

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Desenvolvimento e Análise de Controle Híbrido Preditivo por Lógica *Fuzzy* de Processos de Polimerização

Autor: NÁDSON MURILO NASCIMENTO LIMA Orientador: Prof. Dr. RUBENS MACIEL FILHO

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

Campinas - São Paulo Dezembro de 2010

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

L628d	Lima, Nádson Murilo Nascimento Desenvolvimento e análise de controle híbrido preditivo por lógica <i>fuzzy</i> de processos de polimerização / Nádson Murilo Nascimento LimaCampinas, SP: [s.n.], 2010.
	Orientador: Rubens Maciel Filho. Tese de Doutorado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.
	 Controle preditivo. 2. Teoria de controle não linear. 3. Sistemas nebulosos. 4. Identificação de sistemas. 5. Copolimerização. I. Maciel Filho, Rubens. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Título em Inglês: Development and analysis of predictive hybrid control by fuzzy logic for polymerization processes

Palavras-chave em Inglês: Predictive control, Nonlinear control theory, Fuzzy systems, System identification, Copolymerization Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos Titulação: Doutor em Engenharia Química Banca examinadora: Reinaldo Giudici, Alexandre Tresmondi, Jorge Vicente Lopes da Silva, Fernando José Von Zuben Data da defesa: 13/12/2010 Programa de Pós Graduação: Engenharia Química Tese de Doutorado defendida por Nádson Murilo Nascimento Lima e aprovada em 13 de Dezembro de 2010 pela banca examinadora constituida pelos doutores:

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho – Orientador Faculdade de Engenharia Química (FEQ) – UNICAMP

Prof. Dr. Reinaldo Giudici Escola Politécnica – Universidade de São Paulo (USP)

Dr. Alexandre Tresmondi RHODIA

Dr. Jorge Vicente Lopes da Silva Centro de Tecnologia da Informação Renato Archer (CTI) – MCT

mando Tose Von Lu

Prof. Dr./Fernando José Von Zuben Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC) – UNICAMP

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química defendida por Nádson Murilo Nascimento Lima.

lur

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho - Orientador

DEDICATÓRIA

À memória de meus avós paternos, João Pereira Matos e Maria Carvalho Lima, e de minha avó materna, Maria Souza Nascimento, dedico este trabalho como forma de agradecer todo o amor, carinho e apoio concedidos durante momentos significativos da minha vida.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por sempre me iluminar, por colocar as pessoas e oportunidades certas na minha vida no tempo oportuno e por sempre me guiar pelos melhores caminhos. Sem ele, a elaboração deste trabalho não seria possível.

A toda minha família, em especial aos meus pais José Pereira Lima e Neuza Souza Nascimento Lima, à minha tia Nara Maria Pereira Carvalho e aos meus queridos irmãos Francisco Jósé Nascimento Lima e Bruno José Nascimento Lima, pelos esforços incomensuráveis à minha formação, em todas as vertentes, e por continuamente acreditarem no meu potencial.

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho, meu orientador, por ter me proporcinado os meios necessários para a conclusão deste trabalho e pelas inúmeras demonstrações de incentivo, confiança, respeito e amizade. As suas importantes direções sobre a realização desta tese foram sempre fatores de grande motivação para a realização da mesma.

Ao Prof. Dr. Marcelo Embiruçu de Souza, meu co-orientador, por sua atitude permanentemente atenciosa e criteriosa, que contribuiu decisivamente para a qualidade final desta tese. Sinto-me muito privilegiado por contar com a sua participação neste trabalho e por tê-lo como um grande amigo.

Ao Programa Erasmus Mundus - ISAC, pela oportunidade da realização de um Doutorado "Sanduíche' no exterior, à Universidade do Minho - em Portugal - pelo acolhimento e ao Prof. Eugénio Campos Ferreira, pela respectiva orientação.

Aos Profs. Flavio Manenti e Davide Manca, pela atenciosa orientação durante o meu período de permanência no 'Politecnico di Milano', na Itália.

A todos os amigos e colegas do LOPCA - pelas discussões e contribuições das mais variadas formas - especificamente ao Eduardo Coselli "Ursão", ao Elmer, à Maria Cristina, à Delba, ao Rodrigo e à Mylene, ao Félix, à Betânia, ao Igor, ao Edvaldo, ao Mário e à Elenise, ao Júlio, à Edinara, aos colegas colombianos e, em especial, à grande amiga Lamia.

A todos os amigos da UNICAMP, em especial ao Guilherme, ao Víctor, ao Edson, ao Adroaldo e à Mariana.

Ao Cristiano, pelo suporte técnico concedido em diversas oportunidades.

À FAPESP, pelo suporte financeiro e pelas importantes sugestões concedidas por meio dos relatórios técnicos realizados através do processo nº 2005/59170-6.

Enfim, a todos aqueles que contribuíram de alguma forma para que a realização deste trabalho fosse possível.

EPÍGRAFE

"Measure what is measurable, and make measurable what is not so". Galileo Galilei, 1630.

"Se você nunca foi gago, não pode ter a menor idéia do misterioso poder de desaprovação por parte da sociedade frente a isso que chamam 'gagueira'. É, talvez, uma das influências sociais mais desmoralizantes, perplexas e aterradoras de nossa cultura".

Wendell Johnson, 1961.

"Que o altruísmo, a justiça, a perseverança e a busca incessante do conhecimento sejam sempre, na minha caminhada, ideais fomentadores, capazes de suplantar qualquer espécie de competição que brote do íntimo do ser humano, auxiliando-me também a superar os embates proporcionados pela vida".

Francisco Lima e Nara Carvalho, 2006.

RESUMO

A síntese de controladores representa uma importante vertente dos desenvolvimentos atuais no campo da pesquisa acadêmica e industrial. Um controlador bem projetado pode significar sucesso no que se refere aos objetivos de produção, sendo gerados materiais com as especificações desejadas e proporcionando que o sistema opere sob certas restrições, levando em consideração aspectos relativos à operabilidade, segurança e minimização de resíduos. Para tanto, sabe-se que as etapas de modelagem são fundamentais para a delineação de estratégias de controle. Contudo, a obtenção de representações matemáticas precisas e, ao mesmo tempo, aplicáveis para o controle da maioria dos processos de interesse da engenharia química é uma tarefa árdua, devido à presença de comportamentos dinâmicos não lineares e variantes ao longo do tempo e, por vezes, do espaço. Deste modo, busca-se a obtenção de modelos mais simples, porém dotados da imprescindível representatividade inerente aos sistemas de produção, a fim de serem projetadas estruturas de controle adequadas para cada necessidade específica.

Esta tese enfoca o desenvolvimento de quatro controladores avançados híbridos preditivos não lineares multivariáveis, baseados em modelos nebulosos (fuzzy) funcionais não lineares multivariáveis, para processos de polimerização. Tais sistemas apresentam dinâmicas altamente complexas e de difícil modelagem matemática, dificultando, assim, a aplicação, com sucesso, de metodologias clássicas de controle ou avançadas baseadas em modelos convencionais. Foram considerados dois casos de estudo para a análise de desempenho das configurações de controle propostas: o processo de copolimerização em solução do metacrilato de metila com o acetato de vinila, e a copolimerização industrial do eteno/1-buteno com catalisador Ziegler-Natta solúvel. Os modelos fenomenológicos de ambos os processos já se encontram descritos na literatura, sendo considerados como plantas virtuais para a geração de dados dinâmicos e implementação dos desenvolvimentos sugeridos. A partir de simulações computacionais, os modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis foram construídos - os quais demonstraram excelentes capacidades para a predição das saídas dos processos como uma função dos dados dinâmicos de entrada - sendo, posteriormente, acoplados à estrutura de controle preditivo MPC (Model-based Predictive Control). A escolha da metodologia MPC como base para o desenvolvimento das estratégias propostas deve-se ao fato de sua notória aplicabilidade industrial a processos químicos multivariáveis, além de possibilitar a incorporação de restrições operacionais nas variáveis controladas e manipuladas. Por fim, foram comparados os desempenhos entre os controladores híbridos delineados e duas estratégias de controle preditivo bastante difundidas na literatura. Os problemas regulatório e servo foram analisados, observando-se resultados satisfatórios em ambas as condições. Isto demonstra o alto potencial dos algoritmos propostos para o controle multivariável de sistemas não lineares.

Palavras-chave: Controle Preditivo Baseado em Modelo Não Linear, Controle Avançado Multivariável, Modelagem Nebulosa Dinâmica, Identificação de Sistemas Não Lineares, Copolimerização.

ABSTRACT

Controllers design has currently a great importance in the field of academic and industrial research. A well-projected controller may mean the success regarding the aims of production, and it also provides the production of materials with desirable specifications and it allows that the system operates under specific restrictions, considering aspects related to operability, safety and minimization of residue. Then, it is known that modeling stages are fundamental for delineation of controller strategies. However, the obtaining of precise and applicable mathematical representations to the control of most of relevant process in chemical engineering is a challenging task, because of the presence of nonlinear dynamic behaviors and space-time mutable. Therefore, an effort is done to obtain the simpler models, but provided with the essential representativity inherent to production systems. Thus, suitable control structures could be designed for each specific necessity.

This work focus on the development of four multivariable nonlinear predictive hybrid advanced controllers, based on multivariable nonlinear functional fuzzy models, to polymerization processes. Such systems present high complex dynamic and hard mathematical modeling, making difficult to apply classic controllers or advanced control methodologies based on conventional models. Two study cases for the performance analysis of the proposed controllers were considered: the copolymerization process of methyl methacrylate and vinyl acetate, and industrial copolymerization of ethene/1-butene with Ziegler-Natta catalysis. The phenomenologic models of the two processes already are described in relevant literature, and they are considered as virtual plants to create dynamic data and to implement the suggested developments. Based on computational simulations, multivariable nonlinear functional dynamic fuzzy models were made - they demonstrated excellent capacity for outputs prediction from input dynamic data - and they were, subsequently, inserted in the MPC (Model-based Predicitve Control) control structure. The choice of MPC methodology to develop the proposal structures is because of its wellknown industry applicability to multivariable chemical processes, beyond it makes possible the incorporation of restrictions in controlled and manipulated variables. Finally, the performance among outlined hybrid controllers and two predictive control strategies fairly widespread in the literature were compared. The regulatory and servo problems were analyzed and satisfactory results were observed in both conditions. This demonstrates the high potential of proposed algorithms to control multivariable nonlinear systems.

Keywords: Nonlinear Model-based Predictive Control, Multivariable Advanced Control, Dynamic Fuzzy Modeling, Nonlinear Systems Identification, Copolymerization.

<u>SUMÁRIO</u>

RES	UMOxiii
ABS	TRACT xv
LIST	ΓA DE FIGURASxxiii
LIS	FA DE TABELAS xxxv
NON	MENCLATURA xxxix
CAF	PÍTULO I - INTRODUÇÃO1
I.1	INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA
I.2	OBJETIVOS
I.3	ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO7
CAF	PÍTULO II – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA11
II.1.	INTRODUÇÃO 13
II.2.	PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO13
II.3.	CONTROLE AUTOMÁTICO DE PROCESSOS 16
II.4.	SISTEMAS NEBULOSOS
II.5.	CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO
CAP	PÍTULO IIII – SISTEMAS NEBULOSOS 29
III.1.	INTRODUÇÃO
Ш.2.	CONCEITOS BÁSICOS

III.3. FUNÇÕES DE PERTINÊNCIA	5
III.3.1. Tipos 30 III.3.2. Características 42	6 2
III.4. OPERAÇÕES COM CONJUNTOS NEBULOSOS	3
III.4.1. União 44 III.4.2. Intersecção 44 III.4.3. Complemento 46	4 5 6
III.5. PROPRIEDADES DOS CONJUNTOS NEBULOSOS	6
III.6. PRODUTO CARTESIANO, RELAÇÕES NEBULOSAS, OPERADORES DE IMPLICAÇÃO E REGRAS DE INFERÊNCIA	E 8
 III.6.1. Operações em Relações Nebulosas	8 9 9 0
III.7. VARIÁVEIS LINGUÍSTICAS E TERMOS LINGUÍSTICOS	1
III.8. MODELOS NEBULOSOS	2
III.8.1. "Fuzzificação"	2 3 7
III.9. CLASSIFICAÇÃO DOS MODELOS NEBULOSOS	8
III.10. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	9

CAPÍTULO IV – IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS FUNCIONAIS	NEBULOSOS
IV.1. INTRODUÇÃO	
IV.2. TÓPICOS EM MODELAGEM DE SISTEMAS	
IV.3. ETAPAS PARA IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS	
IV.4. CONSTRUÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS	
IV.4.1.Método do Agrupamento Subtrativo IV.4.2.Método dos Quadrados Mínimos	
IV.5. VALIDAÇÃO DOS MODELOS NEBULOSOS	
IV.6. DETERMINAÇÃO DE INTERAÇÕES ENTRADA-SAÍDA NEBULOSOS FUNCIONAIS MULTIVARIÁVEIS	EM MODELOS
IV.7. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	77

CAPÍTULO V – CONTROLE PREDITIVO BASEADO EM MODELO	79
V.1. INTRODUÇÃO	81
V.2. ALGORITMO MPC MULTIVARIÁVEL	84
V.2.1. Controle DMC Multivariável	87
V.2.2. Controle NMPC-t Multivariável	90
V.2.3. Controle Híbrido L-NFMPC Multivariável	90
V.2.4. Controle Híbrido E-NFMPC Multivariável	90
V.2.5. Controle Híbrido Adaptativo L-ANFMPC Multivariável	91
V.2.6. Controle Híbrido Adaptativo E-ANFMPC Multivariável	92
V.3. SINTONIA DOS CONTROLADORES	92
V.4. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	93

VI.1. INTRODUÇÃO	97
VI.2. DESCRIÇÃO DO PROCESSO	98
VI.3. MODELO FENOMENOLÓGICO	101
VI.3.1. Mecanismo Cinético VI.3.2. Balanços de Massa e Energia VI.3.3. Composição do Copolímero "Morto"	101
VI.3.4.Pesos Moleculares Médios Numérico e Ponderal	107
VI.3.4.2. <i>Momentos da MWD do Copolímero "Vivo"</i> VI.3.5.Balanço Molar do Separador e do Tanque de Armazenamento	109
VI.4. CONTROLE FEEDFORWARD DO RECICLO	112
VI.5. ANÁLISE DINÂMICA DO PROCESSO	117
VI.6. SELEÇÃO DAS MALHAS MULTIVARIÁVEIS DE CONTROLE	119
VI.7. MALHA 3x2	124
VI.7.1.Modelagem Nebulosa Dinâmica Funcional Não Linear Multivariável VI.7.2.Análise da RGA VI.7.3.Resultados de Controle	124 156 157
VI.8. MALHA 4x4	177
VI.8.1.Modelagem Nebulosa Dinâmica Funcional Não Linear Multivariável VI.8.2.Análise da RGA VI.8.3.Resultados de Controle	178 234 235

VI.9. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	
CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO I BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA	ETENO/1- 255
VII.1. INTRODUÇÃO	
VII.2. DESCRIÇÃO DO PROCESSO	
VII.3. MECANISMO CINÉTICO	
 VII.3.1. Formação do Sítio Ativo (Sítio de Iniciação) ou Ativação VII.3.2. Envenenamento por Impureza	263 264 264 264 264 266 266 266 266 267 267 267 270 271 273
VII.4.5. Momentos da Distribuição VII.4.6. Variáveis de Saída e Propriedades de Uso Final do Polímero	
VII.5. ANÁLISE DINÂMICA DO PROCESSO	
VII.6. SELEÇÃO DA MALHA MULTIVARIÁVEL DE CONTROLE	
VII.7. MODELAGEM NEBULOSA DINÂMICA FUNCIONAL NÃO MULTIVARIÁVEL	LINEAR 287
VII.8. RESULTADOS DE CONTROLE	
VII.9. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO	
CAPÍTULO VIII – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PA	ARA O

	II CLO	V III	_	CONCLUD	UL D		DUGLDIULD		U
	DESENV	OLVIM	ENTO	DE TRAB	ALHOS	FUTU	J ROS	•••••	321
		~							
VIII.	1. CONCLU	USÕES .				•••••			323
		~							
VIII.	2. SUGEST	TOES PA	ARA TR	ABALHOS	S FUTUR	ROS			324

REFERÊNCIAS BIBLIOGRA	ÁFICAS	327

APÊNDICE A – TAXAS DE REAÇÃO PARA A COPOLIMERIZAÇÃ ETENO/1-BUTENO	O DO 341
A.1. INTRODUÇÃO	343
A.2. TAXAS DE REAÇÃO	343
A.2.1. Espécie Ativa - EA_n	343
A.2.2. Espécie Catalítica Desativada - <i>CD_n</i>	344
A.2.3. Monômero Tipo 1 - M_1	345
A.2.4. Monômero Tipo 2 ou Co-monômero - M_2	345
A.2.5. Agente de Transferência de Cadeia - H_2	345
A.2.6. Co-catalisador - CC	345
A.2.7. Solvente - S	345
A.2.8. Catalisador Ativo - C_n^*	345
A.2.9. Polímero "Morto"	346
A.2.10. Polímero "Vivo"	346
A.3. CONSIDERAÇÕES FINAIS	351

B. 1	. INTRODUÇÃO	355
B.2.	. SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS PARA O PFR	355
	B.2.1. Balanço de Massa Global e "Balanço de Deslocamento"	356
	B.2.2. Balanço de Massa por Componente	356
	B.2.3. Balanço de Energia	357
	B.2.4. Interpretação das Equações	357
B.3.	. SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS PARA O CSTR	358
	B.3.1. Balanço de Massa Global	358
	B.3.2. Balanço de Massa por Componente	358
	B.3.3. Balanço de Energia	358
B.4.	. DERIVADA DA DENSIDADE	359
	B.4.1. Cálculo da Derivada da Densidade para o Sistema de EDOs do PFR	360
	B.4.2. Cálculo da Derivada da Densidade para o Sistema de EDOs do CSTR	361
B.5.	. CONSIDERAÇÕES FINAIS	361

LISTA DE FIGURAS

Figura III.1. Função característica do conjunto crisp "pessoa com altura mediana"
Figura III.2. Função trapezoidal característica do conjunto nebuloso "pessoa com altura mediana"
Figura III.3. Função triangular com $a = -1,5$, $m = 1,0$ e $b = 3,5$
Figura III.4. Função Γ com $k = 2,0$ e $a = 1,0$
Figura III.5. Função $S \operatorname{com} a = -1,0, m = 1,5 \operatorname{e} b = 3,039$
Figura III.6. Função em forma de sino com $a = 2,0$, $b = 2,0$ e $m = 2,0$
Figura III.7. Função sigmoidal com $k = 1,0$ e $m = 2,0$
Figura III.8. Função "exponential-like" com $k = 2,0$ e $m = 1,0$
Figura III.9. Função gaussiana com $c = 2,0$ e $\sigma = 2,0$
Figura III.10. Diagrama esquemático de um modelo nebuloso (LIMA, 2006) 52
Figura V.1. Diagrama de bloco do controlador preditivo (ESPINOSA et al., 2005)
Figura VI.1. Diagrama do processo de copolimerização do MMA/VAc (CONGALIDIS et al., 1989)
Figura VI.2. Ação do controle <i>feedforward</i> nas vazões do monômero <i>A</i> para perturbações na taxa de purga
Figura VI.3. Ação do controle <i>feedforward</i> nas vazões do monômero <i>B</i> para perturbações na taxa de purga
Figura VI.4. Ação do controle <i>feedforward</i> nas vazões do solvente para perturbações na taxa de purga
Figura VI.5. Resposta em "malha aberta" da taxa de produção do copolímero (G_{pi}) para uma perturbação de 4000 ppm de inibidor na vazão molar total de alimentação 117
Figura VI.6. Resposta em "malha aberta" da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) para uma perturbação de 4000 ppm de inibidor na vazão molar total de alimentação
Figura VI.7. Resposta em "malha aberta" do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para uma perturbação de 4000 ppm de inibidor na vazão molar total de alimentação 118

