que possibilita reproduzir o comportamento dinâmico do reator adequadamente.

Ao longo do trabalho serão apresentadas figuras referentes normalmente as variáveis dependentes do reator, por exemplo, a temperatura, nas posições axiais Z_i. Estas posições se referem ao resultado de interpolação dos pontos de colocação axiais internos Ψ_{MZi} , que por sua vez representam os valores radiais médios. Estes pontos estão representados na Figura III.1 como Z₁, Z₂, Z₃ e assim sucessivamente, até a sexta posição axial. Portanto, a compreensão da Figura III.1 é fundamental para o entendimento das figuras dos Capítulos III, IV e V.

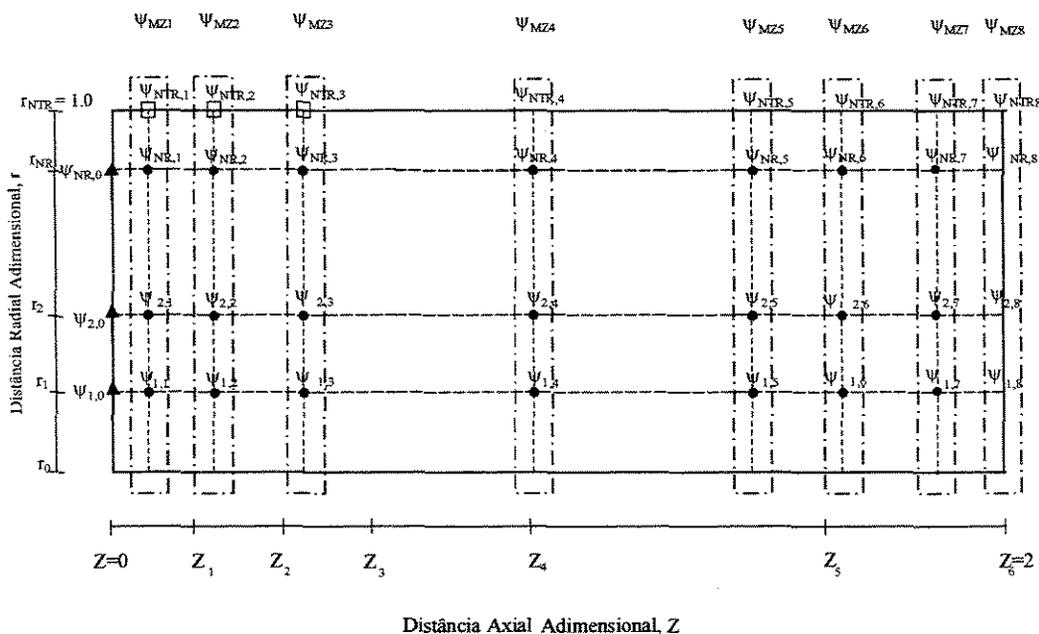


Figura III.1 – Malha de Pontos Gerados pela Colocação Dupla

Nesta figura os Ψ_{MZi} ($i = 1, \dots, 8$) equivalem as posições axiais dos pontos de colocação tem os seguintes valores adimensionais:

$$\Psi_{MZ1} = 0.0254;$$

$$\Psi_{MZ2} = 0.129;$$

$$\Psi_{MZ3} = 0.297;$$

$$\Psi_{MZ4} = 0.5;$$

$$\Psi_{MZ5} = 0.703;$$

$$\Psi_{MZ6} = 0.871;$$

$$\Psi_{MZ7} = 0.975;$$

$$\Psi_{MZ8} = 1.0.$$

e os Z_i ($i = 1, \dots, 6$), equivalem as seguintes posições axiais do reator:

$$Z_1 = 0.20 \text{ m};$$

$$Z_2 = 0.40 \text{ m};$$

$$Z_3 = 0.60 \text{ m};$$

$$Z_4 = 1.00 \text{ m};$$

$$Z_5 = 1.60 \text{ m};$$

$$Z_6 = 2.00 \text{ m}.$$

Efeito de Tfo

Pelas Figuras III.2 a III.5, observa-se o comportamento dinâmico da temperatura e conversão ao longo do eixo axial do reator frente a perturbações degrau positiva e negativa em Tfo.

Das figuras conclui-se que o sistema apresenta um comportamento não linear, inclusive o fenômeno da resposta inversa, mostrando a alta complexidade dinâmica deste sistema e a sensibilidade frente a perturbações em Tfo. Observa-se também pelas figuras que os últimos pontos do reator são menos sensíveis, isto devido já não haver reagente para converter como no início do reator.

Para fins de controle, Tfo não é uma boa opção como variável manipulada, principalmente por ocasionar resposta inversa no sistema.

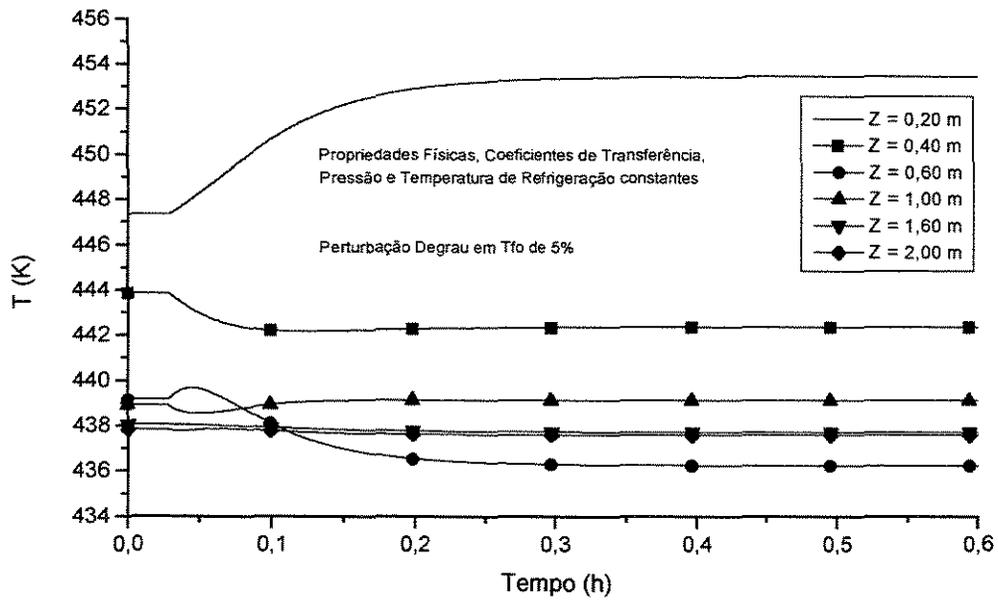


Figura III.2 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

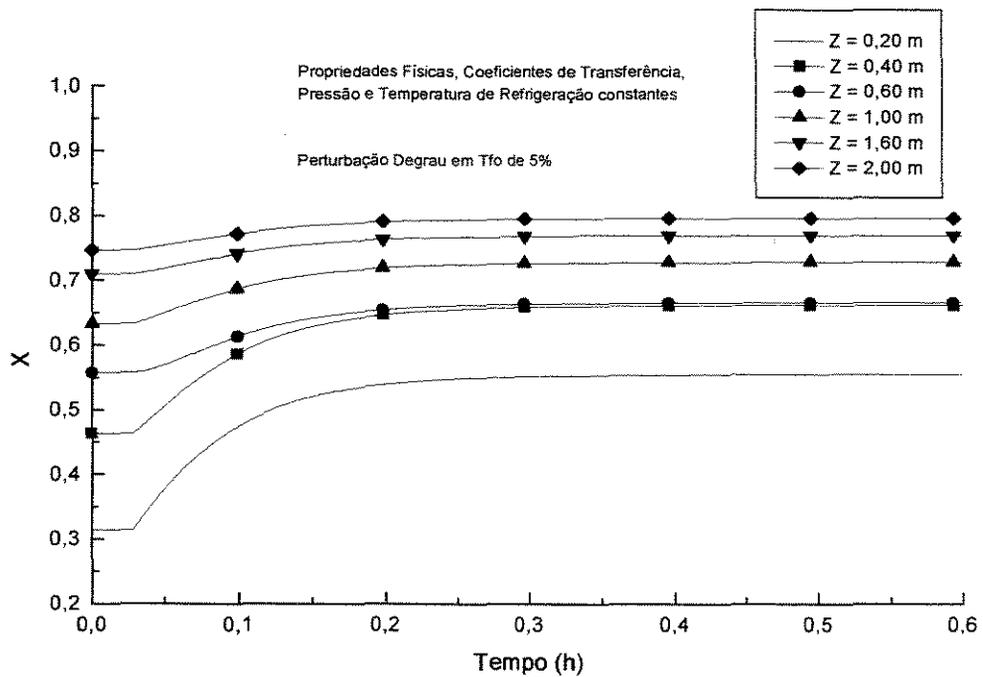


Figura III.3 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

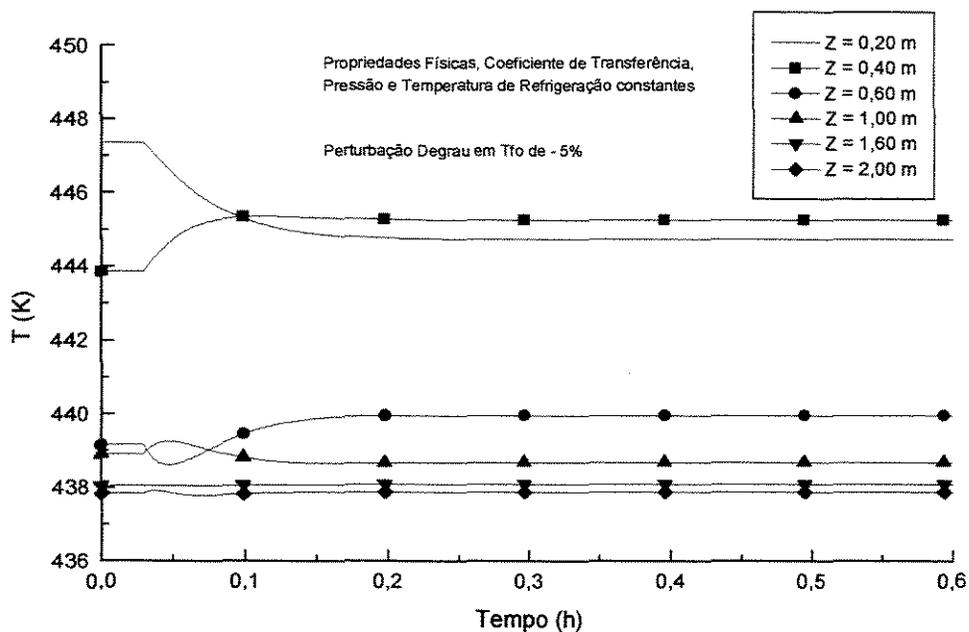


Figura III.4 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

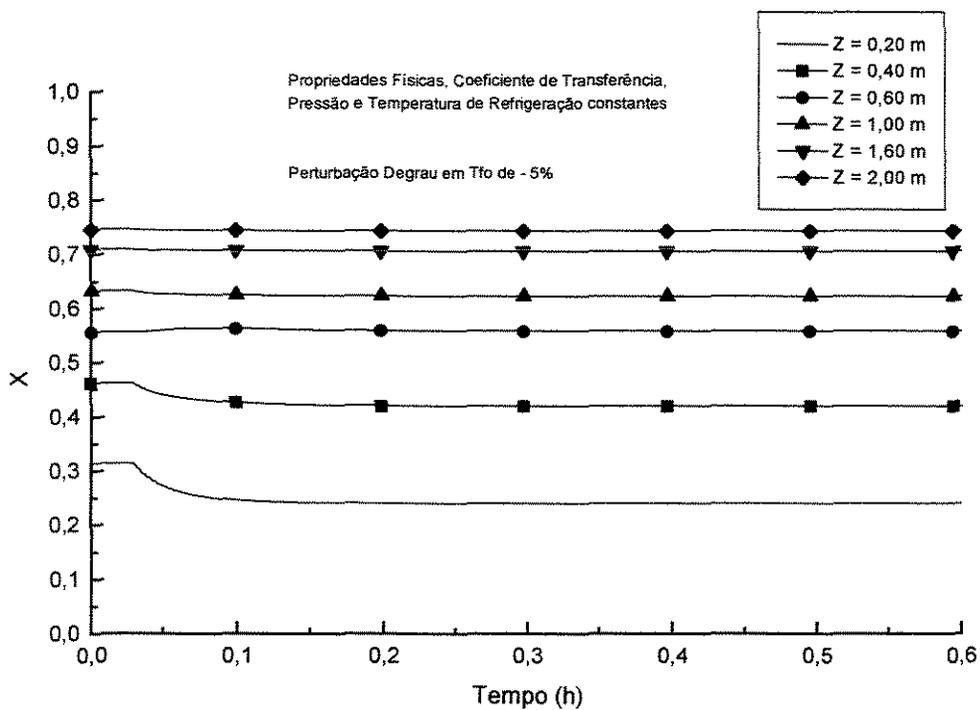


Figura III.5 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

Efeito de Tro

O comportamento do reator frente à perturbações degraus em Tro apresenta uma maior sensibilidade do que com relação à T_{fo} , devido ao fato do fluido refrigerante atuar em toda a extensão do reator, o que pode ser observado nas Figuras III.6 a III.9, nas quais perturbações de menor grandeza produzem grandes oscilações nas variáveis dependentes. Pode ser notado também, que no ponto Z_1 , a temperatura do reator atinge os maiores valores, se tornando desta forma de grande interesse para o sistema de controle.

Também deve ser ressaltada a dificuldade prática de mudanças repentinas na temperatura do fluido refrigerante, que normalmente se constitui em um volume considerável de fluido com alta capacidade calorífica nos sistemas de porte industrial.

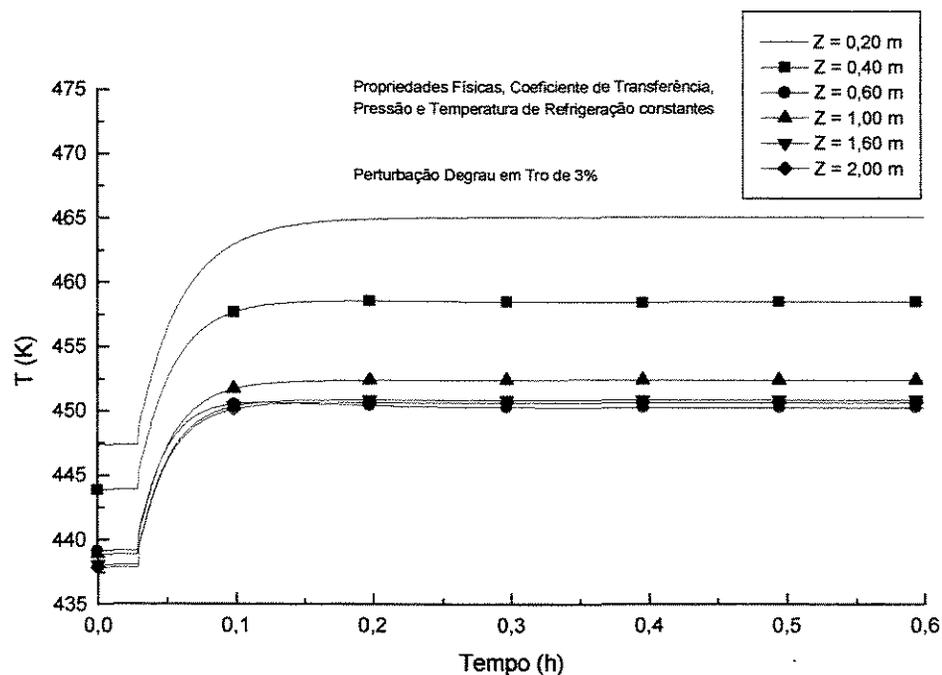


Figura III.6 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

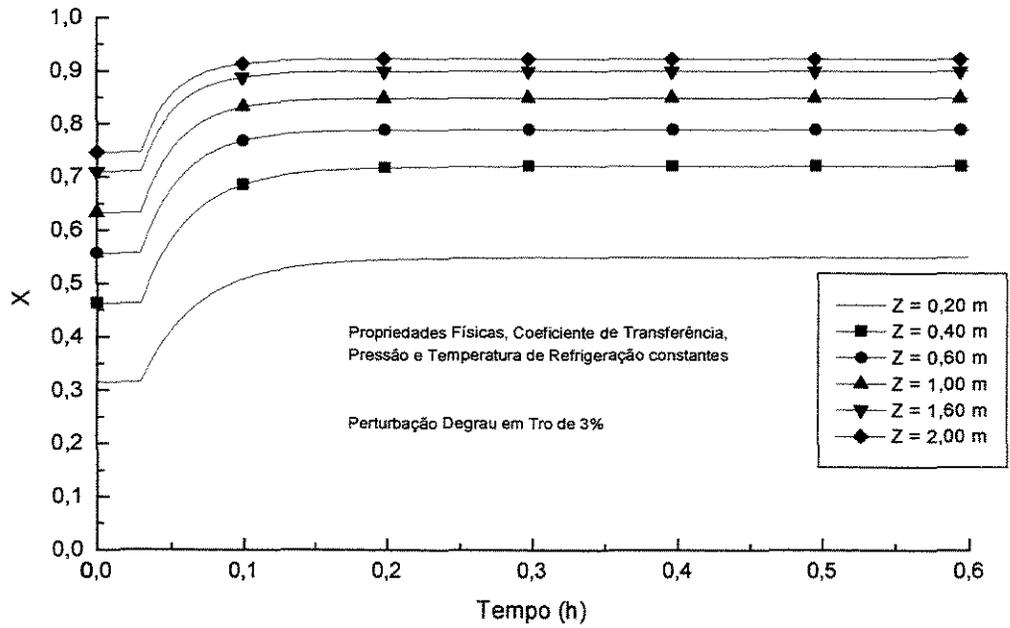


Figura III.7 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

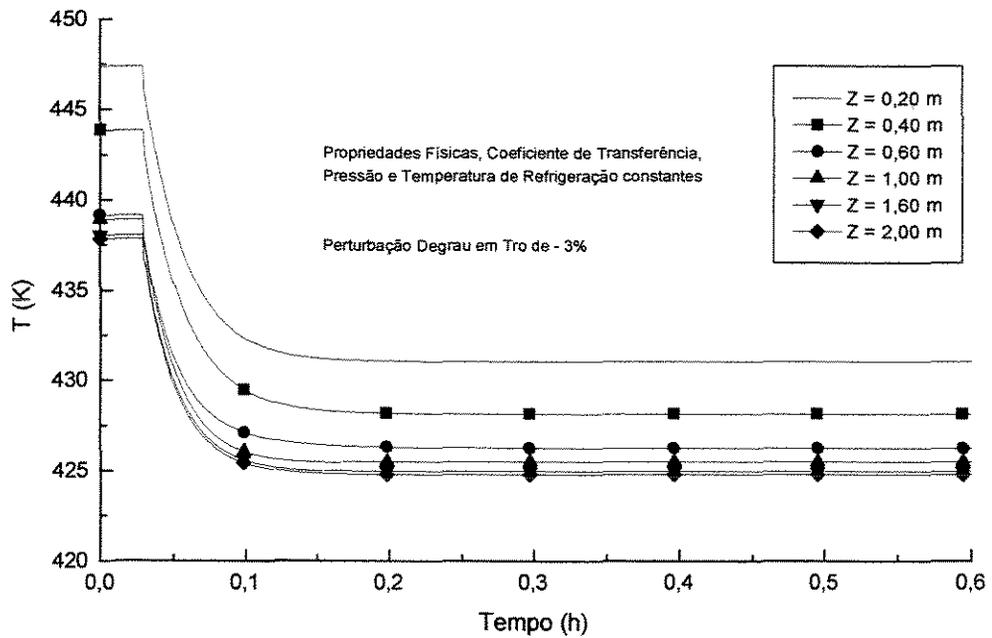


Figura III.8 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

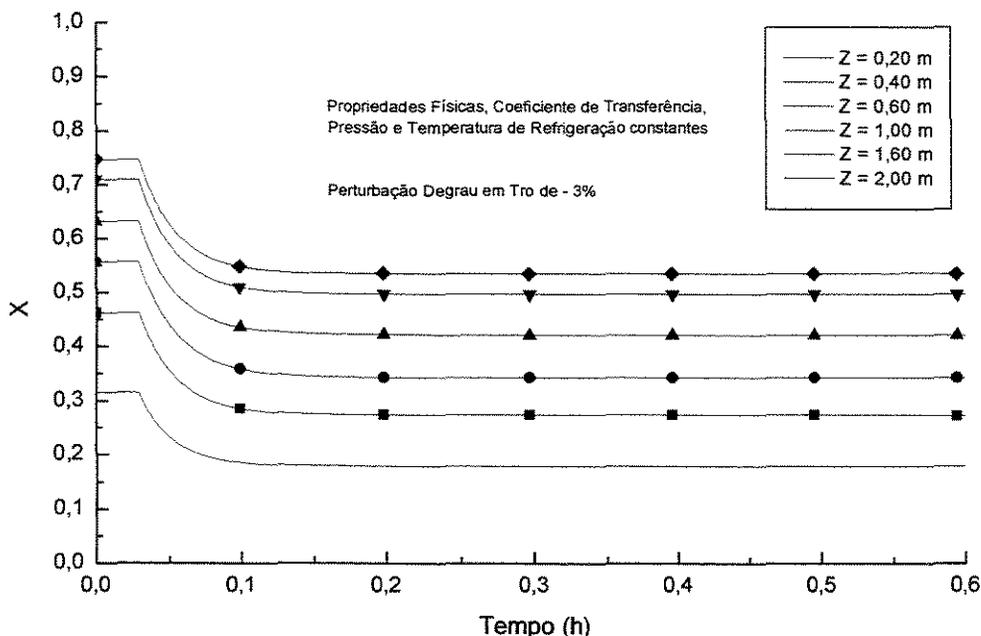


Figura III.9 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

Efeito de GM

Através da observação das Figuras III.10 a III.13, nota-se um comportamento bem menos complexo e baixa sensibilidade do sistema frente às perturbações em GM, por isso visualiza-se somente alguns pontos axiais onde a perturbação pode ser melhor notada. E como a vazão é amplamente utilizada em sistemas de controle, neste caso grandes variações serão necessárias para se obter à resposta desejada do reator. Respostas inversas de pequena intensidade na conversão do reator também foram notadas.

No entanto, com relação aos perfis da pressão do reator, estes apresentam um comportamento semelhante a uma resposta degrau. Isto é devido provavelmente a forma da equação dinâmica da pressão em relação ao parâmetro GM. A equação dinâmica da pressão vem de uma análise dimensional, uma maneira simplificada de gerar perfis dinâmicos da pressão ao longo do reator, Maciel Filho (1989). Devido a esta simplificação no modelo e comportamento muito abrupto da pressão em relação a perturbações degraus em GM, optou-se por considerar somente perfis constantes para a pressão no decorrer do trabalho.

Evita-se com isso perfis dinâmicos de pressão muito agudos e que, provavelmente, não representem a realidade do reator catalítico de leito fixo.

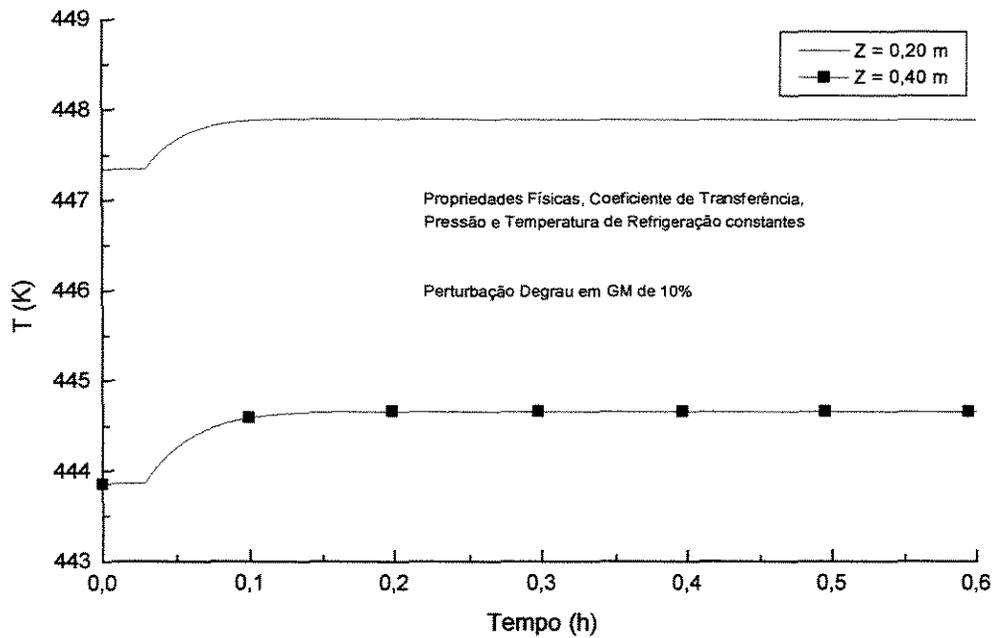


Figura III.10 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

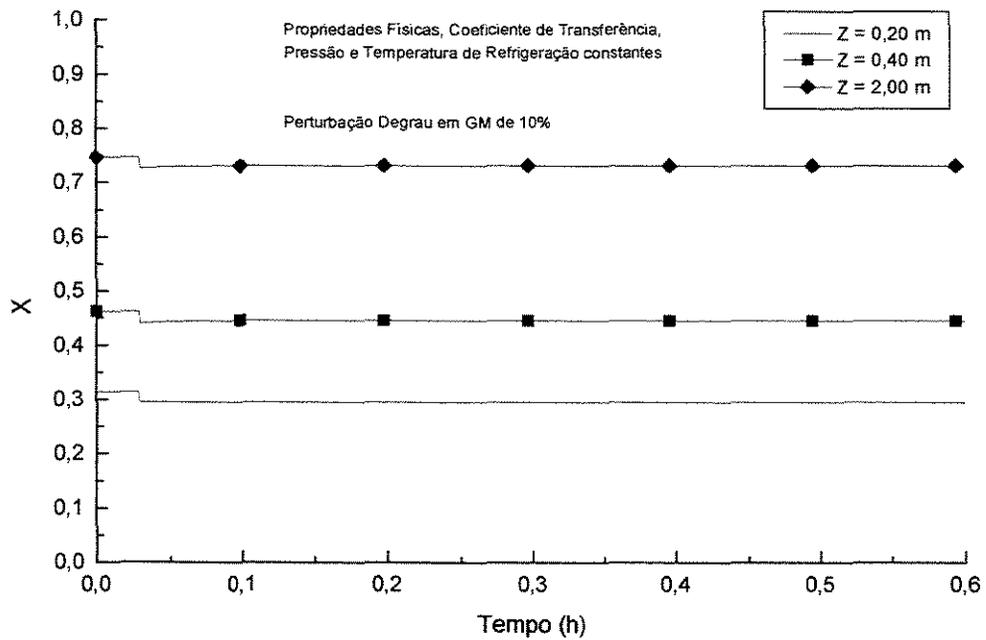


Figura III.11 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

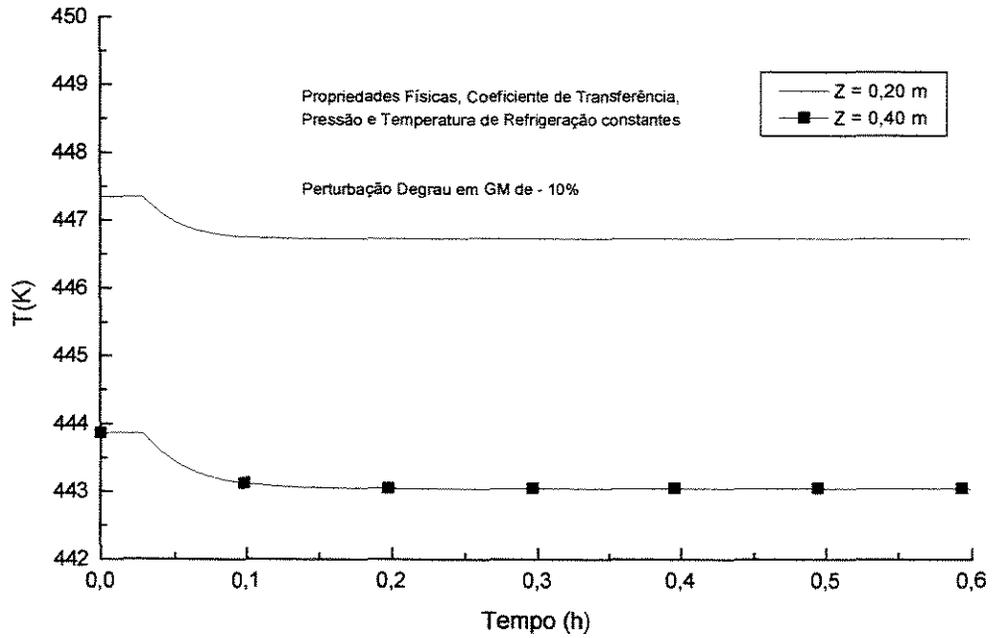


Figura III.12 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

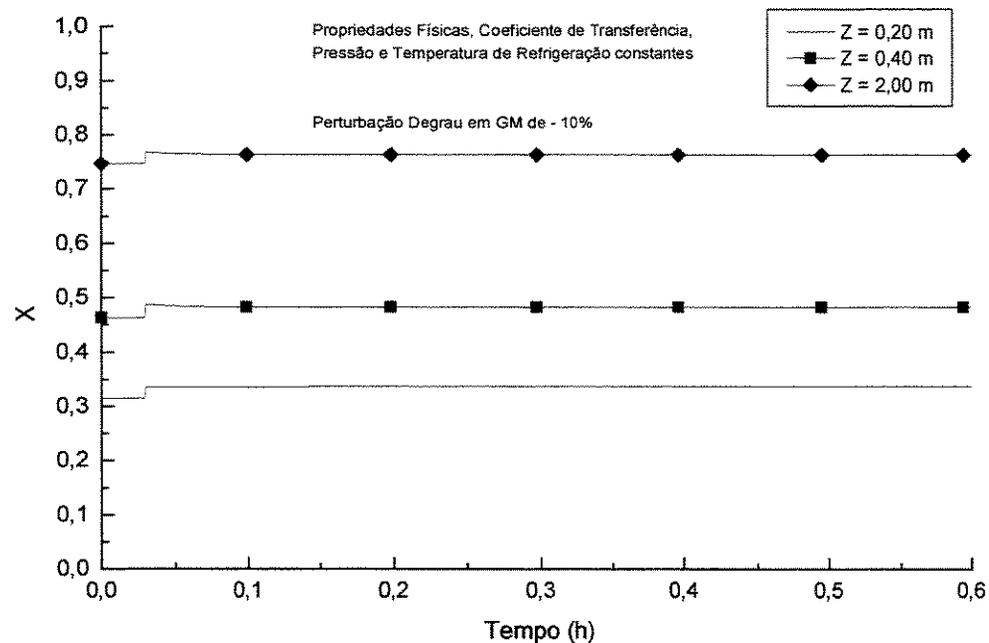


Figura III.13 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

Efeito de R

Pela observação das Figuras III.14 a III.17, nota-se um comportamento dinâmico bem parecido com as do Efeito em GM, com uma não-linearidade menos acentuada do reator para mudanças nestas variáveis operacionais (GM e R), e como já se foi falado anteriormente, com pouca sensibilidade do sistema para perturbações degrau nestas variáveis operacional, onde também se visualiza nas figuras somente alguns pontos axiais do reator que melhor se observa as perturbações.