Figura VI.9. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para perturbações degrau de +/- 2% sobre a temperatura da jaqueta do reator (T_j)
Figura VI.10. Efeitos das variáveis de entrada sobre a taxa de produção do copolímero (G_{pi})
Figura VI.11. Efeitos das variáveis de entrada sobre a fração molar do MMA no copolímero (<i>Y</i> _{ap})
Figura VI.12. Efeitos das variáveis de entrada sobre o peso molecular ponderal médio (M_{pw})
Figura VI.13. Efeitos das variáveis de entrada sobre a temperatura do reator (T_r) 123
Figura VI.14. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 3x2
Figura VI.15. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 3x2
Figura VI.16. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 3x2
Figura VI.17. Dados de identificação dos 1^{os} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.18. Dados de identificação dos 1^{o^8} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.19. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 3x2
Figura VI.20. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 3x2
Figura VI.21. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 3x2
Figura VI.22. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.23. Dados de identificação dos 2^{os} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.24. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha $3x2$

Figura VI.25. Dados de identificação dos 3^{os} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 3x2
Figura VI.26. Dados de identificação dos 3^{os} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 3x2
Figura VI.27. Dados de identificação dos 3^{os} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.28. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.29. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 3x2
Figura VI.30. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 3x2
Figura VI.31. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 3x2
Figura VI.32. Validação do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 3x2
Figura VI.33. Validação do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 3x2
Figura VI.34. Validação do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 3x2
Figura VI.35. Validação do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2
Figura VI.36. Validação do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2
Figura VI.37. Validação do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2
Figura VI.38. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r -Malha 3x2
Figura VI.39. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r -Malha 3x2
Figura VI.40. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r -Malha 3x2
Figura VI.41. Resultados do controle DMC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2

Figura VI.42. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.43. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.44. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.45. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.46. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.47. Resultados do controle DMC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.48. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.49. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.50. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.51. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.52. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.53. Comportamento regulatório da temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha $3x2$
Figura VI.54. Comportamento regulatório da vazão de alimentação de iniciador (<i>G_{if}</i>) – Malha 3x2
Figura VI.55. Comportamento regulatório da vazão de alimentação de VAc (<i>G_{bf}</i>) – Malha 3x2
Figura VI.56. Resultados do controle DMC servo para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.57. Resultados do controle NMPC-t servo para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.58. Resultados do controle L-NFMPC servo para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2

Figura VI.59. Resultados do controle E-NFMPC servo para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.60. Resultados do controle L-ANFMPC servo para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.61. Resultados do controle E-ANFMPC servo para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2
Figura VI.62. Resultados do controle DMC servo para a temperatura do reato (T_r) – Malha $3x2$
Figura VI.63. Resultados do controle NMPC-t servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.64. Resultados do controle L-NFMPC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.65. Resultados do controle E-NFMPC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.66. Resultados do controle L-ANFMPC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.67. Resultados do controle E-ANFMPC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2
Figura VI.68. Comportamento servo da temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha $3x2$
Figura VI.69. Comportamento servo da vazão de alimentação de iniciador (<i>G_{if}</i>) – Malha 3x2
Figura VI.70. Comportamento servo da vazão de alimentação de VAc (<i>G_{bf}</i>) – Malha 3x2
Figura VI.71. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 4x4
Figura VI.72. Dados de identificação dos 1 ^{os} modelos nebulosos para a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) – Malha 4x4
Figura VI.73. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 4x4
Figura VI.74. Dados de identificação dos 1º ^s modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.75. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4

Figura VI.76. Dados de identificação dos 1^{os} modelos nebulosos para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.77. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 4x4
Figura VI.78. Dados de identificação dos 2^{os} modelos nebulosos para a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) – Malha 4x4
Figura VI.79. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 4x4
Figura VI.80. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.81. Dados de identificação dos 2^{o^8} modelos nebulosos para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4
Figura VI.82. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.83. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 4x4
Figura VI.84. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) – Malha 4x4
Figura VI.85. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 4x4
Figura VI.86. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.87. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4
Figura VI.88. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.89. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 4x4
Figura VI.90. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 4x4
Figura VI.91. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 4x4
Figura VI.92. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha 4x4

Figura VI.93. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha 4x4
Figura VI.94. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha 4x4
Figura VI.95. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha 4x4
Figura VI.96. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha 4x4
Figura VI.97. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha 4x4
Figura VI.98. Validação do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 4x4
Figura VI.99. Validação do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 4x4
Figura VI.100. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 4x4
Figura VI.101. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4
Figura VI.102. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4
Figura VI.103. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4
Figura VI.104. Validação do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4
Figura VI.105. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4
Figura VI.106. Validação do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4
Figura VI.107. Dados de identificação dos 1 ^{os} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 4x4
Figura VI.108. Dados de identificação dos 2^{os} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 4x4
Figura VI.109. Dados de identificação dos 3^{os} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 4x4

Figura VI.110. Dados de identificação dos 1 ^{os} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.111. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.112. Dados de identificação dos 3^{os} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.113. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha $4x4$
Figura VI.114. Validação do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 4x4
Figura VI.115. Validação do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 4x4
Figura VI.116. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 4x4
Figura VI.117. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 4x4
Figura VI.118. Validação do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 4x4
Figura VI.119. Resultados do controle DMC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.120. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.121. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.122. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.123. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.124. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4
Figura VI.125. Resultados do controle DMC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4
Figura VI.126. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4

Figura VI.127. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4
Figura VI.128. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4
Figura VI.129. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (<i>Y</i> _{ap}) – Malha 4x4
Figura VI.130. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4
Figura VI.131. Resultados do controle DMC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.132. Resultados do controle NMPC-t regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.133. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.134. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.135. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.136. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4
Figura VI.137. Resultados do controle DMC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.138. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.139. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.140. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.141. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.142. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4
Figura VI.143. Comportamento regulatório da vazão de alimentação de iniciador (G_{if}) – Malha 4x4

Figura VI.144. Comportamento regulatório da razão entre as vazões de MMA e VAc na alimentação do reator (G_{af}/G_{bf}) – Malha 4x4
Figura VI.145. Comportamento regulatório da vazão de alimentação de VAc (G_{bf}) – Malha 4x4
Figura VI.146. Comportamento regulatório da temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 4x4
Figura VII.1. Configuração básica do processo de copolimerização do eteno com 1-buteno (EMBIRUÇU et al., 2000)
Figura VII.2. Representação do processo de copolimerização do eteno com 1-buteno (EMBIRUÇU, 1998)
Figura VII.3. Misturador de correntes (PONTES, 2005)
Figura VII.4. Resposta em "malha aberta" da temperatura na saída do sistema (T_s) para uma perturbação de -10 % na concentração de catalisador na alimentação da zona 1 (base) do CSTR-NI
Figura VII.5. Resposta em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (M_n) para uma perturbação de -10 % na concentração de catalisador na alimentação da zona 1 (base) do CSTR-NI
Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (M_n) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef}) no tempo 21
 Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (<i>M_n</i>) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (<i>Y_{ef}</i>) no tempo 21
 Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (M_n) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef}) no tempo 21
 Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (<i>M_n</i>) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (<i>Y_{ef}</i>) no tempo 21
 Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (<i>M_n</i>) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (<i>Y_{ef}</i>) no tempo 21
 Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (<i>M_n</i>) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (<i>Y_{ef}</i>) no tempo 21
Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (M_n) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef}) no tempo 21
Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (M_n) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef}) no tempo 21

Figura VII.15. Dados de identificação do 1º modelo nebuloso para a temperatura de saída do sistema (T_s)
Figura VII.16. Dados de identificação do 1º modelo nebuloso para o peso molecular numérico médio (M_n)
Figura VII.17. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef})
Figura VII.18. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para a concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H2f})
Figura VII.19. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para a temperatura de saída do sistema (T_s)
Figura VII.20. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para o peso molecular numérico médio (M_n)
Figura VII.21. Dados de identificação do 3º modelo nebuloso para a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef})
Figura VII.22. Dados de identificação do 3º modelo nebuloso para a concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H2f})
Figura VII.23. Dados de identificação do 3º modelo nebuloso para a temperatura de saída do sistema (T_s)
Figura VII.24. Dados de identificação do 3° modelo nebuloso para o peso molecular numérico médio (M_n)
Figura VII.25. Validação do 1º modelo nebuloso com estrutura exponencial para a T_s 313
Figura VII.26. Validação do 2º modelo nebuloso com estrutura exponencial para a T_s 313
Figura VII.27. Validação do 3º modelo nebuloso com estrutura exponencial para a T_s 314
Figura VII.28. Validação do 1º modelo nebuloso com estrutura exponencial para o M_n 314
Figura VII.29. Validação do 2° modelo nebuloso com estrutura exponencial para o M_n 315
Figura VII.30. Validação do 3º modelo nebuloso com estrutura exponencial para o M_n 315
Figura VII.31. Resultados do controle servo para a temperatura de saída do sistema (T_s)
Figura VII.32. Resultados do controle servo para o peso molecular numérico médio (M_n)
Figura VII.33. Comportamento servo da fração mássica de eteno na alimentação prrincipal (<i>Y</i> _{ef})

Figura	VII.34.	Comportamento	servo	da	concentração	de	hidrogênio	na	alimentação
p	rrincipal	(C_{H2f})				••••			

LISTA DE TABELAS

Tabela IV.1. Interpretação da RGA 76
Tabela VI.1. Condições operacionais para o reator de copolimerização do MMA/VAc (CONGALIDIS et al., 1989)100
Tabela VI.2. Parâmetros cinéticos e termodinâmicos para o modelo fenomenológico do processo de copolimerização do MMA/VAc (CONGALIDIS et al., 1989) 105
Tabela VI.3. Condições iniciais do processo de copolimerização do MMA/VAc (MANER, DOYLE III, 1997) 114
Tabela VI.4. Variáveis presentes nos procedimentos de seleção das malhas multivariáveisde controle para o reator de copolimerização do MMA/VAc121
Tabela VI.5. Efeitos das variáveis de entrada sobre as variáveis de saída para o reator de copolimerização do MMA/VAc
Tabela VI.6. Malhas multivariáveis de controle para o reator de copolimerização do MMA/VAc
Tabela VI.7. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha $3x2$ 136
Tabela VI.8. Parâmetros do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha $3x2$
Tabela VI.9. Parâmetros do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha $3x2$
Tabela VI.10. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha $3x2$
Tabela VI.11. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha $3x2$
Tabela VI.12. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha $3x2$
Tabela VI.13. Parâmetros do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2
Tabela VI.14. Parâmetros do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2

Tabela VI.15. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2 144
Tabela VI.16. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 3x2
Tabela VI.17. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 3x2
Tabela VI.18. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 3x2
Tabela VI.19. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 3x2
Tabela VI.20. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno modificado para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 3x2 156
Tabela VI.21. Parâmetros dos controladores preditivos multivariáveis para o problemaregulatório – Malha 3x2159
Tabela VI.22. Parâmetros dos controladores preditivos multivariáveis para o problema servo – Malha 3x2
Tabela VI.23. Malha multivariável 4x4 de controle para o reator de copolimerização do MMA/VAc177
Tabela VI.24. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 4x4
Tabela VI.25. Parâmetros do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 4x4
Tabela VI.26. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 4x4
Tabela VI.27. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha 4x4
Tabela VI.28. Parâmetros do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha 4x4
Tabela VI.29. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha 4x4
Tabela VI.30. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha 4x4
Tabela VI.31. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha 4x4

Tabela VI.32. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha 4x4
Tabela VI.33. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 4x4 200
Tabela VI.34. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 4x4 201
Tabela VI.35. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 4x4
Tabela VI.36. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4
Tabela VI.37. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4
Tabela VI.38. Parâmetros do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4
Tabela VI.39. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4
Tabela VI.40. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4
Tabela VI.41. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4
Tabela VI.42. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 3x3
Tabela VI.43. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno modificado para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 3x3 219
Tabela VI.44. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 4x4
Tabela VI.45. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 4x4
Tabela VI.46. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 4x4
Tabela VI.47. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a <i>T_r</i> – Malha 4x4
Tabela VI.48. Parâmetros do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 4x4

Tabela VI.49. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 4x4
Tabela VI.50. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 1x1
Tabela VI.51. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno modificado para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 1x1 234
Tabela VI.52. Parâmetros dos controladores preditivos multivariáveis para o problema regulatório – Malha 4x4 237
Tabela VII.1. Condições operacionais para o reator de copolimerização do eteno/1-buteno (LIMA, 2006)
Tabela VII.2. Espécies envolvidas no modelo cinético 263
Tabela VII.3. Variáveis presentes nos procedimentos de seleção da malha multivariável de controle para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno
Tabela VII.4. Efeitos das variáveis de entrada sobre as variáveis de saída para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno
Tabela VII.5. Malha multivariável de controle para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno
Tabela VII.6. Parâmetros do 1º modelo nebuloso funcional para a temperatura de saída do sistema (T_s)
Tabela VII.7. Parâmetros do 2° modelo nebuloso funcional para a temperatura de saída do sistema (T_s)
Tabela VII.8. Parâmetros do 3° modelo nebuloso funcional para a temperatura de saída do sistema (T_s)
Tabela VII.9. Parâmetros do 1º modelo nebuloso funcional para o peso molecular numérico médio (M_n) 305
Tabela VII.10. Parâmetros do 2º modelo nebuloso funcional para o peso molecular numérico médio (M_n) 307
Tabela VII.11. Parâmetros do 3º modelo nebuloso funcional para o peso molecular numérico médio (M_n) 310
Tabela VII.12. Erros quadráticos médios dos modelos nebulosos com estrutura exponencialpara o processo de copolimerização do eteno/1-buteno
Tabela VII.13. Parâmetros dos controladores preditivos multivariáveis para o problema servo – Malha 2x2

NOMENCLATURA

Lista de Símbolos

- : Radical livre;
- : Operador de composição;
- *a* : Parâmetro da função conseqüente da base de regras do modelo nebuloso referente à variável manipulada, elemento da matriz dinâmica para o controlador DMC, monômero *A*, constante empírica para o cálculo da viscosidade;
- A : Conjunto nebuloso A, conjunto nebuloso para os termos antecedentes das regras do modelo nebuloso, função de pertinência referente à variável manipulada, monômero A, fator de freqüência (constante de Arrhenius), área da seção transversal, variável intermediária no cálculo da derivada da densidade da mistura;
- *A* : Matriz dinâmica para o controlador DMC;

AIBN : Azobisisobutironitrila;

- *b* : Coeficiente de resposta para o procedimento de geração do modelo de convolução, monômero *B*, parâmetro da função conseqüente da base de regras do modelo nebuloso referente à variável controlada;
- B : Vazão mássica;
- Conjunto clássico (*crisp*), conjunto nebuloso B, conjunto nebuloso para o termo conseqüente da regra do modelo nebuloso, função de pertinência referente à variável controlada, monômero B, variável intermediária no cálculo da distriuição de peso molecular;
- <u>B</u> : Matriz dos coeficientes de resposta para o procedimento de geração do modelo de convolução;
- *c* : Centro da função de pertinência gaussiana, operador de complemento nebuloso, variável intermediária no cálculo da distribuição de peso molecular;
- *C* : Conjunto nebuloso *C*, concentração, componente específico, calor específico, catalisador, espécie catalítica;
- CAT : Catalisador;
- *CC* : Co-catalisador;
- *CCD* : Co-catalisador desativado;
- *CD* : Espécie catalítica desativada;
- *CM* : Concentração de co-monômero;
- CO-CAT : Co-catalisador;
- *d* : Distância entre os centros de grupo para o método do agrupamento subtrativo;
- *D* : Conjunto nebuloso *D*, coeficientes constantes de mistura;
- *E* : Vetor de erros para o método dos quadrados mínimos, energia de ativação;
- *EA* : Espécie ativa;

f	: Função conseqüente da base de regras do modelo nebuloso, fator de
	supressão para os movimentos da variável manipulada, função genérica,
	variável intermediária no cálculo dos momentos do polímero "vivo";
F	: Vazão mássica;
F	: Vazão molar, vazão lateral, variável intermediária no cálculo da derivada
	da densidade da mistura;
g	: Elemento da matriz G para o cálculo da RGA;
Ğ	: Regra sintática, matriz para o cálculo da RGA, vazão mássica, taxa de
	produção;
Η	: Entalpia;
H_2	: Hidrogênio;
Ι	: Operador de implicação, iniciador, matriz identidade, impureza;
k	: Constante cinética, instante de tempo;
l	: Variável intermediária para o cálculo das concentrações totais de radicais
	livres no reator;
L	: Variável intermediária no cálculo da distribuição de peso molecular,
	comprimento total do reator PFR;
m	: Número de instantes de tempo discretos, número de variáveis manipuladas,
	variável manipulada;
М	: Regra semântica, peso molecular, monômero, massa;
<i>m</i> -DNB	: <i>m</i> -dinitrobenzeno;
MMA	: Metacrilato de metila;
n	: Número de dados provenientes do processo para treinamento do modelo
	nebuloso, instante de amostragem;
Ν	: Dimensão de um deteminado espaço, número de zonas do CSTR-NI;
nc	: Número de entradas de componentes;
NC	: Horizonte de controle;
NP	: Horizonte de predição;
NS	: Horizonte de convolução para o controlador DMC;
NSIT	: Número de sítios ativos;
nu	: Número de entradas do modelo nebuloso referentes à variável manipulada;
NVI	: Número de variáveis de entrada;
NVO	: Número de variáveis de saída;
ny	: Número de entradas do modelo nebuloso referentes à variável controlada;
р	: Número de variáveis controladas, número de monômeros do tipo 1;
Р	: Proposição definida no conjunto nebuloso A, potencial de dados para o
	método do agrupamento subtrativo, polímero, polímero "vivo" com o
	monômero 1 como molécula ativa;
PD	: Polidispersão;
PM	: Peso molecular;
PP	: Percentagem em peso;
q	: Número de monômeros do tipo 2;
Q	: Proposição definida no conjunto nebuloso B, vazão volumétrica, polímero
	"vivo" com o monômero 2 como molécula ativa;
r	: Número de regras do modelo nebuloso, raio que define uma zona de
	vizinhança para o método do agrupamento subtrativo, razão de reatividade,
	taxa de reação;

R	: Vazão mássica;
R	: Relação nebulosa, constante universal dos gases, taxa de reação, razão
	mássica;
Rot	: Rotação do agitador do CSTR-NI;
S	: Área superficial, solvente;
t	: Tempo;
Т	: Conjunto de valores lingüísticos, temperatura, agente de transferência de
	cadeia;
и	: Entrada do modelo nebuloso referente à variável manipulada;
U	: Coeficiente global de transferência de calor, polímero "morto";
V	: Critério de custo para o método dos quadrados mínimos, volume, variável
	intermediária no cálculo da distribuição de peso molecular;
VAc	: Acetato de vinila;
W	: Fator de ponderação para as variáveis controladas, fração do componente
	puro;
W	: Vazão mássica;
W	: Relação nebulosa, taxa de produção;
WQ	: Vazão volumétrica;
x	: Elemento do universo de discurso X, variável de entrada, elemento do
	conjunto nebuloso da parte antecedente da base de regras, variável
	intermediária no cálculo da distribuição de peso molecular, conversão;
X	: Universo de discurso;
у	: Elemento do universo de discurso Y, variável de saída, variável controlada,
	função conseqüente da base de regras do modelo nebuloso, fração molar,
	entrada do modelo nebuloso referente à variável controlada;
Y	: Universo de discurso, vetor de dados de saída do processo para o método
	dos quadrados mínimos, fração molar, fração mássica;
Z	: Elemento do universo de discurso Z, coordenada axial, comprimento do
	reator PFR;
Ζ	: Universo de discurso, inibidor.