Também se observam respostas inversas nos gráficos de temperatura do reator, pois para perturbação num sentido, tem-se respostas em outro.

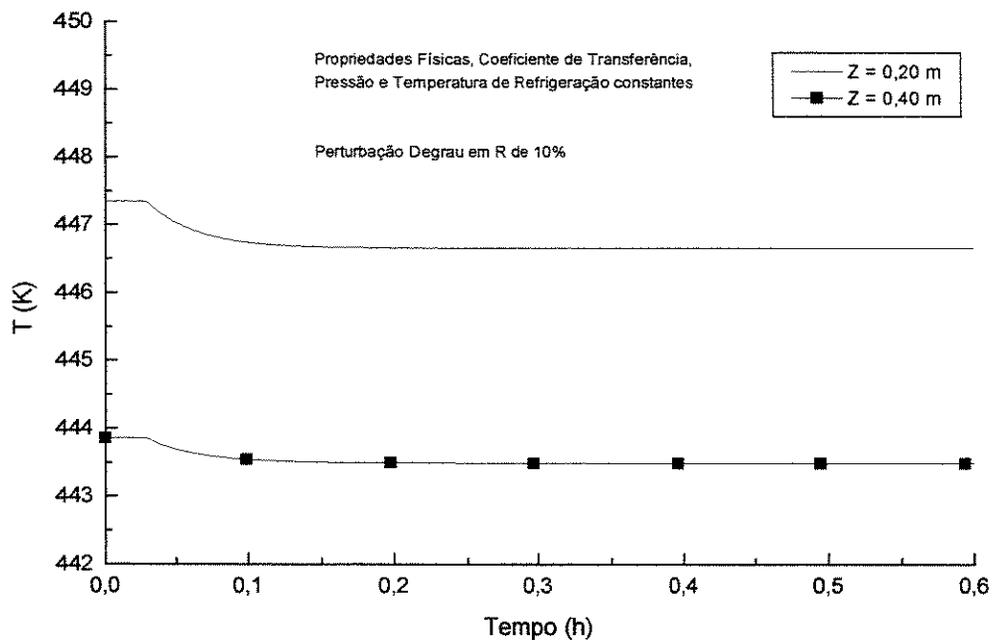


Figura III.14 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

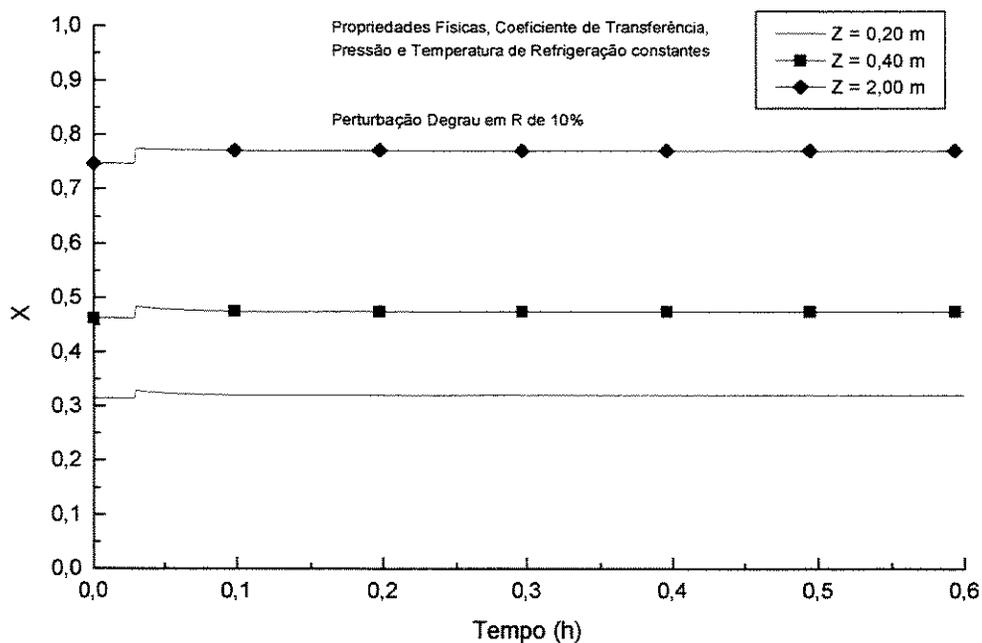


Figura III.15 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

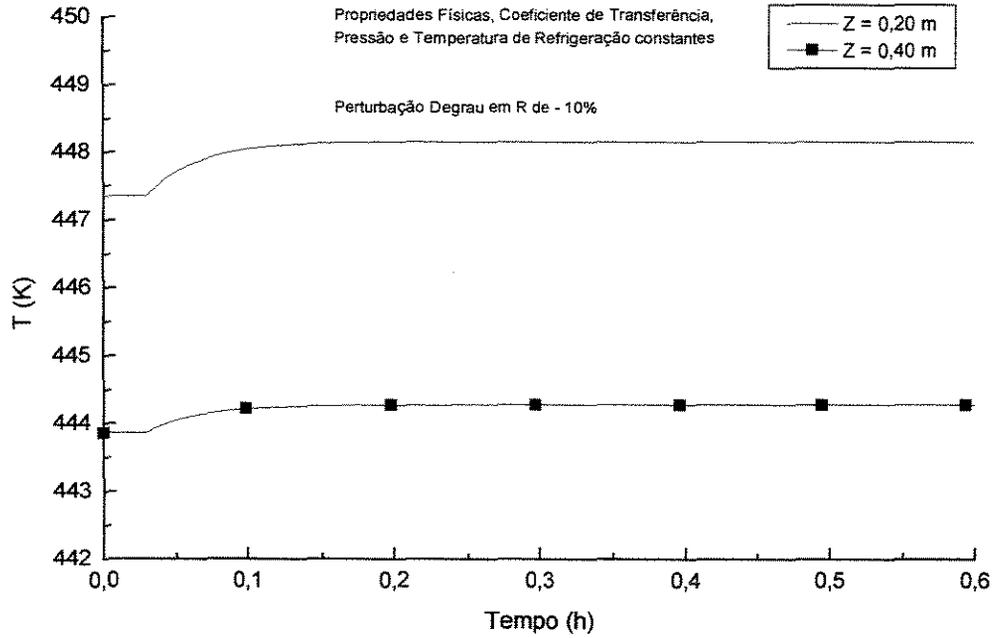


Figura III.16 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

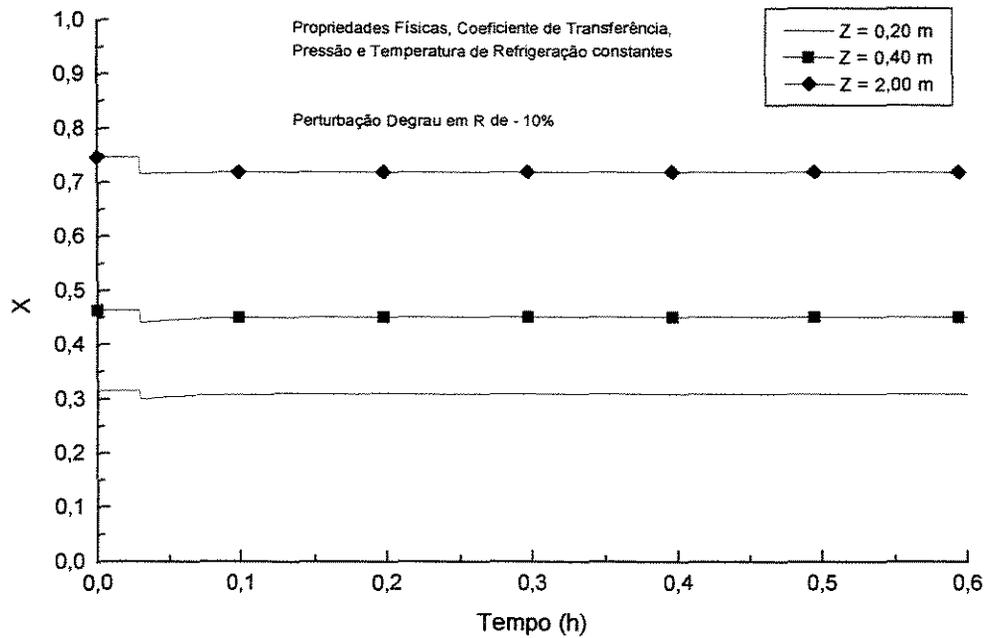


Figura III.17 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

III.3 – CONCLUSÕES

Neste capítulo apresentou-se o comportamento dinâmico do reator utilizando o modelo pseudo-homogêneo bidimensional do reator catalítico de leito fixo (modelo de Toledo e Maciel Filho), onde o modelo se apresentou eficiente na reprodução qualitativa das características deste tipo de reator. Uma questão fundamental a ser comentada é a importância da utilização da capacidade térmica do sólido, $(\rho C_p)_s$, na modelagem do reator visando representar adequadamente o comportamento dinâmico do mesmo.

Com a imposição de perturbações degrau nas variáveis manipuladas (independentes) do reator, procurou-se observar os efeitos que as mesmas reproduziam nas variáveis controladas (dependentes), para melhor planejar as estratégias de controle e otimização que serão de fundamental importância para os próximos capítulos.

CAPÍTULO IV - MODELAGEM EMPÍRICA DO REATOR

IV.1 – INTRODUÇÃO

Observa-se através das perturbações feitas até o momento, que há a necessidade de se avaliar a interação existente entre as variáveis para se estabelecer uma política adequada de controle. Desta forma, fez-se um planejamento de experimentos em estrela para as variáveis de controle (fatores), estudadas no capítulo anterior, para a análise de seus efeitos e suas interações.

Um modelo estatístico do sistema também será obtido e utilizado no próximo capítulo em um sistema de controle.

IV.2 – PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS

Ao contrário do que normalmente se pensa, a estatística não é só análise de dados, ela é também uma ferramenta que auxilia no planejamento dos experimentos em que esses dados são coletados. É comum, especialmente em indústrias químicas, aparecerem problemas em que é preciso investigar várias propriedades ao mesmo tempo e estas, por sua vez, são afetadas por uma dúzia ou mais de fatores experimentais.

Os planejamentos experimentais, baseados em princípios estatísticos, extraem do sistema em estudo o máximo de informação útil, através de um número mínimo de experimentos. As ferramentas estatísticas, embora valiosas, são apenas um complemento ao conhecimento que o especialista possuiu sobre o sistema em estudo. O ideal é que as duas coisas – conhecimento básico do problema e estatística – andem juntas.

Um dos problemas mais comuns que um experimentador pode enfrentar é a determinação da influência de uma ou mais variáveis sobre uma outra variável de interesse.

A primeira coisa a fazer, no planejamento de um experimento, é determinar quais são os fatores e as respostas de interesse para o sistema que se deseja estudar. Os fatores, isto é, as variáveis manipuladas pelo experimentador, tanto podem ser qualitativas (como

tipo de catalisador) como quantitativas (como a temperatura). Dependendo do problema, pode haver mais de uma resposta de interesse.

Em seguida, é preciso definir claramente que objetivo se pretende alcançar com os experimentos, porque isso determinará que tipo de planejamento experimental deve ser utilizado.

Tendo-se selecionado as variáveis importantes, o próximo passo seria avaliar quantitativamente sua influência sobre a resposta de interesse, bem como suas possíveis interações. Para fazer isso com o mínimo de experimentos o pesquisador pode empregar planejamentos fatoriais completos. Ultrapassando essa etapa e desejando obter uma descrição mais detalhada, isso é, obter modelos mais sofisticados, pode-se empregar a modelagem por mínimos quadrados.

Às vezes o objetivo principal do pesquisador é otimizar o seu sistema, isto é, maximizar ou minimizar algum tipo de resposta. Pode ocorrer que ao mesmo tempo deseje-se satisfazer determinados critérios. Por exemplo: produzir a máxima quantidade de um determinado produto ao menor custo possível e sem fugir das especificações. Uma técnica conveniente para isso é a metodologia de superfícies de resposta (RSM).

A metodologia de superfícies de resposta (ou RSM, de “Response Surface Methodology”) é uma técnica de otimização baseada no emprego de planejamentos fatoriais, introduzida por G. E. P. Box na década de 1950 (Box et. al., 1978), e que desde então tem sido usada com grande sucesso na modelagem de diversos processos industriais. Os textos tradicionais que tratam da RSM normalmente são dirigidos a um público com escassos conhecimentos de estatística e por isso mesmo são bastante prolixos, recorrendo a técnicas e procedimentos muito específicos, que na verdade são casos particulares de procedimentos mais gerais.

A metodologia de superfícies de resposta é constituída de duas etapas distintas: modelagem e deslocamento. Essas etapas são repetidas tantas vezes quantas forem necessárias, com o objetivo de atingir uma região ótima (máxima ou mínima) da superfície investigada. A modelagem normalmente é feita ajustando-se modelos lineares ou quadráticos a resultados experimentais obtidos a partir de planejamentos fatoriais. O deslocamento se dá sempre ao longo do caminho de máxima inclinação de um determinado modelo, que é a trajetória na qual a resposta varia de forma mais pronunciada.

Para se investigar a superfície de resposta em torno das condições habituais de funcionamento do processo, usando o planejamento fatorial, note que este planejamento

contém um ponto central, e por isso varre três níveis de cada variável, e não apenas dois. O fato de existirem três níveis nos permitirá verificar se há ou não falta de ajuste para um modelo linear, caso que seria impossível se houvesse apenas dois níveis.

Se o modelo linear não serve, o passo seguinte naturalmente é tentar um modelo quadrático, cuja expressão geral, para duas variáveis, é

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_{11}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + b_{12}x_1x_2$$

Esse modelo, no entanto, tem seis parâmetros, e um planejamento até o momento tem apenas cinco “níveis”, isto é, cinco diferentes combinações de valores. Como não é possível determinar as estimativas quando há mais parâmetros de que níveis, o planejamento deve ser ampliado. A ampliação pode ser feita de várias maneiras. A mais comum é a construção do chamado planejamento em estrela. Para fazer um planejamento em estrela simplesmente acrescentamos ao planejamento já existente um planejamento idêntico, porém girado de 45 graus em relação à orientação de partida. O resultado é uma distribuição octogonal. Um argumento geométrico simples, leva à conclusão de que os novos pontos estão a uma distância de $2^{1/2}$ do ponto central (em variáveis codificadas).

Na metodologia de superfícies de resposta o número de variáveis não é uma restrição, nem o número de respostas. A RSM pode ser aplicada a qualquer número de variáveis independentes e pode modelar simultaneamente várias respostas. Essa característica é importante em muitas situações práticas, sobretudo na indústria, onde vários critérios têm de ser satisfeitos ao mesmo tempo. Essa técnica também se baseia na modelagem por mínimos quadrados.

Modelos Empíricos são modelos que procuram apenas descrever, com base na evidência experimental, o comportamento do processo estudado. Na modelagem empírica procura-se descrever o processo estudado na região experimental investigada. Isso quer dizer que modelos empíricos são também modelos locais. Sua utilização para previsões para situações desconhecidas corre por conta e risco do usuário.

Construir modelos não basta. É preciso também avaliar se eles são realmente adequados à situação que se pretende descrever. Só então tem cabimento extrair conclusões desses modelos.

Mais detalhes sobre planejamento de experimentos consultar: Box et al. (1978), Bruns (1993) e Barros Neto et al. (1996).

Na Tabela IV.1, pode-se observar os valores das perturbações que serão dadas no planejamento em estrela para cada variável.

Tabela IV.1 – Perturbações das Variáveis de Manipulação

Variável	Porcentagem (%)	Valor baixo (-1)	Valor central (0)	Valor alto (+1)
Tfo (K)	2	428,407	437,15	445,893
Tro (K)	2	428,407	437,15	445,893
GM (kg/m ² .h)	10	6300	7000	7700
R	10	25,20	28,00	30,80

O planejamento em estrela consiste em um fatorial completo 2⁴, o que acarreta em 16 experimentos, mais 8 experimentos com 45° em relação aos demais, e mais 2 experimentos no ponto central, que serão demonstrados a seguir na Tabela IV.2.

As respostas para o planejamento serão as variáveis controladas: a temperatura do reator no 1° ponto que se situa a 0,20 m da entrada e a conversão na saída do reator. Estas respostas foram escolhidas, de maneira tal que possa ser controlado o ponto de maior oscilação de temperatura no reator, como foi observado no Capítulo III, e o ponto de maior interesse econômico na planta industrial, respectivamente.

Tabela IV.2 – Planejamento Fatorial em Estrela para o Reator

Corrida	Tfo (K)	Tro (K)	GM (kg/m ² h)	R	T (K)	X
1	428,407	428,407	6300	25,20	435,2139	0,5916
2	428,407	428,407	6300	30,80	434,4859	0,6462
3	428,407	428,407	7700	25,20	435,7293	0,5578
4	428,407	428,407	7700	30,80	434,9197	0,6100
5	428,407	445,893	6300	25,20	458,1418	0,8618
6	428,407	445,893	6300	30,80	456,1391	0,9023
7	428,407	445,893	7700	25,20	460,2175	0,8456

8	428,407	445,893	7700	30,80	457,5440	0,8820
9	445,893	428,407	6300	25,20	437,5459	0,6008
10	445,893	428,407	6300	30,80	436,5934	0,6544
11	445,893	428,407	7700	25,20	438,8923	0,5684
12	445,893	428,407	7700	30,80	437,7798	0,6197
13	445,893	445,893	6300	25,20	463,1910	0,8987
14	445,893	445,893	6300	30,80	458,6436	0,9088
15	445,893	445,893	7700	25,20	467,5480	0,8914
16	445,893	445,893	7700	30,80	460,6159	0,8853
17	419,664	437,15	7000	28,00	445,1681	0,7439
18	545,636	437,15	7000	28,00	451,4663	0,7717
19	437,15	419,664	7000	28,00	426,0270	0,4693
20	437,15	545,636	7000	28,00	471,3280	0,9599
21	437,15	437,15	5600	28,00	446,0402	0,7816
22	437,15	437,15	8400	28,00	448,3723	0,7179
23	437,15	437,15	7000	22,40	449,1544	0,6886
24	437,15	437,15	7000	33,60	446,0744	0,7926
25	437,15	437,15	7000	28,00	447,3448	0,7464
26	437,15	437,15	7000	28,00	447,3448	0,7464

IV.2.1 – Análise da Temperatura do Reator

Para análise dos experimentos feitos na Tabela IV.2, utilizou-se o “Software Statistica for Windows 5.0”, que se mostrou neste trabalho ser eficiente na metodologia empregada e oferecendo amplos recursos de informática.

Os efeitos das variáveis de entrada e suas interações podem ser observados na Tabela IV.3. Com estes pode-se notar a necessidade de controle da temperatura do reator pela temperatura de refrigeração (Efeito 2), sendo a temperatura do reator uma variável de controle importante, haja vista a ocorrência de pontos quentes dentro do reator.

Na Tabela IV.4 são apresentados os coeficientes do modelo estatístico para a resposta de interesse, no caso a temperatura do reator, que foram obtidos por regressão. Em

seguida o modelo estatístico é apresentado e representado na Figura IV.1, onde o modelo pode ser comparado com as respostas observadas no planejamento.

Tabela IV.3 – Efeitos Principais

	Efeito	Erro Padrão	Teste-t	p
Média/Interação	447,3448000	0,595707915	750,9465439	0,000000000
(1) Tf (L)	3,4179250	0,343932125	9,9377893	0,000000787
Tf (Q)	0,6099438	0,403296165	1,5123966	0,158619058
(2) Tr (L)	23,4568917	0,343932125	68,2020956	0,000000000
Tr (Q)	0,7900938	0,403296165	1,9590907	0,075932081
(3) GM (L)	1,4963417	0,343932125	4,3506889	0,001154054
GM (Q)	0,0544688	0,403296165	0,1350589	0,895004953
(4) R (L)	-2,1598583	0,343932125	-6,2798970	0,000060036
R (Q)	0,2585438	0,403296165	0,6410766	0,534601316
1L por 2L	0,9366875	0,421229106	2,2237008	0,048053239
1L por 3L	0,5540375	0,421229106	1,3152878	0,215170216
1L por 4L	-0,9163375	0,421229106	-2,1753898	0,052283707
2L por 3L	0,7909875	0,421229106	1,8778083	0,087158596
2L por 4L	-1,5691375	0,421229106	-3,7251403	0,003351671
3L por 4L	-0,4121375	0,421229106	-0,9784165	0,348896509

Tabela IV.4 – Coeficientes de Regressão do Modelo do Sistema

	Coefic. Regres.	Erro Padrão	Teste-t	P
Média/Interação	2409,629467	1048,203501	2,29881837	0,042119390
(1) Tf (L)	-5,763915	2,624246	-2,19640857	0,050401229
Tf (Q)	0,003990	0,002638	1,51239660	0,158619058
(2) Tr (L)	-5,410349	2,624246	-2,06167779	0,063680853
Tr (Q)	0,005168	0,002638	1,95909066	0,075932081
(3) GM (L)	-0,044802	0,022247	-2,01381717	0,069146227
GM (Q)	0,000000	0,000000	0,13505893	0,895004953

(4) R	(L)	21,618641	5,561835	3,88696182	0,002532802
R	(Q)	0,016489	0,025720	0,64107664	0,534601316
1L por 2L		0,006127	0,002755	2,22370080	0,048053239
1L por 3L		0,000045	0,000034	1,31528779	0,215170216
1L por 4L		-0,018716	0,008603	-2,17538980	0,052283707
2L por 3L		0,000065	0,000034	1,87780827	0,087158596
2L por 4L		-0,032049	0,008603	-3,72514025	0,003351671
3L por 4L		-0,000105	0,000107	-0,97841648	0,348896509

Através da tabela acima, a equação do modelo empírico para a temperatura do reator pode ser assim representada:

$$\begin{aligned}
 T = & 2409,629467 - 5,763915.Tf + 0,003990.Tf^2 - 5,410349.Tr + 0,005168.Tr^2 - \\
 & 0,044802.GM + 21,618641.R + 0,016489.R^2 + 0,006127.Tf.Tr + 0,000045.Tf.GM - \\
 & 0,018716.Tf.R + 0,000065.Tr.GM - 0,032049.Tr.R - 0,000105.GM.R
 \end{aligned}$$

O modelo empírico da temperatura do reator no ponto $Z = 0,20\text{m}$, tem os seguintes valores de ajuste:

$$\text{Resíduo dos Mínimos Quadrados} = 0,709736$$

$$R^2 = 99,77 \%$$

$$R^2 (\text{adj}) = 99,48\%$$

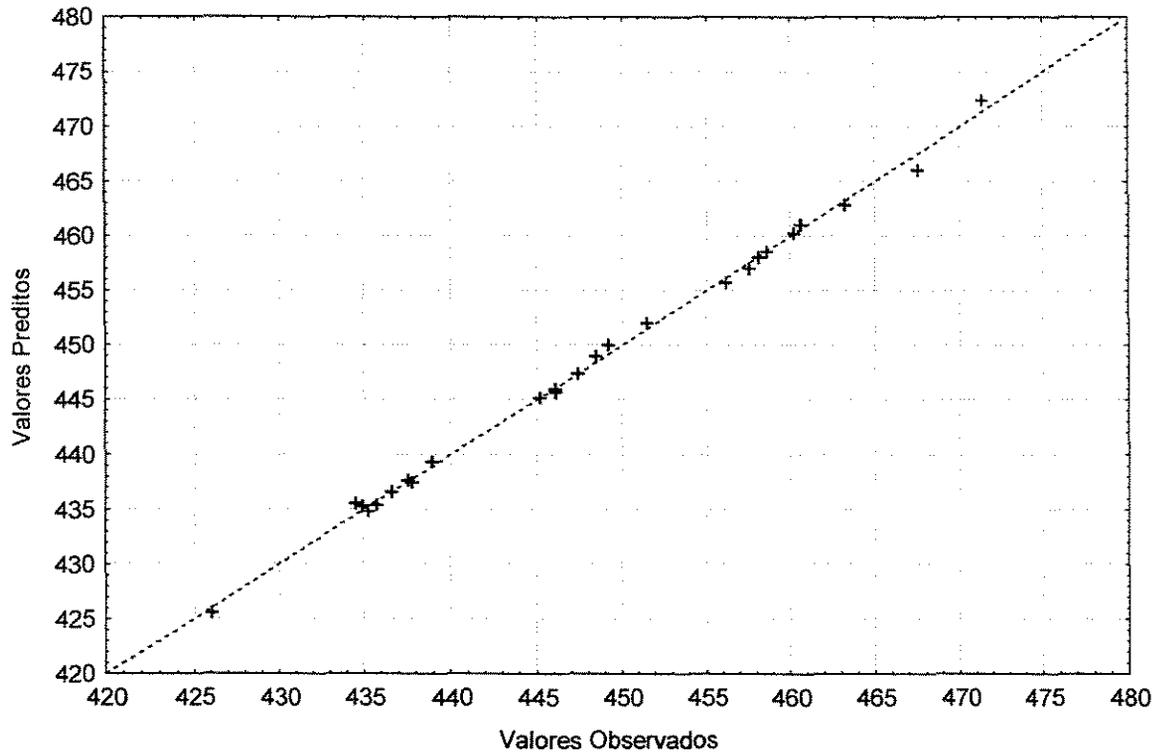


Figura IV.1 – Gráfico dos Valores Observados vs Valores Preditos pelo Modelo

As Figuras IV.2 a IV.7 estão representando de forma tridimensional, como duas variáveis de entrada afetam a temperatura do reator, sendo as outras variáveis de entrada mantidas no ponto central do planejamento. Desta forma, pode-se visualizar a técnica de Superfícies de Resposta.

Através das figuras nota-se a presença de curvatura nas superfícies, e a grande intensidade do efeito da temperatura de refrigeração sobre a temperatura do reator, o que vem realçar a necessidade de controle desta variável.