Lista de Símbolos Gregos

α	: Parâmetro do método do agrupamento subtrativo, parâmetro de trajetória, variável intermediária no cálculo da distribuição de peso molecular, constante empírica para o cálculo do <i>MI</i> , constante empírica para o cálculo do <i>SE</i> , constante empírica para o cálculo da densidade;
β	: Parâmetro do método do agrupamento subtrativo, variável intermediária para o cálculo das concentrações totais de radicais livres no reator, constante empírica para o cálculo do <i>MI</i> , constante empírica para o cálculo do <i>SE</i> , constante empírica para o cálculo da densidade;
δ	: Constante empírica para o cálculo da densidade;
Δ	: Intervalo de variação;
З	: Erro para o método dos quadrados mínimos, eficiência do iniciador, constante empírica para o cálculo da densidade;
$\bar{\mathcal{E}}$: Parâmetro do método do agrupamento subtrativo;

$\underline{\mathcal{E}}$: Parâmetro do método do agrupamento subtrativo;
Φ	: Matriz do vetor de dados para o método dos quadrados mínimos;
γ	: Variável intermediária no cálculo da distribuição de peso molecular,
	constante empírica para o cálculo do <i>SE</i> , constante empírica para o cálculo da densidade;
η	: Parâmetro do método do agrupamento subtrativo;
arphi	: Variável intermediária no cálculo da derivada da densidade da mistura;
λ	: Função de pertinência para um conjunto clássico (<i>crisp</i>), elemento da RGA, concentração molar de monômero no polímero, momento do polímero "morto";
Λ	: Matriz RGA;
μ	: Função de pertinência para um conjunto nebuloso, viscosidade, momento do polímero "vivo";
ν	: Velocidade de escoamento de um elemento de fluido no reator PFR;
θ	: Vetor de parâmetros das funções conseqüentes do modelo nebuloso para o método dos quadrados mínimos, tempo de residência;
ρ	: Densidade, densidade do polímero sólido, massa específica;
σ	: Desvio-padrão da função de pertinência gaussiana;
au	: Função temporal;
ξ	: Vetor de dados para o método dos quadrados mínimos, taxa de purga;
Ψ	: Momento da distribuição de peso molecular.

Lista de Subscritos

•	: Radical livre;
*	: Catalisador ou espécie ativa;
0	: Instante inicial, tempo zero;
0	: Condição inicial, ordem do momento, termo independente da agitação;
1	: Monômero tipo 1;
2	: Monômero tipo 2;
a	: Parâmetro α do método do agrupamento subtrativo, monômero A;
Α	: Conjunto nebuloso A;
b	: Parâmetro β do método do agrupamento subtrativo, monômero <i>B</i> ;
В	: Conjunto clássico (crisp), conjunto nebuloso B;
С	: Terminação por acoplamento, componente genérico, computacional;
С	: Conjunto nebuloso C, catalisador, espécie catalítica;
CC	: Co-catalisador;
CD	: Espécie catalítica desativada;
d	: Terminação por desproporcionamento, desativação;
D	: Conjunto nebuloso D;
e	: Modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado, entrada do processo,
	eteno;
EA	: Espécie ativa;
f	: Instante final, alimentação do reator ou do processo, ativação, transferência
	de cadeia;
F	: Vazão lateral;

h	: Tanque de armazenamento, regra do modelo nebuloso, hidrogênio;
H2f	: Hidrogênio na alimentação principal;
i	: Antecedente para cada regra do modelo nebuloso, variável de entrada, valor
	instantâneo, iniciador, iniciação, entrada do modelo nebuloso referente à
	variável controlada, componente específico;
IC	: Impureza no catalisador ou na espécie ativa;
ICC	: Impureza no co-catalisador;
Ii	: Índice da variável manipulada;
inicial	: Valor inicial;
Io	: Índice da variável controlada;
j	: Regra do modelo nebuloso, jaqueta de resfriamento do reator, entrada do
	modelo nebuloso referente à variável manipulada, número de unidades do
	monômero 1;
k	: Regra do modelo nebuloso, k-ésimo dado, instante de tempo, componente
	específico, número de unidades do monômero 2;
l	: Ordem do momento do polímero "vivo" em relação ao monômero tipo 1;
L	: Número de antecedentes para cada regra do modelo nebuloso;
m	: Número de unidades do monômero B na cadeia polimérica, monômero,
	ordem do momento do polímero "morto" em relação ao monômero tipo 1,
	ordem do momento do polímero "vivo" em relação ao monômero tipo 2;
M	: Monômero;
min	: Valor mínimo;
n	: Número de conjuntos nebulosos, número de unidades do monômero A na
	cadeia polimérica, propriedade média numérica do polímero, tipo de sítio
	ativo, número do sítio ativo, ordem do momento do polímero "morto" em
	relação ao monômero tipo 2;
0	: Valor inicial;
р	: Polímero, propagação, número de monômeros do tipo 1, polímero "vivo"
	terminado pelo monômero tipo 1;
q	: Número de monômeros do tipo 2, polímero "vivo" terminado pelo
	monomero tipo 2;
r	: Reator, zona do reator CSTR-NI, elemento de fluido;
R	: Relação nebulosa;
Rot	: Rotação do agitador do CSTR-NI;
S	: Solvente, separador, salda do processo;
t T	: Agente de transferencia de cadela, terminação de cadela;
	: remperatura;
U	: Ponniedodo módio nonderal do nativação:
W	: Propriedade media ponderal do ponmero;
X	: Transferencia de cadeia para solvente;
у -	: variavel de Salda;
Z	: mioidor, midição.

Lista de Sobrescritos

- : Valor médio, valor predito pelo modelo nebuloso;
- : Radical livre;

*	: Centro de grupo para o método do agrupamento subtrativo, catalisador ou
	espécie ativa;
^	: Valor ótimo, valor predito;
1	: Monômero tipo 1;
2	: Monômero tipo 2;
a	: Monômero A;
atual	: Valor presente;
b	: Constante empírica para o cálculo da viscosidade, monômero <i>B</i> ;
CC	: Co-catalisador;
CL	: Malha fechada;
CLpred	: Valor predito em malha fechada;
d	: Valor desejado;
f	: Transferência de cadeia;
h	: Hidrogênio;
i	: Regra do modelo nebuloso;
j	: Regra do modelo nebuloso;
k	: Regra do modelo nebuloso;
l	: Ordem do momento do polímero "vivo" em relação ao monômero tipo 1;
m	: Ordem do momento do polímero "morto" em relação ao monômero tipo 1,
	ordem do momento do polímero "vivo" em relação ao monômero tipo 2;
max	: Limite superior;
medida	: Valor medido;
min	: Limite inferior;
n	: Número de dados provenientes do processo, ordem do momento do
	polímero "morto" em relação ao monômero tipo 2;
new	: Mudanças futuras;
0	: Ordem de reação, valor padrão;
OL	: Malha aberta;
old	: Mudanças passadas;
р	: Polímero;
r	: Número de regras do modelo nebuloso;
set	: Setpoint;
Т	: Matriz transposta.

Outros Símbolos

[] : Concentração.

Abreviaturas

ATR-FT-IR	: Attenuated Total Reflectance - Fourier Transform - InfraRed;
CSTR	: Continuous Stirred Tank Reactor;
CSTR-NI	: Continuous Stirred Tank Reactor – Não Ideal;
DMC	: Dynamic Matrix Control;
E-ANFMPC	: Exponential Structure – Adaptive Nonlinear Fuzzy Model-based Predictive
	Control;
EDO	: Equação Diferencial Ordinária;
E-NFMPC	: Exponential Structure – Nonlinear Fuzzy Model-based Predictive Control;
----------	---
FH-PID	: Fuzzy-Híbrida-PID-feedback;
GA	: Genetic Algorithm;
GLC	: Global Linearizing Control;
GPC	: Generalized Predictive Control;
IAE	: Integral of the Absolute value of the Error;
IMC	: Internal Model Control;
ISE	: Integral of the Square of the Error;
ITAE	: Integral of the Time multiplied by the Absolute value of the Error;
L-ANFMPC	: Linear Structure – Adaptive Nonlinear Fuzzy Model-based Predictive
	Control;
LFE	: Método Learning From Example;
LGPC	: Linear Generalized Predictive Control;
L-NFMPC	: Linear Structure – Nonlinear Fuzzy Model-based Predictive Control;
LSODE	: Livermore Solver of Ordinary Differential Equations;
MAC	: Model Algorithmic Control;
MI	: Melt Index (Índice de Fluidez);
MIMO	: Multiple-Input / Multiple-Output;
MISO	: Multiple-Input / Single-Output;
MLFE	: Método Learning From Example Modificado;
MPC	: Model-based Predictive Control;
MWD	: Molecular Weight Distribution;
NIR	: Near-InfraRed;
NLGPC	: Non Linear Generalized Predictive Control;
NLMPC	: Non Linear Model Predictive Control;
NMPC	: Nonlinear Model-based Predictive Control;
NMPC-t	: Nonlinear Model-based Predictive Control - typical;
Р	: Controlador Proporcional;
PFR	: Plug Flow Reactor;
PI	: Controlador Proporcional-Integrativo;
PID	: Controlador Proporcional-Integrativo-Derivativo;
PSD	: Particle Size Distribution;
QBMPC	: Quality control-combined Batch Model Predictive Control;
RGA	: Relative Gain Array;
RNA	: Rede Neural Artificial;
SE	: Stress Exponent (Expoente de Tensão);
SISO	: Single-Input / Single-Output;
SQP	: Successive Quadratic Programming;
STC	: Self Tuning Controller.

<u>CAPÍTULO I</u> INTRODUÇÃO

I.1 INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

Os processos de polimerização ocupam uma posição de destaque dentro do mercado industrial mundial. Através de tais meios reacionais, pode-se obter uma enorme diversidade de materiais de grande interesse comercial, tais como: embalagens, medicamentos, cosméticos, móveis, tubulações, tintas, biomateriais, entre outros.

Entretanto, o comportamento dinâmico dos processos poliméricos é extremamente complexo, sendo caracterizado por intensas não linearidades (ROFFEL, CHIN, 1991) e estados variantes ao longo do tempo e, por vezes, do espaço. A todos esses inconvenientes, somam-se ainda a presença de fortes interações multivariáveis e a particularidade de um mesmo monômero poder formar polímeros com propriedades distintas. Assim sendo, de modo a serem obtidos produtos com características peculiares, tais sistemas devem ser continuamente monitorados e severamente controlados sob certas condições operacionais pré-determinadas, que lhe atribuem, entre outras, propriedades físicas, mecânicas, elétricas, térmicas, óticas, reológicas e/ou de processamento, desejadas em futuras utilizações. A importância da utilização de uma boa configuração de controle vai além do desejo de obtenção de produtos dentro de certa especificação e de permitir operacionalização em níveis de alto desempenho, mas também engloba questões de segurança, redução de custos e minimização da geração de resíduos e efluentes, de modo a evitar maiores danos ao meio ambiente.

Contudo, é importante frisar que muitos dos algoritmos convencionais de controle não atendem, em sua totalidade, as exigências cada vez mais específicas de plantas com alta eficiência, especialmente no que se refere à qualidade do produto gerado; os problemas se agravam quando são tratados sistemas multivariáveis, os quais compreendem a maioria dos processos de interesse. Destaca-se ainda que o controlador deva ser capaz de atender as necessidades de produção sem, contudo, violar restrições. Visando superar essas dificuldades e em virtude do crescente avanço tecnológico, tem ocorrido, nos últimos anos, um aumento considerável na aplicação de estratégias de controle avançado em processos de polimerização, merecendo destaque especial a utilização das técnicas de controle preditivo baseadas em modelo, conhecidas como MPC (*Model-based Predictive Control*), as quais utilizam um modelo dinâmico do processo como parte integrante do sistema de controle.

3

De acordo com Dechechi (1996), a grande aceitação dos algoritmos MPC para controle de processos químicos se deve às suas habilidades na manipulação e incorporação de restrições operacionais envolvendo variáveis de entrada e saída, além da transparência apresentada com relação ao ajuste das constantes de projeto.

Adicionalmente, um processo polimérico, além de todas as peculiaridades explanadas anteriormente, pode, em determinadas condições, apresentar múltiplos estados estacionários, modificando significativamente o seu comportamento dinâmico, além de outras características desconhecidas durante as etapas de projeto do controlador. Desta forma, a incorporação de metodologias adaptativas na formulação do controle preditivo pode ser muito vantajosa, proporcionando grandes benefícios nas ações de controle; além disso, se bem projetadas, necessitam praticamente do mesmo esforço computacional.

No entanto, o desenvolvimento de uma estrutura MPC requer a disponibilidade de modelos matemáticos representativos dos processos, os quais devem ser solucionados em tempo real. Os modelos dinâmicos lineares, apesar de muito utilizados por suas simplicidade e versatilidade, não são adequados para descrever sistemas com fortes não linearidades, como os de polimerização. Já os modelos fenomenológicos (advindos dos balanços de massa, energia e quantidade de movimento e compostos por um conjunto de equações diferencias ordinárias, algébricas e, em determinadas circunstâncias, equações diferencias parciais), apesar de bem desenvolvidos em muitas áreas, são provenientes de procedimentos de modelagem altamente estafantes e desafiadores, em virtude da escassez de informações precisas acerca dos fenômenos presentes nos sistemas. Esses fatores podem causar limitações quanto à acuracidade dos modelos resultantes e conferem dificuldades de implementação e resolução *on-line*.

Assim sendo, está em âmbito cada vez mais crescente a busca por novas metodologias para a obtenção de modelos mais simples e que sejam, ao mesmo tempo, representativos dos referidos meios reacionais. Uma atenção de destaque está direcionada à aplicação de técnicas de identificação de sistemas não lineares acopladas à inteligência artificial, especialmente as que se referem à formulação de modelos nebulosos (modelos *fuzzy*). Tais representações, por integrarem conceitos de incerteza e imprecisão e incluírem definições de lógica probabilística, se adéquam de maneira interessante ao comportamento dos processos de polimerização, para os quais o desenvolvimento de modelos

fenomenológicos seria uma tarefa árdua e consumidora de uma disponibilidade de tempo apreciável e nem sempre possível; além disso, segundo Ross (2004), permitem a inclusão de informações do processo na formulação do modelo matemático, o que torna a alternativa de grande interesse do ponto de vista operacional. A utilização de sistemas nebulosos na modelagem de processos simplifica, notavelmente, os procedimentos realizados, possuindo os atrativos de minimização no tempo de processamento e simplicidade de implementação, aliando-se ao baixo custo e à facilidade de manutenção dos equipamentos, já que não é necessário um conhecimento dinâmico detalhado sobre os fenômenos intrínsecos presentes internamente no sistema analisado, mas somente um conjunto de dados entrada/saída.

Segundo Meleiro (2002), dentre os desenvolvimentos mais recentes em estruturas de controle avançado, destacam-se aqueles caracterizados pela forte ligação entre as áreas de modelagem – como a lógica nebulosa – e o projeto de sistemas de controle preditivo baseados em modelo. Deste modo, a união dos conceitos de sistemas nebulosos, na busca por modelos precisos de simples resolução, com a metodologia MPC, dada sua robustez e acessibilidade, apresenta-se como uma alternativa promissora no campo do projeto de estratégias de controle avançado para processos de polimerização.

I.2 OBJETIVOS

Este trabalho tem como objetivo principal desenvolver controladores avançados híbridos preditivos não lineares multivariáveis, baseados em modelos nebulosos não lineares, para processos de polimerização. Quatro configurações de controle preditivo não linear multivariável são propostas dentro deste escopo:

- 1°. Um controlador baseado em um único modelo nebuloso não linear multivariável para cada variável controlada, composto por uma estrutura funcional linear para cada regra do modelo (definido como L-NFMPC – *Linear structure - Nonlinear Fuzzy Model-based Predictive Control*);
- 2°. Um controlador baseado em um único modelo nebuloso não linear multivariável para cada variável controlada, composto por uma estrutura funcional exponencial para cada regra do modelo (definido como E-NFMPC – *Exponential structure - Nonlinear Fuzzy Model-based Predictive Control*);

- 3°. Um controlador adaptativo baseado em múltiplos modelos nebulosos não lineares multivariáveis para cada variável controlada, composto por uma estrutura funcional linear para cada regra dos modelos (definido como L-ANFMPC – Linear structure - Adaptive Nonlinear Fuzzy Model-based Predictive Control);
- 4°. Um controlador adaptativo baseado em múltiplos modelos nebulosos não lineares multivariáveis para cada variável controlada, composto por uma estrutura funcional exponencial para cada regra dos modelos (definido como E-ANFMPC – Exponential structure - Adaptive Nonlinear Fuzzy Model-based Predictive Control).

Controladores NMPC (*Nonlinear Model-based Predictive Control*) típico (NMPCt) e DMC (*Dynamic Matrix Control*) multivariáveis também serão desenvolvidos para fins de comparação de desempenho.

Dois casos de estudo são considerados para implementação e análise dos desenvolvimentos propostos. Cada um dos processos apresenta um comportamento abstruso, dificultando, deste modo, o projeto com sucesso de controladores clássicos e avançados baseados em modelos convencionais. Ambos possuem um modelo matemático fenomenológico já descrito na literatura e apresentam operação contínua. O primeiro sistema é a reação de copolimerização em solução do metacrilato de metila com o acetato de vinila (CONGALIDIS et al., 1989; MANER, DOYLE III, 1997; LIMA, 2006; LIMA et al., 2007; LIMA et al., 2010a), sendo o segundo um processo industrial de copolimerização do eteno com o 1-buteno usando catalisador Ziegler-Natta solúvel (EMBIRUÇU, 1998; EMBIRUÇU et al., 2000; PONTES, 2005; LIMA, 2006; LIMA et al., 2009). O modelo fenomenológico para o processo de produção do polietileno se encontra testado e validado com dados industriais reais.

Os modelos matemáticos fenomenológicos dos dois casos de estudo são utilizados como plantas virtuais para a geração de dados de identificação dos modelos nebulosos e implementação das estratégias de controle a serem projetadas, e se encontram implementados em linguagem de programação FORTRAN 90 (LIMA, 2006); além disso, para o 1º processo considerado, o respectivo modelo fenomenológico será utilizado como modelo de predição do controlador NMPC-t. Através de simulação computacional -

ferramenta de reconhecida importância na análise do comportamento de sistemas e que tem obtido notório sucesso nos mais variados ramos devido, em grande parte, ao aumento no poder de cálculo dos computadores digitais (o que promoveu um enorme incremento na rapidez de processamento dos sinais) - é realizado um estudo dinâmico das variáveis dos processos, com conseqüente desenvolvimento dos modelos nebulosos multivariáveis. Estes são integrados, posteriormente, à metodologia de controle preditivo, onde atuam como preditores na configuração interna dos controladores, obtendo-se, então, as estratégias híbridas. Os controladores devem garantir a estabilidade do sistema e são analisados tanto na condição de controle regulatório (processo sob influência de perturbação externa), quanto para o controle servo (mudança de *setpoint*, otimização). Todos os *softwares* foram desenvolvidos em linguagem FORTRAN 90.

Os modelos nebulosos para cada variável controlada, empregados nas configurações L-NFMPC e L-ANFMPC propostas, são do tipo Takagi-Sugeno (TAKAGI, SUGENO, 1985). Estes possuem uma estrutura funcional, sendo capazes de modelar um sistema altamente não linear através da interpolação de funções matemáticas lineares representativas de cada região em um dado sistema; por conseguinte, como será observado, a combinação dessas funções (uma para cada regra em cada modelo) conduz a representações não lineares dos processos, com grau de não linearidade mutável de acordo com a base de regras do modelo, o que faz com que os modelos nebulosos utilizados em tais estruturas de controle sejam definidos como não lineares. Os modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno são modificados para uma representação exponencial no caso das estratégias E-NFMPC e E-ANFMPC, visando-se analisar a qualidade da predição por uma abordagem através de funções locais não lineares.

I.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

São apresentados a seguir, de forma sucinta, os principais assuntos abordados nesta tese de doutorado.

O capítulo II mostra uma ampla revisão bibliográfica sobre as principais referências na literatura que abordam a análise de comportamento dos processos poliméricos, procedimentos de modelagem para tais processos, aplicações da lógica nebulosa a sistemas e projeto de estratégias de controle, com destaque especial para a utilização de controladores preditivos.

No capítulo III, são discutidos conceitos gerais básicos sobre a teoria de sistemas nebulosos, sendo apresentada a definição de conjuntos nebulosos e descritas as principais propriedades e operações envolvendo esses termos. Variáveis lingüísticas são introduzidas, sendo enfocadas as etapas de "fuzzificação", inferência e "defuzzificação" para modelagem nebulosa. Este capítulo ainda apresenta uma breve descrição das classes de modelos nebulosos presentes na literatura. Todas essas definições são importantes para o entendimento da seqüência do trabalho.

O capítulo IV apresenta os principais tópicos sobre identificação de sistemas não lineares no que se refere à estruturação do modelo nebuloso dinâmico, sendo discutidos os principais procedimentos presentes na metodologia de geração e descritos, de forma detalhada, os métodos numéricos aplicados na modelagem. Ainda, uma metodologia para a determinação de interações entrada-saída em modelos nebulosos funcionais multivariáveis é exposta.