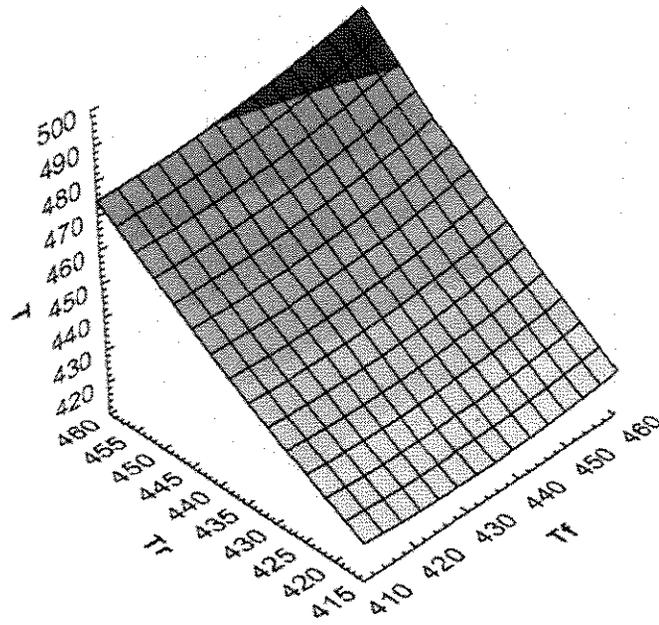


Figura IV.2 – Superfície de Resposta para as variáveis T_f e T_r

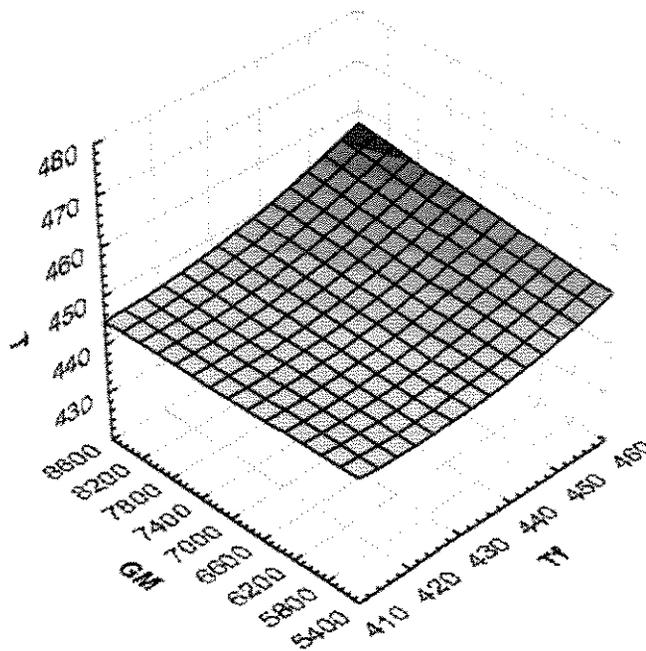


Figura IV.3 - Superfície de Resposta para as variáveis T_f e GM

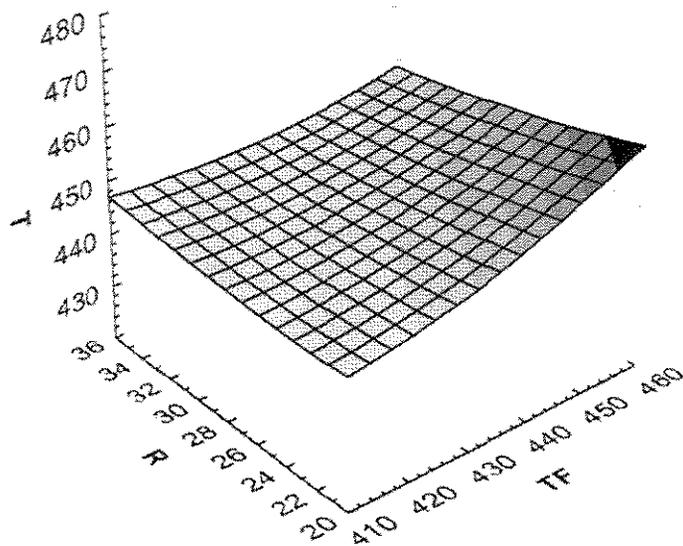


Figura IV.4 - Superfície de Resposta para as variáveis Tf e R

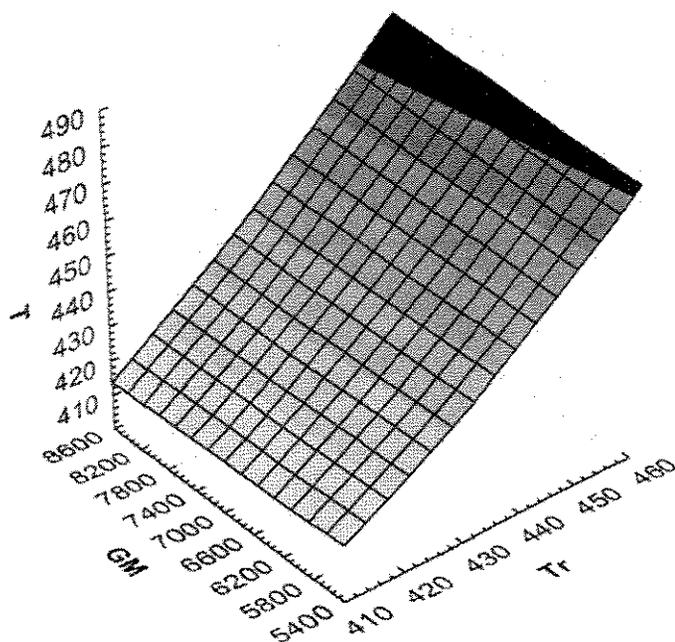


Figura IV.5 - Superfície de Resposta para as variáveis Tr e GM

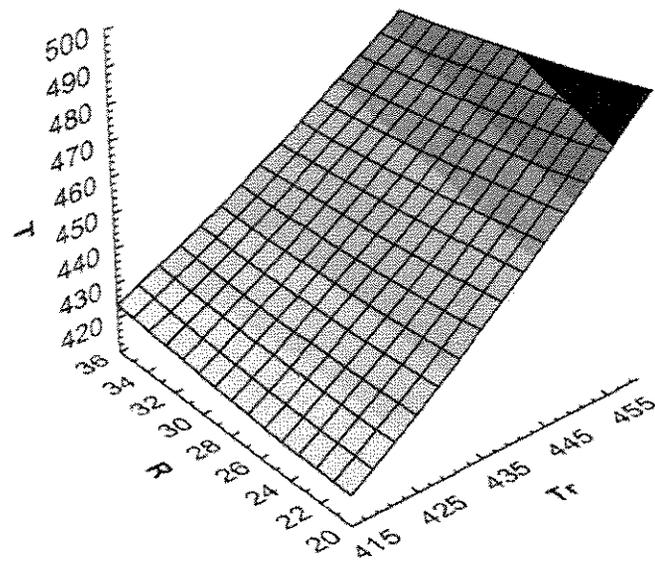


Figura IV.6 - Superfície de Resposta para as variáveis Tr e R

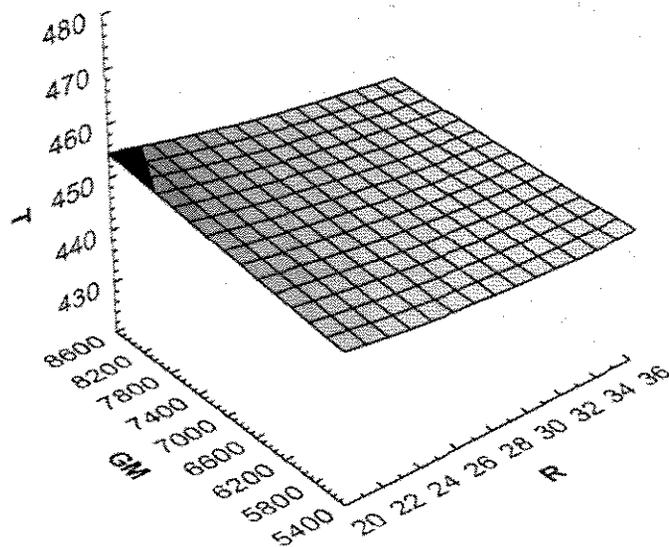


Figura IV.7 - Superfície de Resposta para as variáveis R e GM

IV.2.2 – Análise da Conversão do Reator

Para esta análise, utiliza-se o mesmo planejamento de experimentos da Tabela IV.2, onde os resultados para conversão (X) podem ser encontrados, e também o “Software Statistica for Windows 5.0” para fornecer dados e gráficos.

Na Tabela IV.5, são apresentados os efeitos das variáveis de entrada e suas interações, onde se pode notar também o efeito da temperatura de refrigeração (Efeito 2) sobre a conversão do reator. E na Tabela IV.6 são apresentados os coeficientes de regressão para o modelo estatístico, tendo como resposta à conversão no final do reator.

Em seguida, o modelo estatístico é apresentado e também representado pela Figura IV.8, onde pode ser comparado com as respostas observadas no planejamento.

Tabela IV.5 – Efeitos Principais

	Efeito	Erro Padrão	Teste-t	p
Média/Interação	0,746400	0,010222	73,01807	0,000000
(1)Tf (L)	0,015483	0,005902	2,62352	0,023680
Tf (Q)	0,007238	0,006920	1,04582	0,318082
(2)Tr (L)	0,267350	0,005902	45,30014	0,000000
Tr (Q)	-0,014362	0,006920	-2,07538	0,062192
(3)GM (L)	-0,027650	0,005902	-4,68505	0,000666
GM (Q)	0,003213	0,006920	0,46421	0,651552
(4) R (L)	0,041717	0,005902	7,06853	0,000021
R (Q)	-0,001362	0,006920	-0,19688	0,847511
1L por 2L	0,006850	0,007228	0,94769	0,363644
1L por 3L	0,001075	0,007228	0,14872	0,884463
1L por 4L	-0,009350	0,007228	-1,29356	0,222322
2L por 3L	0,008725	0,007228	1,20709	0,252714
2L por 4L	-0,016350	0,007228	-2,26199	0,044935
3L por 4L	-0,003125	0,007228	-0,43234	0,673849

Tabela IV.6 – Coeficientes de Regressão do Modelo do Sistema

	Coefic. Regres.	Erro Padrão	Teste-t	p
Média/Interação	-10,7772667	17,98678469	-0,59917694	0,561192383
(1)Tf (L)	-0,0553595	0,04503108	-1,22936250	0,244583988
Tf (Q)	0,0000473	0,00004527	1,04581906	0,318082008
(2)Tr (L)	0,0822000	0,04503108	1,82540678	0,095185735
Tr (Q)	-0,0000939	0,00004527	-2,07538187	0,062192320
(3)GM (L)	-0,0003933	0,00038176	-1,03029493	0,324993504
GM (Q)	0,0000000	0,00000001	0,46420639	0,651551805
(4) R (L)	0,2473601	0,09543904	2,59181279	0,025057110
R (Q)	-0,0000869	0,00044135	-0,19688131	0,847510925
1L por 2L	0,0000448	0,00004728	0,94768557	0,363644271
1L por 3L	0,0000001	0,00000059	0,14872438	0,884462591
1L por 4L	-0,0001910	0,00014763	-1,29355622	0,222321817
2L por 3L	0,0000007	0,00000059	1,20708856	0,252714237
2L por 4L	-0,0003339	0,00014763	-2,26199403	0,044934575
3L por 4L	-0,0000008	0,00000184	-0,43233831	0,673849067

Com os coeficientes da tabela acima, a equação do modelo estatística para a conversão do reator é:

$$\begin{aligned}
 X = & -10,7772667 - 0,0553595.Tf + 0,0000473.Tf^2 + 0,0822000.Tr - 0,0000939.Tr^2 - \\
 & 0,0003933.GM + 0,2473601.R - 0,0000869.R^2 + 0,0000448.Tf.Tr + \\
 & 0,0000001.Tf.GM - 0,0001910.Tf.R + 0,0000007.Tr.GM - 0,0003339.Tr.R - \\
 & 0,0000008.GM.R
 \end{aligned}$$

O modelo estatístico da conversão do reator acima, tem os seguintes valores de ajuste:

$$\text{Resíduo dos Mínimos Quadrados} = 0,000209$$

$$R^2 = 99,49 \%$$

$$R^2 (\text{adj}) = 98,84\%$$

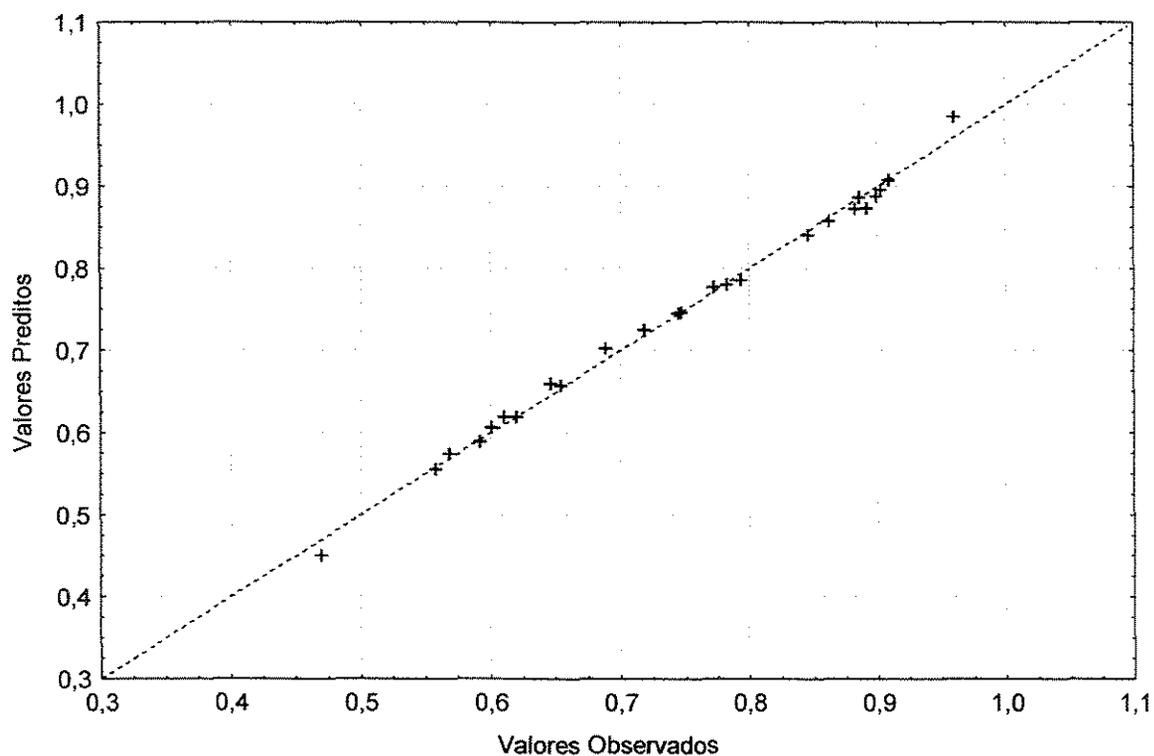


Figura IV.8 – Gráfico dos Valores Observados vs Valores Preditos pelo Modelo

As Figuras IV.9 a IV.14 apresentam as superfícies de resposta de duas variáveis de entrada e a conversão de saída do reator, sendo as outras variáveis de entrada mantidas constantes no ponto central do planejamento.

Como na análise da temperatura do reator, nota-se a presença de curvatura nas superfícies e a grande intensidade do efeito da temperatura de refrigeração na conversão do reator.

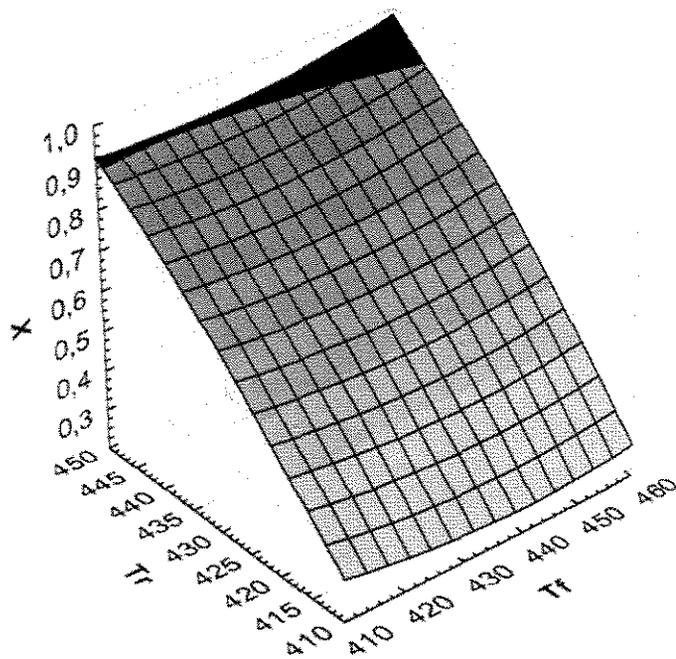


Figura IV.9 - Superfície de Resposta para as variáveis T_f e T_r

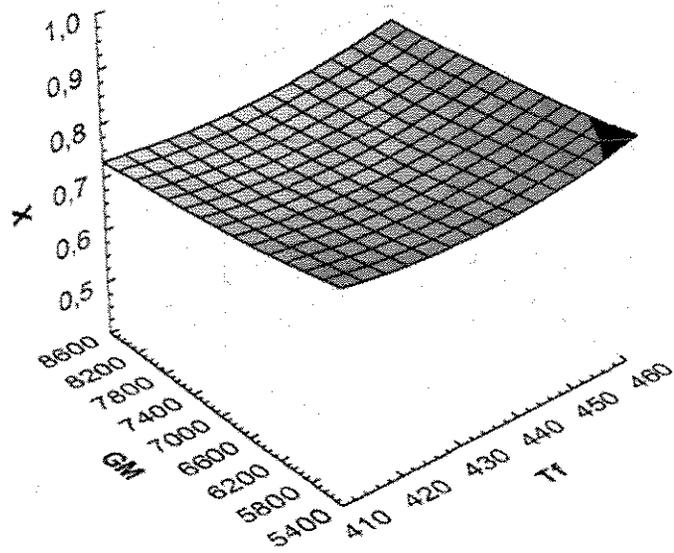


Figura IV.10 - Superfície de Resposta para as variáveis T_f e GM

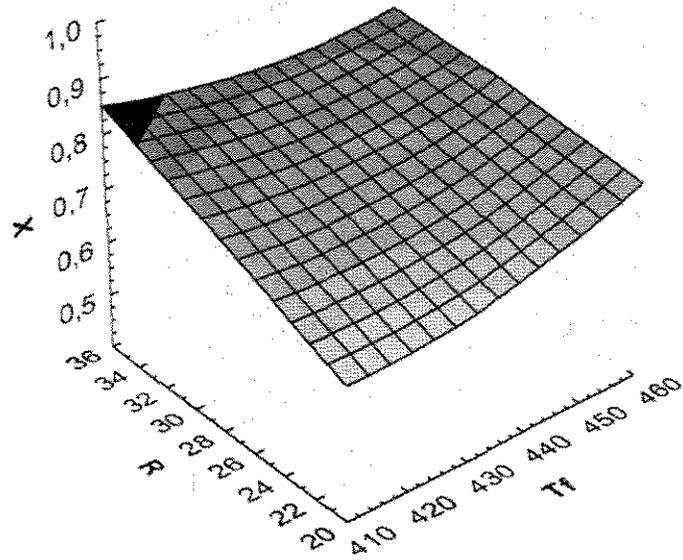


Figura IV.11 - Superfície de Resposta para as variáveis Tf e R

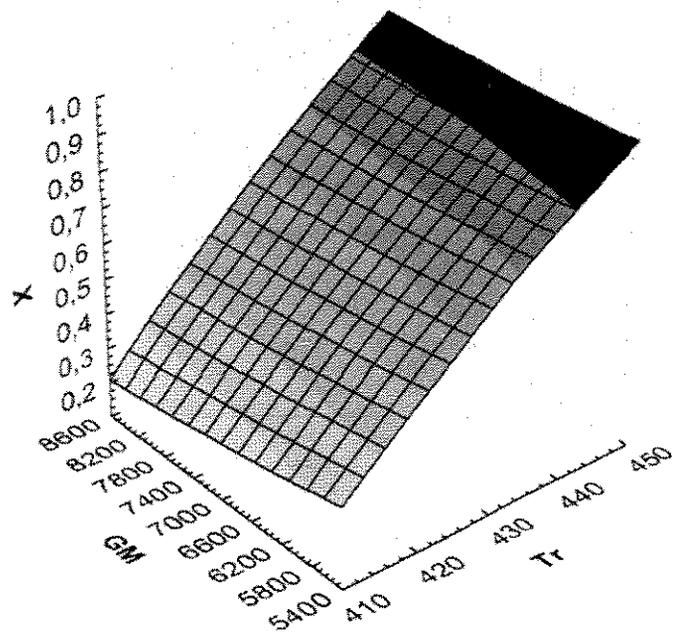


Figura IV.12 - Superfície de Resposta para as variáveis Tr e GM

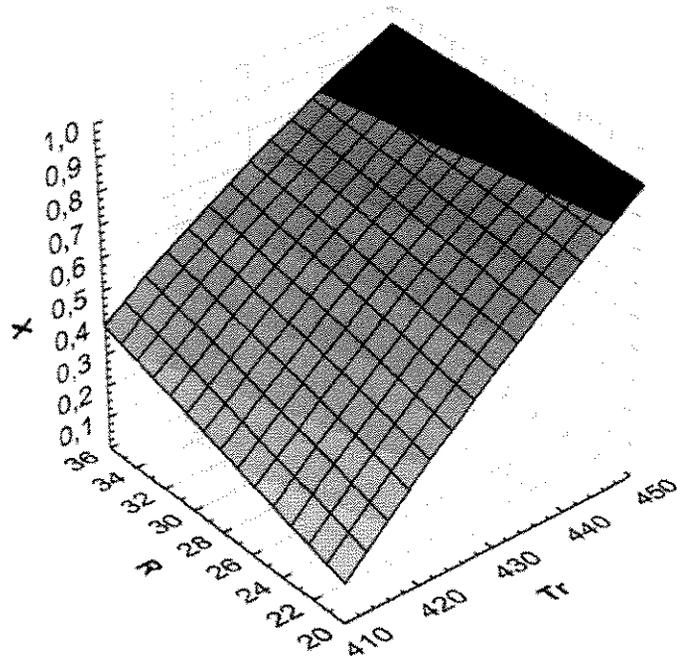


Figura IV.13 - Superfície de Resposta para as variáveis Tr e R

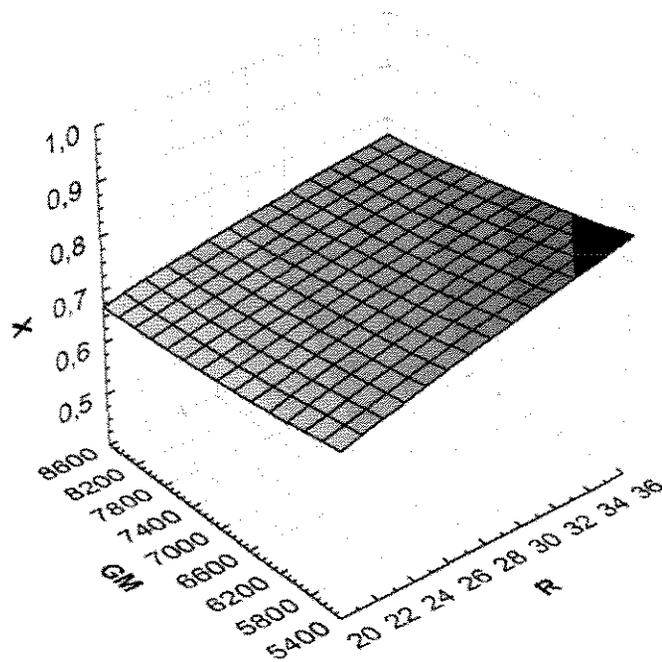


Figura IV.14 - Superfície de Resposta para as variáveis R e GM

IV.3 – CONCLUSÕES

Neste capítulo, apresentam-se as equações dos modelos estatísticos para a temperatura do reator no ponto de maior oscilação e para a conversão de saída do reator. Estes modelos representam dinamicamente o reator catalítico de leito fixo frente a perturbações de grau de intensidade aplicada no planejamento dos experimentos.

Foi feito também neste capítulo, um planejamento em estrela para a análise das variáveis de entrada do reator, e como estas afetam a temperatura e a conversão do reator. Foi também apresentada a técnica de superfície de resposta, onde se nota facilmente a grande necessidade de um sistema de controle que manipule a temperatura de refrigeração, visto sua grande sensibilidade nas repostas de temperatura e conversão do reator.

No capítulo posterior, serão utilizados os modelos estatísticos atuando como um controlador “Feedback-Feedforward”. Desta forma, pretende-se obter maior rapidez nas ações de controle, quando são notadas perturbações nas variáveis controladas e nas de entrada.

CAPÍTULO V – CONTROLE DO REATOR QUÍMICO

V.1 – INTRODUÇÃO

Para este capítulo considerações serão dadas para o problema de controle do reator, incluindo as revisões dos principais sistemas de controle de processos químicos utilizados na indústria, a apresentação do sistema de controle proposto e sua empregabilidade no reator.

Desta forma, o modelo estatístico obtido anteriormente será empregado no sistema de controle do reator catalítico de leito fixo, e será observado o seu potencial comparando-o com um controlador convencional do tipo PID.

V.2 – SISTEMAS DE CONTROLE

O estudo do controle de reatores químicos de leito fixo vem sendo desenvolvido ao longo de vários anos em diversas universidades e instituições científicas. O tema está longe de ser esgotado por não se tratar de um único, mas de uma variedade grande de processos com particularidades distintas, Toledo (1999).

Os objetivos de controle do reator são muitos, por exemplo: prioridades econômicas, de segurança, de qualidade do produto desejado ou todos ao mesmo tempo. Além disso, os reatores químicos de leito fixo apresentam algumas particularidades que prejudicam um sistema de controle, como:

- indisponibilidade, na maioria dos casos da medição em tempo real da variável mais importante do processo químico: a concentração dos compostos;
- resposta inversa de algumas variáveis dependentes, em relação às variações de certas variáveis independentes;
- tempo morto associado à velocidade de propagação da onda térmica ao longo do leito;
- acoplamento não-linear entre os processos cinéticos e energéticos;

- parâmetros físico-químicos que variam no espaço e no tempo.

A estratégia de controle de um reator químico está diretamente relacionada com seu objetivo operacional. No caso deste trabalho, as prioridades de controle são o perfil de temperatura do sistema, devido a sua instabilidade térmica, e a concentração do produto, por seu fator econômico. Desta forma, fez-se o controle do reator através das duas variáveis, tendo como objetivo a comparação das mesmas no sistema. Para isto, os controladores são avaliados no sentido de absorver perturbações nas cargas e mudanças de “set point” que alteram a estabilidade do sistema.

Para os estudos de controle utilizou-se o reator catalítico de leito fixo, no qual ocorre a reação de oxidação do etanol a acetaldeído; reação fortemente exotérmica e característica de muitos processos industriais. Portanto, o sistema apresenta duas grandes dificuldades que possibilitam avaliar o desempenho de um algoritmo de controle adequadamente: a forte liberação de calor (reação exotérmica) e a natureza distribuída do sistema (conversão e temperatura do reator variam no espaço e no tempo). Estas características levam a ocorrência de gradientes de concentração e temperatura ao longo do reator, o aparecimento de pontos de máxima temperatura (ponto quente), a ocorrência do fenômeno da resposta inversa e alta sensibilidade do reator frente a perturbações nos parâmetros operacionais do reator. Estas características, que tornam o controle do reator um objetivo difícil de ser alcançado, apresentam um ambiente adequado para avaliar o desempenho de estratégias e algoritmos de controle. Mais detalhes sobre o controle de reatores exotérmicos e distribuídos consultar Luyben (1966), McGreavy (1983), Maciel Filho (1989), Froment e Bischoff (1990), Windes e Ray (1992a e 1992b).

Para mais detalhes sobre o controle em geral e aplicações de controladores avançados em reatores catalíticos de leito fixo as seguintes referências podem ser consultados: Jutan et al. (1977), Bonvin et al. (1980), Iserman (1981), Desphande e Ash (1981), McGreavy (1983), Astrom e Wittemark (1984), Stephanopoulos (1984), Smith e Corripio (1985), Seborg et al. (1986), McDermott et al. (1986), Bolzan (1986), Desphande (1989), Seborg et al. (1989), Maciel Filho (1989), Luyben (1990), Rubião (1990), Chen e Sun (1991), Patwardhan et al. (1992), Carneiro (1992), Ogunnaike e Ray (1994), Wright e Edgar (1994), Assis (1996), Doyle et al. (1996), Edwards e Arthur (1997), Toledo e Maciel Filho (1996, 1997a, 1997b, 1998a, 1998b e 1998c).

V.2.1 – Controle “Feedback”

Considerando um processo com um controlador “feedback” em serviço, este sistema “closedloop” pode experimentar perturbações de dois diferentes sinais: carga ou mudança de “set point”.

A maioria das perturbações em sistemas de engenharia química são de perturbações carga, tais como mudanças de composição da alimentação, temperatura do fluido reagente, temperatura do fluido de refrigeração, etc. A função do controlador “feedback” quando uma perturbação carga ocorre é retornar a variável controlada para o “set point” por mudanças apropriadas na variável manipulada, através do chamado resposta reguladora.

As mudanças de “set point” podem ser feitas, particularmente em processos batelada ou mudando de uma condição de operação para outra em um processo contínuo. Estas mudanças também atuam como perturbações para o sistema. A função do controlador “feedback” é dirigir a variável controlada para igualar ao novo “set point”. A resposta para uma perturbação no “set point” é chamada de resposta servo.

Os “loops” do controle “feedback” nunca podem realizar um perfeito controle de um processo químico, que é manter a saída do processo continuamente no desejado valor de “set point” na presença de carga ou mudanças de “set point”. A razão é simples: “Um controlador “feedback” age no sistema somente após ter detectado um desvio no valor de saída de um desejado “set point”.

As vantagens do controlador “feedback” são:

- não requer identificação e medição de qualquer perturbação;
- não é sensível a erros de modelagem;
- não é sensível a mudanças de parâmetros

As desvantagens são:

- o controle espera até o efeito da perturbação tenha sido sentida pelo sistema, antes da ação de controle ser feita;
- é insatisfatório para processos lentos ou com significativo tempo morto;
- pode criar instabilidade na resposta de “closedloop”.

PID

Considere o processo geral mostrado na Figura V.1, com uma saída y , uma perturbação d e uma variável possível de ser manipulada m .

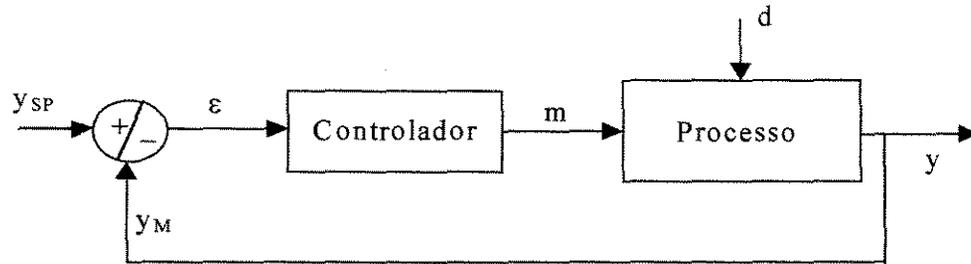


Figura V.1 – Malha de Controle “Feedback” – PID

A ação de controle do PID envolve os seguintes passos:

1. Medir o valor da saída utilizando um medidor adequadamente escolhido e posicionado. Denota-se de y_M o valor indicado pelo instrumento de medida.
2. Comparar o valor medido y_M com o valor desejado y_{SP} (“set point”) da saída. Gera-se um erro a partir destas duas grandezas: $\varepsilon = y_{SP} - y_M$.
3. O erro é então alimentado no controlador, que por sua vez, altera o valor da variável manipulada m de tal maneira a reduzir a magnitude do valor de ε .

Controladores PID são usados em “loops”, onde a ação derivativa pode ajudar a compensar um atraso em algum lugar no “loop”. Uma aplicação muito comum é no controle da temperatura, onde o efeito adverso do atraso do “thermocouple” e “thermowell” pode ser parcialmente reduzido pela ação derivativa. O problema principal com a ação derivativa é que amplia qualquer ruído no sinal do processo, produzindo flutuações na posição da válvula de controle. Então, a ação derivativa deve ser usada somente em sinais que estejam livres de ruído.

A equação do controlador PID analógico mais utilizado é:

Algoritmo Clássico

$$u(t) = K_c \left[e(t) + \frac{1}{T_I} \int_0^t e(t) dt + T_D \frac{de(t)}{dt} \right] \quad \text{V.1}$$

onde:

$u(t)$ = variável manipulada;

K_c = ganho proporcional;

T_I = tempo integral;

T_D = tempo derivativo;

$e(t)$ = “set point” – variável controlada.

A atuação do controlador PID é proporcional ao erro, à integral do erro e à derivada do erro, para que o controlador possa ser utilizado as constantes K_c , T_I e T_D necessitam ser convenientemente escolhidas, isto é, o controlador necessita ser sintonizado.

Para pequenos tempos de amostragem, T_A , esta equação pode ser transformada em uma equação de diferenças por discretização.

A derivada é simplesmente aproximada por uma diferença de primeira ordem, e o termo integral é aproximado utilizando integração trapezoidal. A equação (V.1) toma a seguinte forma:

$$u(k) = K_c \left\{ e(k) + \frac{T_A}{T_I} \left[\frac{e(0) + e(k)}{2} + \sum_{i=1}^{k-1} e(i) \right] + \frac{T_D}{T_A} [e(k) - e(k-1)] \right\} \quad \text{(V.2)}$$

A equação (V.2) é um algoritmo não-recursivo, conhecido como algoritmo de posição. Entretanto, algoritmos recursivos são mais apropriados para programação em computadores e caracterizam-se pelo cálculo da variável manipulada corrente, $u(k)$, baseada na variável manipulada passada, $u(k-1)$, e termos de correção.

Para derivar o algoritmo recursivo, tem-se que subtrair da equação (V.2) a seguinte equação:

$$u(k-1) = K_c \left\{ e(k-1) + \frac{T_A}{T_I} \left[\frac{e(0) + e(K-1)}{2} + \sum_{i=1}^{k-2} e(i) \right] + \frac{T_D}{T_A} [e(k-1) - e(k-2)] \right\} \quad (\text{V.3})$$

Chega-se assim à forma recursiva, conhecida como algoritmo de velocidade, equação (V.4).

$$u(k) = u(k-1) + q_0 e(k) + q_1 e(k-1) + q_2 e(k-2) \quad (\text{V.4})$$

onde:

$u(k)$ = variável manipulada;

$e(k)$ = “set point” - variável controlada;

q_0 , q_1 e q_2 = parâmetros do controlador;

$$q_0 = K_c \left[1 + \frac{T_A}{2T_I} + \frac{T_D}{T_A} \right] \quad (\text{V.5})$$

$$q_1 = -K_c \left[1 - \frac{T_A}{2T_I} + \frac{2T_D}{T_A} \right] \quad (\text{V.6})$$

$$q_2 = \frac{K_c T_D}{T_A} \quad (\text{V.7})$$

Os parâmetros q_0 , q_1 e q_2 , os quais foram considerados invariantes no tempo, devem ser determinados de maneira a se obter um bom desempenho para o sistema controle. Diversas técnicas podem ser utilizadas na determinação dessas constantes: Ziegler-Nichols, Cohen-Coon, tentativa e erro, (Luyben, 1990).

Para mais detalhes consultar: Stephanopoulos (1984), Seborg et al. (1989), Isermann (1981), Toledo (1992) e Souza (1993).

V.2.2 – Controle “Feedforward”

Sistemas de controle “feedforward” têm ganhado alta aceitação na Engenharia Química nas últimas décadas. Estes têm demonstrado suas habilidades para melhorar o controle, devido ao seu carácter antecipativo que é interessante em face do comportamento dos processos químicos.

O controle “feedforward” é provavelmente mais utilizado em sistemas de engenharia química, pois estes sistemas são freqüentemente vagarosos, não-lineares, multivariáveis, e contém apreciáveis atrasos ou tempo morto.

A noção básica do controle “feedforward” é detectar as perturbações tão logo elas entrem no processo, e realizar os ajustes nas variáveis manipuladas para que as variáveis de saída sejam mantidas constantes. Se a perturbação for detectada tão logo entre no processo, faz sentido levar a ação imediata em ordem para compensar os efeitos no processo. Esta é a vantagem do controle “feedforward” sobre o controle “feedback”, pois ele pode ser perfeito, em teoria, sendo que uma perturbação não produzirá erro na variável controlada de saída.

As desvantagens do controle “feedforward” são:

- A perturbação deve ser detectável. Se ela não pode ser medida, não se pode usar o controle “feedforward”;
- Deve-se conhecer como as perturbações e as variáveis manipuladas afetam o processo.

Desta maneira, muitos sistemas de controle são instalados em combinação de sistemas “Feedback-Feedforward”. O controlador “feedforward” cuida das grandes e freqüentes perturbações mensuráveis, e o controlador “feedback” trata de quaisquer erros que vieram através do processo por causa de imprecisões no controlador “feedforward” ou outras perturbações não mensuráveis.

Em sistemas não-lineares a adição de um controlador “feedforward” freqüentemente permite um ajuste ótimo do controlador “feedback”, pois a magnitude da perturbação que o controlador “feedback” deve dominar será reduzido pelo primeiro. As ações do controlador “feedforward” não são perfeitas, porque a dinâmica não é perfeita, mas há um melhoramento significativo em cima do controle “feedback”.

V.3 – CONTROLE DO REATOR QUÍMICO

Nesta etapa do trabalho, pretende-se discutir o objetivo e a aplicação prática dos assuntos abordados até o momento.

Através das equações estatísticas que descrevem o comportamento dinâmico do reator em operação, pode-se utilizá-las no sistema de controle do reator como um controlador tipo “Feedback-Feedforward”, e para fins de comparação optou-se por um controlador “feedback” tipo PID, que é amplamente utilizado nas indústrias. Com isto, se pretende obter altos níveis de desempenho para o reator, através de relativos baixos esforços de controle e programação .

Na figura V.2, observa-se melhor o sistema de controle do reator proposto neste trabalho.

O sinal gerado tanto pelo controlador “feedforward” como pelo controlador “feedback”, quando se observa presença de mudanças de “set point” ou perturbações, são enviados instantaneamente para a variável manipulada.

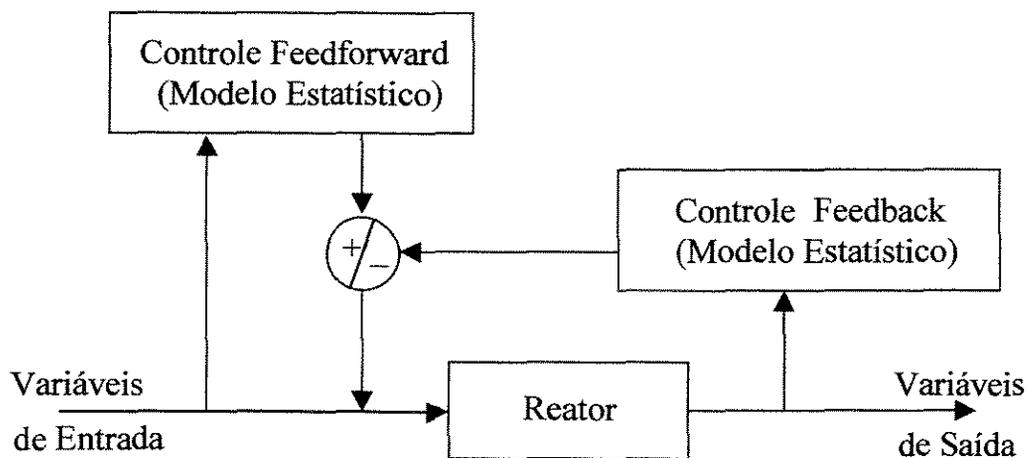


Figura V.2 – Esquema de Funcionamento do Controlador “Feedback-Feedforward”

V.3.1 – Controle do Perfil Térmico do Reator

Nesta etapa consideração será dada para o controle da temperatura dentro do reator, desta forma as figuras que serão mostradas a seguir, têm como objetivo controlar a

temperatura no ponto $z = 0,2$ m, pois este ponto apresenta grande oscilação térmica, o que foi demonstrado nos capítulos anteriores.

Nas figuras V.3 e V.5 demonstra-se o desempenho do sistema de controle do reator frente a mudanças de “set point”, e nas figuras V.4 e V.6, visualiza-se o desempenho da variável manipulada para cada caso, respectivamente.

Logo que se observa o comportamento dinâmico do reator nas situações abaixo, pode-se notar que o sistema de controle pela equação estatística não atinge completamente a temperatura especificada, o que não acontece com o controlador PID, onde com este controlador a temperatura do reator é atingida satisfatoriamente.

É interessante observar o comportamento da variável manipulada, onde a temperatura do fluido refrigerante é logo especificada pela equação estatística, o que não acontece com o controlador PID, onde sua lei baseada no erro, produz grandes oscilações na variável manipulada para se atingir o “set point” da variável controlada. Deve ser ressaltado que na prática estes tipos de oscilações podem não ser possíveis.

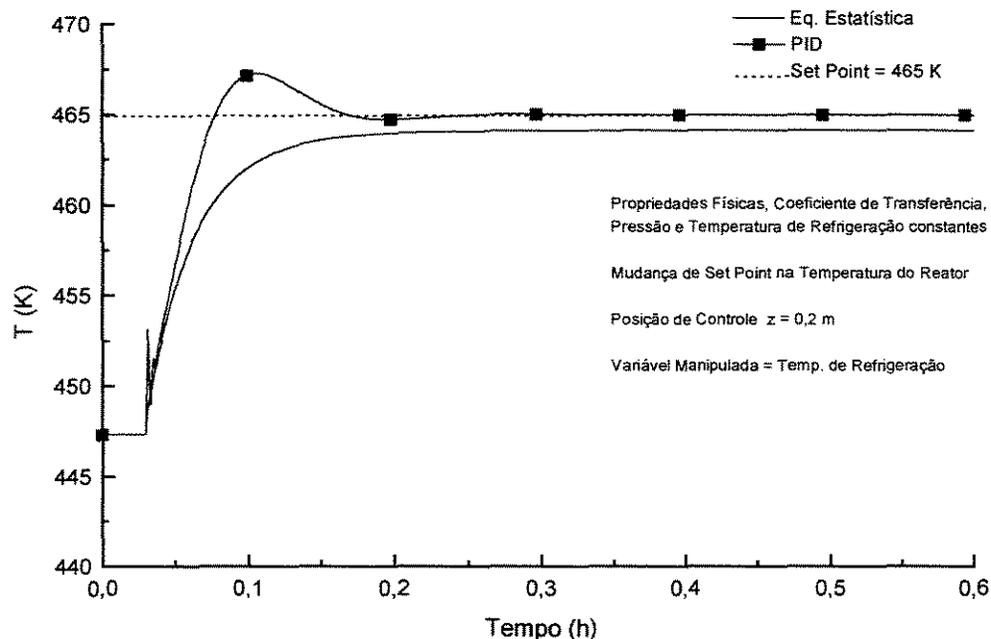


Figura V.3 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

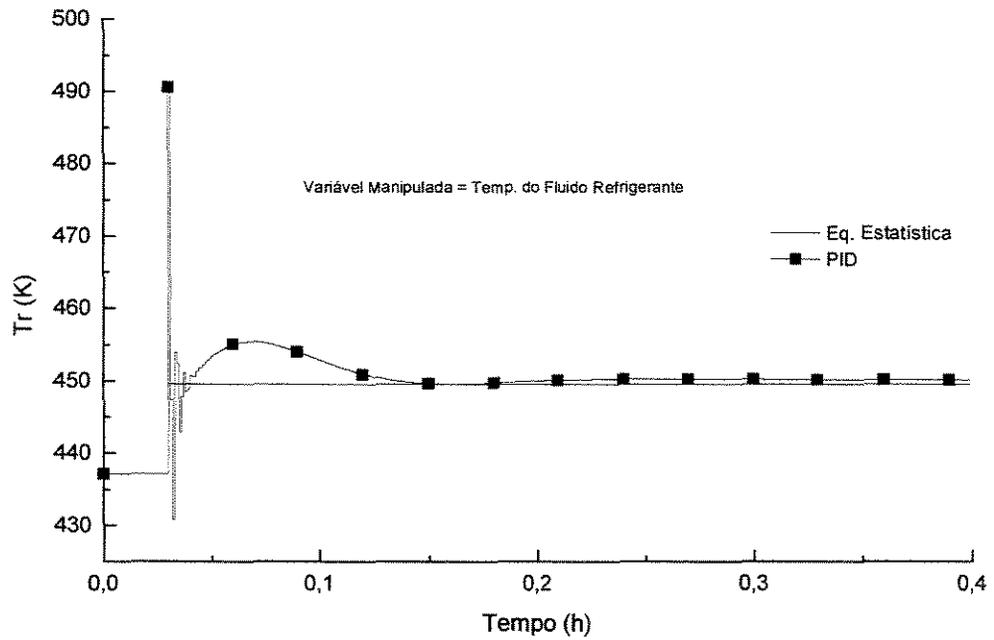


Figura V.4 – Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator

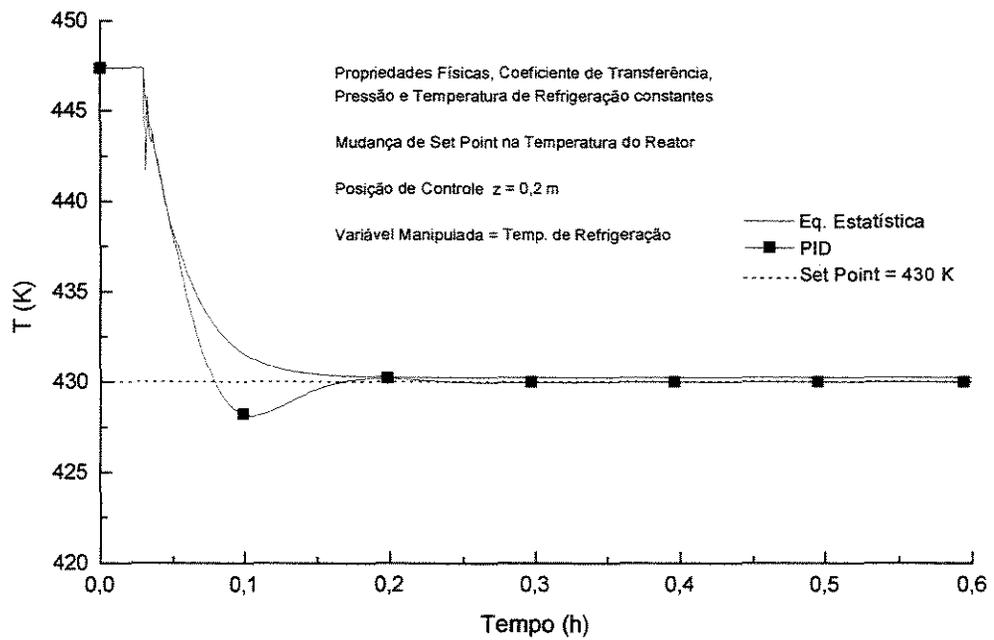


Figura V.5 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

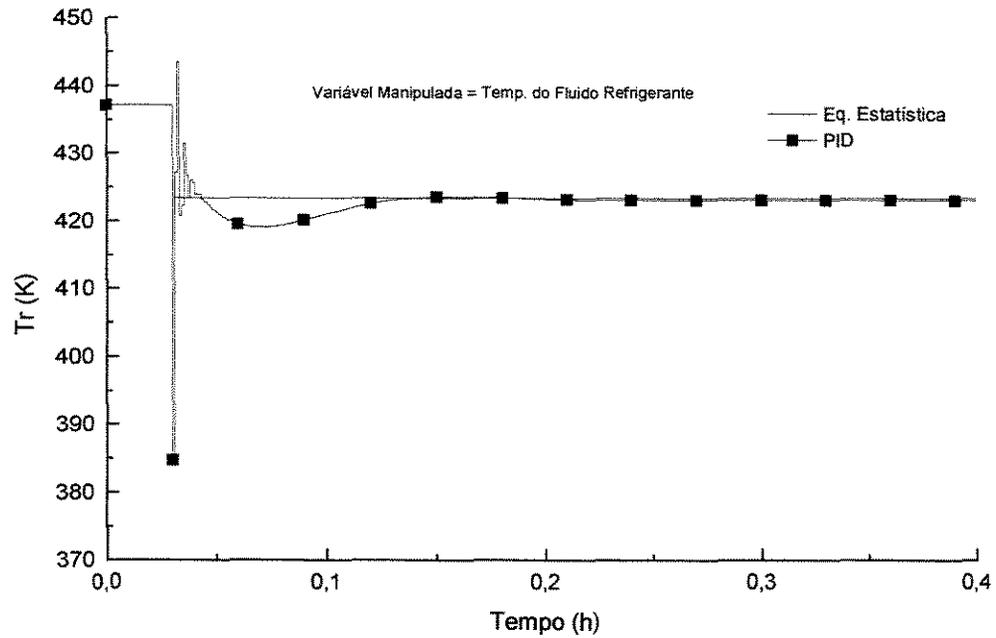


Figura V.6 – Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator

As figuras V.7 a V.11 mostram o comportamento dinâmico do reator frente a perturbações degrau nas variáveis de entrada. Desta forma, observa-se que a Equação Estatística controla normalmente o reator, mas não atinge totalmente o valor de “set point” desejado para a variável controlada (“offset”), o que o controle PID já faz facilmente devido a sua lei de controle baseado no erro.

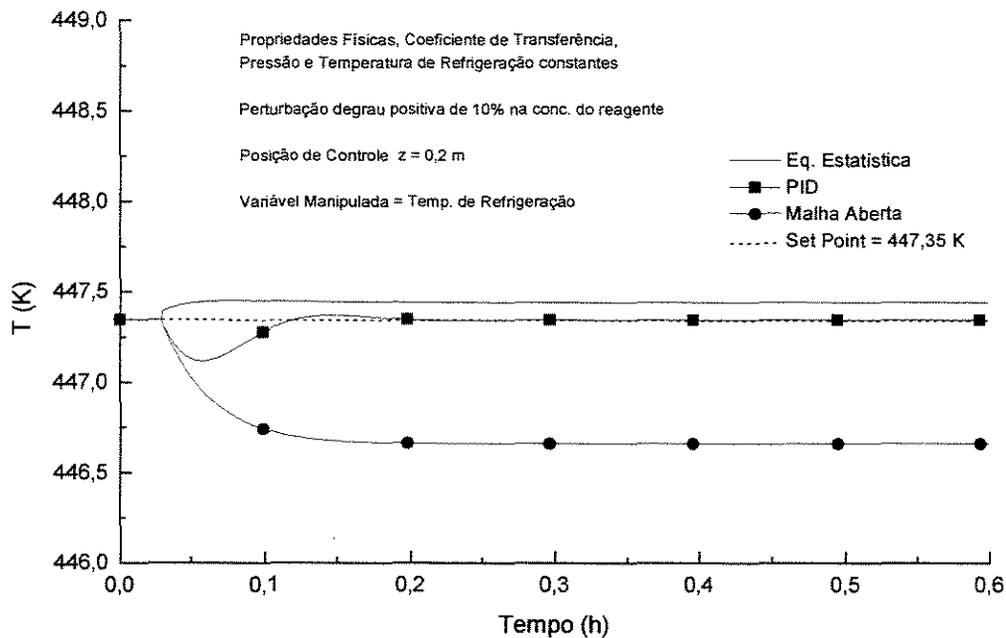


Figura V.7 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

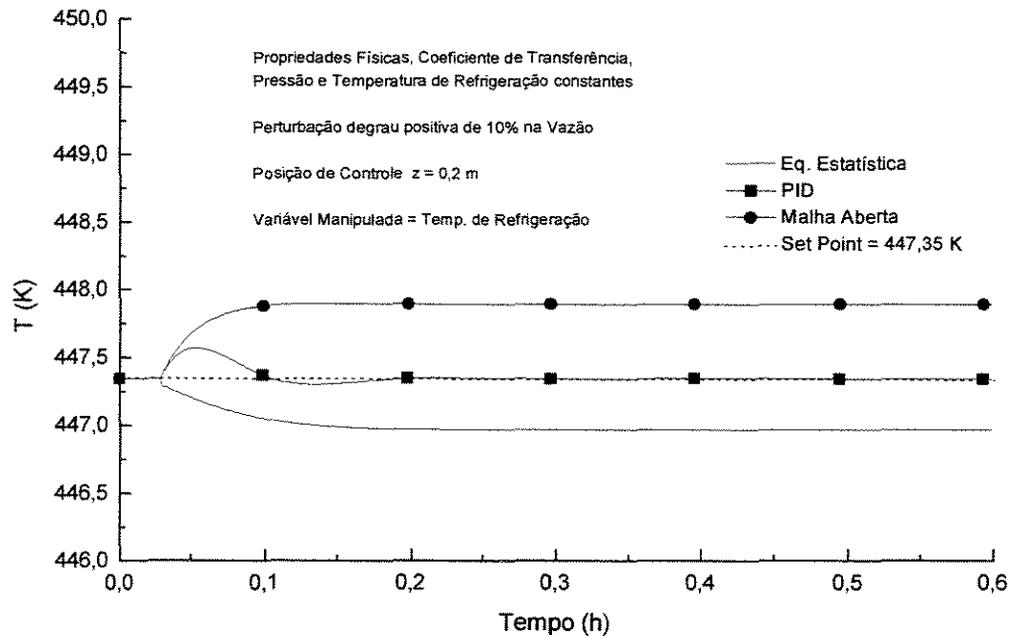


Figura V.8 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

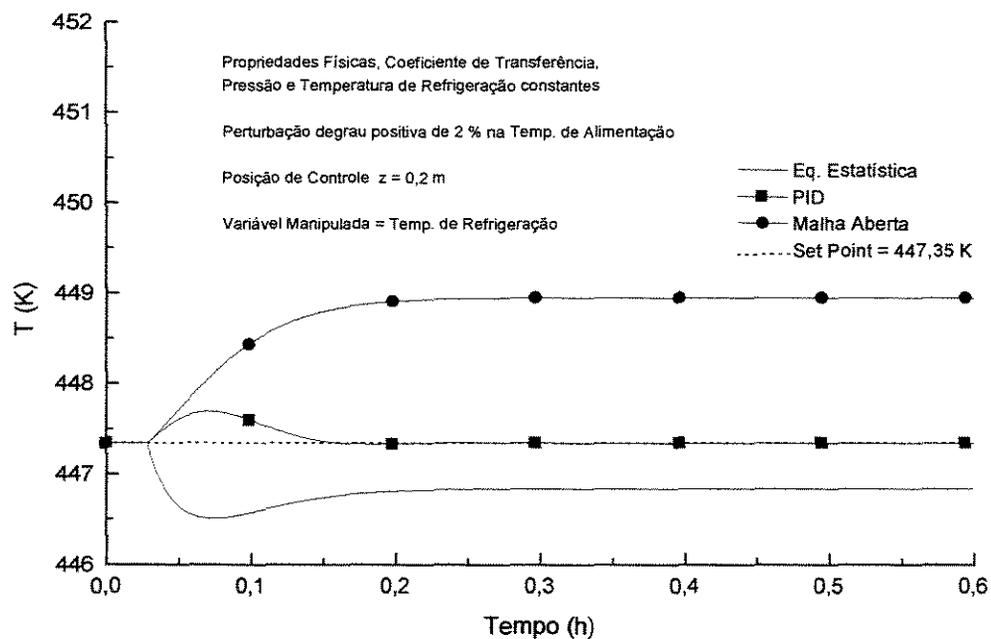


Figura V.9 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

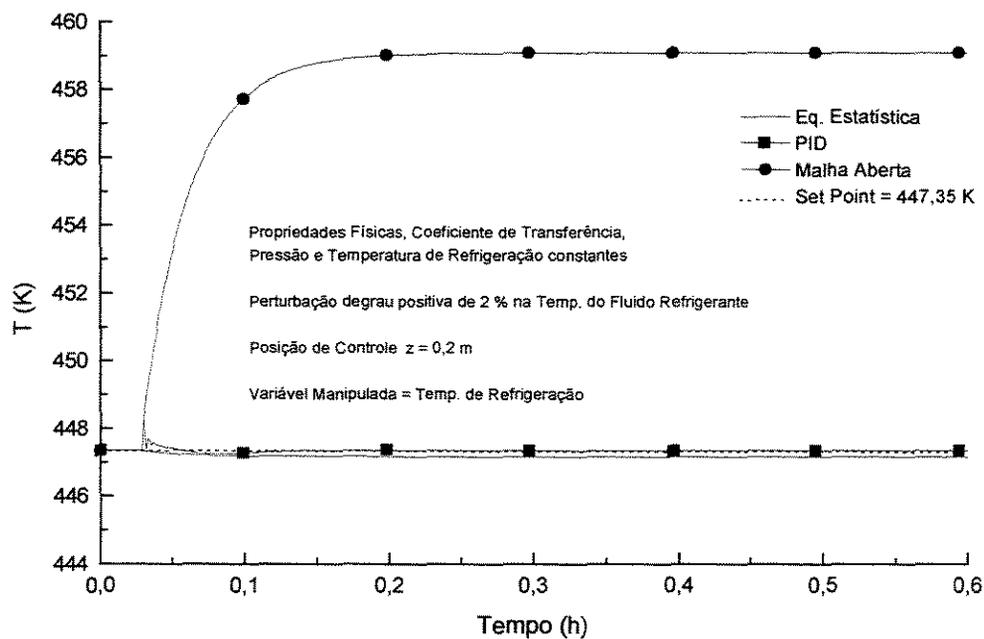


Figura V.10 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

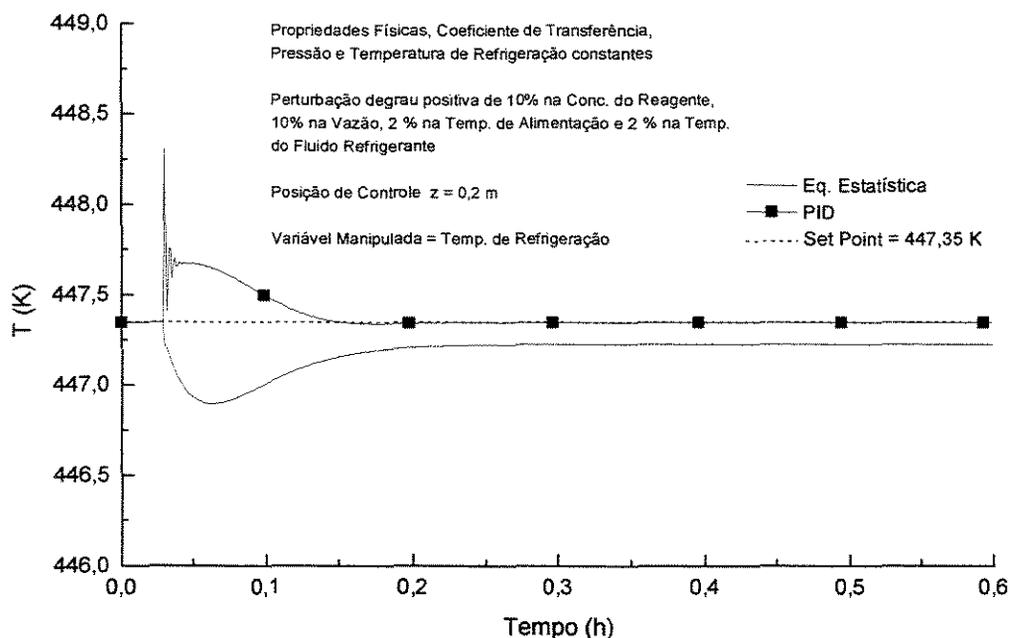


Figura V.11 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

Nas figuras V.12 a V.17, mantém-se em controle a temperatura do reator no 1º ponto, e altera-se a variável manipulada agora para a vazão, devido a ser uma variável muito utilizada neste tipo de função pela indústria. Neste caso em particular, nota-se que não se obtém um sistema adequado para controle, visto que a vazão não apresenta influência significativa sobre o reator, como foi demonstrado pelo planejamento fatorial.