Apresentam-se, no capítulo V, os fundamentos teóricos da estratégia de controle preditivo baseada em modelo (MPC), utilizada para projetar todos os controladores propostos nesta tese. Os algoritmos de controle MIMO (*Multiple-Input / Multiple-Output*) linear e não linear típico (DMC e NMPC-t multivariáveis, respectivamente) são inicialmente descritos, sendo posteriormente demonstrada a metodologia de obtenção dos controladores híbridos preditivos, baseados em modelos nebulosos, almejados. Discute-se ainda o procedimento adotado para sintonia dos controladores delineados.

O capítulo VI apresenta o 1° caso de estudo considerado neste trabalho. Trata-se do processo de copolimerização em solução do metacrilato de metila com o acetato de vinila. O modelo fenomenológico do processo é descrito, o qual é utilizado como planta virtual para obtenção de dados dinâmicos e implementação dos controladores via simulação computacional, além de modelo de predição na estratégia NMPC-t. Modelos nebulosos dinâmicos multivariáveis são obtidos para o sistema considerando duas malhas de controle MIMO, com conseqüente geração dos controladores híbridos. As estratégia de controle DMC e NMPC-t são, então, implementadas no sistema para fins de análise comparativa de

No capítulo VII, é apresentado o 2° caso de estudo considerado neste trabalho: o processo de copolimerização em solução do eteno com o 1-buteno na presença de catalisador Ziegler-Natta. Do mesmo modo que para o 1° processo, o modelo fenomenológico é inicialmente descrito, o qual é utilizado como planta virtual para implementação das estruturas de controle. Modelos nebulosos dinâmicos multivariáveis são gerados para uma malha de controle MIMO, e dois controladores híbridos são delineados. Então, são apresentados os resultados da aplicação de tais estratégias para condições de controle servo.

O capítulo VIII apresenta as conclusões gerais sobre os resultados obtidos nesta tese, bem como sugestões para o desenvolvimento de trabalhos futuros.

<u>CAPÍTULO II</u> <u>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</u>

II.1 INTRODUÇÃO

Este capítulo tem como objetivo apresentar uma revisão da literatura sobre os trabalhos mais relevantes envolvidos com os conceitos tratados nesta tese.

Inicialmente, a seção II.2 apresenta uma breve descrição sobre trabalhos relacionados ao estudo de processos de polimerização. É mostrada uma diversidade de sistemas de modo a destacar a importância da análise de tais meios reacionais. Em seguida, na seção II.3, uma concisa exposição sobre publicações envolvendo a aplicação de estratégias de controle em processos poliméricos é relatada, merecendo ênfase especial os trabalhos referentes ao uso de controladores preditivos MPC. Por fim, a seção II.4 destaca alguns estudos relacionados a aplicação de sistemas nebulosos na modelagem e controle de processos de polimerização.

II.2 PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO

A produção de polímeros ocupa um patamar de grande destaque dentro do campo industrial mundial, de forma que seus processos de geração devem ser muito bem monitorados de modo a ser produzida uma resina com as especificações desejadas. Para que isto seja possível, é de fundamental importância o conhecimento detalhado do comportamento dinâmico de tais processos, o que é reproduzido muitas vezes através da obtenção de modelos matemáticos. A seguir, são apresentados alguns trabalhos presentes na literatura que procuram explorar um estudo de comportamento e a formulação de modelos para processos de polimerização.

Cozewith (1988) investigou o comportamento dinâmico das propriedades do polímero para a terpolimerização do etileno/propileno/etilideno em um reator tanque agitado contínuo (CSTR – *Continuous Stirred Tank Reactor*) com catalisador Ziegler-Natta solúvel. Um modelo foi desenvolvido e validado pela medida da resposta transiente da composição e do peso molecular do polímero. As equações do modelo também foram utilizadas para simular partidas do reator.

Kim e Choi (1991) analisaram os comportamentos dinâmico e estacionário da copolimerização do etileno/1-buteno com catalisador Ziegler-Natta solúvel em um reator

CSTR. Esse catalisador é usado para polimerização de olefinas em grandes escalas de temperatura, o que proporcionou a obtenção de uma variedade de classes de polímeros.

Scott et al. (1993) realizaram uma série de experimentos para a copolimerização em emulsão do etileno com o acetato de vinila em um reator semi-batelada, avaliando os efeitos das variáveis do processo na taxa de polimerização, composição do copolímero, tamanho das partículas e pesos moleculares médios. A partir desse conhecimento, técnicas avançadas de otimização e controle podem ser desenvolvidas.

Zacca e Ray (1993) apresentaram um modelo para a polimerização de olefinas em fase líquida em um reator com reciclo utilizando catálise Ziegler-Natta. O reator é modelado como dois reatores tubulares interconectados. O modelo permite a investigação de efeitos importantes como taxa de reciclo, dispersão axial e taxa de transferência de calor.

Embiruçu (1998) e Embiruçu et al. (2000) desenvolveram um modelo matemático dinâmico para descrever o processo contínuo de polimerização do etileno com catalisador Ziegler-Natta solúvel em um conjunto de reatores de tanque agitado (CSTR) e tubulares. O modelo compreende uma descrição detalhada do mecanismo cinético, apresentando os balanços de massa, energia e momento. Os reatores tubulares foram assumidos como PFR (*Plug Flow Reactor*) ideais, surgindo dificuldades na resolução do conjunto de equações diferenciais parciais do PFR. O método das características foi utilizado, considerando o princípio da similaridade entre o PFR e um reator batelada, o que simplifica notavelmente os procedimentos numéricos. Somente um tipo de sítio ativo foi considerado como forma de simplificação, embora os autores acreditem na teoria da multiplicidade de sítios. Foram realizadas predições das propriedades de uso final do polímero (pesos moleculares médios, densidade do polímero sólido, índice de fluidez) e propriedades de desempenho do processo, tais como taxa de produção e consumo de energia. Dados industriais foram utilizados para validação do modelo, o qual demonstrou descrever o sistema de forma satisfatória.

Zeaiter et al. (2002) desenvolveram um modelo dinâmico detalhado para a polimerização em emulsão do estireno em um reator semi-batelada, para prever a distribuição de tamanho da partícula do produto (PSD – *Particle Size Distribution*) e a distribuição de peso molecular (MWD – *Molecular Weight Distribution*). O modelo obtido apresentou bons resultados quando comparado com os dados experimentais. Verificou-se

ainda que a PSD é afetada principalmente pela taxa de alimentação do monômero e a MWD é influenciada em sua maior parte pela temperatura do reator. Assim, foi proposto o uso da taxa de alimentação do monômero para controlar a PSD e a temperatura do reator para controlar a MWD em situações práticas.

Kappler et al. (2003) realizaram o monitoramento em tempo real da copolimerização do etileno/1-hexeno. Os reatores foram equipados com monitores *on-line* baseados na técnica ATR-FT-IR (*Attenuated Total Reflectance - Fourier Transform - InfraRed*), a qual mostrou ser uma ferramenta bastante valiosa. Foram monitoradas a conversão do 1-hexeno, a taxa de produção do polímero e a concentração e composição do copolímero. Essas análises proporcionaram informações a respeito da atividade do catalisador e de seu intervalo de ativação e desativação, da cinética da polimerização, dos parâmetros da copolimerização e do grau de homogeneidade do copolímero resultante.

Lenzi et al. (2004) realizaram a polimerização do estireno simultaneamente em suspensão e emulsão. A carga inicial adicionada ao reator se refere àquela de uma polimerização em suspensão tradicional, enquanto os constituintes da emulsão foram adicionados ao longo da batelada. Foi observado como as propriedades finais do polímero e o curso da polimerização dependem do momento em que a carga característica da emulsão é adicionada à polimerização em suspensão. Um modelo matemático para representação do sistema também foi apresentado, possuindo este boa concordância com dados experimentais de conversão, pesos moleculares médios e curva de distribuição de pesos moleculares.

Pontes (2005) desenvolveu um modelo matemático dinâmico para descrever o processo contínuo de copolimerização do etileno/1-buteno com catalisador Ziegler-Natta solúvel em um conjunto de reatores de tanque agitado (CSTR) e tubulares. Foram utilizados como base os trabalhos de Embiruçu (1998) e Embiruçu et al. (2000). Dificuldades ocorreram na estimação dos parâmetros cinéticos para a copolimerização devido à grande quantidade destes. Assim, como forma de simplificação, esses parâmetros foram estimados para a homopolimerização do etileno, sendo utilizadas relações provenientes da literatura para descrição das reações cruzadas presentes na copolimerização. O modelo foi validado e testado com dados reais industriais, apresentando resultados satisfatórios. Esse modelo é utilizado como base para a análise do 2° caso de estudo apresentado nesta tese.

II.3 CONTROLE AUTOMÁTICO DE PROCESSOS

A necessidade de obtenção de produtos dentro de certas características impõe aos processos condições de operação pré-determinadas. No entanto, ações externas podem interferir diretamente nos sistemas, gerando perturbações e fazendo com que as variáveis controladas sejam levadas a valores diferentes dos desejados, causando instabilidade ou produzindo um erro estacionário (*offset*). Além disso, é desejado, em determinadas circunstâncias, alterar as condições estacionárias de um processo (mudança de *setpoint*). Assim, variáveis manipuladas devem ser ajustadas de forma a atuarem no sistema para correção dos possíveis desvios. Essas interferências se referem justamente ao foco do controle automático de processos, ou seja, ações devem ser tomadas de modo a manterem as variáveis de saída dos sistemas em seus valores desejados.

De uma maneira geral, podem-se destacar duas classes de necessidades para as quais um sistema de controle é requerido (EMBIRUÇU, 2000):

- 1. Suprimir a influência de perturbações externas: o processo se encontra, em determinado momento, em uma condição de operação estável. Perturbações externas podem, continuamente, influenciá-lo, desviando-o, portanto, do seu valor estacionário, o que pode induzi-lo a uma situação de instabilidade. Deste modo, um sistema de controle é requerido para suprimir os referidos distúrbios, fazendo com que o processo retorne às condições desejadas. Esse objetivo de controle é conhecido como controle regulatório, ou seja, é almejado que o sistema retorne ao *setpoint* (valor objetivado) inicial após as variáveis de saída terem sido desviadas dos respectivos valores desejados;
- 2. Otimizar o desempenho do processo (mudança de *setpoint*): em algumas circunstâncias, é desejada a alteração no *setpoint* do processo em função de determinados objetivos operacionais. Uma configuração de controle também deve ser projetada com essa função. É o que se conhece como controle servo.

Assim, como observado, é imperativa a utilização de sistemas de controle para as mais variadas necessidades. O seu projeto passa pelo cumprimento de várias etapas.

Primeiramente, segundo Luyben (1990), deve-se conhecer o processo o qual se deseja controlar: é preciso identificar as variáveis presentes no sistema, como estas estão correlacionadas, qual o grau de sensibilidade entre elas, quais as possíveis perturbações. É necessário também definir os objetivos de controle, o que se deseja realizar.

Posteriormente, segue-se para a seleção das medições, ou seja, quais variáveis devem ser medidas para monitorar o desempenho operacional da planta. Na sequência, deve-se escolher qual (ou quais) variável deve ser manipulada para controlar o processo. Essa é uma etapa bastante importante para o sucesso do sistema de controle, já que as variáveis manipuladas atuarão diretamente no processo, modificando as condições de operação iniciais. Uma determinada variável controlada não deve ser muito sensível às variações de uma dada variável manipulada, pois uma pequena variação desta produzirá uma grande mudança naquela, nem deve possuir uma pequena sensibilidade, pois serão necessárias grandes variações na variável manipulada para uma mudança amena na variável controlada; assim, a sensibilidade deve ser intermediária de forma a evitar estes possíveis problemas de controle.

A próxima etapa refere-se à seleção da configuração (ou estratégia) de controle. Deve ser definida a estrutura de informação que será usada para conectar as medições disponíveis às variáveis manipuladas. Selecionada a estratégia, deve-se especificar a "lei de controle", ou seja, projetar o controlador, definir de que forma as variáveis manipuladas devem ser modificadas para se alcançar os objetivos desejados.

Finalizando, deve-se realizar a sintonia do controlador, ou seja, selecionar os melhores valores para os seus parâmetros (ajustar). É importante ressaltar que um controlador mal projetado pode instabilizar um processo estável. Logo, ao se realizar o projeto de uma estrutura de controle, é preciso atentar para as possíveis condições de operação as quais o controlador provavelmente estará sujeito.

Em função da imensa importância dos processos de polimerização, conforme já explanado, é fundamental a aplicação de estratégias de controle em tais meios reacionais. A seguir, são mostrados alguns trabalhos relacionados à implementação de controladores em sistemas poliméricos.

Congalidis et al. (1989) desenvolveram um sistema de controle combinado *feedforwardlfeedback* para a copolimerização em solução do metacrilato de metila com acetato de vinila em um CSTR com um *loop* de reciclo. A estrutura *feedforward* foi aplicada no processo para regular a vazão de realimentação, permitindo isolar o reator para a implementação da estratégia *feedback*. Quatro malhas SISO (*Single-Input / Single-Output*) de controle PI (Proporcional-Integrativo) foram avaliadas para regular a taxa de produção, composição do copolímero, peso molecular e temperatura de reação, fornecendo bons resultados. Um modelo matemático fenomenológico detalhado do processo foi apresentado, o qual é utilizado como base para a análise do 1° caso de estudo examinado nesta tese.

Daoutidis et al. (1990) consideraram o controle *feedback/feedforward* de um processo não linear multivariável e aplicaram este a um reator de polimerização simulado.

Estratégias não lineares de controle são apropriadas para processos em batelada, mas esses tipos específicos de controladores são sensíveis a erros nos parâmetros do modelo, limitando assim as suas aplicações. Visando superar essa questão, Wang et al. (1995) aplicaram uma técnica de controle adaptativo de sistemas linearizáveis, junto com um filtro de Kalman estendido, para simular a polimerização do estireno em um reator batelada, analisando as saídas (extensão da reação) na presença de incertezas dos parâmetros do modelo. Os resultados da simulação mostraram que a técnica utilizada pode assegurar o desempenho do sistema de controle, mesmo com a existência de incertezas nos parâmetros de modelagem.

Machado e Bolzan (1998) utilizaram um controlador adaptativo do tipo STC (*Self Tuning Controller*) para controlar a operação de um reator de polimerização em batelada. Aplicando um modelo do processo, foram determinadas as condições de operação necessárias para produzir o polímero com as características desejadas. Variáveis como pesos moleculares médios - numérico e ponderal - e taxa de polidispersão foram usadas como parâmetros de qualidade do polímero. Testes experimentais em uma unidade piloto de poliestireno em suspensão mostraram a capacidade do STC em controlar esse tipo de reator.

Ahn et al. (1998) desenvolveram a modelagem matemática e realizaram a simulação da polimerização do metacrilato de metila em um reator batelada. Mudanças de densidade da mistura reacional e o efeito gel foram considerados. Por meio de dados

experimentais obtidos de uma planta piloto, os autores realizaram a validação do modelo, o monitoramento e o controle do processo, reproduzindo com bastante precisão a trajetória ótima de temperatura do reator que permite obter o polímero com as propriedades desejadas *a priori*.

Gupta e Gupta (1999) realizaram a otimização multiobjetivo de um sistema industrial semi-batelada para a produção do nylon 6. As duas funções objetivo minimizadas referem-se ao tempo total de reação e a concentração de um dímero cíclico indesejado no produto final, enquanto simultaneamente são atingidos valores desejados de conversão e comprimento médio de cadeia. Para isto, foram controladas a fração de abertura da válvula de controle e a temperatura da jaqueta do reator. Soluções ótimas foram obtidas para a fabricação de três diferentes grades de polímero e significativas melhoras foram observadas na operabilidade do sistema.

Fontoura et al. (2003) apresentaram a técnica de espectroscopia NIR (*Near-InfraRed*) para monitoramento e controle da conversão do monômero e dos pesos moleculares médios para a polimerização em solução do estireno. Duas estratégias de controle foram projetadas e os resultados experimentais mostraram ser viável o uso da nova técnica.

Pan e Lee (2003) adotaram um método baseado em histórico de base de dados para ajustar e controlar as condições do processo de polimerização do metacrilato de metila, com base na qualidade do polímero produzido. A polimerização em massa foi realizada em um reator batelada a temperatura constante, e os parâmetros de qualidade considerados pelos autores foram os pesos moleculares médios e o índice de polidispersidade. A predição da temperatura do reator, dos pesos moleculares médios e da polidispersidade obtidas mostraram que o método é robusto e prevê os efeitos da alimentação, batelada a batelada, na qualidade final do produto.

Othman et al. (2004) propuseram uma lei de controle para controlar a concentração de monômero nas partículas de polímero e assegurar simultaneamente a produção de polímero com composição homogênea para processos de homopolimerização, copolimerização e terpolimerização em emulsão. Controladores não lineares baseados em métodos da geometria diferencial foram utilizados para calcular a taxa de fluxo de monômero. Os controladores são baseados na estimação do número de moles do monômero

livre por calorimetria. A técnica foi validada experimentalmente usando os monômeros acrilato de butila, metacrilato de metila e acetato de vinila.

Upreti et al. (2005) realizaram o controle ótimo para a polimerização do metacrilato de metila em um reator batelada não-isotérmico com jaqueta de resfriamento. Diferentes objetivos de controle ótimo foram analisados através da otimização do comportamento de uma determinado variável, simultaneamente com a especificação de uma outra. A temperatura do fluido recirculante na jaqueta do reator foi considerada como uma função de controle de uma variável independente. Os resultados mostraram que a metodologia de controle ótimo pode elevar consideravelmente o desempenho de um processo de polimerização em batelada.

Entretanto, os processos de polimerização possuem dinâmicas bastante complexas, com características fortemente não lineares e variantes no tempo e, por vezes, no espaço. Esses fatores prejudicam enormemente o projeto, com sucesso, de estratégias de controle para tais processos, de modo que a aplicação de controladores clássicos [PID (Proporcional-Integrativo-Derivativo), PI, P (Proporcional)] e convencionais se apresenta de forma muito limitada, já que tais estruturas proporcionam desempenho pouco efetivo como, por exemplo, quando aplicadas a processos multivariáveis, com tempo morto e de comportamento variante. Assim, a aplicação de técnicas de controle avançado em processos de polimerização está crescendo consideravelmente, fato decorrente principalmente do aumento no potencial de cálculo dos computadores digitais, o que possibilitou a aplicação de técnicas de controle moderno, não antes praticáveis devido à lentidão de processamento. Dentre as técnicas de controle avançado, destacam-se as estratégias de controle preditivo baseadas em modelo (MPC), as quais utilizam um modelo dinâmico do processo como parte integrante do sistema de controle. Esses modelos são operados em paralelo com a planta, de modo que os efeitos das variações impostas ao processo sejam mais precisos e rapidamente preditos. Segundo Gobin et al. (1994), as estratégias MPC possuem a propriedade atraente de combinar algoritmos multivariáveis poderosos de controle, com facilidades de execução e simplicidade conceitual.

O sucesso da aplicação de controladores MPC em processos industriais de grande complexidade pode ser atribuído às suas características que atendem às necessidades mais exigentes dos sistemas: otimização de uma função objetivo, tratamento de restrições e adequação a sistemas multivariáveis (MATTEDI, 2003). Assim, são apresentadas, a seguir, algumas referências relacionadas à aplicação do controle preditivo em processos de polimerização.

Peterson et al. (1992) desenvolveram e aplicaram um novo método de controle preditivo baseado em modelo para um reator semi-batelada de polimerização por radical livre do metacrilato de metila. O algoritmo de controle proposto utiliza um modelo não linear explícito do processo e elementos básicos do controle DMC. O modelo do DMC é atualizado para compensar as não linearidades relacionadas.

Gobin et al. (1994) aplicaram o controle DMC para a polimerização do estireno na presença de uma mistura binária de iniciador envolvendo dois reatores tanque agitado contínuos (CSTR) em cascata. Sob determinadas circunstâncias, tal sistema exibe múltiplos estados estacionários e comportamento instável em malha aberta, o que dificulta o controle de temperatura. O controle é obtido manipulando as taxas de fluxo do líquido refrigerante que circula dentro dos revestimentos dos reatores. O projeto do controlador DMC foi baseado na linearização de um modelo dinâmico em torno de um ponto de operação estável em "malha aberta", e a execução de seu algoritmo foi realizada usando uma formulação padrão. O controle DMC teve seu desempenho comparado ao PID convencional na forma digital.