Para este sistema de controle acima, não se obteve sintonia de controle para a Equação Estatística, e nem para o PID. Para o caso de uma perturbação do tipo mudança de “set point”, não foi possível obter um controle perfeito. Somente foi possível sintonizar os controladores para algumas perturbações degrau nas variáveis de entrada.

Como já foi mencionado anteriormente, a Equação Estatística deixa de atingir completamente o valor desejado, mas não deixando de controlar o sistema para um valor próximo do desejado.

Para uma perturbação degrau na temperatura de alimentação do reator, o controlador PID não se mostrou eficiente, perdendo o controle sobre a temperatura do

reator. Já no caso da perturbação na temperatura do fluido refrigerante, não obteve-se um sistema de controle eficiente em nenhum dos casos.

Estes fatos se devem, provavelmente, pelo fato da pequena influência da vazão sobre o reator químico, o que se nota na figura V.13, onde altos valores na vazão são necessários para surtir efeitos no sistema, o que, na prática, deve ser uma hipótese rejeitada.

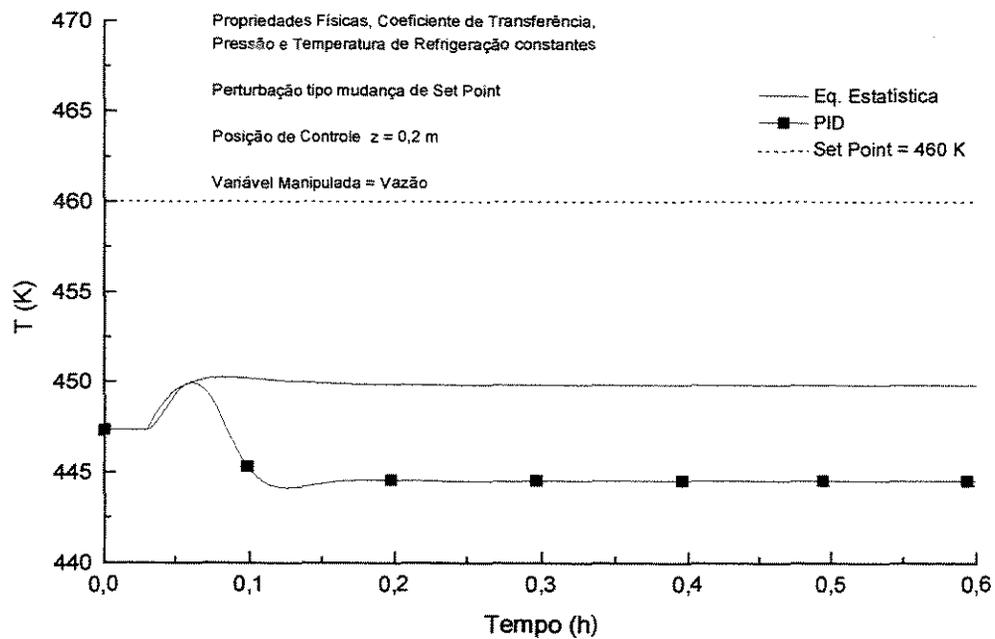


Figura V.12 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

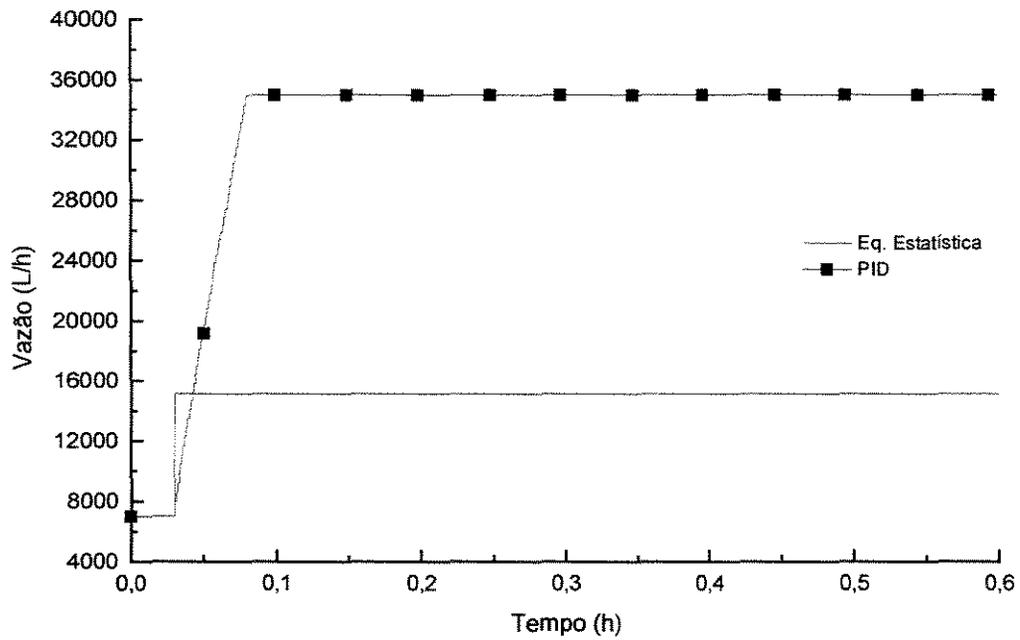


Figura V.13 – Perfil Dinâmico da Vazão do Reator

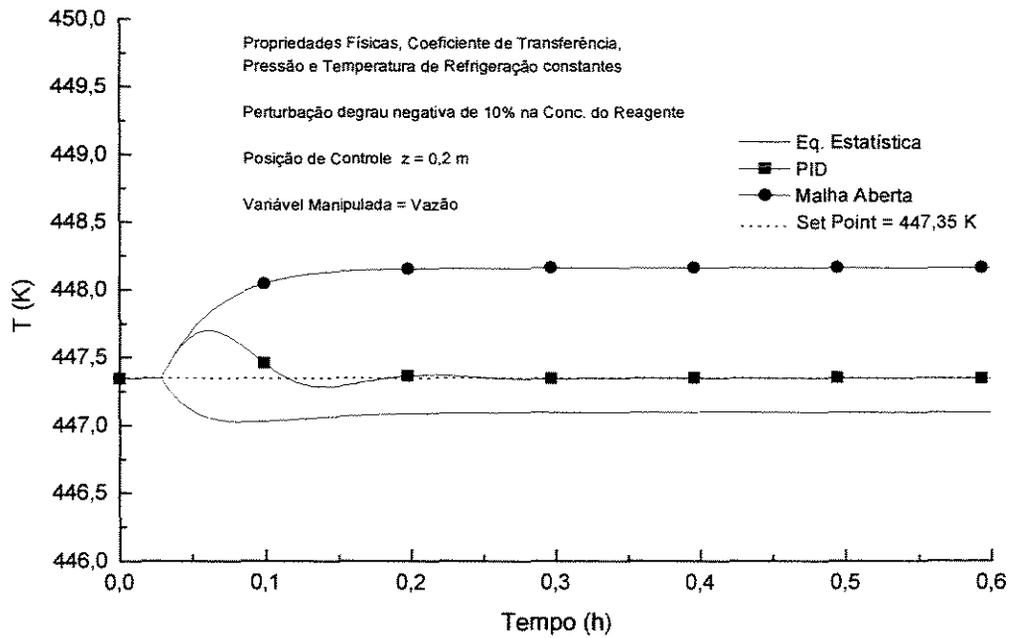


Figura V.14 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

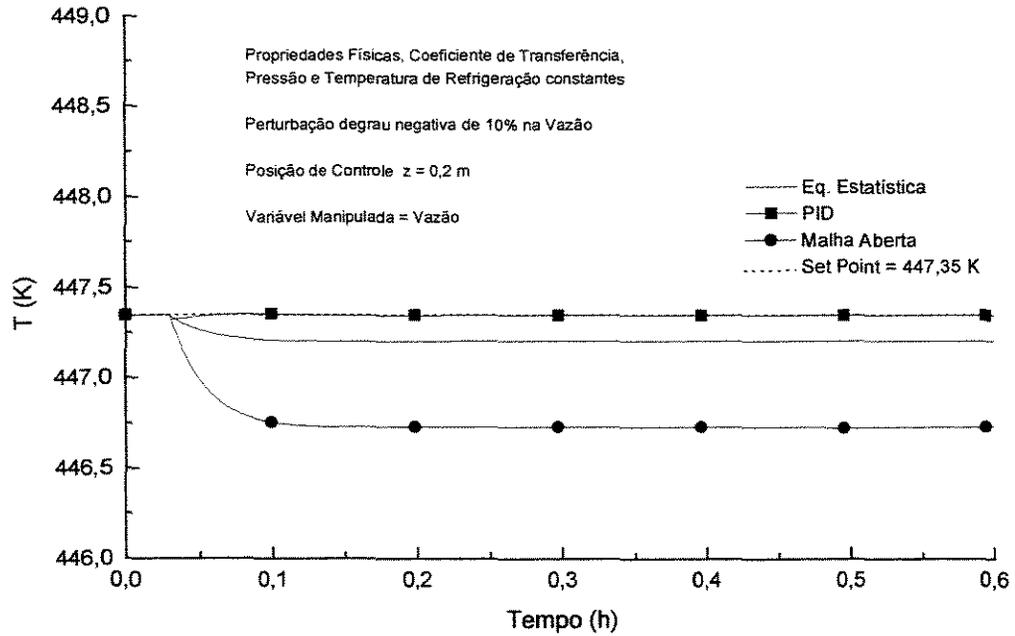


Figura V.15 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

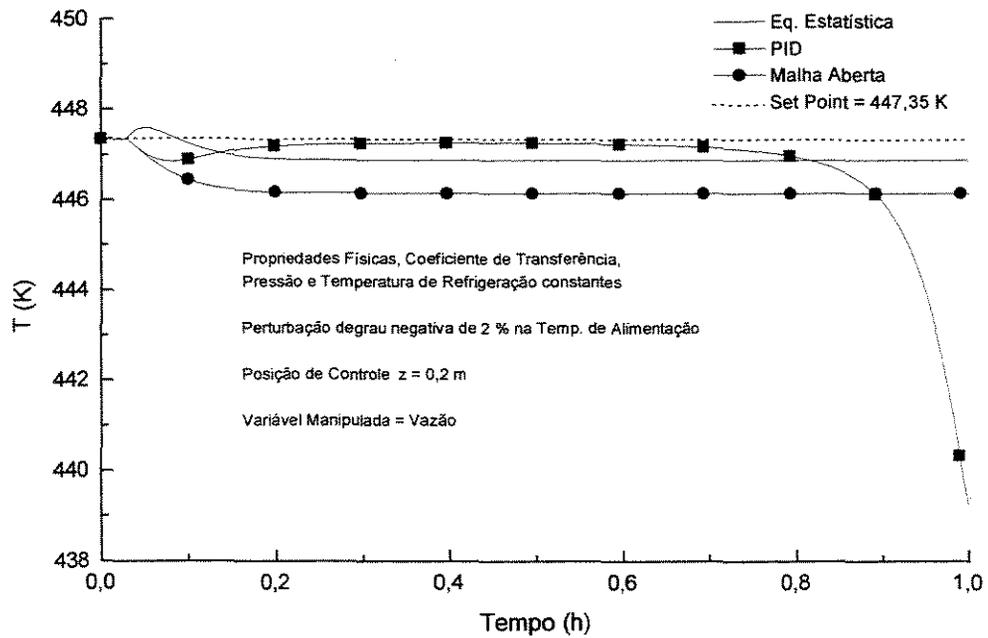


Figura V.16 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

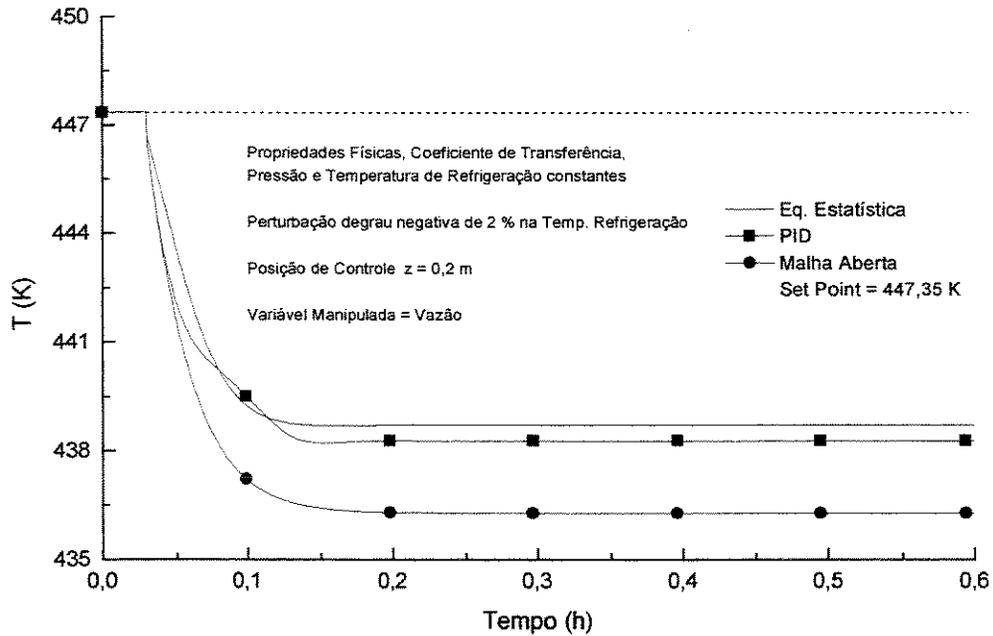


Figura V.17 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

A fim de confirmar os dados estatísticos e comentários sobre a temperatura do fluido refrigerante, T_r , e a velocidade de fluxo mássico, GM , que apresentam função de variável de manipulação, realizamos alguns testes de perturbação.

A seguir, apresentamos na Tabela V.1 as perturbações degrau nestas variáveis de entrada, visando observar o comportamento sobre a variável a ser controlada, que no caso é a temperatura do reator no 1º ponto em $z = 0,2$ m.

Tabela V.1 – Perturbações degrau nas variáveis para manipulação

Perturbação degrau (%)	Temperatura no 1º ponto (K) para perturbação em T_r	Temperatura no 1º ponto (K) para perturbação em GM
-50	237,65	443,52
-30	317,47	445,28
-10	398,69	446,73

0	447,35	447,35
10	500,93	447,89
30	573,79	448,78
50	653,09	449,42

A temperatura do fluido refrigerante sendo a variável que mais se destacou com seu efeito na parte estatística, teve sua confirmação através dos dados da Tabela V.1, onde se pode observar a elevada sensibilidade sobre a temperatura do reator. Já a velocidade de fluxo mássico, como nos dados anteriores e pela Tabela V.1, não teve efeito significativo sobre a temperatura do reator, sendo então confirmado a limitada utilização prática desta variável.

A seguir, observa-se melhor as conclusões anteriores através das Figuras V.18 e V.19, o comportamento dinâmico da temperatura do reator no 1º ponto frente a perturbações degrau em GM e Tr, respectivamente.

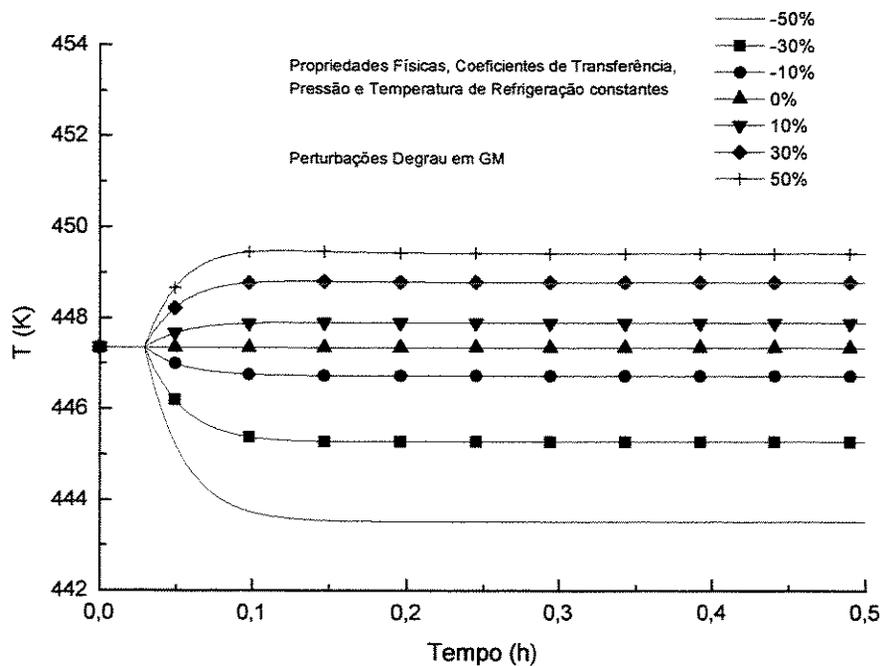


Figura V.18 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

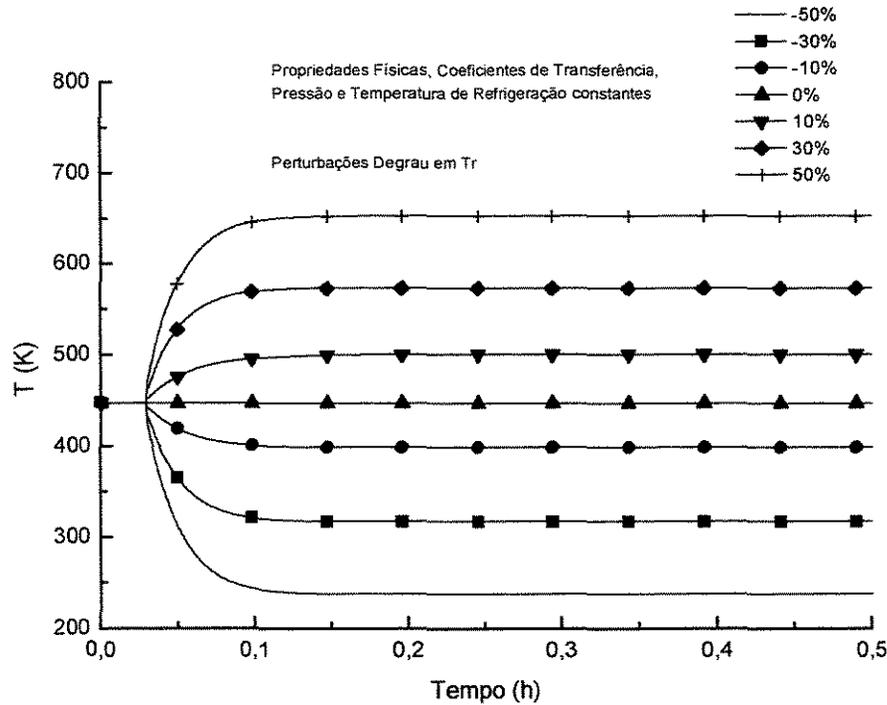


Figura V.19 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

V.3.2 – Controle da Conversão do Reator

Como no item anterior, desenvolveu-se agora outro esquema de sistema de controle do reator químico, levando em consideração o fator econômico, ou seja, a quantidade de produto obtido na saída do reator. Desta forma, controlar-se-á no ponto $z = 2,0$ m (saída do reator) a conversão obtida de produto.

Nas figuras V.20 e V.22 demonstra-se o desempenho do sistema de controle do reator frente a mudanças de “set point”. Nas figuras V.21 e V.23, visualiza-se o desempenho da variável manipulada para cada caso, respectivamente.

Pelas figuras, observa-se que o sistema de controle estatístico consegue se aproximar bem mais do “set point” desejado, o que não aconteceu no caso anterior, onde a temperatura do reator era a variável de controle, e ainda, consegue-se obter uma resposta bem mais rápida do que no caso do controlador PID.

Com relação a variável manipulada, no caso a temperatura do fluido refrigerante, acontece praticamente como anteriormente; o valor desejado é logo fornecido pela Equação Estatística, que para este caso se aproximou mais do valor desejado.

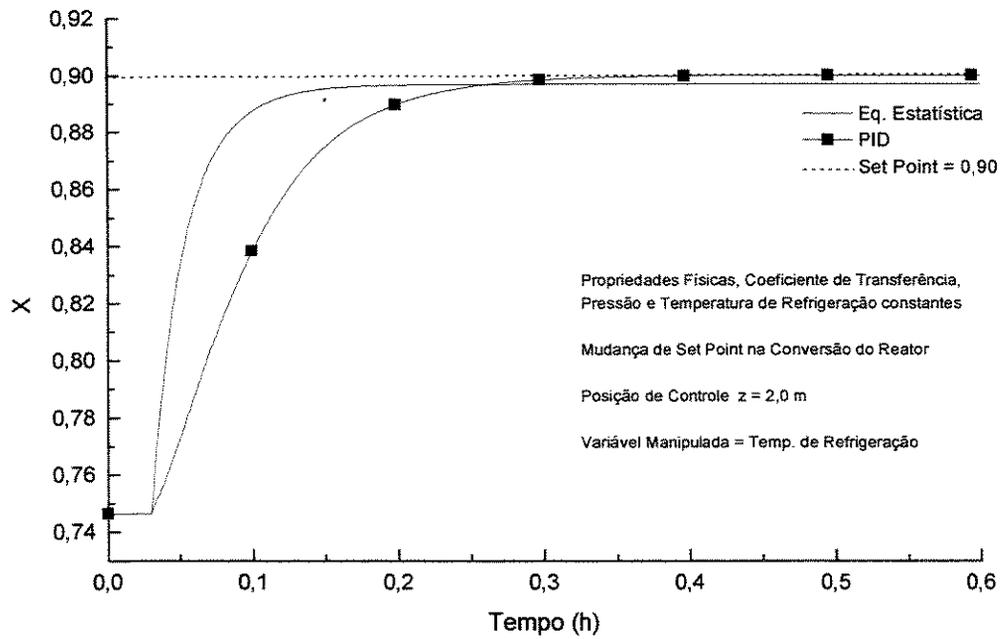


Figura V.20 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

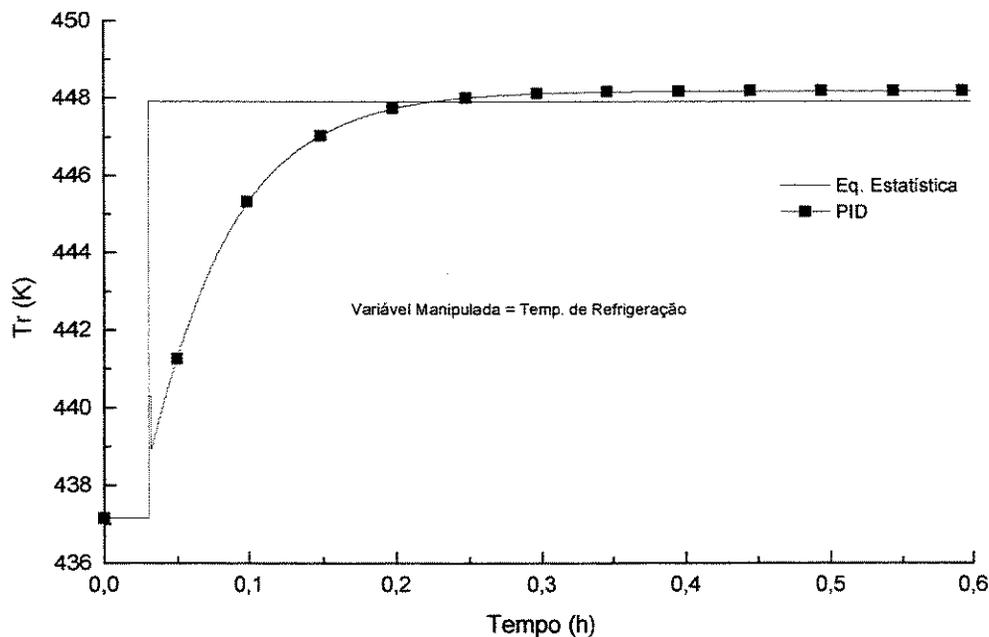


Figura V.21 – Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator

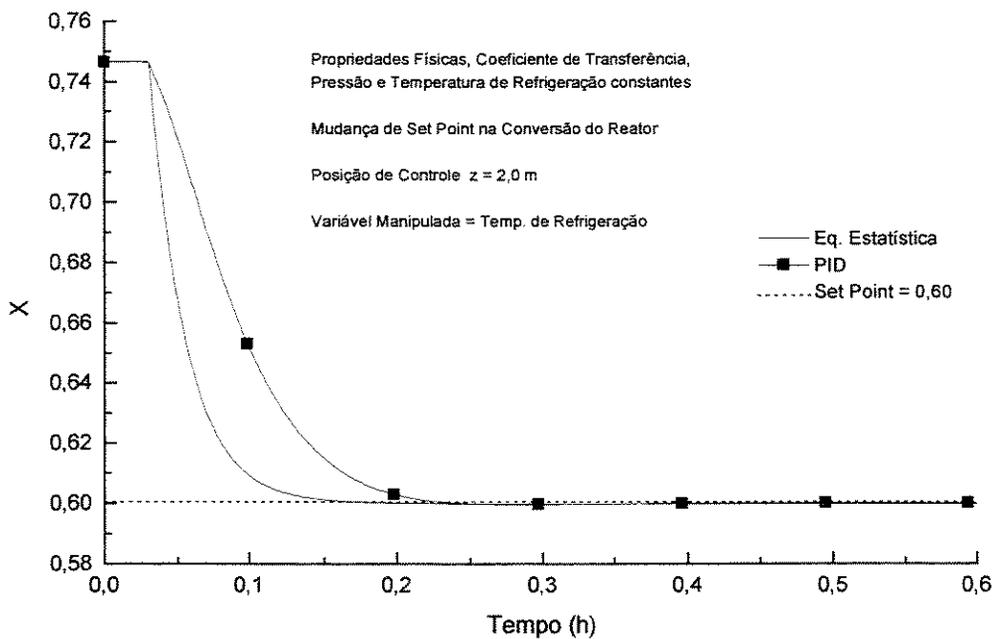


Figura V.22 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

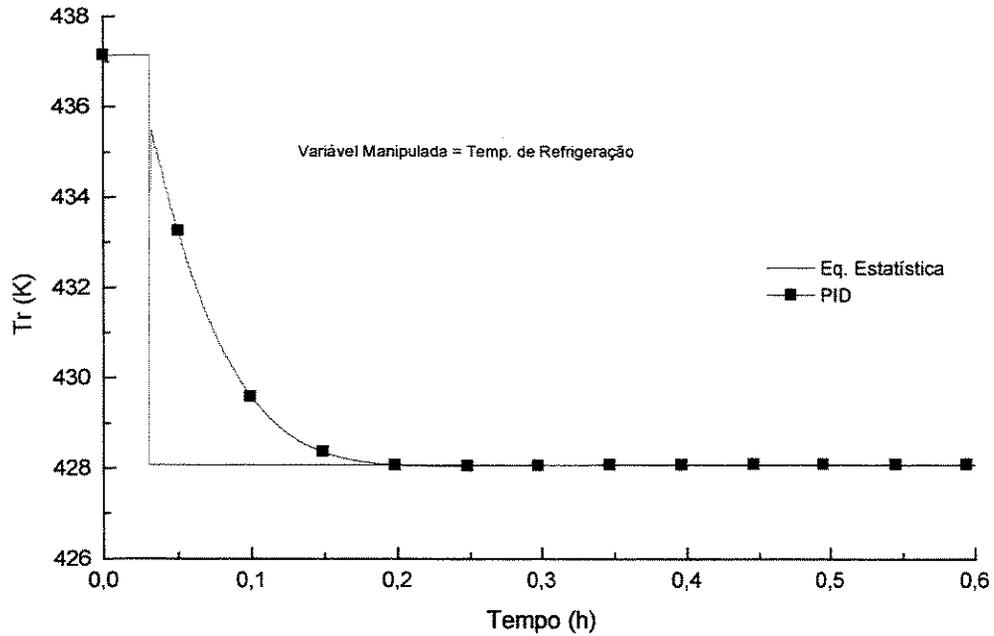


Figura V.23 – Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator

As Figuras V.24 a V.31 demonstram como o mesmo esquema de controle do reator químico anterior se comporta frente a perturbações do tipo degrau nas variáveis de entrada do reator.

Pode-se notar que através da Equação Estatística, a resposta para a correção da perturbação é mais rápida do que pelo PID, mas não obtendo totalmente o valor desejado, o que nesses casos representam pequenos desvios, e em alguns casos como na perturbação da Vazão e da Temperatura do Fluido de Refrigeração são desprezíveis, na prática.

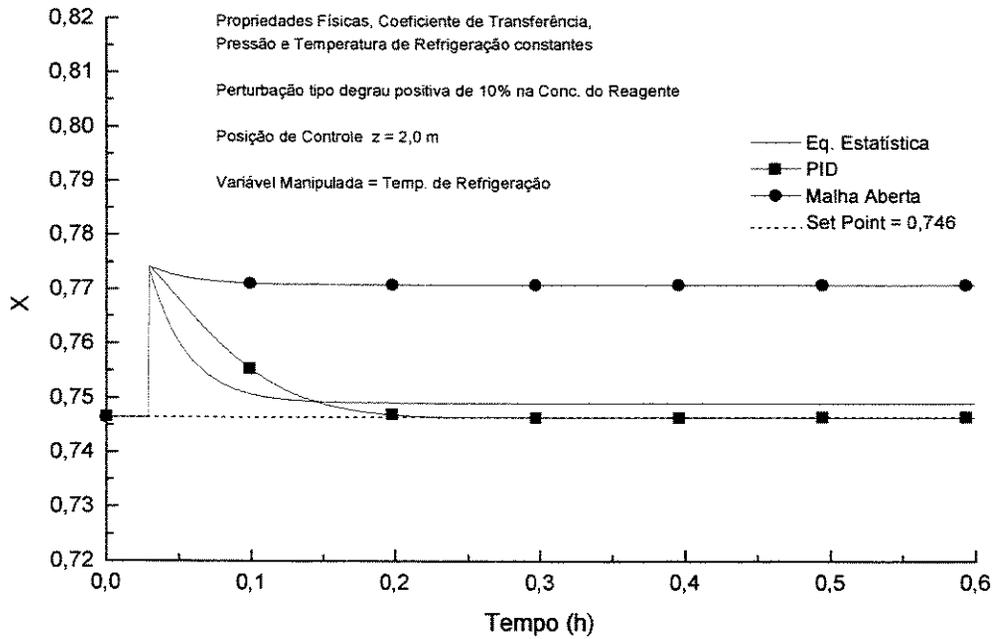


Figura V.24 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

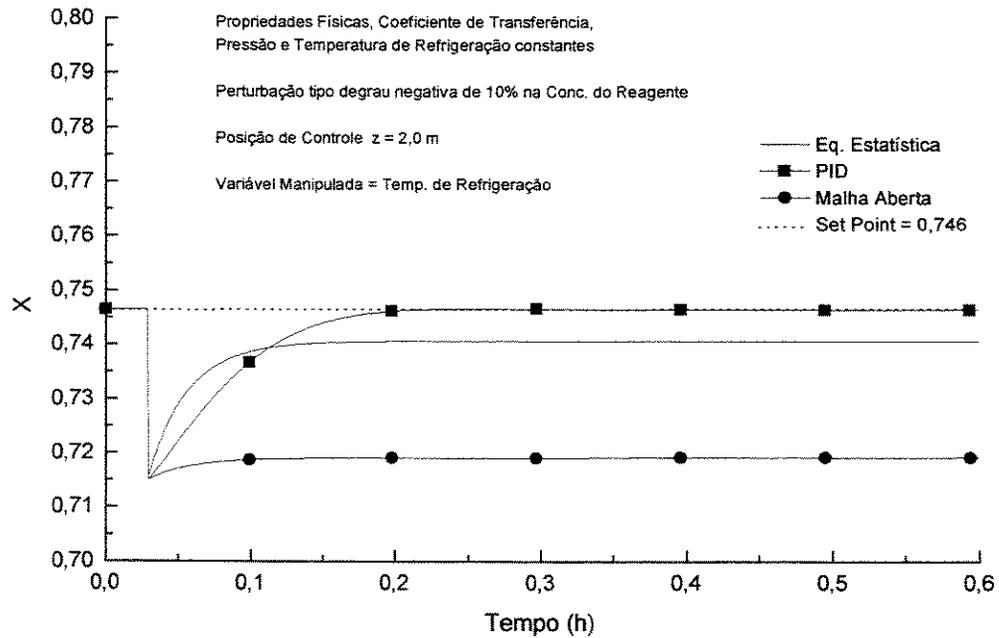


Figura V.25 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

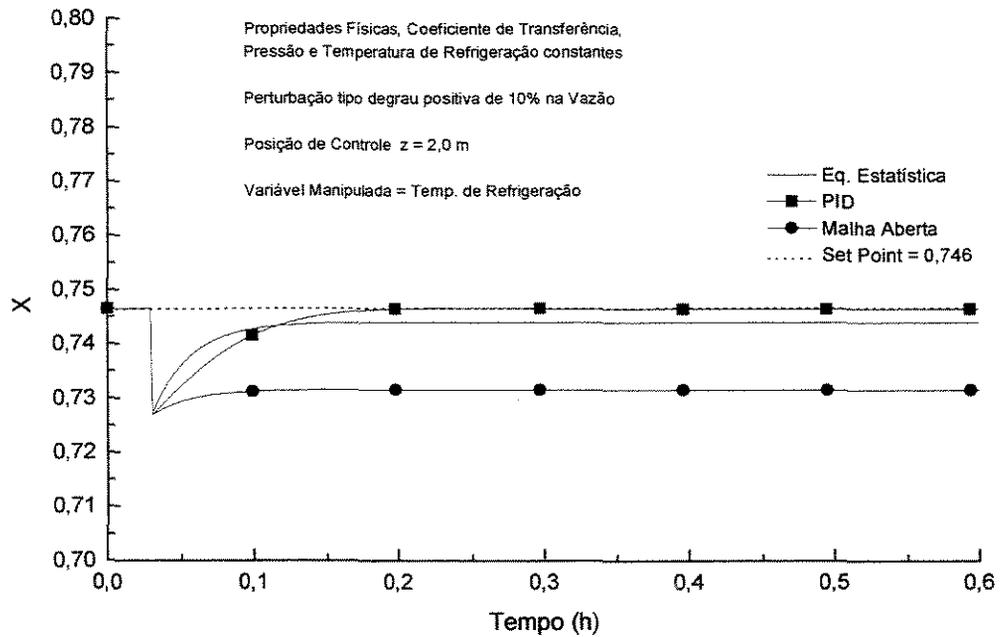


Figura V.26 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

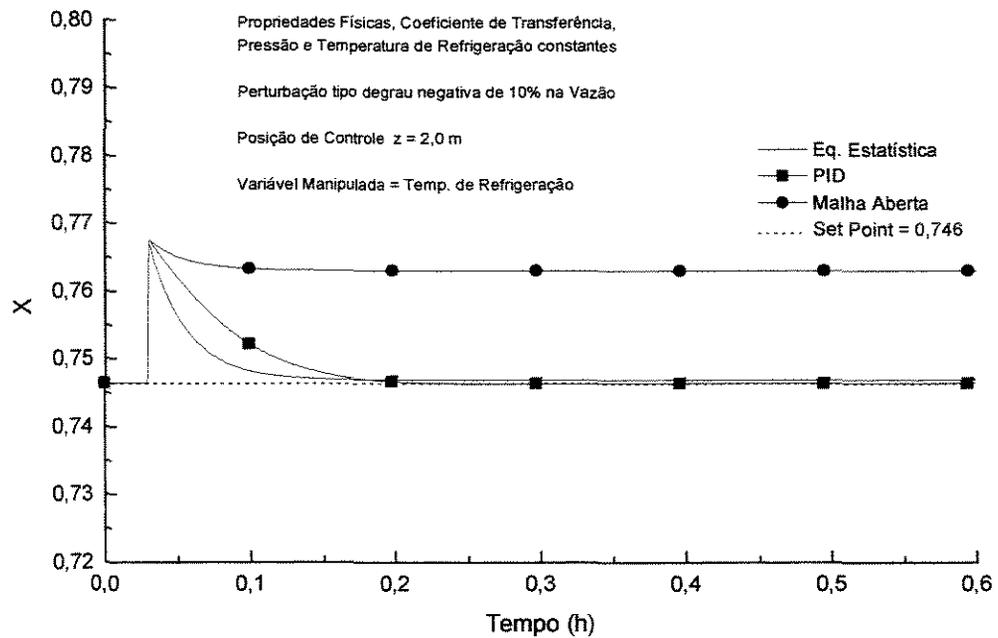


Figura V.27 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

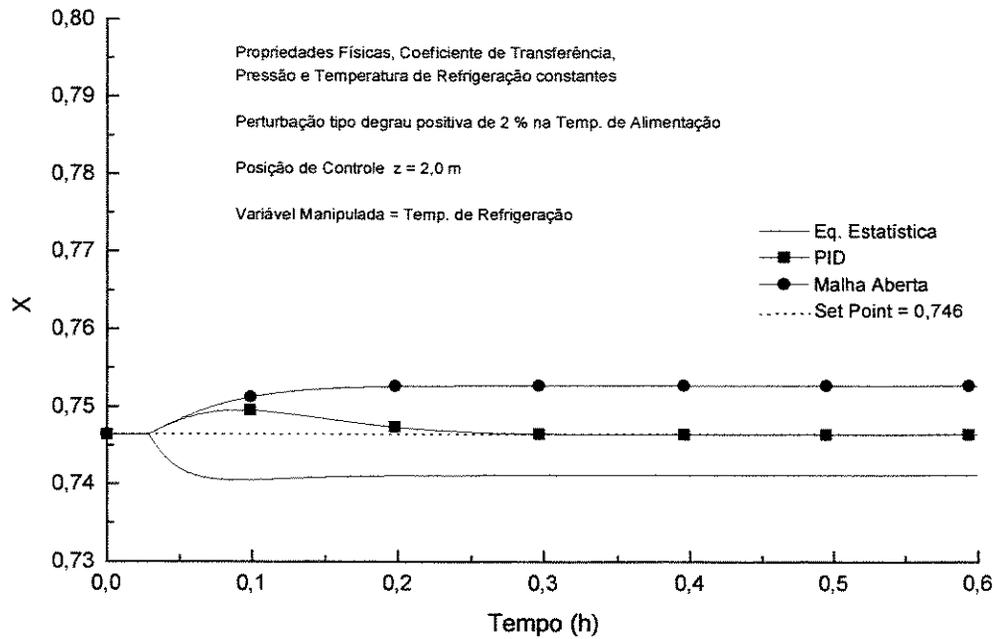


Figura V.28 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

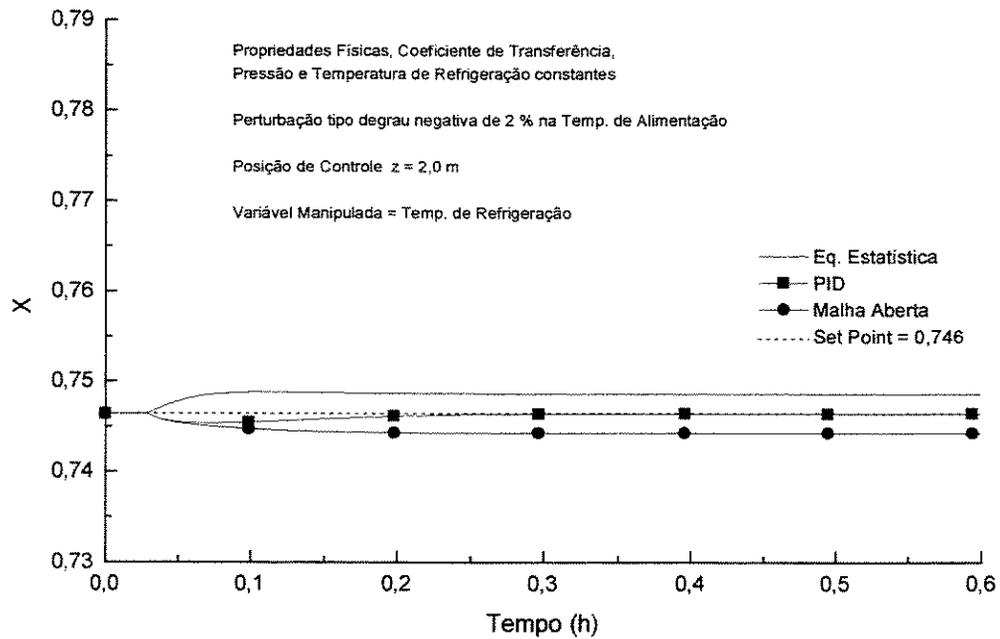


Figura V.29 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

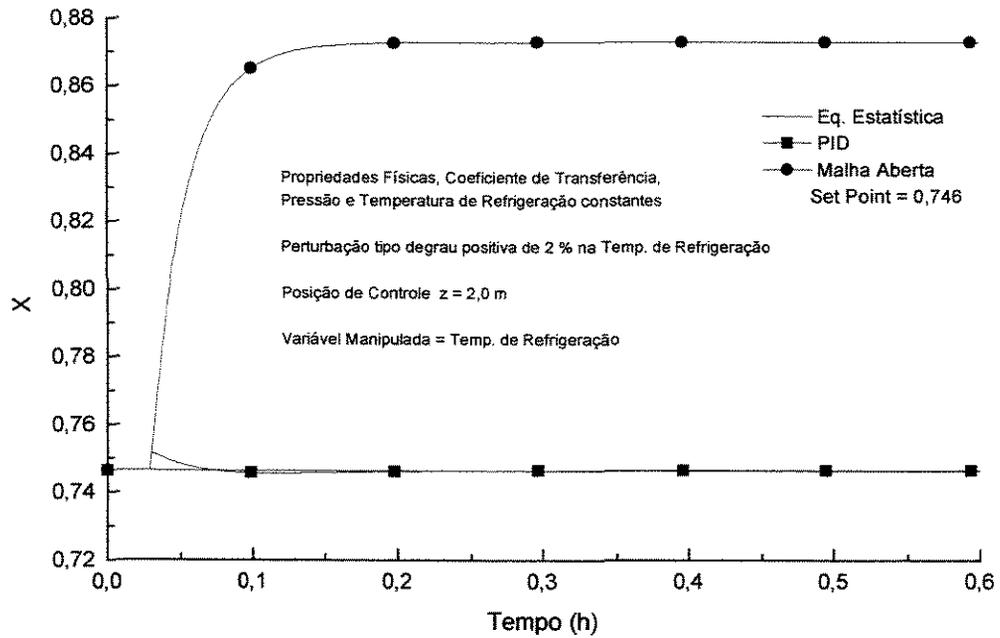


Figura V.30 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

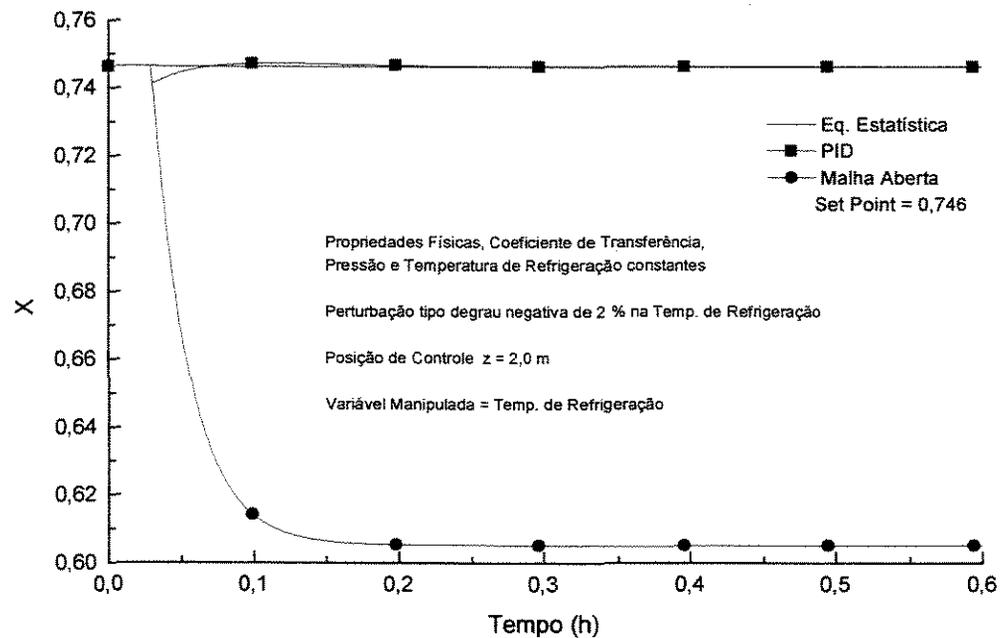


Figura V.31 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

V.4 – CONCLUSÕES

Neste capítulo pôde-se visualizar o desempenho da Equação Estatística, desenvolvida no Capítulo 4, atuando como um controlador do tipo “Feedback-Feedforward”, e sendo comparado a um controlador “feedback” tipo PID.

Nota-se que a Equação Estatística controla satisfatoriamente o reator químico, tanto quando a variável de controle é a temperatura do reator ou quando é a conversão do reator, tendo no último caso uma performance ainda melhor.

Sua grande vantagem foi que o valor da variável manipulada para correção dos desvios gerados pelas perturbações é logo designado, o que não acontece com o controlador PID, que em certos casos apresenta grandes oscilações nesta variável para poder corrigir os desvios.

A desvantagem encontrada pelo uso da Equação Estatística foi o desvio que se nota na variável controlada com relação ao “set point”, chamado de “offset”. Este erro já era esperado, devido a Equação obtida através dos Mínimos Quadrados não apresentar um ajuste 100 %. O erro pode ser contornado na prática atribuindo valores ao “set point” do programa próximos aos almejados.

CAPÍTULO VI – ALGORITMO DE CONTROLE PROPOSTO PARA O REATOR

VI.1 – INTRODUÇÃO

Pelas simulações anteriores com sistemas de controle de processos químicos utilizados pela indústria, reservou-se para este capítulo um novo algoritmo de controle, que será detalhado e visualizado adiante.

A proposta de controle terá como principal objetivo a união destes sistemas, na obtenção de um controlador Estatístico-PID. Este novo algoritmo de controle utiliza o modelo estatístico obtido no Capítulo IV, onde a velocidade de previsão do modelo se une ao potencial de correção do controlador tipo PID, criando um modelo dinâmico.

O desempenho do controlador Estatístico-PID será demonstrado e comparado ao controlador convencional tipo PID pelas figuras e comentários deste capítulo.

VI.2 – CONTROLADOR ESTATÍSTICO-PID

No estudo do capítulo 5, observou-se a grande capacidade de previsão do modelo estatístico de 2ª ordem, onde se gera um sinal rápido e muito coerente para fins de controle, mas também obtendo desvantagens ao gerar “offsets” e limites de operação em suas variáveis. A limitação de operação pode compreender tanto a dificuldade prática de se realizar um projeto de planejamento fatorial completo, como também a dificuldade em se trabalhar com sistemas variantes no tempo.

Desta forma, a intenção deste capítulo é contornar as dificuldades encontradas anteriormente no controle com o modelo estatístico em sistema “Feedback-Feedforward”, aproveitando a velocidade de previsão do modelo, e inovando ao sugerir um algoritmo de controle que opere também com sistema “Feedback-Feedforward”.

O sistema “feedforward” permanecerá no algoritmo de controle pela vantagem de detectar as perturbações tão logo elas entrem no processo, e este pode ser rapidamente redirecionado pelo modelo estatístico que ajusta a variável manipulada, de forma a minimizar os desvios nas variáveis de saída.

Já o sistema “feedback” terá uma nova proposta para ajuste dos desvios gerados pelas imperfeições do sistema “feedforward”. Este algoritmo utiliza-se também do modelo estatístico, mas com a vantagem de poder contar com uma das constantes do modelo estatístico variando no tempo.

A proposta é melhor visualizada e compreendida pela figura abaixo, e seu algoritmo é descrito a seguir.

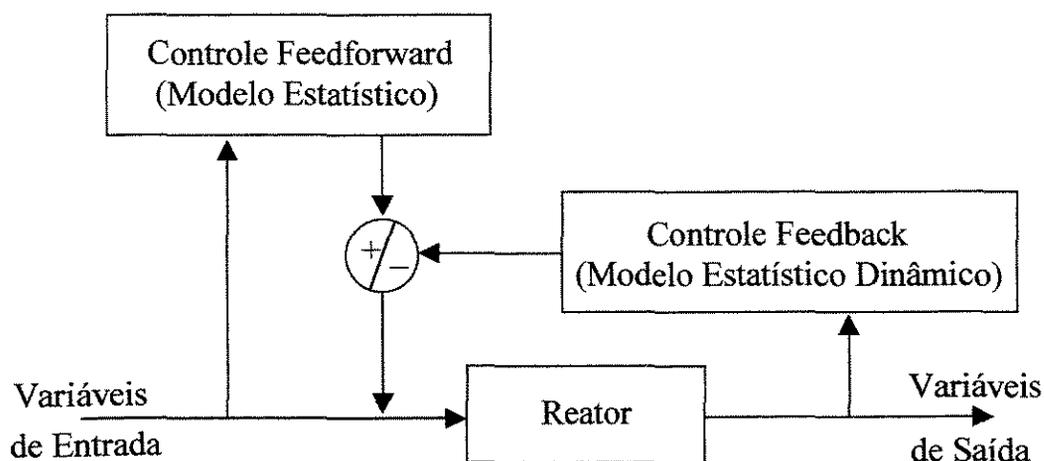


Figura VI.1 – Esquema de Funcionamento do Controlador Estatístico-PID

Algoritmo do controlador Estatístico-PID :

- Se houver ou não perturbação nas variáveis de entrada, o controle “feedforward” gera ou não o ajuste na variável manipulada pelo modelo estatístico, permanecendo fixo nesta etapa os valores das constantes do modelo estatístico;
- Já o sistema “feedback” estará vigilante quanto ao desvio do “set point” da variável controlada, que ao notar algum desvio aciona o controlador PID;
- Com a presença do desvio na variável controlada, o PID gera um sinal de correção para uma constante do modelo estatístico, que se torna variante no tempo;
- O modelo estatístico por sua vez gera e envia o novo sinal para a variável manipulada.

A constante do modelo estatístico a ser modificada no tempo, deve ser de grande expressão para o modelo, ou seja, sua alteração deve ser sensível para a variável manipulada. Este é um ponto importante para o controlador Estatístico-PID obter ou não alta eficiência.

No caso deste trabalho, a constante do modelo a ser manipulada pelo PID será a que multiplica na forma linear a temperatura do fluido refrigerante, tanto para o caso de controle sobre a temperatura do reator, como sobre a conversão na saída do reator, pois seu efeito nas duas equações empíricas pode ser observado através de cálculos matemáticos, como também graficamente pelo capítulo 4.

VI.2.1 – Controle do Perfil Térmico do Reator

Nesta parte do trabalho, observar-se-á o funcionamento do controlador Estatístico-PID no controle da temperatura do reator no 1º ponto em $z = 0,2$ m. As simulações do reator frente a problemas enfrentados pelos controladores são comparadas com o controlador convencional PID, e podem ser observadas pelas figuras e comentários a seguir.

Para se ter segurança na parte de comparações entre controladores, os valores das constantes de projeto do PID para os dois controladores são fixados para todas as simulações, e seus valores são os seguintes :

Tabela VI.1 – Valores das constantes do PID para controle da temperatura do reator

Constantes	Estatístico-PID	PID
K_c	5	0,5
T_I	0,015	0,01
T_D	0,001	0,005

Desta forma então, nas figuras VI.2 e VI.4 se observa o desempenho dos controladores frente a mudanças de “set point” na temperatura do reator, e pelas figuras VI.3 e VI.5, as respectivas ações da variável manipulada.

Pode-se logo notar pelas figuras que o controlador proposto Estatístico-PID leva vantagem sobre o PID no que diz respeito, a sensibilidade e velocidade na anulação do erro. Já com relação a variável manipulada, que no caso é a temperatura do fluido refrigerante, os dois controladores realizam elevadas oscilações nesta variável, para obterem a expressiva velocidade de anulação do erro, o que pode ser inadequado para um sistema não linear.

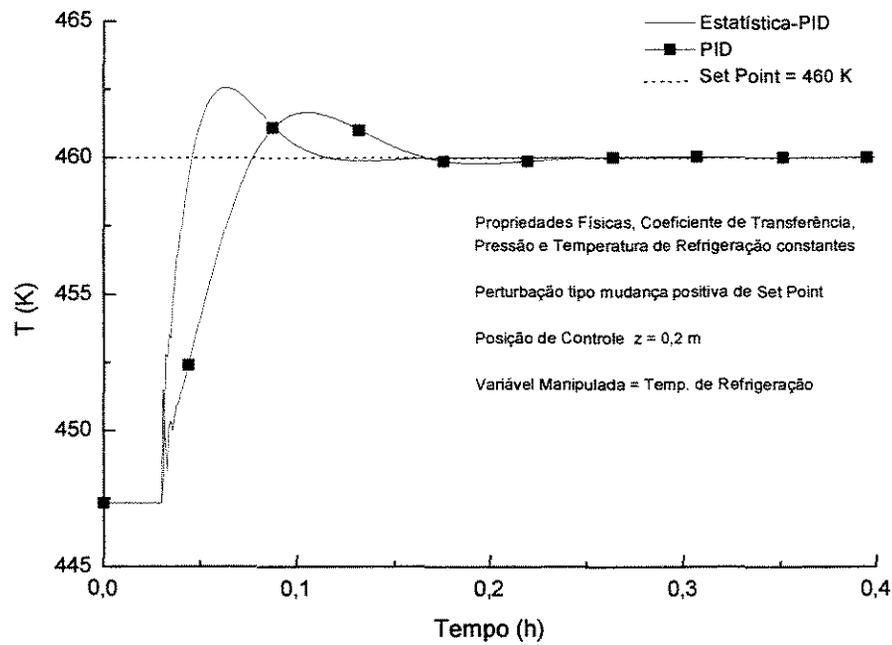


Figura VI.2 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

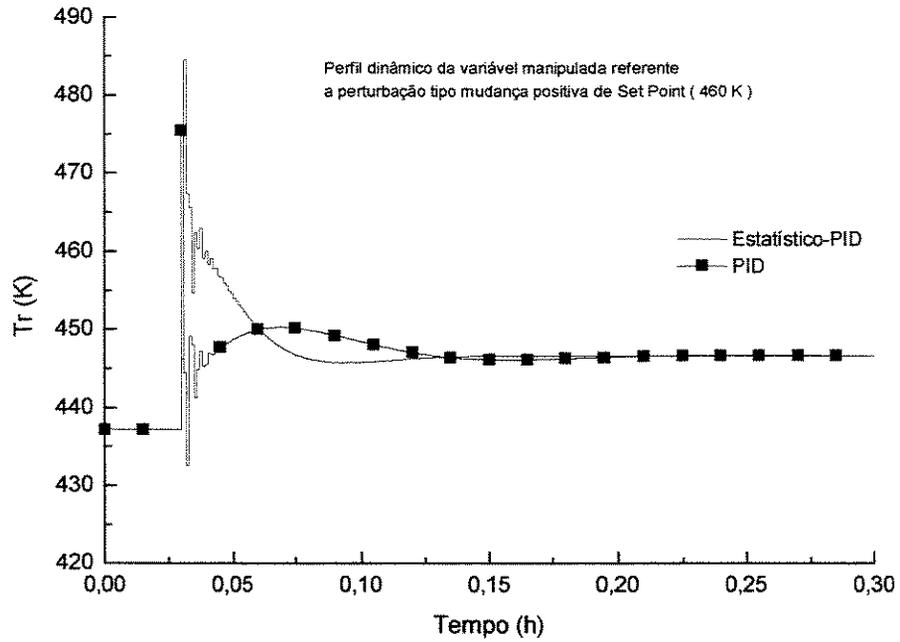


Figura VI.3 – Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator

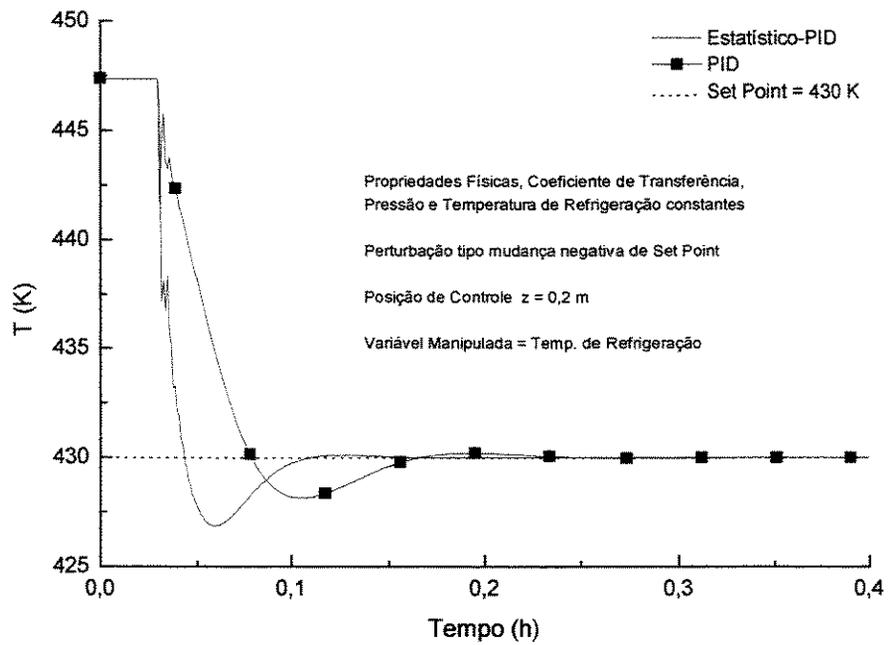


Figura VI.4 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

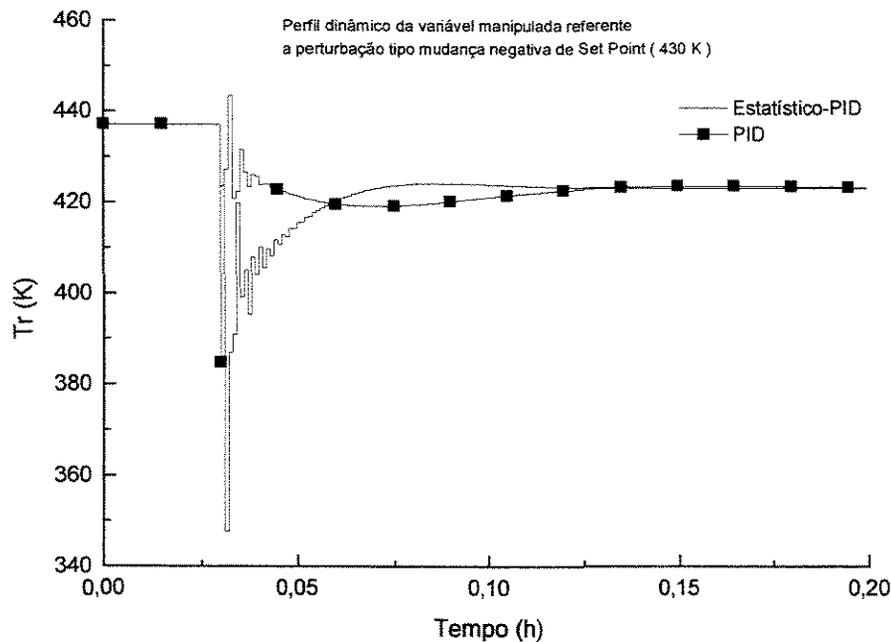


Figura VI.5 – Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator

Nas figuras VI.6 a VI.11, observa-se a atuação dos controladores através do comportamento dinâmico do reator frente a perturbações degrau nas variáveis de entrada.