Sriniwas et al. (1995) investigaram a estimação e controle de um processo industrial de polimerização, que apresenta características não lineares. A maioria das técnicas de estimação disponíveis não são facilmente aplicáveis devido ao grande esforço computacional envolvido. Assim, um novo estimador é apresentado, sendo este implementado internamente a um algoritmo de controle preditivo não linear baseado em modelo (NLMPC – *Non Linear Model Predictive Control*). A combinação estimador-controlador apresentou bons resultados para alguns problemas práticos de controle.

Meziou et al. (1996) avaliaram o desempenho do controlador DMC através de simulação para um reator CSTR de polimerização do etileno/propileno/dieno. Foram controladas a composição do etileno, a composição do dieno e a viscosidade Mooney do produto polimérico, através de manipulação das vazões dos monômeros (etileno e dieno) e do agente de transferência de cadeia (hidrogênio). Os resultados da simulação mostraram a excelente capacidade do DMC para controlar a qualidade do produto durante mudanças de

setpoint em suas especificações (controle servo) e de mudanças na taxa de produção e na atividade catalítica (controle regulatório). O controle DMC apresentou desempenho superior a estratégias de controle convencionais e aparece como uma alternativa promissora para tais sistemas reacionais.

Vega et al. (1997) aplicaram um controlador preditivo baseado em modelo para a polimerização em solução do estireno via radical livre em reatores tubulares. Um modelo neural-híbrido foi utilizado como modelo interno na configuração de controle e mostrou ser uma boa representação do sistema. O controlador apresentou resultados satisfatórios no controle da conversão do monômero.

Yüce et al. (1999) investigaram, experimentalmente e por simulações, a aplicação do controlador DMC em um reator batelada de polimerização em solução para controlar o comprimento de cadeia numérico médio e a conversão em um tempo mínimo. As variáveis do processo foram a temperatura de reação e a concentração de iniciador. O desempenho do DMC foi comparado ao do controlador IMC (*Internal Model Control*), apresentando resultados satisfatórios para ambas as técnicas.

Chae et al. (2000) reformularam uma algoritmo denominado QBMPC (*Quality control-combined Batch Model Predictive Control*), o qual se baseia na combinação do controle de qualidade do produto e no monitoramento de processos em reatores batelada. A polimerização do metacrilato de metila foi analisada, sendo consideradas condições de variação temporal e espacial. As variáveis de controle do produto foram o peso molecular médio, o índice de polidispersidade e a conversão final do monômero. Os resultados finais do trabalho mostraram que a técnica melhorada QBMPC descreve com sucesso os três itens de qualidade definidos, superando incertezas do algoritmo inicial.

Silva e Oliveira (2002) utilizaram a estrutura de controle preditivo MPC para otimização de sistemas de polimerização. A técnica forneceu uma metodologia eficiente e bem-integrada para a supervisão ótima de processos químicos descontínuos. Foram consideradas para análise de aplicação a polimerização em suspensão do cloreto de vinila e a polimerização em solução do metacrilato de metila. São mostradas vantagens do método em termos de ganho de produtividade e potencialidade de manufatura dos produtos com propriedades pré-especificadas.

Park e Rhee (2003) aplicaram um controlador preditivo MPC não linear baseado no filtro de Kalman estendido para controlar propriedades do polímero proveniente de um reator semi-batelada de copolimerização do metacrilato de metila com o metacrilato. Os resultados experimentais demonstraram a superioridade da estratégia de controle proposta quando comparada com outras técnicas previamente testadas.

Özkan et al. (2006) implementaram um sistema de controle preditivo generalizado não linear (NLGPC - *Non Linear Generalized Predictive Control*) para controlar a temperatura de um tanque bem misturado, com jaqueta, sob mudanças de *setpoint*. Um sistema polimérico foi utilizado para aplicação da estratégia proposta e o controlador projetado teve seu desempenho comparado ao controlador preditivo generalizado linear (LGPC - *Linear Generalized Predictive Control*).

Khaniki et al. (2007) descreveram a aplicação de um controlador preditivo baseado em modelo para controlar a temperatura da polimerização do metacrilato de metila em um reator batelada. Tal estrutura de controle consiste de duas partes: um controlador não linear GLC (*Global Linearizing Control*), para gerar um modelo do sistema, e um controlador MPC, para obter a seqüência de controle ótimo da variável de entrada. A temperatura do reator foi ajustada para acompanhar uma trajetória de temperatura pré-determinada através de sinais de entrada. Os resultados das simulações mostraram que a abordagem proposta é eficiente e robusta.

II.4 SISTEMAS NEBULOSOS

A teoria dos conjuntos nebulosos foi desenvolvida por Lotfi Zadeh (1965) para tratar do aspecto vago da informação. Quando utilizada em um contexto lógico, como o de sistemas baseados em conhecimento, é conhecida como lógica nebulosa ou lógica *fuzzy*.

A lógica nebulosa é uma das tecnologias atuais mais bem sucedidas para o desenvolvimento de estruturas de controle para processos sofisticados (SANDRI, CORREA, 1999). Ela está relacionada com os princípios formais do raciocínio aproximado, possuindo a capacidade de permitir a inclusão de informações do processo na formulação do modelo matemático. O uso de sistemas construídos desta maneira é especialmente interessante quando o modelo está sujeito a incertezas, como no caso dos processos de polimerização, os quais são caracterizados por comportamentos pouco precisos e de difícil

modelagem matemática. Sala et al. (2005) destacam a pesquisa atual como direcionada quase que exclusivamente para métodos de modelagem e controle nebulosos, apresentando a lógica nebulosa como uma técnica de grandes potencialidades. Nos parágrafos seguintes, são apresentados alguns trabalhos referentes à aplicação de sistemas nebulosos para processos poliméricos.

Vaija et al. (1985) aplicaram a lógica nebulosa no desenvolvimento de modelos de detecção de falhas e controle de segurança para processos com modelos matemáticos incertos e de pobre exatidão. Um processo hipotético de polimerização foi utilizado para demonstrar a aplicação dos novos modelos.

Hagimori et al. (1991) construíram um simulador para a polimerização contínua em massa do poliestireno em um tanque agitado, o qual examina a não-homogeneidade da temperatura e a concentração no sentido do fluxo. Foram aplicados controladores *fuzzy* mono e multivariáveis, sendo investigada a escolha de variáveis operacionais e a inferência da base de regras do controle nebuloso para mudanças na conversão. O controlador *fuzzy* multivariável apresentou um desempenho superior ao monovariável com manipulação da temperatura de resfriamento do reator.

Roffel e Chin (1991) aplicaram princípios de controle *fuzzy* para um reator de polimerização. Os autores destacam a potencialidade da aplicação dos controladores nebulosos a tais processos devido à presença de comportamentos não lineares variantes no tempo e com baixa freqüência de medição. Ótimos resultados de controle foram obtidos para situações em que o modelo do processo era inviável e impraticável para posterior implementação de técnicas de controle convencionais. O desvio-padrão das propriedades de interesse do polímero foi reduzido em mais de 40%.

Ni et al. (1997) desenvolveram uma estrutura de controle *Fuzzy*-Híbrida-PID*feedback* (FH-PID) para um reator batelada de polimerização altamente exotérmica. O reator é definido como um tanque de mistura e uma geração interna de calor foi considerada como possível distúrbio. A saída da parte *fuzzy*-híbrida é usada para ajustar o *setpoint* do controlador PID de forma a compensar o efeito da perturbação, o que faz com que a porção híbrida não influencie a estabilidade do sistema de controle PID original. Um modelo *fuzzy* foi construído para estimar o calor de reação dentro do bloco *fuzzy*-híbrido e seus parâmetros foram estimados através da resposta transiente do processo obtida com um controlador PID convencional. A estratégia FH-PID foi aplicada para controle de temperatura das polimerizações batelada em solução e batelada em emulsão inversa da acrilamida. Os resultados obtidos comprovaram a eficácia da estratégia proposta para o controle de processos de polimerização em batelada.

Hwang et al. (1998) aplicaram um algoritmo de controle *fuzzy*-PID para a copolimerização térmica em solução do estireno e acrilonitrila em um CSTR. Um modelo matemático foi inicialmente desenvolvido e mostrou prever muito bem o comportamento industrial sob diversas condições operacionais. Este modelo é utilizado para cálculo da conversão, da composição do copolímero, do peso molecular ponderal médio e da polidispersão; além disso, permite determinar as propriedades finais do polímero em função de mudanças nos parâmetros de operação. A partir de uma análise dinâmica do processo, o controlador proposto foi desenvolvido e utilizado para controle da conversão para ambos os problemas servo e regulatório, apresentando resultados bastante satisfatórios e demonstrando facilidade de implementação.

Asua (2001) implementou um controlador hierárquico baseado em modelo composto por sistemas *fuzzy* para a copolimerização em emulsão do estireno com o acrilato de butila. A lógica *fuzzy* foi utilizada para determinar a trajetória ótima, enquanto o controlador baseado em modelo foi aplicado para seguir esta trajetória.

Hanai et al. (2003) construíram um modelo *fuzzy* baseado em redes neurais para estimar características físico-químicas do polibutadieno a fim de determinar condições iniciais de preparação do polímero. Na construção do modelo, as relações entre as condições operacionais do processo com as características físico-químicas do polímero foram obtidas a partir de regras do tipo SE-ENTÃO.

Altinten et al. (2003) implementaram um método de controle *fuzzy* com algoritmo genético (GA – *Genetic Algorithm*) para controlar a temperatura ótima de um reator batelada, com jaqueta, de polimerização via radical livre. Usando parâmetros *fuzzy* obtidos para três perfis de temperatura ótima diferentes, a eficiência do controlador proposto foi examinada por simulação e experimentalmente. Foi observado que o GA, empregado para otimizar o desempenho de controle, é capaz de ajustar eficientemente o controlador *fuzzy* para as mais diversas situações e, conseqüentemente, controlar a temperatura do reator de polimerização.

Antunes et al. (2005) projetaram e testaram experimentalmente um algoritmo de controle *fuzzy*-PID para controlar a temperatura de um reator batelada de polimerização do metacrilato de metila. No projeto do controlador, o conhecimento obtido do procedimento da curva de reação do processo foi empregado para a determinação das funções de pertinência da estrutura nebulosa, e um filtro digital foi aplicado com sucesso a fim de corrigir o comportamento oscilatório da temperatura. A configuração proposta foi comparada ao PID convencional, na forma de velocidade, para a análise do problema regulatório, demonstrando ser mais apropriada e de mais confiança para o controle em processos de polimerização.

Solgi et al. (2006) apresentaram uma generalização dos controladores *fuzzy* de Takagi-Sugeno. Nessa generalização, todas (ou algumas) as entradas dos controladores *fuzzy* são números nebulosos. O controlador proposto foi aplicado para o controle de temperatura de um reator batelada de polimerização em solução do metacrilato de metila, o qual usa o erro da temperatura da jaqueta em adição ao erro da temperatura do reator. No entanto, a temperatura desejada da jaqueta é afetada por ruídos e perturbações, o que provoca incertezas quanto ao valor desejado dessa variável. Números *fuzzy* são aplicados para modelar essa incerteza e uma trajetória *fuzzy* foi obtida para a temperatura desejada da jaqueta. Resultados experimentais evidenciaram o bom desempenho da nova proposta.

Lima et al. (2007) expuseram um procedimento alternativo para o desenvolvimento de modelos cognitivos a partir da lógica *fuzzy*. A copolimerização em solução do metacrilato de metila com acetato de vinila em um CSTR foi utilizada para demonstrar a aplicação do método. Um planejamento fatorial foi realizado para discriminar os efeitos das variáveis de entrada sobre as variáveis de saída do processo e, de posse dos resultados, modelos cognitivos dinâmicos MISO (*Multiple-Input / Single-Output*) baseados em relações *fuzzy* tipo Takagi-Sugeno foram gerados para a taxa de produção, composição do copolímero, peso molecular e temperatura de reação, demonstrando capacidades preditivas bastante satisfatórias.

Lima et al. (2009) projetaram um controlador híbrido *fuzzy*-preditivo para processos de polimerização. A copolimerização industrial do eteno/1-buteno com catalisador Ziegler-Natta solúvel, em um conjunto de reatores de tanque agitado (CSTR) e tubulares, foi considerada como caso de estudo para validar os desenvolvimentos propostos. Uma malha

SISO (*Single-Input / Single-Output*) foi considerada para o controle de peso molecular, sendo analisados os problemas regulatório e servo. A estratégia sugerida foi comparada ao DMC, apresentando resultados altamente promissores.

Lima et al. (2010a) demonstraram a formulação de modelos *fuzzy* para o processo de destilação molecular de resíduos pesados de petróleo. Dados experimentais foram aplicados na construção dos modelos, de modo a complementar os provenientes da modelagem fenomenológica. Modelos dinâmicos MISO baseados em relações *fuzzy* tipo Takagi-Sugeno foram gerados para a temperatura, espessura de filme, perfis de concentração e fluxo de destilado, possuindo excelente concordância com a modelagem baseada nos primeiros princípios.

Lima et al. (2010b) explanaram o desenvolvimento de um sistema de controle preditivo multivariável, baseado em modelos *fuzzy* tipo Takagi-Sugeno, para a copolimerização em solução do metacrilato de metila com acetato de vinila em um CSTR com um *loop* de reciclo. Um controlador *feedforward* foi aplicado no processo para regular a vazão de realimentação, de modo a isolar o reator para a implementação do controle proposto. A taxa de produção, composição do copolímero, peso molecular e temperatura de reação foram avaliados para os problemas regulatório e servo. A configuração delineada foi comparada ao DMC, apresentando desempenho satisfatório.

II.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Os processos de polimerização são de grande importância no campo da indústria de transformação, gerando materiais das mais diversas características e aplicações. Não obstante, tais sistemas apresentam dinâmicas bastante complexas, muitas vezes impraticáveis de serem modeladas com a precisão necessária e desejada, fato que dificulta grandemente o desenvolvimento de configurações de controle. Deste modo, pesquisas estão sendo direcionadas na procura por representações mais exatas e controladores mais eficazes para processos poliméricos.

Destarte, o objetivo deste capítulo foi apresentar alguns trabalhos presentes na literatura relacionados à investigação de processos de polimerização, sendo dada maior ênfase àqueles referentes à aplicação de técnicas de controle avançado, mais especificamente, das estratégias de controle preditivo baseadas em modelo (MPC). Entretanto, para seu projeto, é necessária a utilização de modelos representativos das dinâmicas do processo a ser controlado, o que faz com que a aplicação de técnicas não lineares de modelagem através de sistemas nebulosos se apresente como um caminho interessante a ser focado. Com esse objetivo, também foram analisadas referências abordando com sucesso a aplicação de técnicas de modelagem e controle nebuloso em processos de polimerização, de forma que a integração das duas vertentes - controle preditivo e sistemas nebulosos - será objetivada ao longo deste trabalho.

<u>CAPÍTULO III</u> SISTEMAS NEBULOSOS

III.1 INTRODUÇÃO

Muitos dos problemas práticos em engenharia se relacionam, em algum nível, com conceitos de imprecisão e incerteza. Seja na modelagem de um processo, no projeto de equipamentos ou na construção de configurações de controle, sempre haverá simplificações de modo a tornarem viáveis os procedimentos realizados. Até que ponto vão essas simplificações sem prejudicar a qualidade das ações é algo não muito bem compreendido, pois depende de cada caso e das necessidades desejadas em determinada situação. Por exemplo, na maioria das vezes, maior precisão, nem sempre necessária, requer maiores custo e disponibilidade de tempo, nem sempre acessíveis.

Visando o melhor tratamento desses conceitos, Lotfi Zadeh (1965) introduziu a teoria dos conjuntos *fuzzy*. Segundo Klir e Yuan (1995), os trabalhos de Zadeh (1965) tiveram uma grande influência no pensamento sobre o conceito de incerteza até então, pois definia não somente a teoria de probabilidade como a única representação para a incerteza, mas também os fundamentos sobre os quais esta teoria foi baseada. Posteriormente, por volta de 1978, Zadeh ilustrou a teoria de possibilidades como um caso especial da teoria dos conjuntos *fuzzy*, visando a diminuição das limitações provenientes da definição de probabilidade, o que possibilitou o tratamento tanto da imprecisão quanto da incerteza de um conjunto de informações em um único ambiente formal (SANDRI, CORREA, 1999).

A partir da teoria dos conjuntos *fuzzy*, surgiu a definição de sistemas nebulosos, os quais têm sido cada vez mais utilizados para o tratamento de informações com os mais diversos objetivos, seja na automação de sistemas, na modelagem de processos, no auxílio à decisão, entre outras aplicações. De acordo com Ross (2004), os sistemas nebulosos apresentam grande utilidade quando aplicados em dois contextos gerais: (1) em situações envolvendo sistemas altamente complexos, cujos comportamentos não são bem entendidos, e (2) em circunstâncias onde uma aproximação, obtida em um menor tempo de modelagem, é permitida. O contexto (1) aplica-se diretamente aos processos de polimerização, os quais são analisados nesta tese, reforçando ainda mais os objetivos previamente propostos.

Um sistema nebuloso, quando aplicado no âmbito no âmbito de tomada de decisões, pode ser sintetizado por duas abordagens distintas (PEDRYCZ, GOMIDE, 2007):

através do conhecimento que o especialista detém acerca do processo (quando então recebe a denominação de abordagem *top-down* ou *expert-driven*) ou a partir de dados de entrada/saída amostrados do processo que se quer modelar (quando então recebe a denominação de abordagem *bottom-up* ou *data-driven*). A aplicação conjunta de ambas as abordagens também é possível, sendo esta denotada de abordagem 'híbrida'. No presente trabalho, a abordagem *bottom-up* ou *data-driven* será adotada para o desenvolvimento dos modelos nebulosos funcionais referentes aos dois processos considerados.

Assim, este capítulo tem por finalidade apresentar os conceitos básicos da teoria dos sistemas nebulosos, os quais são imprescindíveis para o entendimento da seqüência desse trabalho. Inicialmente, são discutidas definições gerais básicas sobre conjuntos nebulosos (seção III.2). Na seção III.3 é realizado um estudo detalhado sobre funções de pertinência, sendo apresentados os seus principais tipos e características. Na seqüência, são demonstradas as principais operações (seção III.4) e propriedades (seção III.5) dos conjuntos nebulosos, sendo também definidas relações nebulosas e operadores de implicação (seção III.6). Posteriormente, é introduzido o conceito de variáveis lingüísticas (seção III.7) e a estrutura básica de um modelo nebuloso é mostrada, sendo enfocados os procedimentos de "fuzzificação", inferência e "defuzzificação" (seção III.8). O capítulo é finalizado com uma breve apresentação das classes de modelos nebulosos na seção III.9.

III.2 CONCEITOS BÁSICOS

Um conjunto nebuloso *A* do universo de discurso (espaço onde estão definidos os elementos do conjunto) *X* é definido por uma função de pertinência $\mu_A : X \rightarrow [0,1]$. Essa função associa a cada elemento *x* de *X* o grau $\mu_A(x)$, com o qual *x* pertence a *A* (ZADEH, 1965; ESPINOSA, 2005). $\mu_A(x)$ indica o grau de compatibilidade entre *x* e o conceito expresso por *A*:

- $\mu_A(x) = 1$ indica que *x* é completamente compatível com *A*;
- $\mu_A(x) = 0$ indica que x é completamente incompatível com A;
- $0 < \mu_A(x) < 1$ indica que *x* é parcialmente compatível com *A*, com grau $\mu_A(x)$.

Como observado, a pertinência para um conjunto nebuloso pode ser aproximada, de modo que possa haver um número infinito de graus de pertinência entre os limites do intervalo (0 e 1). Para um conjunto clássico *B*, também denominado de *crisp*, entretanto, tem-se uma pertinência binária do tipo "sim" ou "não", "pertence" ou "não-pertence", ou seja, $\lambda_B : X \to \{0,1\}$, representada matematicamente pela função III.1, onde λ representa a pertinência de um determinado elemento *x* de *X* para um conjunto *crisp*:

$$\lambda_B(x) = \begin{cases} 1, se \ x \in B \\ 0, se \ x \notin B \end{cases}$$
(III.1)

Assim, um conjunto *crisp* pode ser definido como um conjunto nebuloso específico para o qual a pertinência é total ou nula.