Nota-se que o controlador Estatístico-PID obtém expressiva vantagem sobre o controlador PID, pois não se observam oscilações tal como para o PID, apesar de serem desprezíveis praticamente, e por isso o controlador Estatístico-PID atinge rapidamente o “set point” desejado.

Outro fato importante de se comentar, é a possibilidade do controlador Estatístico-PID poder atuar de forma tranquila à imposições de perturbações acima de limites estabelecidos no projeto do modelo Estatístico, e em situações onde o sistema altere com o tempo, devido o modelo empírico estar sempre sendo corrigido pelo algoritmo PID.

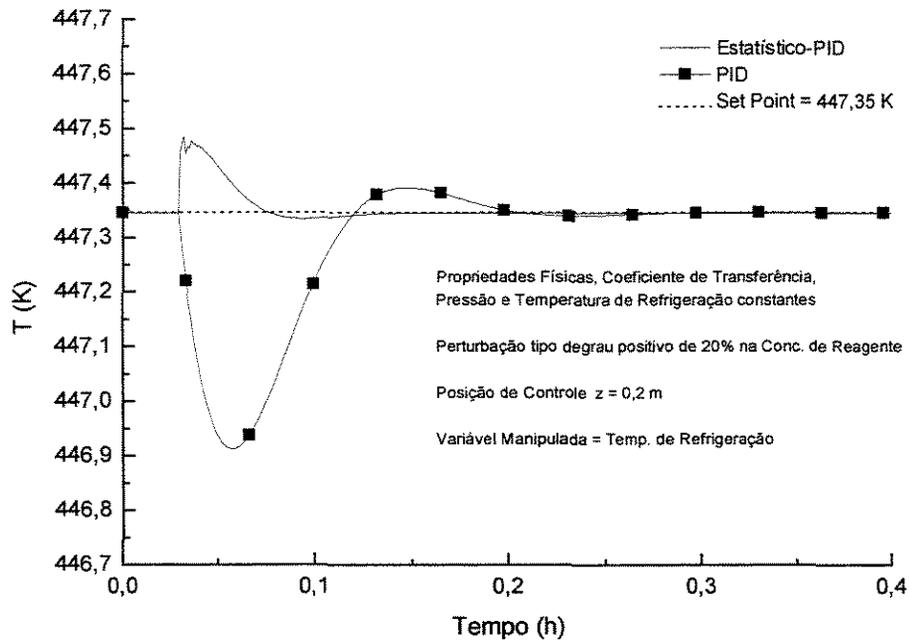


Figura VI.6 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

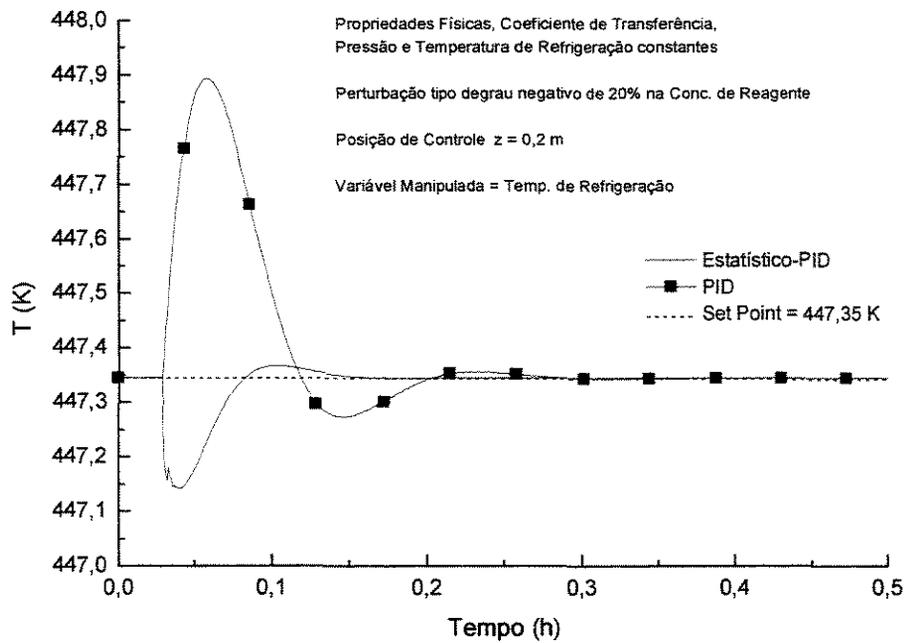


Figura VI.7 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

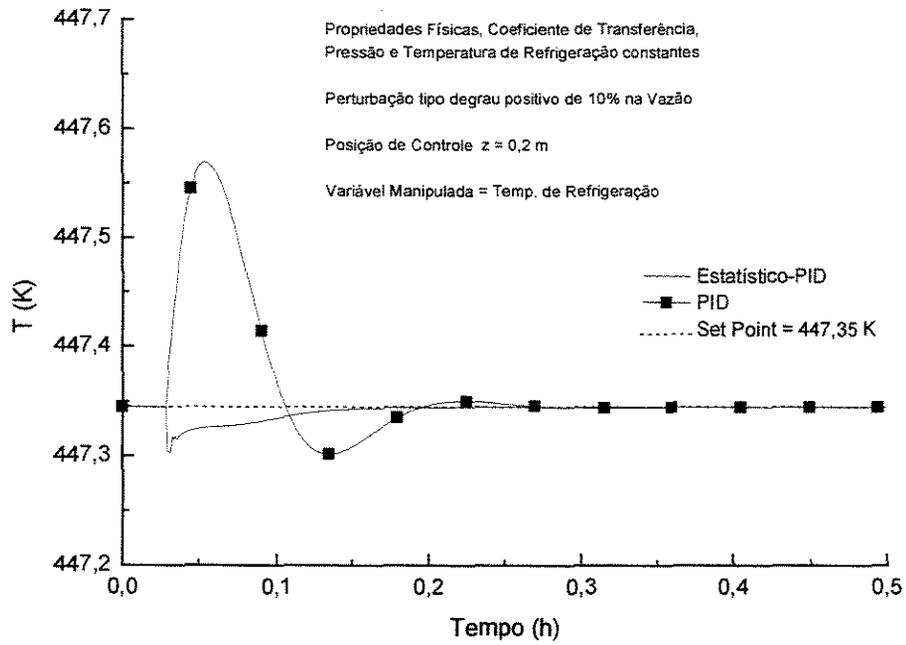


Figura VI.8 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

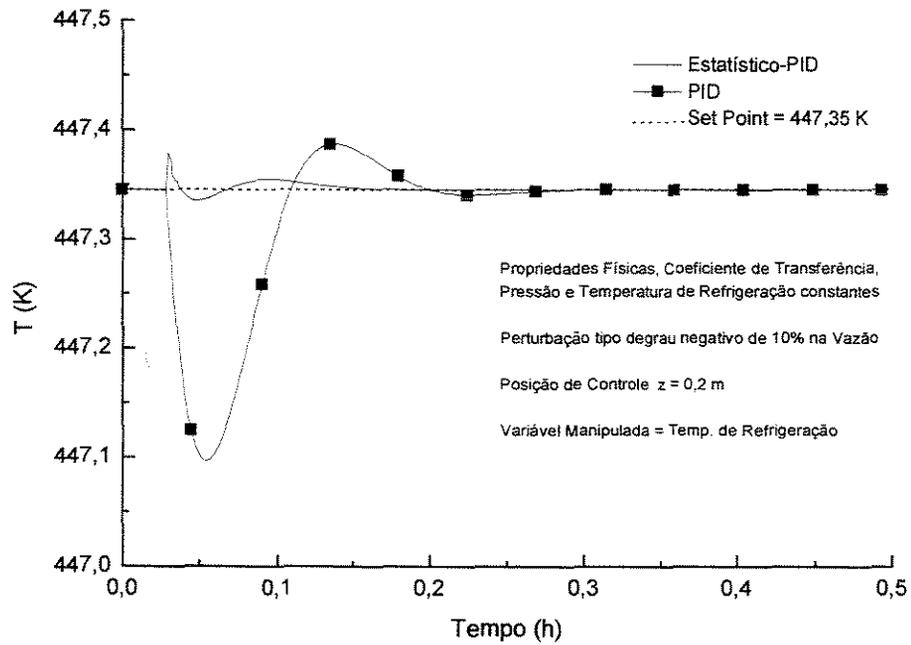


Figura VI.9 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

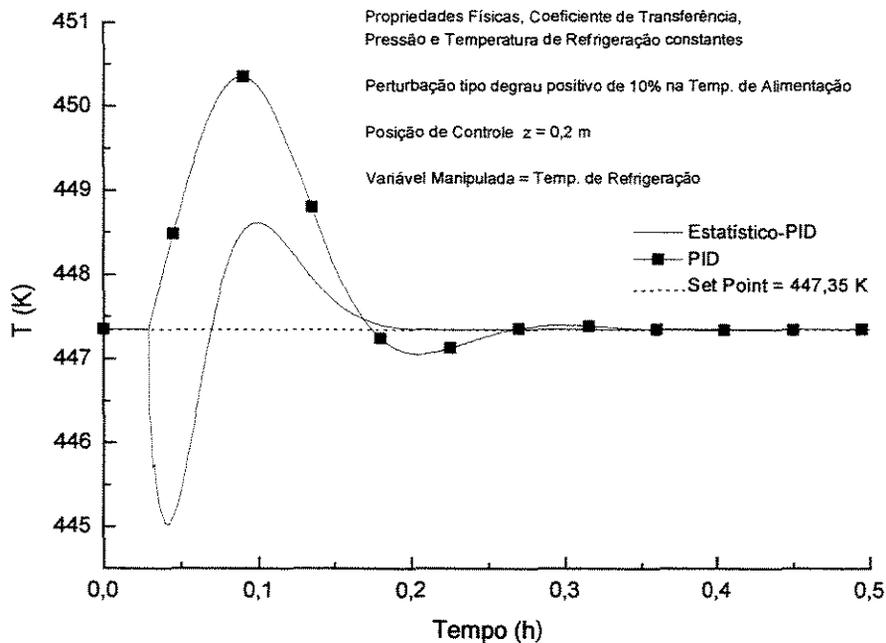


Figura VI.10 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

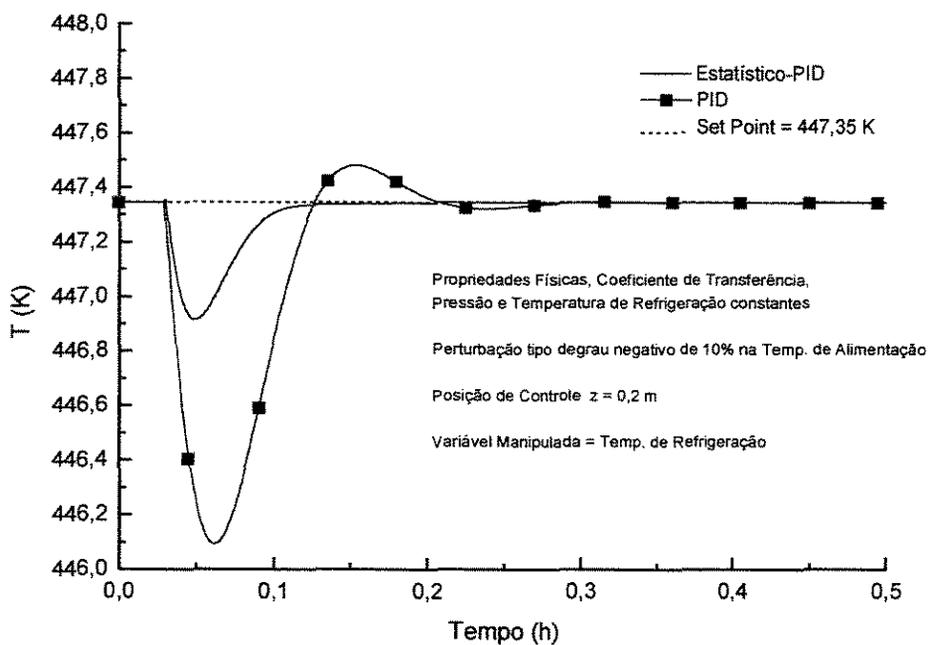


Figura VI.11 – Perfil Dinâmico da Temperatura Axial do Reator

VI.2.2 – Controle da Conversão do Reator

Como no capítulo 5, será desenvolvido agora o esquema de controle proposto sobre a conversão de produto na saída do reator em $z = 2,0$ m, com as simulações dinâmicas do reator sendo também comparadas com o controlador convencional PID.

Para ter-se um parâmetro de comparações entre os controladores, os valores das constantes de projeto do PID para os dois controladores também são fixadas em todas as simulações, e seus valores são os seguintes :

Tabela VI.2 – Valores das constantes do PID para controle da conversão do reator

Constantes	Estatístico-PID	PID
K_c	10	10
T_I	0,01	0,01
T_D	0,0005	0,0005

Note que os valores das constantes de projeto do PID são os mesmos para os dois controladores, o que não leva a crer que esta situação possa ocorrer em todos casos, pois no caso do controle sobre a temperatura, isto não ocorreu.

Desta forma, nas figuras VI.12 e VI.14 observa-se o desempenho dos controladores frente a mudanças de “set point” na conversão de saída do reator, e pelas figuras VI.13 e VI.15, as respectivas ações dos controladores sobre a variável manipulada.

Logo, nota-se pelas figuras que o controlador proposto Estatístico-PID leva vantagem sobre o PID no que diz respeito, a sensibilidade e velocidade de resposta. No caso de alcance do valor desejado, o controlador Estatístico-PID apresentou ligeira vantagem.

Já com relação a variável manipulada, no caso a temperatura do fluido refrigerante, o controlador Estatístico-PID realizou elevadas oscilações nesta variável para obter a expressiva velocidade de resposta, o que não se notou com o controlador PID.

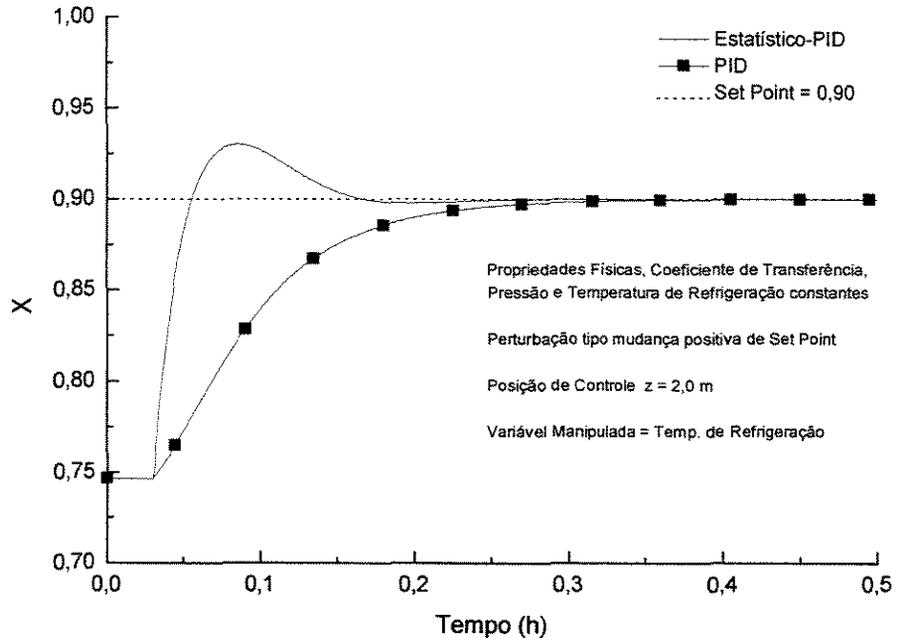


Figura VI.12 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

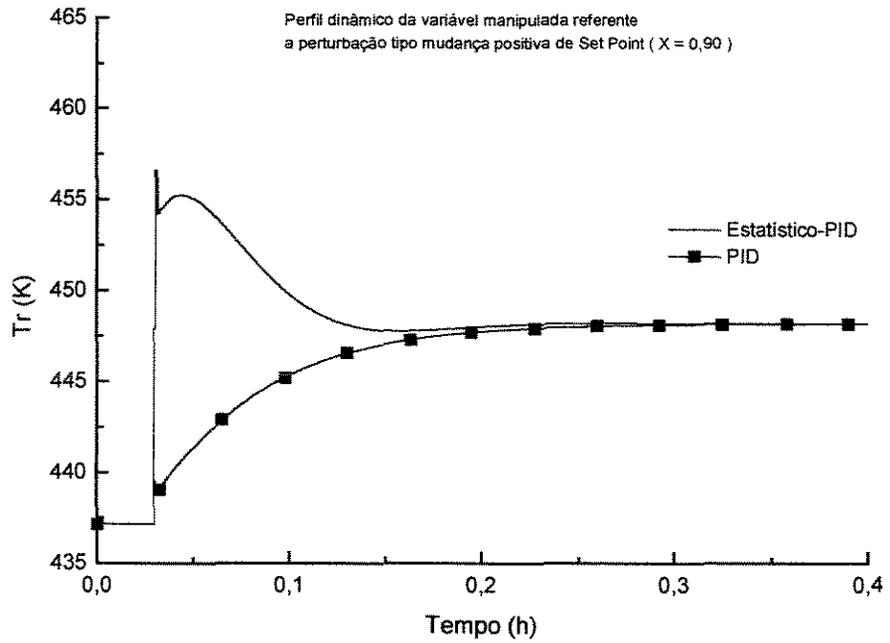


Figura VI.13 – Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator

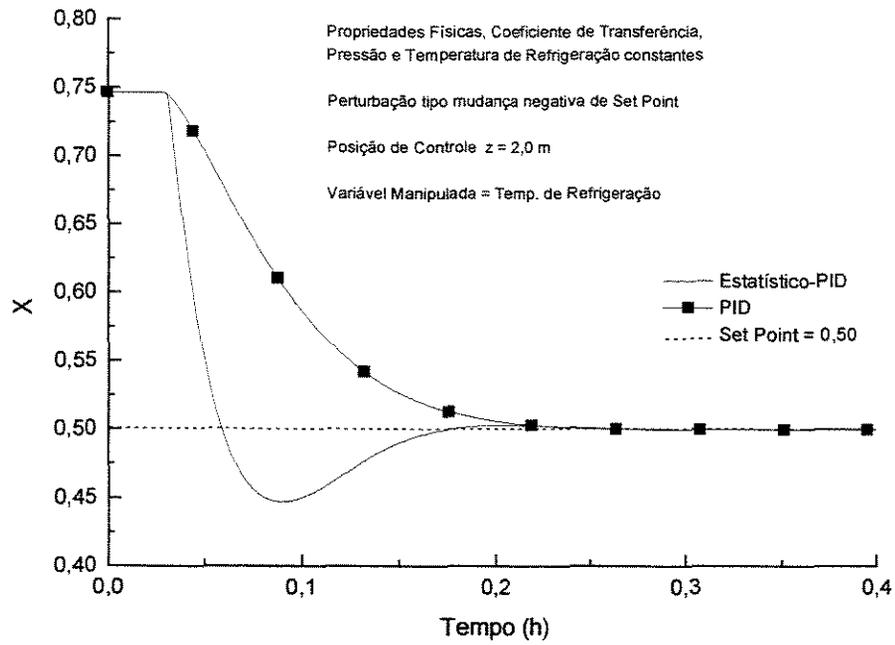


Figura VI.14 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

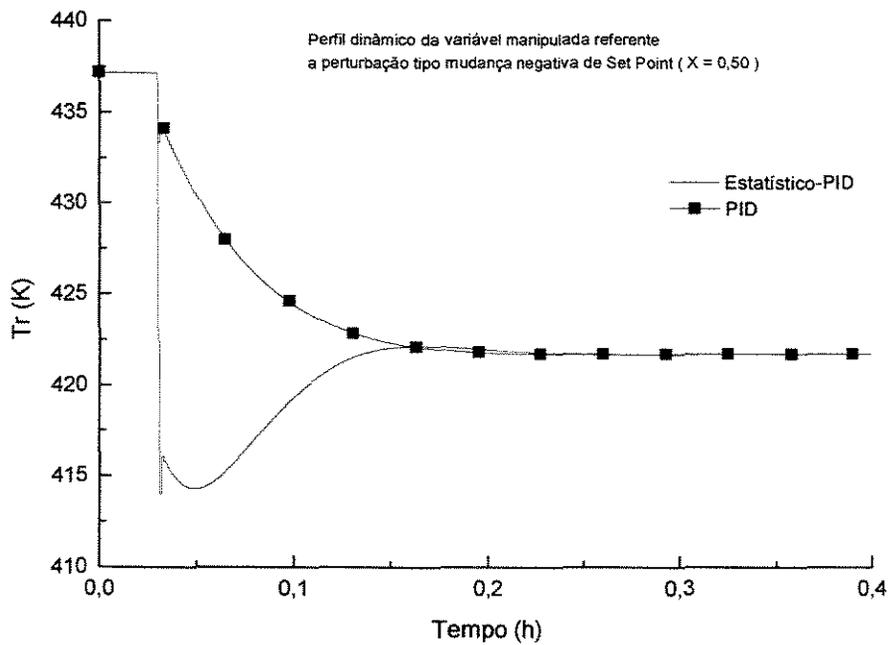


Figura VI.15 – Perfil Dinâmico da Temperatura do Fluido Refrigerante do Reator

Nas Figuras VI.16 a VI.21, demonstra-se o comportamento do reator com o mesmo esquema de controle anterior, mas frente a perturbações do tipo degrau nas variáveis de entrada do reator.

Nota-se que, através do controlador Estatístico-PID, a resposta para a correção da perturbação é mais rápida do que pelo PID, mas obtendo o valor desejado praticamente em tempos iguais para todos os casos.

Outra nota importante de comentar, como no caso anterior de controle sobre a temperatura do reator, pode-se realizar perturbações de maior intensidade sem que houvesse prejuízo com o modelo Estatístico, devido seu projeto ser com valores limitados.