As particularidades dos conjuntos *crisp* e nebulosos estão justamente nas suas funções de pertinência: um conjunto *crisp* possui sempre uma única função de pertinência, já um conjunto nebuloso pode ter um número infinito de funções de pertinência para representá-lo, ganhando este mais flexibilidade e permitindo ajustá-las de modo a maximizar o uso para uma determinada aplicação (ROSS, 2004). É importante destacar que pode haver sobreposição de informações entre conjuntos nebulosos, ou seja, dois conjuntos nebulosos podem ser sobrepostos em um mesmo universo devido à pertinência de um dado elemento x em um determinado conjunto não necessitar ser completa, o que não é possível com conjuntos *crisp*.

Para exemplificar a diferença entre os dois conceitos, a variável "altura" é ilustrada nas figuras III.1 e III.2, descrevendo, respectivamente, a representação do conceito "pessoa com altura mediana" para um conjunto *crisp* e nebuloso. Como pode ser visto, o conjunto *crisp B* não representa em sua totalidade a definição "pessoa com altura mediana", pois um indivíduo com uma altura de 1,59 m ou 1,81 m, por exemplo, seria completamente incompatível com esse conceito, isto é, teria pertinência igual a 0 para o conjunto. Analisando agora o conjunto nebuloso *A*, observa-se que qualquer pessoa com uma altura entre 1,60 e 1,80 m possui altura mediana, acima de 1,90 m e abaixo de 1,50 m não é considerada com altura mediana, e nos intervalos [1,50;1,60] e [1,80;1,90] possui parcialmente altura mediana, com grau tanto maior quanto mais próxima de 1,60 e 1,80 m é a sua altura.



Figura III.1. Função característica do conjunto crisp "pessoa com altura mediana".



Figura III.2. Função trapezoidal característica do conjunto nebuloso "pessoa com altura mediana".

Um conjunto nebuloso *A* em um universo de discurso *X* discreto e finito pode ser representado pela seguinte notação:

$$A = \left\{ \frac{\mu_A(x_1)}{x_1} + \frac{\mu_A(x_2)}{x_2} + \cdots \right\} = \left\{ \sum_i \frac{\mu_A(x_i)}{x_i} \right\}$$
(III.2)

Quando o universo X é contínuo e infinito, o conjunto nebuloso A é denotado por:

$$A = \left\{ \int \frac{\mu_A(x)}{x} \right\}$$
(III.3)

Em ambas as notações, a linha horizontal não é um quociente, representa apenas um delimitador. O numerador em cada termo é o valor de pertinência ao conjunto nebuloso *A* associado com o elemento do universo de discurso indicado no denominador. Na primeira notação, o símbolo "+" não representa uma soma algébrica, mas sim um operador de agregação. Do mesmo modo, na segunda notação, o sinal de integral não é uma integral algébrica, mas um operador de agregação contínuo para variáveis contínuas.

Pode-se ainda definir a cardinalidade de um conjunto nebuloso A como:

• Para X discreto \rightarrow

$$A\Big| = \sum_{x \in X} \mu_A(x) \tag{III.4}$$

• Para X contínuo \rightarrow

$$A\Big| = \int_{X} \mu_A(x) dx \tag{III.5}$$

III.3 FUNÇÕES DE PERTINÊNCIA

Será observado, no decorrer deste capítulo, que os procedimentos de modelagem e controle nebuloso se iniciam com a etapa de "fuzzificação", a qual transforma entradas *crisp* em valores nebulosos. Essa ação é realizada pelas funções de pertinência. Assim, é interessante um estudo mais detalhado sobre este tipo de função.

Uma função de pertinência pode ser definida através de um conjunto de pares ordenados $\{\mu_A(x)/x\}$, onde $x \in X$. Elas compreendem todas as informações contidas em seus respectivos conjuntos nebulosos. Podem possuir várias formas e são tipicamente definidas em um universo unidimensional, sendo, então, representadas por curvas; mas podem também ser expressas em duas ou mais dimensões, onde as curvas geram superfícies e hiper-superfícies, respectivamente. O tipo de função de pertinência utilizado em uma dada aplicação pode influir diretamente na qualidade dos resultados objetivados em uma determinada proposta; deste modo, cada sistema deve ser analisado particularmente de forma a ser selecionada a melhor opção.

III.3.1 Tipos

Existem vários tipos de funções de pertinência. As mais utilizadas são (WANG, 1996; PEDRYCZ, GOMIDE, 1998):

6.

1. Função triangular:

$$\mu_{A}(x) = \begin{cases} 0, se \ x \le a \\ \frac{x-a}{m-a}, se \ x \in [a,m] \\ \frac{b-x}{b-m}, se \ x \in [m,b] \\ 0, se \ x \ge b, \end{cases}$$
(III.6)

onde *m* é o valor modal, e *a* e *b* são, respectivamente, os limites superior e inferior. A figura III.3 mostra a representação deste tipo de função.

2. Função Γ :

$$\mu_{A}(x) = \begin{cases} 0, se \ x \le a \\ 1 - e^{-k(x-a)^{2}}, se \ x > a \end{cases}$$
(III.7)

ou

$$\mu_{A}(x) = \begin{cases} 0, se \ x \le a \\ \frac{k(x-a)^{2}}{1+k(x-a)^{2}}, se \ x > a, \end{cases}$$
(III.8)

onde k > 0, sendo representada na figura III.4 (equação III.7).



Figura III.3. Função triangular com a = -1,5, m = 1,0 e b = 3,5.



Figura III.4. Função Γ com k = 2,0 e a = 1,0.

3. Função S:

$$\mu_{A}(x) = \begin{cases} 0, se \ x \le a \\ 2\left(\frac{x-a}{b-a}\right)^{2}, se \ x \in [a,m] \\ 1 - 2\left(\frac{x-b}{b-a}\right)^{2}, se \ x \in [m,b] \\ 1, se \ x > b, \end{cases}$$
(III.9)

conforme representada na figura III.5.

4. Função trapezoidal:

$$\mu_{A}(x) = \begin{cases} 0, se \ x < a \\ \frac{x-a}{m-a}, se \ x \in [a,m] \\ 1, se \ x \in [m,n] \\ \frac{b-x}{b-n}, se \ x \in [n,b] \\ 0, se \ x > b, \end{cases}$$
(III.10)

sendo *n* também um valor modal. Esta função já foi apresentada na figura III.2, com a = 1,5, m = 1,6, n = 1,8 e b = 1,9.

5. Função em forma de sino:

$$\mu_{A}(x) = \frac{1}{1 + \left|\frac{x - m}{a}\right|^{2b}}$$
(III.11)

Esta função é representada na figura III.6.



Figura III.5. Função S com a = -1,0, m = 1,5 e b = 3,0.



Figura III.6. Função em forma de sino com a = 2,0, b = 2,0 e m = 2,0.
6. Função sigmoidal:

$$\mu_A(x) = \frac{1}{1 + e^{-k(x-m)}}$$
(III.12)

Esta função é apresentada na figura III.7.

7. Função "exponential-like":

$$\mu_A(x) = \frac{1}{1 + k(x - m)^2}, \text{ para } k > 1,$$
(III.13)

ou

$$\mu_A(x) = \frac{k(x-m)^2}{1+k(x-m)^2}, \text{ para } k > 0,$$
(III.14)

conforme mostrada na figura III.8 (equação III.13).

8. Função gaussiana:

$$\mu_A(x) = \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-c}{\sigma}\right)^2\right]$$
(III.15)

onde *c* é o centro da função de pertinência e σ é o seu desvio-padrão. Este tipo de função de pertinência foi utilizado neste trabalho para o desenvolvimento dos modelos nebulosos, pois, segundo Mattedi (2003), esta função analítica possui a vantagem da existência da função derivada $\left(\frac{d\mu(x)}{dx}\right)$ para todo o domínio, fator que pode ser necessário quando o modelo é empregado em uma etapa de otimização, como é o caso das técnicas de controle preditivo. O comportamento de uma função gaussiana típica é representado na figura III.9.



Figura III.7. Função sigmoidal com k = 1,0 e m = 2,0.



Figura III.8. Função "*exponential-like*" com k = 2,0 e m = 1,0.



Figura III.9. Função gaussiana com c = 2,0 e $\sigma = 2,0$.

III.3.2 Características

Já foi definido, anteriormente, que todas as informações contidas nos conjuntos nebulosos são descritas por suas respectivas funções de pertinência. Logo, é importante definir alguns termos utilizados para descrever características especiais desse tipo de função. Os conceitos apresentados a seguir referem-se a conjuntos nebulosos contínuos, mas aplicam-se igualmente para conjuntos nebulosos discretos.

O núcleo de uma função de pertinência para um determinado conjunto nebuloso A é definido como a região do universo caracterizada pela pertinência completa ao conjunto A, isto é, o núcleo compreende todos os elementos x do universo tais que $\mu_A(x) = 1$.

O suporte de uma função de pertinência para um conjunto nebuloso *A* é definido como a região do universo que agrupa elementos de alguma forma compatíveis com o conceito expresso por *A*, isto é, o suporte compreende todos os elementos *x* do universo tais que $\mu_A(x) > 0$.

Os **limites** (fronteiras) de uma função de pertinência para um dado conjunto nebuloso *A* são definidos como a região do universo que contém elementos com pertinência

parcial ao conjunto *A*, isto é, os limites compreendem todos os elementos *x* do universo tais que $0 < \mu_A(x) < 1$.

A **altura** para um dado conjunto nebuloso *A* é definida como o maior grau de compatibilidade dos elementos de *X* em relação ao conceito expresso por *A*, isto é, a altura representa o valor máximo de $\mu_A(x)$.

Um conjunto nebuloso é dito **normal** se sua função de pertinência possui ao menos um elemento x do universo com pertinência unitária, ou seja, um conjunto nebuloso estará normalizado se e somente se sua altura for igual a 1. Para situações em que a altura seja menor que 1, o conjunto nebuloso é definido como **subnormal**.

Um elemento é definido como **protótipo** de um conjunto nebuloso normal quando somente ele possui um valor de pertinência igual a 1.

Para todo $x_1 e x_2 \in X$, um conjunto nebuloso A é dito **convexo** se:

$$\mu_{A}(kx_{1} + (1 - k)x_{2}) \ge \min(\mu_{A}(x_{1}), \mu_{A}(x_{2}))$$
(III.16)

onde $k \in [0,1]$ e *min* caracteriza o *operador mínimo* (menor valor em um conjunto de valores).

Os **pontos de** *crossover* de uma função de pertinência são definidos como os elementos do universo para os quais a pertinência a um conjunto nebuloso *A* é igual a 0,5, ou seja, para os quais $\mu_A(x) = 0,5$.

Um número nebuloso é definido como um conjunto nebuloso convexo e normalizado.

III.4 OPERAÇÕES COM CONJUNTOS NEBULOSOS

Muitas vezes é desejável a combinação entre conjuntos nebulosos de maneira a ser produzido um único conjunto nebuloso. Isto é possibilitado através das operações entre conjuntos nebulosos. As principais são a união, a intersecção e o complemento, sendo definidas através das funções de pertinência dos respectivos conjuntos. Essas operações são apresentadas a seguir.

III.4.1 União

A união entre conjuntos nebulosos é implementada por uma família de operadores denominados de *s*-normas ou *t*-conormas (co-normas triangulares). Uma *s*-norma, representada genericamente por *s*, é um operador *s*: $[0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$ que mapeia os graus de pertinência de dois determinados conjuntos nebulosos *A* e *B* conforme a definição:

$$s[\mu_A(x), \mu_B(x)] = \mu_{A \cup B}(x)$$
 (III.17)

As *s*-normas são empregadas para definir disjunções em um raciocínio aproximado. Elas devem satisfazer as seguintes propriedades (DUBOIS, PRADE, 1985):

- s(1, 1) = 1, $s(\mu_A(x), 0) = s(0, \mu_A(x)) = \mu_A(x)$ (elemento neutro = 0);
- $s(\mu_A(x), \mu_B(x)) = s(\mu_B(x), \mu_A(x))$ (comutatividade);
- $s(\mu_A(x), \mu_B(x)) \le s(\mu_C(x), \mu_D(x))$ se $\mu_A(x) \le \mu_C(x)$ e $\mu_B(x) \le \mu_D(x)$ (monotonicidade);

•
$$s(\mu_A(x), s(\mu_B(x), \mu_C(x))) = s(s(\mu_A(x), \mu_B(x)), \mu_C(x))$$
 (associatividade);

sendo C e D conjuntos nebulosos.

As s-normas mais utilizadas são:

1. Máximo:

$$s[\mu_A(x),\mu_B(x)] = max[\mu_A(x),\mu_B(x)]$$
 (III.18)

A *s*-norma "máximo" produz o menor valor de pertinência de todas as *s*-normas. Suas características previnem a combinação de erros nos operandos (KLIR, YUAN, 1995), o que não ocorre para a maioria das outras *s*-normas.

2. Soma algébrica:

$$s[\mu_A(x), \mu_B(x)] = \mu_A(x) + \mu_B(x) - \mu_A(x)\mu_B(x)$$
(III.19)

3. Soma limitada:

$$s[\mu_A(x), \mu_B(x)] = min[1, \mu_A(x) + \mu_B(x)]$$
(III.20)

4. Soma drástica:

$$s[\mu_{A}(x),\mu_{B}(x)] = \begin{cases} \mu_{A}(x), se \ \mu_{B}(x) = 0\\ \mu_{B}(x), se \ \mu_{A}(x) = 0\\ 1, caso \ contrário \end{cases}$$
(III.21)

III.4.2 Intersecção

A intersecção entre conjuntos nebulosos é implementada por uma família de operadores denominados de *t*-normas (normas triangulares). Uma *t*-norma, representada genericamente por *t*, é um operador *t*: $[0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$ que mapeia os graus de pertinência de dois determinados conjuntos nebulosos *A* e *B* conforme a definição:

$$t[\mu_A(x), \mu_B(x)] = \mu_{A \cap B}(x) \tag{III.22}$$

As *t*-normas são empregadas para definir conjunções em um raciocínio aproximado. Elas devem satisfazer as seguintes propriedades (DUBOIS, PRADE, 1980):

- $t(0, 0) = 0, t(\mu_A(x), 1) = t(1, \mu_A(x)) = \mu_A(x)$ (elemento neutro = 1);
- $t(\mu_A(x), \mu_B(x)) = t(\mu_B(x), \mu_A(x))$ (comutatividade);
- $t(\mu_A(x), \mu_B(x)) \le t(\mu_C(x), \mu_D(x))$ se $\mu_A(x) \le \mu_C(x)$ e $\mu_B(x) \le \mu_D(x)$ (monotonicidade);
- $t(\mu_A(x), t(\mu_B(x), \mu_C(x))) = t(t(\mu_A(x), \mu_B(x)), \mu_C(x))$ (associatividade);

sendo *C* e *D* conjuntos nebulosos.

As *t*-normas mais utilizadas são:

1. Mínimo:

$$t[\mu_{A}(x),\mu_{B}(x)] = min[\mu_{A}(x),\mu_{B}(x)]$$
(III.23)

A *t*-norma "mínimo" produz o maior valor de pertinência de todas as *t*-normas. Suas características também previnem a combinação de erros nos operandos (KLIR, YUAN, 1995), o que não ocorre para a maioria das outras *t*-normas. 2. Produto algébrico:

$$t[\mu_{A}(x), \mu_{B}(x)] = \mu_{A}(x)\mu_{B}(x)$$
(III.24)

3. Produto limitado:

$$t[\mu_A(x), \mu_B(x)] = max[0, \mu_A(x) + \mu_B(x) - 1]$$
(III.25)

4. Produto drástico:

$$t[\mu_{A}(x),\mu_{B}(x)] = \begin{cases} \mu_{A}(x), se \ \mu_{B}(x) = 1\\ \mu_{B}(x), se \ \mu_{A}(x) = 1\\ 0, caso \ contrário \end{cases}$$
(III.26)

III.4.3 Complemento

Um complemento nebuloso, representado genericamente por *c*, é um operador *c*: $[0,1] \rightarrow [0,1]$ que mapeia os graus de pertinência de um determinado conjunto nebuloso *A* conforme a definição:

$$c[\mu_A(x)] = \mu_{\overline{A}}(x) \tag{III.27}$$

A função c deve satisfazer as seguintes propriedades (PUCCIARELLI, 2005):

sendo B um conjunto nebuloso.

O complemento nebuloso mais utilizado é o "complemento de 1", expresso por:

$$\mu_{\bar{A}}(x) = 1 - \mu_{A}(x)$$
(III.28)

III.5 PROPRIEDADES DOS CONJUNTOS NEBULOSOS

Considerando A, $B \in C$ conjuntos nebulosos definidos no universo de discurso X, as propriedades dos conjuntos nebulosos mais freqüentemente utilizadas são:

1. Comutatividade:

$$A \cup B = B \cup A$$

$$A \cap B = B \cap A$$
(III.29)

2. Associatividade:

$$A \cup (B \cup C) = (A \cup B) \cup C$$

$$A \cap (B \cap C) = (A \cap B) \cap C$$
(III.30)

3. Distributividade:

$$A \cup (B \cap C) = (A \cup B) \cap (A \cup C)$$

$$A \cap (B \cup C) = (A \cap B) \cup (A \cap C)$$
(III.31)

4. Idempotência:

$$A \cup A = A$$

$$A \cap A = A$$
(III.32)

5. Identidade:

$$A \cup \emptyset = A, \quad A \cap X = A$$

$$A \cap \emptyset = \emptyset, \quad A \cup X = X$$
(III.33)

6. Transitividade:

Se
$$A \subseteq B$$
 e $B \subseteq C$, então $A \subseteq C$ (III.34)

7. Involução:

$$\overline{\overline{A}} = A \tag{III.35}$$

8. Leis de De Morgan:

$$\overline{(A \cap B)} = \overline{A} \cup \overline{B}$$

$$\overline{(A \cup B)} = \overline{A} \cap \overline{B}$$
(III.36)

III.6 PRODUTO CARTESIANO, RELAÇÕES NEBULOSAS, OPERADORES DE IMPLICAÇÃO E REGRAS DE INFERÊNCIA

Sejam A_1 , ..., A_n conjuntos nebulosos em X_1 , ..., X_n , respectivamente. O **produto** cartesiano de A_1 , ..., A_n é um conjunto nebuloso no espaço X_1 x ... x X_n definido pela função de pertinência:

$$\mu_{A_{1}x...xA_{n}}(x) = \min_{i} \{ \mu_{A_{i}}(x_{i}) / x = (x_{1},...,x_{n}), x_{i} \in X_{i} \}$$
(III.37)

Sejam X e Y dois universos de discurso. Uma **relação nebulosa** R é definida como o conjunto nebuloso do produto cartesiano $X \times Y$, sendo expressa por:

$$R = \{((x, y), \mu_R(x, y))/(x, y) \in X \times Y\}$$
(III.38)

Sejam agora dois conjuntos nebulosos A e B definidos por:

$$A = \{(x, \mu_A(x)) | x \in X\}$$
(III.39)

$$B = \{(y, \mu_B(y)) | y \in Y\}$$
 (III.40)

Uma relação nebulosa entre A e B deve satisfazer as seguintes condições:

$$\mu_R(x, y) \le \mu_A(x), \forall (x, y) \in X \times Y$$

$$\mu_R(x, y) \le \mu_R(y), \forall (x, y) \in X \times Y$$

(III.41)

III.6.1 Operações em Relações Nebulosas

Considerando R e W relações nebulosas no espaço cartesiano $X \ge Y$, podem-se definir as seguintes operações:

1. União:

$$(R \cup W)(x, y) = R(x, y) s W(x, y)$$
 (III.42)

2. Intersecção:

$$(R \cap W)(x, y) = R(x, y) t W(x, y)$$
 (III.43)

3. Complemento:

$$R(x, y) = 1 - R(x, y)$$
 (III.44)

III.6.2 Composições de Relações Nebulosas

Relações nebulosas em diferentes espaços podem ser combinadas através da operação de composição. Os principais tipos de "composição", considerando $R_1(x,y)$, $(x,y) \in X \ge Y \ge R_2(y,z)$, $(y,z) \in Y \ge Z$ duas relações nebulosas, são (ZIMMERMANN, 1996):

1. Composição max-min:

$$R_{1} \circ R_{2}(x, z) = \left\{ \left[(x, z), \max_{y} \{ \min \{ \mu_{R_{1}}(x, y), \mu_{R_{2}}(x, y) \} \} \right] \middle| x \in X, y \in Y, z \in Z \right\}$$
(III.45)

onde o símbolo o indica uma operação de composição.