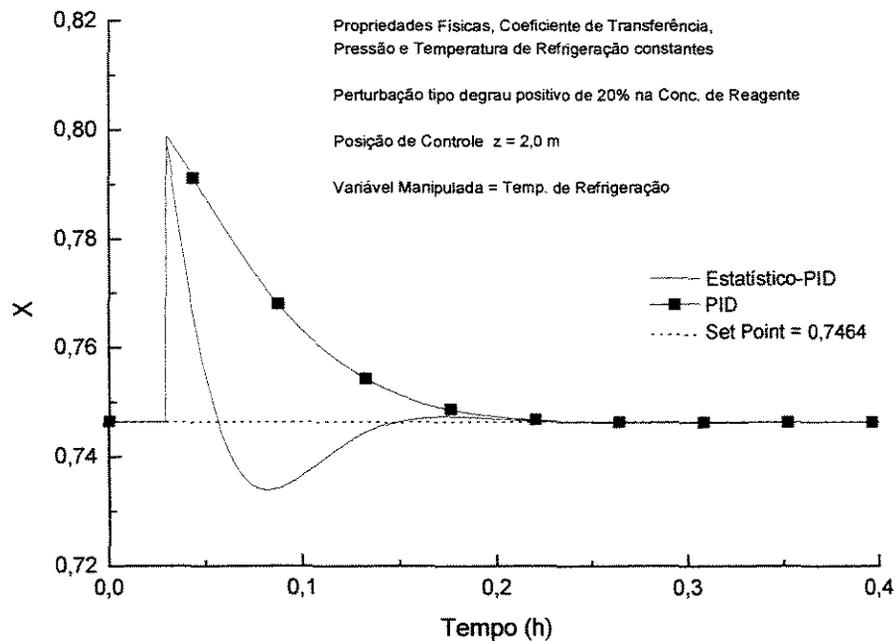


Figura VI.16 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

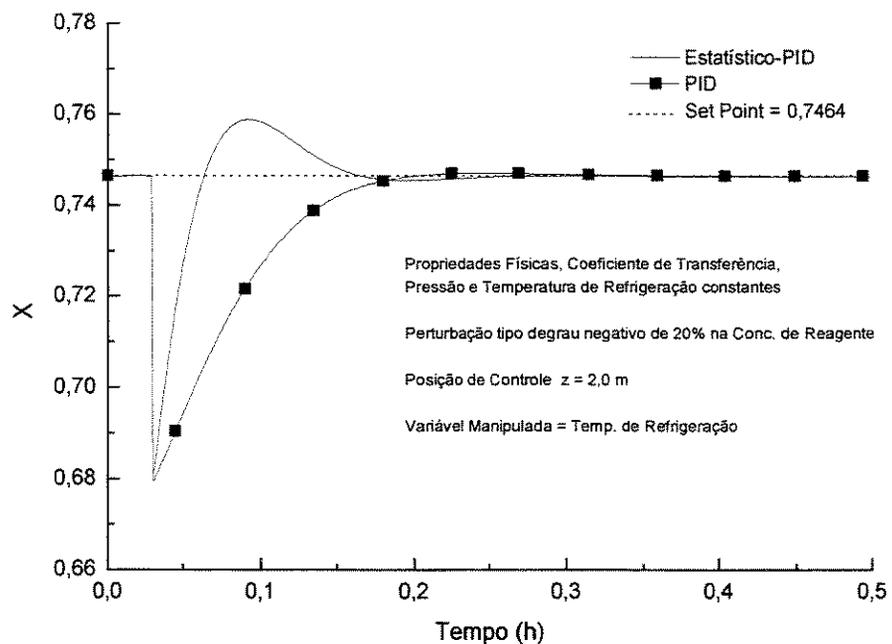


Figura VI.17 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

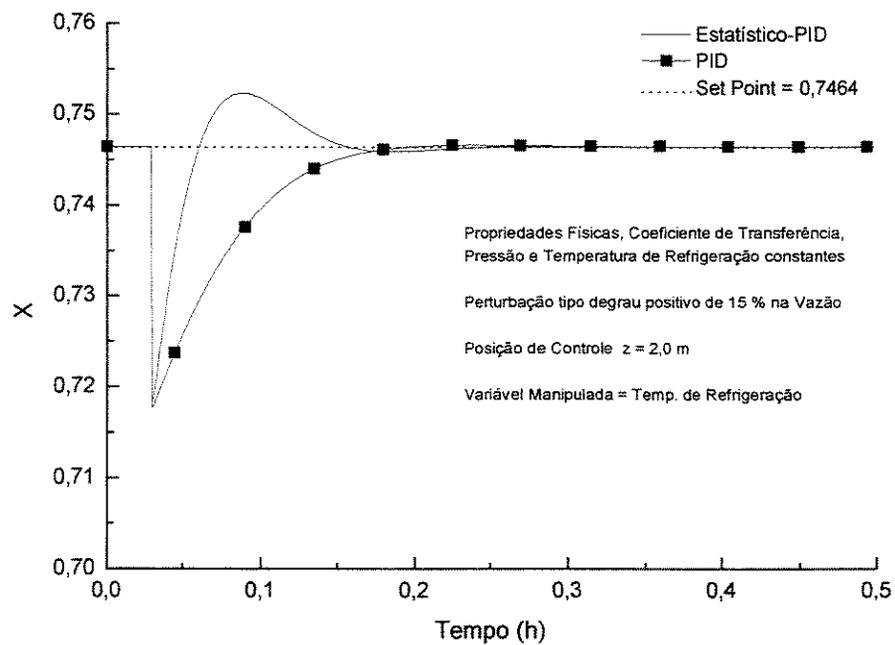


Figura VI.18 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

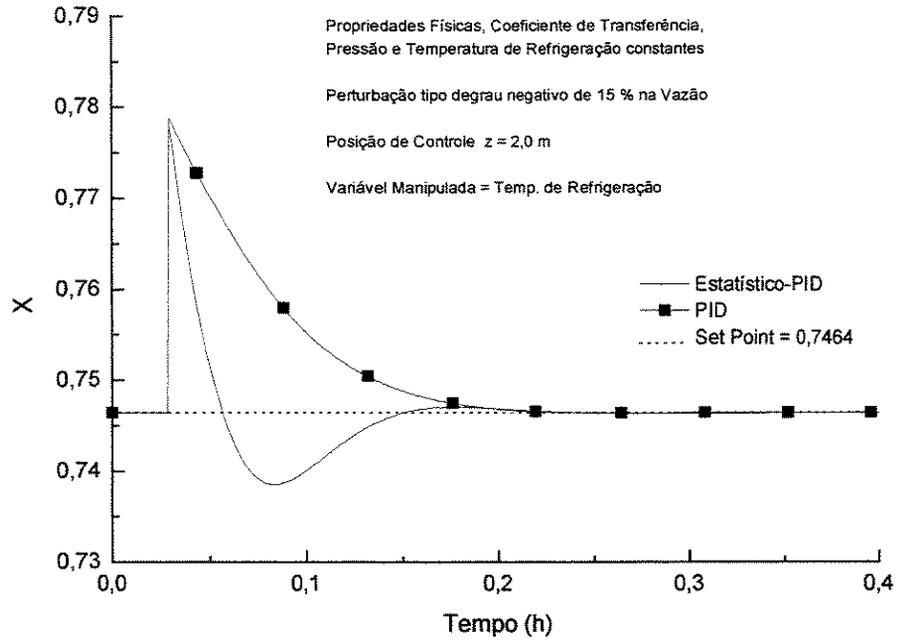


Figura VI.19 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

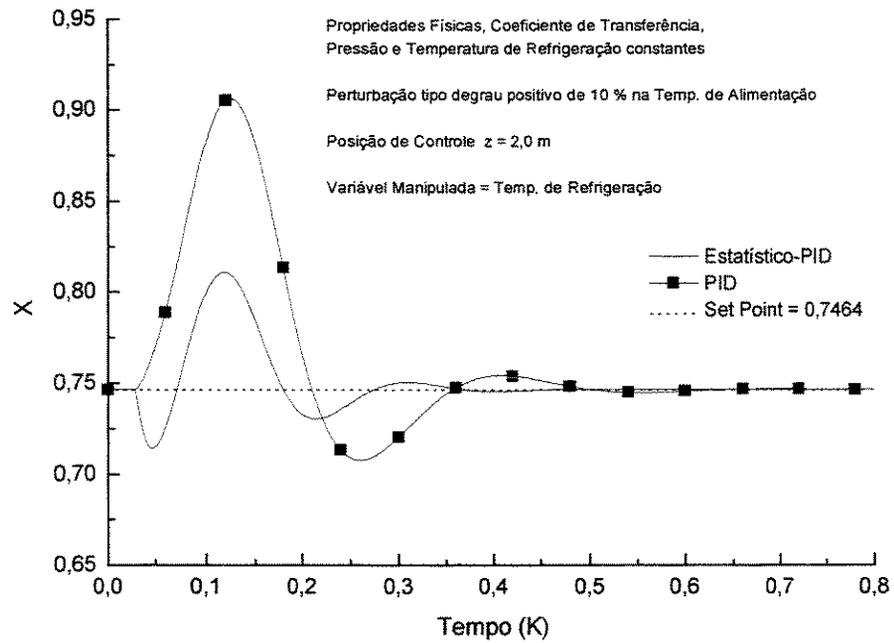


Figura VI.20 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

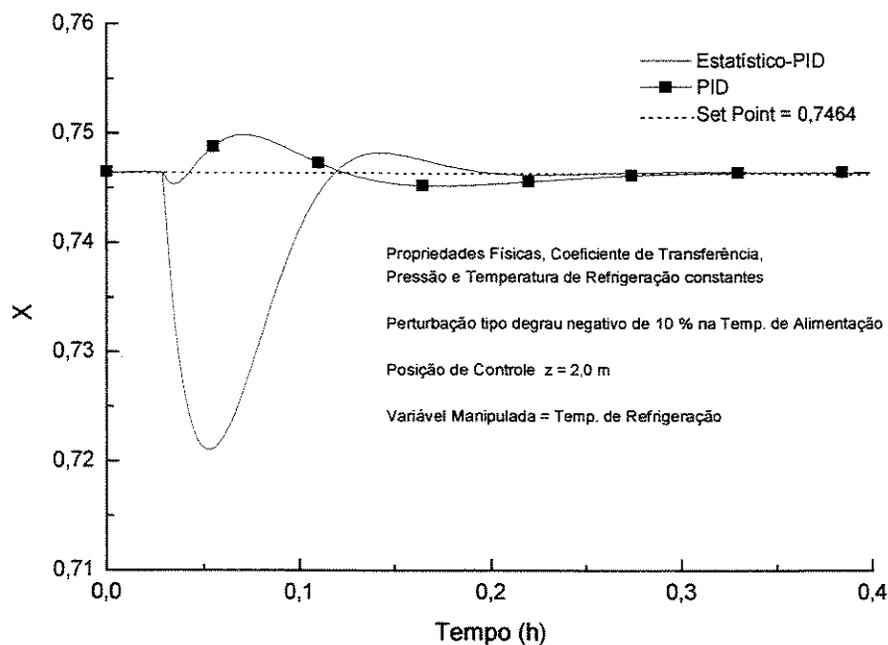


Figura VI.21 – Perfil Dinâmico da Conversão Axial do Reator

VI.3 – CONCLUSÕES

Neste capítulo pôde-se visualizar o desempenho do controlador proposto Estatístico-PID frente a diferentes tipos de perturbações existentes em sistemas químicos, onde a desvantagem da Equação Estatística com a presença de “offsets” foi sanada com a implementação do algoritmo PID no controlador Estatístico-PID

Observa-se neste tipo de controlador sensibilidade e rapidez de respostas melhores que no controlador convencional do tipo PID. Para o caso, onde a variável de controle é a temperatura do reator, o controlador Estatístico-PID obteve anulação do erro com maior velocidade, e no caso onde a conversão do reator era a variável controlada, o controlador proposto teve uma anulação do erro semelhante ao PID, mas tendo uma sensibilidade semelhante ao primeiro caso, o que no caso da conversão pode ser de extrema necessidade em virtude de sistemas que controlam a concentração de produtos químicos apresentam ainda lentidão de leitura.

A variável manipulada apresentou elevadas oscilações tanto para o controlador Estatístico-PID como para o controlador PID. Mas, isto não é tão relevante, quando se observa que para o controlador Estatístico-PID não houve limites tão severos quanto aos apresentados no projeto do modelo Estatístico para as perturbações impostas ao sistema, isto devido ao modelo variar no tempo, obtendo um modelo empírico dinâmico atualizado instantaneamente.

CAPÍTULO VII – CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O modelo pseudo-homogêneo bidimensional de Toledo e Maciel Filho baseado em Maciel Filho (1989), foi utilizado neste trabalho como sugestão de implementação para sistemas de controle, e se mostrou eficiente na capacidade de reprodução das principais características do comportamento dinâmico de reatores de leito fixo encontrados na literatura e na prática.

A limitação do uso do modelo e das variações das propriedades físicas, coeficientes de transferência, pressão e temperatura de refrigeração, se faz necessária quando a alta precisão quantitativa é um requisito, sendo no entanto outros modelos com maiores detalhes inadequados para aplicações em controle e otimização, de acordo com Toledo (1999).

O estudo do comportamento dinâmico do reator químico através do planejamento fatorial, mostrou-se eficiente na detecção da variável que melhor tem influência sobre o reator, no caso, a temperatura do fluido de refrigeração, T_r , o que a torna uma variável de suma importância como variável de manipulação. Outra variável que se tentou manipular foi a velocidade de fluxo mássico, G_M , por ser de fácil emprego praticamente, mas que não se mostrou útil para este fim, tendo que sofrer altas variações para poder controlar o reator, e que pode ser comprovado tanto com a Equação Estatística e o PID.

Com relação ao desempenho do sistema de controle “Feedforward-Feedback” avaliado neste trabalho, tendo como controlador uma equação empírica fixa obtida por um trabalho estatístico, se mostrou tão eficiente quanto um controlador “feedback” do tipo PID, que na atualidade é empregado em larga escala industrial. Mas, com a presença de “offsets”, limitações a sistemas não variem no tempo e operação através de limites estreitos nas variáveis de entrada fez com que sua empregabilidade se tornasse restrita.

Desta forma, nos chama a atenção para o controlador Estatístico-PID proposto neste trabalho é a sua facilidade de obtenção e programação para atuar como controlador. Outro ponto importante a ressaltar sobre o algoritmo proposto, é a obtenção de um modelo dinâmico através da manipulação de uma das constantes pelo controlador tipo PID, conseguindo desta maneira corrigir desvios nas variáveis de saída do sistema.

Com o novo algoritmo de controle apresentado por este trabalho, pôde-se sugerir o estudo de comparação com outros tipos de controladores avançados, como preditivos e adaptativos, ou até mesmo a utilização destes controladores no algoritmo de controle ao invés do PID.

Para projetos de novas equações estatísticas, deve-se ressaltar a importância de um conhecimento prévio do sistema através de técnicas estatísticas, onde se pode explorar ainda mais o sistema, caminhando para um ponto ótimo, como através de técnicas de Superfície de Resposta apresentadas neste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AHMEDI, M. and FAHIEN, R. W., Tubular Reactor Design I – Two Dimensional Model, **Chem. Eng. Sci.**, 35, 889-895, 1980a.
- AHMEDI, M. and FAHIEN, R. W., Tubular Reactor Design II – A Modified One Dimensional Model, **Chem. Eng. Sci.**, 35, 897-904, 1980b.
- AMUNDSON, N. R., **Mathematical Methods in Chemical Engineering, Matrices and Their Application**, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1966.
- ARIS, R., **Introduction to the Analysis of Chemical Reactors**, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1965.
- ARIS, R. and AMUNDSON, N. R., **Mathematical Methods in Chemical Engineering, Vol. 2**, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1973.
- ARIS, R., **The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts, Volume I – The Theory of The Steady State**, Clarendon Press, Oxford, 1975a.
- ARIS, R., **The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts, Volume II – Questions of Uniqueness, Stability and Transient Behaviour**, Clarendon Press, Oxford, 1975b.
- ASSIS, A. J., **Projeto de Controladores Adaptativos Auto-Ajustáveis**, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1996.
- ASTROM, K. J. and WITTEMARK, B., **Computer Controlled Systems, Theory and Design**, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1984.
- AZEREDO, M. C. R., **Desenvolvimento de um Software para Estudo do Comportamento Dinâmico de Reatores de Leito Fixo**, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1996.
- AZEVEDO, S. F., ROMERO-OGAWA, M. A., WARDLE, A. P., Modeling of Tubular Fixed Bed Catalytic Reactors; A Brief Review, **Chemical Engineering Research and Design**, 68(A6), 483-502, 1990.
- BARROS NETO, B., SCARMINIO, I. S. e BRUNS, R. E., **Planejamento e Otimização de Experimentos**, Editora UNICAMP, 2^a Edição, Campinas, 1996.
- BILOUS, O. e AMUNDSON, N. R., Chemical Reactor Stability and Sensitivity II. Effects of Parameters on Sensitivity of Empty Tubular Reactors, **AIChE Journal**, vol.2, 1956.

- BIRD, R. B., STEWART, W. E. and LIGHFOOT, E. N., **Transpor Phenomena**, John Wiley & Sons, New York, 1960.
- BISCAIA Jr., E. C., **Análise das Características Operacionais de Reatores Multitubulares Catalíticos de Leito Fixo**, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1980.
- BOLZAN, A., **Controle Ótimo de Reatores Tubulares com Desativação Catalítica**, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1986.
- BONVIN, D., RINKER, R. G. and MELLICHAMP, D. A., Dynamic Analysis and Control of a Tubular Autothermal Reactor at an Unstable State, **Chem. Eng. Sci.**, 35, 603-612, 1980.
- BOX, G. E. P., HUNTER, W.G. and HUNTER, J. S., **Statistics for Experimenters – Introduction to Design, Data Analysis, and Model Building**, John Wiley & Sons, Inc., 1978.
- CARBERRY, J. J. and BUT, J. B., On the Status of Catalytic Reaction Engineering, **Cat. Ver. – Sci. Eng.**, 10, 2, 221-242, 1974.
- CARBERRY, J. J., **Chemical and Catalytic Reaction Engineering**, McGraw-Hill, Inc., 1976.
- CAREY, G. F. and FINLAYSON, B. A., Orthogonal Collocation on Finite Elements, **Chem. Eng. Sci.**, 30, 587-596, 1975.
- CARNAHAN, B., LUTHER, H. A. and WILKES, J. D., **Applied Numerical Methods**, John Wiley & Sons, New York, 1969.
- CARNEIRO, H. P., **Controle Robusto de Reator Químico de Leito Fixo**, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1992.
- CONSTANTINIDES, A., **Applied Numerical Methods with Personal Computers**, McGraw-Hill, Inc., 1978.
- CHAPRA, S. C. and CANALE, R. P., **Numerical Methods for Engineers**, Second Edition, McGraw-Hill, Inc., 1989.
- CHEN, C. Y. and SUN, C. C., Adaptive Inferential Control of Packed-Bed Reactors, **Chemical Engineering Science**, 46, 4, 1041-1054, 1991.
- CUNHA, C., **Métodos Numéricos – Para as Engenharias e Ciências Aplicadas**, Editora UNICAMP, Campinas, 1993.

- DAVIS, M. E., **Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers**, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1984.
- DESPHANDE, P. B., **Multivariable Process Control**, Instrument Society of America, 1989.
- DOMINGUES, A., **Modelagem e Simulação de Processo de Oxidação do Etanol a Acetaldeído**, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1992.
- DORAISWAMY, L. K. and SHARMA, M. N., **Heterogeneous Reactions: Analysis, Examples and Reactor Design: Gas-Solid and Solid-Solid Reactions**, Vol.1, John Wiley & Sons, Inc, 1984.
- DOYLE, F. J., BUDMAN, H. M. and MORARI, M., "Linearizing" Controller Design for a Packed-Bed Reactor Using a Low-Order Wave Propagation Model, **Ind. Eng. Chem. Res.**, 35, 3567-3580, 1996.
- DUARTE, S. I. P. and LEMCOFF, N. O., Analysis of Fixed Bed Catalytic Reactor Models, ACS Symposium Series 237, **American Chemical Society**, 239-254, 1984.
- EDWARDS, I. M., and ARTHUR JUTAN, Optimization and control using response surface methods, **Computers Chem. Engng.**, 21, 4, 441-453, 1997.
- FINLAYSON, B. A., Packed Bed Reactor Analysis by Orthogonal Collocation, **Chem. Eng. Sci.**, 26, 1081-1091, 1971.
- FINLAYSON, B. A., Orthogonal Collocation in Chemical Reaction Engineering, **Cat. Rev.-Sci. Eng.**, 10(1), 69-138, 1974.
- FOGLER, H. S., **Elements of Chemical Reaction Engineering**, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1986.
- FROMENT, G. F., **Fixed Bed Reactor Design**, **Chemical Engineering: Concepts and Reviews**, Vol. 3, Gordon and Breach Science Publishers S. A., 179-212, 1986.
- FROMENT, G. F. and HOFMANN, H. P. K., **Chemical Reaction and Reactor Engineering, Design of Fixed-Bed Gas-Solid Catalytic Reactors**, ed. Carbery & Varma, 373-440, Marcel Dekker, New York, 1987.
- FROMENT, G. F. and BISCHOFF, K.B., **Chemical Reactor Analysis and Design**, 2th ed., John Wiley & Sons, New York, 1990.
- HAGAN, P. S., HERSKOWITZ, M. and PIRKLE, C., Equilibrium Temperature Profiles in Highly Sensitive Tubular Reactors, **SIAM J. Appl. MATH.**, 47, 6, 1287-1305, 1987.

- HAGAN, P. S., HERSKOWITZ, M. and PIRKLE, C., A Simple Approach to Highly Sensitive Tubular Reactors, **SIAM J. Appl. MATH.**, 48, 5, 1083-1101, 1988a.
- HAGAN, P. S., HERSKOWITZ, M. and PIRKLE, C., Runaway in Highly Sensitive Tubular Reactors, **SIAM J. Appl. MATH.**, 48, 6, 1437-1450, 1988b.
- HILL, C. G. Jr., **An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design**, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- HIMMELBLAU, D. M. and BISCHOFF, K. B., **Process Analysis and Simulation**, John Wiley & Sons, Inc., 1968.
- HOLLAND, C. D. & ANTHONY, R. G., **Fundamentals of Chemical Reaction Engineering**, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1979.
- INCROPERA, F. P. and WITT, D. P., **Fundamentals of Heat and Mass Transfer**, Second Edition, John Wiley & Sons, Inc., 1981.
- ISERMAN, R., **Digital Control Systems**, Springer-Verlag, Berlin, 1981.
- JORGENSEN, S. B. and JENSEN, N., Dynamic and Control of Chemical Reactors – Selectively Surveyed, **IFAC Dynamics and Control of Chemical Reactors**, Netherlands, 49-67, 1989.
- JUTAN, A., TREMBLAY et al., Multivariable Computer Control of a Butane Hydrogenolysis Reactor: Part 1. State Space Reactor Modeling, **AIChE Journal**, 23, 5, 732 - 742, September 1977.
- KARANTH, N. G. and HUGHES, R., Mathematical Modeling of Heterogeneous Catalytic Reactors, **Cat. Ver. – Sci. Eng.**, 9, 2, 169-208, 1974.
- KHANNA, R. and SEINFELD, J. H., Mathematical Modeling of Packed Bed Reactors: Numerical Solutions and Control Model Development, **Advances in Chemical Engineering**, Academic Press Inc., 16, 227-235, 1987.
- KHESGHI, H. S., HAGAN, P. S., REYES, S. C., PIRKLE, J. C. Jr., Transient in Tubular Reactors: Comparison of One and Two Dimensional Models, **AIChE Journal**, 34, 8, 1373-1375, 1988.
- KUBICEK, M. and HLAVACEK, V., **Numerical Solution of Nonlinear Boundary Value Problems with Applications**, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.

- KUNO, M. and SEADER, J. D., Computing All Real Solutions to Systems of Nonlinear Equations with a Global Fixed-Point Homotopy, **Ind. Eng. Chem. Res.**, 27, 1320-1329, 1988.
- KWONG, W. H., **Método da Colocação Ortogonal – Introdução à Teoria e Prática**, Monografia, DEQ/UFSCar, São Carlos, 1993.
- LAPIDUS, L. and AMUNDSON, N. R., **Chemical Reactor Theory – A Review**, Prentice – Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1977.
- LEROU, J. J. and FROMENT, G. F., Velocity, Temperature and Conversion Profiles in Fixed Bed Catalytic Reactors, **Chem. Eng. Sci.**, 32, 853-861, 1977.
- LEVENSPIEL, O. , **Engenharia das Reações Químicas**, Vol. 1 – Cinética Química Aplicada, Editora Edgard Blucher Ltda, 1983a.
- LEVENSPIEL, O. , **Engenharia das Reações Químicas**, Vol. 2 – Cálculo de Reatores, Editora Edgard Blucher Ltda, 1983b.
- LEVENSPIEL, O., **The Chemical Reactor Omnibook**, OSU Book Stores Inc., Couallis, Oregon, 1989.
- LUYBEN, W. L., Stability of Autorefrigerated Chemical Reactors, **AIChE Journal**, 662-668, 1966.
- LUYBEN, W. L., **Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers**, McGraw-Hill Book Company, Fourth Edition, 1990.
- MACIEL FILHO, R., **Oxidação Catalítica de Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Óxido de Ferro-Molibdênio**, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1985.
- MACIEL FILHO, R., **Modeling and Control of Multitubular Reactors**, Ph.D. Thesis, University of Leeds, Leeds, 1989.
- MACIEL FILHO, R., MOURA, J. C. e MCGREAVY, C., Regimes Cinéticos e Desativação de Catalisadores de Fe-Mo na Oxidação do Etanol a Acetaldeído, **12^o Simpósio Ibero-Americano de Catálise**, Rio de Janeiro, Brasil, 10-20, 1990.
- MACIEL FILHO, R. and DOMINGUES, A., A Multitubular Reactor for Obtention of Acetaldehyde by Oxidation of Ethyl Alcohol, **ISCRE 12 (Twelfth International Symposium on Chemical Reaction Engineering)**, Turim, Itália, 1992.
- MCGREAVY, C. and NAIM, H., Reduced Dynamic Model of a Fixed Bed Reactor, **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, 55, June, 326-332, 1977.

- McGREAVY, C., On-Line Control System for Chemical Reaction Process, **Computers Chem. Eng.**, 7, 4, 529-566, 1983.
- McGREAVY, C. and IKPONMWOSA, A. N., Experimental Study of Thermal Dynamics of a Non-isothermal, No-adiabatic Fixed Bed Catalytic Reactor, **XI Simp. Iberoam. Cat. Guanajuato**, Mexico, 1373-1380, 1988.
- McGREAVY, C. and MACIEL FILHO, R., Influence of Flow Distribution on Heat Transfer in Multitubular Catalytic Reactors, **3rd Latin American Conf. Heat and Mass Tr.**, Mexico, 1988.
- McGREAVY, C. and MACIEL FILHO, R., Dynamics and Control of Chemical Reactors, presented at **IFAC Dynamic and Control of Chemical Reactors**, Maastricht, The Netherlands, 1989.
- MIHAEL, R. and IORDACHE, C., Performances of Some Numerical Techniques Used for Simulation of Fixed Bed Catalytic Reactors, **Chem. Eng. Sci.**, 31, 83-86, 1976.
- MOURA, J. C., **Oxidação de Etanol a Acetaldeído sobre Catalisador de Cobre Oxidado**, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1984.
- NAUMAN, E. B., **Chemical Reactor Design**, John Wiley & Sons, New York, 1987.
- OGUNNAIKE, B. A. and RAY, W. H., **Process Dynamics Modeling and Control**, Oxford University Press, Inc., New York, 1994.
- PATERSON, W. R. e CARBERRY, J. J., Fixed Bed Catalytic Reactor Modelling – The Heat Transfer Problem, **Chem. Eng. Sci.**, vol.38, 1, pp.175, 1983.
- PATWARDHAN, A. A., WRIGHT, G. T. and EDGAR, T. F., Nonlinear Model-Predictive Control of Distributed-Parameter Systems, **Chemical Engineering Science**, 47, 4, 721-735, 1992.
- PEREIRA, C. J., WANG, J. B. and VARMA, A., A Justification of the Internal Isothermal Model for Gas-Solid Catalytic Reactions, **AIChE Journal**, 25(6), 1036-1043, 1979.
- PIRKLE Jr., J. C., REYES, S. C., HAGAN, P. S. and KHESGHI, H., Solution of Dynamic Distributed Parameter Model of Nondiabatic, Fixed-Bed Reactor, **Comput. Chem. Engng.**, 11 (6), 737-747, 1987.
- QUINTA FERREIRA, R. M., COSTA, A. C. and RODRIGUES, A. E., Dynamic Behavior of Fixed-Bed Reactors with “Large-Pore” Catalysts: A Bidimensional Heterogeneous Diffusion/Convection Model, **Computers Chem. Engng.**, 16, 8, 721-751, 1992.

- RICE, R. G. and DO, D. D., **Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers**, John Wiley & Sons, Inc., 1995.
- RUBIÃO, L. E. G., **Controle de Processos Químicos Multivariáveis**, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1990.
- SANTOS, A. M. N., **Reatores Químicos, Conceitos Básicos e Projecto de Reatores Ideais**, Volume 1, Fundação Calostre Gulbenkian, Lisboa, 1990.
- SCHIESSER, W. E., **The Numerical Method of Lines Integration of Partial Differential Equations**, Academic Press, Inc., 1991.
- SEBORG, D., E., EDGAR, T. F. and MELLICHAMP, D. A., **Process Dynamics and Control**, John Wiley and Sons, NY, 1989.
- SEGALL, N. L., MCGREGOR, J. F. and WRIGHT, J. D., Collocation Methods for Solving Packed Bed Reactor Models with Radial Gradients, **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, 62, December, 808-817, 1984.
- SOUZA, M. E., **Controle de Processos Não Lineares**, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1993.
- STEPHANOPOULOS, G., **Chemical Process Control, Na Introduction to Theory and Practice**, Prentice-Hall, Inc., New Jersey, 1984.
- STINGHEN, A., O., **Estratégias de Otimização de Processos**, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1998.
- TEMKIN, M. I., The Kinetics of some Industrial Heterogeneous Catalytic Reactors, **Advances in Catalysis**, Vol. 28, 1979.
- TOLEDO, E. C. V., **Modelagem e Controle de um Reator de Polimerização CSTR Acoplado a um Condensador Horizontal Semi-Inundado**, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1992.
- TOLEDO, E. C. V., **Modelagem, Simulação e Controle de Reatores Catalíticos de Leito Fixo**, Tese de Doutorado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1999.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelos de Reatores Catalíticos de Reatores de Leito Fixo para Aplicações em Tempo Real, **IV Congresso Argentino de Ingenieria Quimica**, Argentina, Outubro, 1994.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Aproximações Numéricas para a Solução de Modelos de Reatores Catalíticos de Leito Fixo, **XVI CILAMCE - Congresso Íbero**

- Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia**, Curitiba, PR, Outubro, 1995.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelagem, Simulação e Controle de um Reator Catalítico de Leito Fixo, **XXIV ENEMP - Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados**, Uberlândia, MG, 1996.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Dynamic and Advanced Control of a Fixed Bed Catalytic Reactors, **ENPROMER'97 – 1º Congresso de Engenharia de Processos do Mercosul**, pg. 69-70, Bahia Blanca, Argentina, 1 al 4 Setiembre, 1997a.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Análise de Sensibilidade Paramétrica e Controle Multivariável de um Reator Catalítico de Leito Fixo, **XXV ENEMP - Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados**, São Carlos, SP, 1997b.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Comportamento Dinâmico e Estratégias de Controle Avançado para um Reator Catalítico com Desativação de Catalisador, **XIII Congreso Chileno de Ingenieria Quimica, ELAIQ'98 – II Encuentro Latino-Americano de Ingenieria Quimica**, Chile, pag. 716-724, 1998a.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Avaliação de Controladores Avançados na Política Operacional de Reatores Catalíticos de Leito Fixo, **XII COBEQ - Congresso Brasileiro de Engenharia Química**, Porto Alegre, RS, Setembro, 1998b.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Modelos Dinâmicos e a Avaliação de Diferentes Controladores Avançados em Reatores Catalíticos de Leito Fixo, **XVIII Interamerican Congress of Chemical Engineering**, San Juan, Puerto Rico, December 6 to 10, 1998c.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Building Reduced Models for Advanced Control of Fixed Bed Catalytic Reactors, **The Fourth Italian Conference on Chemical and Process Engineering – IcheaP-4**, Florence, Italy, 1999a.
- TOLEDO, E. C. V. e MACIEL FILHO, R., Development of Dynamic Models for Control and Parametric Sensitivity Study of Fixed Bed Catalytic Reactor, **ENPROMER'99 – 2º Congresso de Engenharia de Processos do Mercosul**, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil, 30 de Agosto a 02 de Setembro, a ser publicado, 1999b.
- TRESMONDI, A., **Determinação de Parâmetros em Processos Reativos Industriais**, Tese de Mestrado, FEQ/UNICAMP, Campinas, 1995.
- VARMA, A., Packed Bed Reactors: An Overview, ACS Symposium Series 168, **American Chemical Society**, 279-286, 1981.
- VILLADSEN, J. & MICHELSEN, M.L., **Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation**, Prentice-Hall, New Jersey, 1978.

- VILLADSEN, J. and MICHELSEN, M. L., **Numerical Methods in Reaction Engineering, Chemical Reaction and Reactor Engineering**, ed. Carberry and Varma – Marcel Dekker, New York, 1-62, 1987.
- WESTERTERP, K. R., VANSWAAY, W. P. M. and BEENACKERS, A. A. C. M., **Chemical Reactor Design and Operation**, John Wiley & Sons, 1984.
- WINDES, L. C. and RAY, W. H., A Control Scheme for Packed Bed Reactors Having a Changing Catalyst Activity Profile. I. On-line Parameter Estimation and Feedback Control, **J. Proc. Cont.**, 2, 23, 1992a.
- WINDES, L. C. and RAY, W. H., A Control Scheme for Packed Bed Reactors Having a Changing Catalyst Activity Profile. I. On-line Optimizing Control, **J. Proc. Cont.**, 2, 43, 1992b.
- WRIGHT, G. T. and EDGAR, T. F., Nonlinear Model Predictive Control of a Fixed-Bed Water-Gas Shift Reactor: An Experimental Study, **Computers Chem. Engng.**, 18, 2, 83-102, 1994.

UNICAMP

BIBLIOTECA CENTRAL

SEÇÃO CIRCULANTE