2. Composição max-produto:

$$R_{1} \circ R_{2}(x, z) = \left\{ \left[(x, z), \max_{y} \{ \mu_{R_{1}}(x, y) \cdot \mu_{R_{2}}(y, z) \} \right] \middle| x \in X, y \in Y, z \in Z \right\}$$
(III.46)

3. Composição max-média:

$$R_1 \circ R_2(x, z) = \left\{ (x, z), \frac{1}{2} \cdot max \left\{ \mu_{R_1}(x, y) + \mu_{R_2}(y, z) \right\} \right\} / x \in X, y \in Y, z \in Z \right\}$$
(III.47)

III.6.3 Operadores de Implicação

Relações nebulosas também podem ser obtidas através de operações de implicação nebulosas. Os operadores de implicação *I*: $[0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$ são usados para modelar regras de inferência do tipo: **se** (premissa), **então** (conclusão). Considerando *A* e *B* conjuntos nebulosos dados por $\mu_A(x)$: $X \rightarrow [0,1], \mu_B(y)$: $Y \rightarrow [0,1],$ e denotando por *P* uma proposição definida em *A* e por *Q* uma proposição definida em *B*, a relação $R = P \rightarrow Q$ (*P* implica $Q \rightarrow$ se *x* é *A* então *y* é *B*) é expressa como:

$$\mu_R(x, y) = I[\mu_A(x), \mu_B(y)]$$
(III.48)

Existem vários tipos de operadores de implicação, apresentando-se, assim, diferentes técnicas para a obtenção dos valores da função de pertinência das relações nebulosas R definidas no espaço cartesiano $X \ge Y$. Os principais são:

1. Implicação de Kleene-Diemes:

$$I[\mu_{A}(x),\mu_{B}(y)] = max[\mu_{B}(y),1-\mu_{A}(x)]$$
(III.49)

2. Implicação de Mandani:

$$I[\mu_{A}(x), \mu_{B}(y)] = min[\mu_{A}(x), \mu_{B}(y)]$$
(III.50)

3. Implicação de Lukasiewicz:

$$I[\mu_A(x), \mu_B(y)] = \min\{1, [1 - \mu_A(x) + \mu_B(y)]\}$$
(III.51)

4. Implicação de Larsen:

$$I[\mu_A(x), \mu_B(y)] = \mu_A(x) \cdot \mu_B(y)$$
(III.52)

5. Implicação de Zadeh-Wilmott:

$$I[\mu_{A}(x),\mu_{B}(y)] = max\{min[\mu_{A}(x),\mu_{B}(y)],1-\mu_{A}(x)\}$$
(III.53)

6. Implicação de Brower-Gödel:

$$I[\mu_{A}(x),\mu_{B}(y)] = \begin{cases} 1, & se \ \mu_{A}(x) \le \mu_{B}(y) \\ \mu_{B}(y), & caso \ contrário \end{cases}$$
(III.54)

III.6.4 Regras de Inferência

Na lógica nebulosa, existem dois importantes tipos de regras de inferência para aplicações em engenharia (LEE, 1990; TANSCHEIT, 2006):

1. Modus ponens generalizado: Regra de inferência com a seguinte lógica:

Premissa 1: $x \notin A^*$ Premissa 2: SE $x \notin A$ ENTÃO $y \notin B$ Conseqüência: $y \notin B^*$

No modus ponens generalizado, o conjunto nebuloso A* não é, essencialmente, o mesmo que A (antecedente da regra), da mesma forma que B* não necessita ser o mesmo que o conseqüente B. Referindo-se à lógica clássica, tem-se que uma regra seria disparada somente se a Premissa 1 fosse exatamente o antecedente da regra, sendo o resultado precisamente o conseqüente dessa regra. Na lógica nebulosa, entretanto, uma regra é disparada se houver um grau de compatibilidade diferente de zero entre a Premissa 1 e o antecedente da regra. Assim, o resultado será um conseqüente com grau de compatibilidade não nulo em relação ao conseqüente da regra, definido como: $B^* = A^* \circ R$, onde *R* é uma relação nebulosa e o símbolo \circ se refere a uma operação de composição.

2. Modus tollens generalizado: Regra de inferência com a seguinte lógica:

Premissa 1: $y \notin B^*$ Premissa 2: SE $x \notin A$ ENTÃO $y \notin B$ Conseqüência: $x \notin A^*$,

onde se aplicam os mesmos conceitos apresentados anteriormente.

III.7 VARIÁVEIS LINGÜÍSTICAS E TERMOS LINGUÍSTICOS

Uma variável lingüística é um elemento simbólico utilizado para descrever o conhecimento. Pode ser definida por uma quíntupla (x, T(x), X, G, M), onde x é o nome da variável, T(x) é um conjunto de valores lingüísticos (atributos, adjetivos) que x pode assumir, X é o universo de discurso de x, G é a regra sintática para geração dos nomes dos valores de x como uma composição de termos de T(x), conectivos lógicos, modificadores e delimitadores, e M é uma regra semântica que associa um significado a cada valor, ou seja, associa uma função de pertinência a cada elemento de T(x).

Como exemplo ilustrativo, define-se: x = temperatura, T(x) = {muito baixa, baixa, média, moderadamente alta, alta} e X: [20°C, 200°C]. Assim, pode-se interpretar "muito baixa" como temperaturas abaixo de 40°C, "baixa" para temperaturas em torno de 70°C, "média" para temperaturas por volta de 100°C, "moderadamente alta" para temperaturas em torno de 130°C e "alta" para temperaturas acima de 150°C. *G*, por exemplo, seria: temperatura "não baixa e não muito alta", e *M* caracteriza esses termos por conjuntos nebulosos com funções de pertinência.

Termos lingüísticos são referidos tanto aos elementos de T(x) quanto às suas funções de pertinência.

III.8 MODELOS NEBULOSOS

Os procedimentos desenvolvidos por um modelo nebuloso serão detalhados nesta seção. A figura III.10 apresenta um diagrama esquemático mostrando a estrutura típica de um modelo nebuloso. Como observado, as etapas de "fuzzificação", inferência e "defuzzificação" devem ser processadas.



Figura III.10. Diagrama esquemático de um modelo nebuloso (LIMA, 2006).

III.8.1 "Fuzzificação"

"Fuzzificação" é o processo de conversão dos valores *crisp* em nebulosos. Os valores das variáveis de entrada do sistema são identificados e, posteriormente, normalizados em um universo de discurso padronizado. Esses valores são então

transformados em conjuntos nebulosos através da utilização de funções de pertinência, para que possam passar para o procedimento de inferência. A interface de "fuzzificação" determina assim a relação entre as variáveis de entrada e os valores lingüísticos.

III.8.2 Procedimento de Inferência

O mecanismo de inferência de um sistema nebuloso é composto pela "base de conhecimento", a qual consiste de uma base de dados e uma base de regras. Na base de dados, ficam armazenadas, por exemplo, definições sobre discretização e normalização dos universos de discurso, e sobre as funções de pertinência dos termos nebulosos. A base de regras é formada por estruturas do tipo:

SE
$$\langle premissa (antecedente) \rangle$$
 ENTÃO $\langle conclusão (conseqüente) \rangle$, (III.55)

onde saídas são inferidas através da aplicação dos operadores de implicação, já definidos no item III.6.3. Variáveis lingüísticas são usadas como antecedentes e conseqüentes, podendo ser representadas por conjuntos nebulosos e conectivos lógicos desses conjuntos.

Uma regra nebulosa pode ter apenas um antecedente e um conseqüente, originando uma proposição simples, ou pode ser composta por múltiplos antecedentes e/ou múltiplos conseqüentes, formando uma proposição composta. Em uma proposição nebulosa composta, os conectivos "e", "ou" e "não", os quais representam intersecção (implementada pelas *t*-normas), união (implementada pelas *s*-normas) e complemento, respectivamente, são utilizados para conectar as proposições simples individuais.

Em um sistema nebuloso, é importante que existam tantas regras quantas forem necessárias para mapear totalmente as combinações dos termos das variáveis, isto é, que a base de regras seja completa, garantindo que exista sempre ao menos uma regra a ser disparada para qualquer entrada. Também são essenciais a consistência, onde procura-se evitar a possibilidade de contradições, e a interação entre as regras, gerenciada pela função de implicação de modo a contornar as situações de ciclo (SANDRI, CORREA, 1999).

A maioria das bases de regras é formada por mais de uma regra. O processo de obtenção da saída global, resultante das contribuições conseqüentes individuais para cada regra na base de regras, é conhecido como agregação de regras. Duas estratégias simples de agregação são citadas a seguir:

Sistema conjuntivo de regras: caso o sistema de regras seja conjuntamente satisfeito, o conectivo "e" é utilizado para conectar as saídas de cada regra. Assim, a saída global agregada y é encontrada pela intersecção nebulosa das saídas individuais yⁱ, onde i = 1, 2, ..., r sendo r o número de regras, como:

$$y = y^{1} e y^{2} e \dots e y^{r}$$
 (III.56)

ou

$$y = y^{1} \cap y^{2} \cap \dots \cap y^{r}$$
(III.57)

a qual é definida pela função de pertinência:

$$\mu_{y}(y) = t [\mu_{y^{1}}(y), \mu_{y^{2}}(y), ..., \mu_{y'}(y)], \text{ para } y \in Y$$
(III.58)

• Sistema disjuntivo de regras: se a satisfação de pelo menos uma das regras é requerida, o conectivo "ou" é utilizado para conectar as saídas de cada regra. Deste modo, a saída global agregada y é encontrada pela união nebulosa das contribuições individuais, como:

$$y = y^{1} ou y^{2} ou ... ou y^{r}$$
 (III.59)

ou

$$y = y^1 \cup y^2 \cup \dots \cup y^r \tag{III.60}$$

a qual é definida pela função de pertinência:

$$\mu_{y}(y) = s[\mu_{y'}(y), \mu_{y'}(y), ..., \mu_{y'}(y)], \text{ para } y \in Y$$
(III.61)

Os métodos de agregação de regras mais utilizados na prática são apresentados a seguir, compreendendo os modelos de Mamdani, Larsen, Takagi-Sugeno e Tsukamoto (SANDRI, CORREA, 1999; ROSS, 2004). Em geral, as diferenças entre os métodos estão na sua parte conseqüente, no seu processo de agregação das várias regras e na "defuzzificação" do sistema, a qual será definida posteriormente.

1. Modelo de Mamdani:

O modelo de Mamdani faz parte dos modelos denotados de clássicos. Nestes, a conclusão de cada regra especifica um conjunto nebuloso (muitas vezes sub-normalizado) como o valor da variável de saída. Essas saídas são então agregadas, e uma conclusão global *crisp* é obtida através da aplicação de uma técnica de defuzzificação apropriada à função de pertinência agregada.

No modelo de Mamdani, as implicações nebulosas são modeladas pelo operador de Mamdani (equação III.50) e as regras são agregadas através da *s*-norma "máximo" (operador de união, definido pela equação III.18). Considerando um sistema MISO (*Multiple-Input / Single-Output*) cujos antecedentes sejam conectados de forma conjuntiva, A_i^k como conjuntos nebulosos representando os termos antecedentes das regras para $x \in X$ e B^k como o conjunto nebuloso representando o termo conseqüente da regra para $y \in Y$, a saída agregada para *r* regras é dada por:

$$\mu_{B^{k}}(y) = \max_{k} [\min[\mu_{A_{1}^{k}}(x), \mu_{A_{2}^{k}}(x), ..., \mu_{A_{L}^{k}}(x)]], \qquad (\text{III.62})$$

para k = 1, 2, ..., r; sendo L o número de antecedentes para cada regra.

2. Modelo de Larsen:

O modelo de Larsen também é referido como clássico, e é uma variação do modelo de Mamdani. Agora, no entanto, o operador de Larsen (equação III.52) é utilizado nas implicações nebulosas das regras em lugar do operador de Mamdani. No modelo de Larsen, as regras também são agregadas através da *s*-norma "máximo" (equação III.18), sendo a saída agregada para *r* regras, considerando sistemas MISO com antecedentes conjuntivos, expressa como:

$$\mu_{B^{k}}(y) = \max_{k} \left[\mu_{A_{1}^{k}}(x) \cdot \mu_{A_{2}^{k}}(x) \cdot \dots \cdot \mu_{A_{L}^{k}}(x) \right], \quad (\text{III.63})$$

para k = 1, 2, ..., r; sendo L o número de antecedentes para cada regra.

Deste modo, o método de Mamdani possibilita variações quanto à seleção das *t*normas ou *s*-normas utilizadas na conexão dos antecedentes, da escolha do operador de implicação, das diferentes estratégias de agregação das regras e das numerosas técnicas de agregação que podem ser utilizadas.

3. Modelo de Takagi-Sugeno:

O modelo de Takagi-Sugeno é pertencente a uma classe de modelos denotados de "modelos de interpolação". Foi proposto por Takagi e Sugeno (1985), buscando-se relacionar as entradas do sistema em cada regra (antecedente) a funções analíticas presentes na parte conseqüente. Assim, a conclusão de cada regra é uma função resultante da combinação linear dos antecedentes, tendo como parâmetros um conjunto de constantes.

O método de Takagi-Sugeno possui como vantagem, em relação a outras estruturas, a possibilidade de incorporação de algum possível conhecimento fenomenológico do processo no modelo nebuloso. Esse modelo pode ser definido para cada regra k, considerando sistemas MISO, como:

SE
$$x_1 \notin A_1^k = x_2 \notin A_2^k = ... = x_L \notin A_L^k ENTÃO y^k \notin y^k = f(x_1, x_2, ..., x_L)$$
 (III.64)

onde A_i^k é um conjunto nebuloso monotônico do antecedente *i* na regra *k*, *L* é o número de antecedentes para cada regra e *f* é uma função de estrutura linear para cada variável de entrada.

No modelo de Takagi-Sugeno, cada regra possui uma saída *crisp*, dada por uma função. A saída numérica global inferida y é obtida pela média ponderada das saídas individuais y^k geradas em cada regra, utilizando os respectivos graus de pertinência como pesos, evitando assim a necessidade de um processo adicional de "defuzzificação", o qual se faz presente para os modelos clássicos. Essa saída global é definida como:

$$y = \frac{\sum_{k=1}^{r} y^{k} \mu_{k}(x)}{\sum_{k=1}^{r} \mu_{k}(x)}$$
(III.65)

onde $\mu_k(x)$ é a compatibilidade global da regra k calculada através de uma t-norma.

Segundo Ross (2004), o modelo de Takagi-Sugeno é um método bastante popular para a modelagem de sistemas nebulosos devido à não necessidade da utilização da interface de "defuzzificação"; além disso, possui características estruturais altamente factíveis para utilização em estratégias de controle. Assim, ele será aplicado na identificação dos modelos nebulosos, para os controladores L-NFMPC e L-ANFMPC, dos dois casos de estudo analisados nesta tese de doutorado. As funções conseqüentes em cada regra do modelo funcional serão modificadas para uma representação exponencial no caso das estratégias E-NFMPC e E-ANFMPC. $\mu_k(x)$ (na equação III.65) será calculada utilizando a *t*-norma "produto algébrico", definida pela equação III.24.

4. Modelo de Tsukamoto:

O modelo de Tsukamoto também pertence à classe dos "modelos de interpolação". Neste, a conclusão de cada regra é representada por um conjunto nebuloso com uma função de pertinência monotônica. Nesta função, também conhecida como "função ombro", a saída inferida para cada regra é definida como um valor *crisp* induzido pelo valor de pertinência decorrente da parte antecedente da regra. Assim, a saída para cada regra, considerando B_k como o conjunto nebuloso conseqüente da regra $k \in \mu_k(x)$ como a compatibilidade da regra k, pode ser definida como:

$$\mathbf{y}^{k} = \boldsymbol{\mu}_{B_{k}}\left(\boldsymbol{\mu}_{k}\left(\boldsymbol{x}\right)\right) \tag{III.66}$$

A saída global também é calculada pela média ponderada das saídas individuais em cada regra utilizando a equação III.65, o que evita a necessidade de um processo adicional de "defuzzificação".

Mesmo com a ausência da necessidade de um procedimento de "defuzzificação", o método de Tsukamoto é, de modo geral, somente empregado em situações específicas, em virtude da natureza especial das funções de pertinência das saídas requeridas pelo método.

III.8.3 "Defuzzificação"

"Defuzzificação" é o processo de conversão dos resultados nebulosos em quantidades *crisp*. A interface de "defuzzificação" deve ser aplicada aos modelos clássicos para obtenção de uma única saída do sistema de regras do modelo nebuloso.

O procedimento envolve a identificação do domínio das variáveis de saída num correspondente universo de discurso e, com a conclusão nebulosa inferida, evolui-se uma saída não nebulosa (SANDRI, CORREA, 1999).

Existem vários métodos de "defuzzificação" propostos na literatura. Os mais utilizados são descritos a seguir (SANDRI, CORREA, 1999; ROSS, 2004):

 Método do primeiro (ou último) máximo: o valor da saída corresponde ao ponto em que o grau de pertinência da distribuição conseqüente global atinge o primeiro (ou o último) valor máximo;

2. Método do centróide (centro de área ou centro de gravidade): o valor da saída corresponde ao ponto onde está localizado o centróide da distribuição;

3. Método da média ponderada: é um método bastante usado, mas sua utilização se restringe à existência de funções de pertinência simétricas para as saídas. O centróide de cada função simétrica é calculado, e a média ponderada é obtida utilizando como pesos os respectivos graus de pertinência dos pontos correspondentes ao valor do centróide;

4. Método da média dos máximos: o valor de saída corresponde à média entre os valores que têm o maior grau de pertinência inferido pelas regras.

III.9 CLASSIFICAÇÃO DOS MODELOS NEBULOSOS

Os modelos nebulosos podem ser classificados quanto à forma de representação como funcionais, lingüísticos e relacionais (BABUSKA, VERBRUGGEN, 1996).

Os modelos funcionais são também denominados de modelos Takagi-Sugeno e já foram definidos no item III.8.2. Esses apresentam uma estrutura híbrida, já que os dados da parte antecedente são representados por conjuntos nebulosos e os termos conseqüentes das regras correspondem a funções numéricas das entradas. Nestas estruturas, o modelo pode ser interpretado como uma interpolação entre funções lineares locais. Entretanto, devido a essas interpolações e à ocorrência de sobreposições apresentadas pelos conjuntos nebulosos das premissas, os modelos funcionais passam a fornecer uma representação não linear de sistemas, com grau variando de acordo com os graus de pertinência de cada uma das regras.

Nos **modelos lingüísticos**, as regras seguem a forma geral: SE ($x \notin A$) ENTÃO ($y \notin B$), onde $x \in y$ são variáveis lingüísticas. $A \in B$ são termos lingüísticos (conjuntos nebulosos)

constantes inferindo um significado para as variáveis lingüísticas dadas, tais como: "temperatura alta", "pressão muito baixa", entre outros. Portanto, um modelo nebuloso lingüístico é caracterizado por fazer uso direto da representação lingüística das regras. Quando o sistema é composto por entradas e saídas numéricas, o problema de identificação do modelo consiste no ajuste dos parâmetros das funções de pertinência a partir dos dados de entrada e saída.

Nos **modelos relacionais**, o mapeamento entre os conjuntos nebulosos de entrada e saída é representado através de uma relação nebulosa *R*, sendo esta já definida na seção III.6. Um modelo relacional genérico pode ser representado pela relação *R*: $A \ge B \rightarrow [0,1]$, onde *A* e *B* são conjuntos nebulosos de entrada e saída, respectivamente. Nestes modelos, os antecedentes das regras se encontram na forma conjuntiva e cada regra contém todos os possíveis conseqüentes, tendo cada qual um peso diferente. Essa ponderação é importante para o ajuste dos conseqüentes das regras, sem que seja necessário mudar os conjuntos nebulosos de referência.

O modelo lingüístico pode ser considerado como um caso especial do modelo relacional, sendo representado por uma relação $R: A \ge \{0,1\}$. Nele, a relação é uma restrição de relação binária, de modo que cada regra possua somente algum conseqüente.

III.10 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Este capítulo apresentou uma descrição sucinta sobre sistemas nebulosos, explanando conceitos relevantes sobre esta importante área da inteligência artificial. Esses conceitos serão utilizados no próximo capítulo na descrição dos procedimentos para identificação de modelos nebulosos dinâmicos não lineares funcionais, os quais serão utilizados posteriormente na geração dos controladores híbridos avançados propostos como objetivos deste trabalho (capítulo V).

<u>CAPÍTULO IV</u> <u>IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS</u> <u>FUNCIONAIS</u>

IV.1 INTRODUÇÃO

Para a obtenção dos controladores híbridos avançados não lineares multivariáveis propostos como temas desta tese, os quais consistem na integração de conceitos da lógica nebulosa e do controle preditivo baseado em modelo (MPC), é necessária, inicialmente, a geração dos modelos nebulosos funcionais não lineares multivariáveis, cujos conceitos básicos já foram apresentados no capítulo III. Como será descrito no capítulo V, os modelos nebulosos serão utilizados internamente na estrutura de controle preditivo, onde atuarão como modelos de predição. De uma maneira geral, pode-se dizer que cada modelo nebuloso formulado decompõe o espaço de entrada em regiões nebulosas e aproxima a saída do sistema em cada região por modelos locais.

Deste modo, este capítulo apresenta a metodologia utilizada para o desenvolvimento dos modelos nebulosos funcionais, destacando os tópicos mais importantes. Inicialmente, na seção IV.2, é apresentada uma descrição sobre técnicas de modelagem, sendo enfocada a importância dos procedimentos de identificação de sistemas. Posteriormente, são demonstrados os passos necessários para a geração de modelos nebulosos dinâmicos (seção IV.3). A seção IV.4 apresenta então os desenvolvimentos presentes na metodologia de construção de modelos nebulosos funcionais, sendo detalhados os métodos numéricos do "agrupamento subtrativo" e dos "quadrados mínimos". Na seção IV.5, é descrito o tratamento adotado neste trabalho para a análise dos resultados de validação dos modelos nebulosos. A seção IV.6 finaliza o capítulo apresentando uma metodologia (RGA - *Relative Gain Array*) para a determinação de interações entrada-saída em modelos nebulosos funcionais multivariáveis.

IV.2 TÓPICOS EM MODELAGEM DE SISTEMAS

A disponibilidade de um modelo representativo do processo é uma condição fundamental para o projeto com sucesso de estratégias de controle, particularmente dos controladores preditivos, os quais utilizam um modelo interno em sua estrutura e são considerados nesta tese.

CAPÍTULO IV – IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS 64

As técnicas de modelagem podem ser classificadas genericamente em duas categorias (AMARAL, 1980; SÖDERSTRÖM, STOICA, 1989; AGUIRRE et al., 1998): a modelagem fenomenológica (determinística, física) - desenvolvida a partir de pressupostos teóricos (balanços), sendo também denominada de "modelagem caixa-branca" - e a modelagem a partir de amostragem (empírica) - também conhecida como **identificação de sistemas**, a qual pode ser definida como "modelagem caixa-preta" pelo fato de necessitar de muito pouco ou nenhum conhecimento sobre o processo analisado. Há ainda a "modelagem caixa-cinza", a qual é definida como uma abordagem intermediária entre as outras duas.

Como já apresentado, a obtenção de modelos fenomenológicos do processo com relativa precisão pode ser uma tarefa árdua e bastante complicada para situações em que um conhecimento prévio do sistema é limitado. Assim, a modelagem a partir da identificação de sistemas tem alcancado grande crescimento nos últimos anos pelo fato de não exigir um entendimento aprofundado do processo. Ela tem sido viabilizada em grande parte pelo aumento na acessibilidade e no potencial de processamento dos computadores digitais. Segundo Meleiro (2002), o grande apelo pela "modelagem caixa-preta" é devido, principalmente, à dificuldade na obtenção de um tratamento matemático genérico para sistemas não lineares, o que corresponde ao comportamento da grande maioria dos processos químicos, em especial, das reacões de polimerização. Vale ressaltar que a aplicação desse tipo de modelagem também cresce em situações onde há algum conhecimento disponível sobre o processo, em função de ser uma técnica com relativa simplicidade e com grande capacidade para representação de sistemas. De acordo com Henson e Seborg (1997), uma outra vantagem dessa técnica reside no fato de ser possível especificar explicitamente a complexidade do modelo, permitindo até certo ponto o monitoramento do grau de complicação do problema de controle resultante.

Há uma imensa variedade de representações matemáticas que podem ser utilizadas na identificação de processos, merecendo ênfase particular aquelas baseadas em sistemas nebulosos, sendo este o foco deste trabalho. A grande vantagem de tal aplicação reside no fato de suas capacidades de interação e extração de informações lingüísticas de dados entrada-saída e de permitir a descrição da dinâmica dos sistemas em regiões descritas por regras, fatores de grande valia que fazem dos sistemas nebulosos módulos relevantes em técnicas de identificação. A capacidade de capturar informações lingüísticas soma-se de de validação está baseado tanto em critérios quantitativos quanto qualitativos. Logo, a próxima seção apresenta as etapas necessárias para identificação (geração) de modelos nebulosos dinâmicos.

IV.3 ETAPAS PARA IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS

Várias etapas compõem os desenvolvimentos necessários para a obtenção de modelos nebulosos dinâmicos. É importante destacar que uma série de decisões deve ser tomada nas fases iniciais do processo de modelagem, as quais poderão influir diretamente na qualidade do modelo obtido (LIMA, 2006).

Inicialmente, deve ser escolhida a estrutura do modelo nebuloso que estará presente na base de regras do sistema. Devem ser definidas as variáveis (conjuntos entradas/saída, para representações MISO) que serão utilizadas, bem como a forma de interligação entre elas. O número e tipos das variáveis selecionadas devem estar de acordo com a necessidade do problema em questão (MATTEDI, 2003). Por exemplo, para a aplicação do modelo nebuloso internamente em uma estratégia de controle preditivo MPC MIMO, objetivo desta tese, deve-se buscar a determinação de modelos MISO para cada variável controlada (saída) em função das variáveis manipuladas (entradas). Essas estruturas devem possuir uma configuração dinâmica de forma que representem o comportamento do processo ao longo de um horizonte de tempo.

Os modelos nebulosos geralmente apresentam entradas passadas em suas estruturas e utilizam valores passados das próprias saídas como dados de entrada. A escolha do número de variáveis passadas utilizadas é um parâmetro de desempenho importante e se apresenta como um tópico de otimização que deve ser levado em consideração na construção do modelo (LIMA et al., 2007).

Definida a estrutura, a próxima etapa é a geração dos dados de identificação do modelo. Neste ponto, devem ser escolhidos os limites máximo e mínimo de variação das variáveis, para que seja determinada a faixa de operação do modelo, considerando os objetivos propostos. Inicialmente, são gerados os dados de treinamento, os quais são utilizados para a obtenção dos parâmetros do modelo. Este é validado posteriormente através da aplicação dos dados de teste. A geração de dados é realizada a partir da excitação

das variáveis de entrada do sistema, podendo ser basicamente de duas formas: aleatória ou levando em consideração aspectos relevantes de freqüência e amplitude das mudanças nas mesmas. Deve-se ressaltar também que a geração dos dados de treinamento e teste é realizada em diferentes condições de freqüência e amplitude de excitação das variáveis de entrada.

Como será visto no decorrer deste capítulo, o procedimento de determinação dos parâmetros do modelo envolve o processo de inversão de matriz. Assim, é importante destacar que a escolha dos valores de freqüência é de extrema importância, pois uma excitação reduzida pode causar problemas de mau condicionamento de matriz, complicando conseqüentemente o processo de inversão. Por outro lado, deve-se garantir uma freqüência de excitação máxima capaz de modelar os valores estacionários. Em relação à amplitude de excitação, deve ser realçado que este dado deve levar em conta a faixa operacional do modelo (MATTEDI, 2003).

No processo de validação, é importante ressalvar que os parâmetros do modelo gerado são ajustados através da análise, em conjunto, do erro causado pela aplicação dos dados de teste com o número de regras do modelo nebuloso. Quanto maior o número de regras, maior a capacidade de predição do modelo até um certo ponto, acima do qual aumenta-se o erro de validação, mesmo com a diminuição do erro de treinamento. Este fenômeno é conhecido como "sobre-ajuste" e deve ser evitado, para que não seja obtida uma representação enganosa do comportamento do sistema.

Outro tópico importante na obtenção de modelos nebulosos dinâmicos é a determinação da taxa de amostragem. Segundo Mattedi (2003), esta deve levar em consideração o tempo de resposta do modelo, procurando atender a todos os intervalos de resposta presentes nas relações entradas/saídas para o caso de sistemas multivariáveis. Uma taxa de amostragem excessiva pode causar problemas de mau condicionamento numérico, enquanto o inverso pode ocasionar o problema da falta de representação das dinâmicas de espectros de freqüência mais elevados. No caso de utilização do modelo para controle de processos, o valor da taxa de amostragem deve estar inteiramente relacionado com o intervalo de ação do controlador de modo a evitar ações indevidas de controle e, conseqüentemente, a instabilização da malha.

IV.4 CONSTRUÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS

Modelos nebulosos dinâmicos tipo Takagi-Sugeno, cuja estrutura já foi previamente definida de forma genérica pela equação III.64 (capítulo III), serão desenvolvidos nesta tese para as configurações de controle L-NFMPC e L-ANFMPC. A equação III.64 pode ser representada de modo mais detalhado, para *r* regras presentes na base de conhecimento do sistema nebuloso, da seguinte forma:

$$SE x_{1} \acute{e} A_{1}^{1} e x_{2} \acute{e} A_{2}^{1} e \dots e x_{L} \acute{e} A_{L}^{1} ENTÃO y^{1} = a_{1}^{1} \cdot x_{1} + a_{2}^{1} \cdot x_{2} + \dots + a_{L}^{1} \cdot x_{L}$$

$$SE x_{1} \acute{e} A_{1}^{j} e x_{2} \acute{e} A_{2}^{j} e \dots e x_{L} \acute{e} A_{L}^{j} ENTÃO y^{j} = a_{1}^{j} \cdot x_{1} + a_{2}^{j} \cdot x_{2} + \dots + a_{L}^{j} \cdot x_{L}$$
(IV.1)
$$SE x_{1} \acute{e} A_{1}^{r} e x_{2} \acute{e} A_{2}^{r} e \dots e x_{L} \acute{e} A_{L}^{r} ENTÃO y^{r} = a_{1}^{r} \cdot x_{1} + a_{2}^{r} \cdot x_{2} + \dots + a_{L}^{r} \cdot x_{L}$$

sendo A_i^k conjuntos nebulosos, representados neste trabalho por funções de pertinência gaussianas (equação III.15, no capítulo III), onde i = 1, ..., L; k = 1, ..., r; e a_i^k são parâmetros das funções conseqüentes do modelo.

Para os controladores E-NFMPC e E-ANFMPC, as funções conseqüentes na equação III.64 serão descritas por uma estrutura exponencial para cada variável de entrada, exemplificadas como a seguir:

$$SE x_{1} \acute{e} A_{1}^{1} e x_{2} \acute{e} A_{2}^{1} e \dots e x_{L} \acute{e} A_{L}^{1} ENTÃO y^{1} = a_{1}^{1} exp(x_{1}) + a_{2}^{1} exp(x_{2}) + \dots + a_{L}^{1} exp(x_{L})$$

$$SE x_{1} \acute{e} A_{1}^{j} e x_{2} \acute{e} A_{2}^{j} e \dots e x_{L} \acute{e} A_{L}^{j} ENTÃO y^{j} = a_{1}^{j} exp(x_{1}) + a_{2}^{j} exp(x_{2}) + \dots + a_{L}^{j} exp(x_{L})$$

$$SE x_{1} \acute{e} A_{1}^{r} e x_{2} \acute{e} A_{2}^{r} e \dots e x_{L} \acute{e} A_{L}^{r} ENTÃO y^{r} = a_{1}^{r} exp(x_{1}) + a_{2}^{r} exp(x_{2}) + \dots + a_{L}^{r} exp(x_{L})$$

$$(IV.2)$$

Foi definido, anteriormente, que a etapa de geração dos dados de identificação é fundamental para o desenvolvimento da modelagem. É importante que o conjunto de dados de treinamento represente o processo da melhor forma possível, pois isto pode ser um fator decisivo na qualidade do modelo obtido. Realizado esse passo, seguem-se as etapas de "fuzzificação" (através de funções de pertinência gaussianas) e inferência [nesta tese, serão aplicadas a *t*-norma "produto algébrico" (equação III.24, no capítulo III) para as premissas,

CAPÍTULO IV – IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS 68

a *s*-norma "soma algébrica" (equação III.19, no capítulo III) e a implicação de "Larsen" (equação III.52, no capítulo III), visando-se assegurar a existência da função derivada para o modelo nebuloso, o que é importante quando o modelo é empregado em uma etapa de otimização, como é o caso das técnicas de controle preditivo]. Conforme já descrito, a realização da etapa de "defuzzificação" não é necessária, pois a saída numérica global inferida pelo modelo nebuloso será calculada através da média ponderada entre cada uma das saídas individuais obtidas em cada regra, utilizando os respectivos graus de pertinência como pesos. Todos esses conceitos já foram apresentados no capítulo III de forma detalhada.

Entretanto, a dimensão do modelo - número de regras, número e parâmetros das funções de pertinência associadas a cada variável lingüística e parâmetros das funções conseqüentes das regras - não é conhecida inicialmente. Logo, muitos algoritmos encontram-se descritos na literatura de forma a solucionar essas questões. Os mais comumente utilizados são (ROSS, 2004):

• Método do Agrupamento Subtrativo (*Subtractive Clustering*): determina o número de regras e os parâmetros das funções de pertinência;

• Método do Gradiente: a qualidade do modelo nebuloso pode ser consideravelmente melhorada por modificações nos parâmetros de entrada. O método do gradiente age nesse sentido, ajustando os parâmetros das premissas do modelo;

• Método dos Quadrados Mínimos: precisa do número de regras e das funções de pertinência das premissas. É utilizado para calcular os parâmetros das funções conseqüentes do modelo nebuloso funcional. Existem ainda algoritmos dos quadrados mínimos modificados, que realizam o processo de refino dos parâmetros após o cálculo inicial;

• Método Learning From Example (LFE): somente constrói as regras. Confia inteiramente na completa especificação das funções de pertinência pelo analista;

• Método Learning From Example Modificado (MLFE): ao contrário do método LFE, o MLFE calcula tanto as regras quanto as funções de pertinência.

A escolha de qual metodologia utilizar depende de vários fatores, dentre os quais, do nível de conhecimento prévio sobre o sistema analisado (ROSS, 2004). Como observado acima, cada um dos métodos é aplicado para um determinado objetivo específico, de modo que eles podem ser combinados segundo a necessidade desejada. Para o presente trabalho, os modelos nebulosos funcionais serão gerados para os dois processos analisados através da combinação dos métodos do Agrupamento Subtrativo e dos Quadrados Mínimos (CHIU, 1994), os quais serão detalhados a seguir.

IV.4.1 Método do Agrupamento Subtrativo

Como já definido anteriormente, o método do agrupamento subtrativo é utilizado na determinação do número de regras r e dos parâmetros das funções de pertinência da parte antecedente do modelo nebuloso (centro e desvio-padrão, no caso de funções de pertinência gaussianas).

O algoritmo do agrupamento subtrativo (CHIU, 1994; CHIU, 1996) consiste no agrupamento de dados a partir de um conjunto de dados de treinamento e trata-se de uma extensão do método *Grid-based Mountain Clustering* introduzido por Yager e Filev (1994). Primeiramente, os dados de treinamento são separados em grupos de acordo com suas respectivas classes e, então, o método é aplicado para cada grupo de dados individualmente para a extração das regras. O algoritmo demonstrando a metodologia da técnica é descrito a seguir:

Seja { x_1 , x_2 , ..., x_n } um conjunto de *n* dados em um espaço de dimensão *N*. Os dados devem inicialmente ser normalizados de modo que as faixas de cada uma de suas coordenadas em cada dimensão seja igual. Cada dado é definido como um "centro de grupo em potencial" e define-se a medida do potencial do dado x_i como:

$$P_{i} = \sum_{j=1}^{n} e^{-\alpha \left\|x_{i} - x_{j}\right\|^{2}}$$
(IV.3)

onde $\alpha = \frac{4}{r_a^2}$.

denota a distância euclidiana e r_a é uma constante positiva. Assim, a medida do potencial de um dado é uma função de sua distância para todos os demais dados. Deste modo, um dado com muitos dados vizinhos terá um alto potencial. A constante r_a é o raio que define uma zona de vizinhança, sendo que dados fora desta zona apresentam fraca influência sobre o potencial calculado.

Após o potencial de cada dado ter sido calculado, seleciona-se o dado com maior potencial como primeiro centro de grupo. Define-se x_1^* como sendo o dado escolhido como primeiro centro de grupo e P_1^* como sendo o seu respectivo potencial. É então executado, através da equação IV.4, o processo de redução dos potenciais calculados anteriormente:

$$P_{i} = P_{i} - P_{1}^{*} e^{-\beta \left\| x_{i} - x_{1}^{*} \right\|^{2}}$$
(IV.4)

onde $\beta = \frac{4}{r_b^2}$, sendo r_b uma constante positiva.

Por conseguinte, ocorre uma subtração do potencial de cada dado como uma função de sua distância ao primeiro centro de grupo. Os dados próximos ao primeiro centro de grupo terão uma grande redução de seus respectivos potenciais e, conseqüentemente, pouco provavelmente serão selecionados como o próximo centro de grupo. A constante r_b é o raio que define uma zona de vizinhança onde os dados sofrerão considerável redução no potencial, podendo ser definida pela seguinte equação:

$$r_b = \eta . r_a \tag{IV.5}$$

onde η é um fator que relaciona os raios e deve ser ajustado durante o processo de obtenção do modelo nebuloso. É utilizado geralmente um valor maior que 1 de forma a evitar a obtenção de centros de grupos com espaçamento próximos.

Quando os potenciais de todos os dados tiverem sido reduzidos de acordo com a equação IV.4, seleciona-se o dado com maior potencial como o segundo centro de grupo. Então, repete-se o procedimento de alteração dos potenciais, de forma análoga à anterior, como função do segundo centro de grupo escolhido. Generalizando, após o *k-ésimo* centro de grupo ter sido obtido, repete-se o processo de redução dos potenciais através da equação:

$$P_{i} = P_{i} - P_{k}^{*} e^{-\beta \left\| x_{i} - x_{k}^{*} \right\|^{2}}$$
(IV.6)

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

SE $P_k^* > \overline{\varepsilon}P_1^*$ ENTÃO aceita-se x_k^* como sendo centro de grupo e continua; SENÃO

SE $P_k^* < \underline{\varepsilon}P_1^*$ ENTÃO rejeita-se x_k^* e finaliza o processo de agrupamento; SENÃO

SE $\frac{d_{\min}}{r_a} + \frac{P_k^*}{P_1^*} \ge 1$ ENTÃO aceita-se x_k^* como centro de grupo e continua;

SENÃO

rejeita-se x_k^* *e anula-se o potencial de* x_k^* ;

Selectiona-se o dado com maior potencial como o novo x_k^* e refaz-se o mesmo procedimento.

 $\overline{\varepsilon}$ especifica um limiar para o potencial acima do qual o dado será definitivamente aceito como centro de grupo; $\underline{\varepsilon}$ especifica um limiar abaixo do qual o dado será definitivamente rejeitado. Valores de $\overline{\varepsilon} = 0,5$ e $\underline{\varepsilon} = 0,15$ são tipicamente usados para esses parâmetros. Se o potencial recair na região duvidosa, deve-se verificar se o dado fornece uma boa compensação entre ter um potencial razoável e ser suficientemente distante dos centros de grupos existentes. d_{\min} representa a menor das distâncias entre x_k^* e todos os centros de grupos previamente encontrados.

Assim, o número de regras do modelo nebuloso é igual ao número de centros de grupos x_k^* determinados pelo método de agrupamento descrito, com os centros definidos pelos respectivos x_k^* .

Os desvios-padrão σ_i das funções de pertinência gaussianas para uma determinada variável x_i são calculados pela equação:

$$\sigma_i = \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} (x_i^{\max} - x_i^{\min})$$
(IV.7)

onde x_i^{max} e x_i^{min} são os limites máximo e mínimo de x_i , respectivamente, sendo α definido pela equação IV.3.

É importante destacar que o método de agrupamento subtrativo é ágil quando aplicado a sistemas de altas dimensões com número moderado de dados, já que seu tempo de processamento cresce linearmente com a dimensão de dados e de forma quadrática em relação ao número de dados.

IV.4.2 Método dos Quadrados Mínimos

O algoritmo dos quadrados mínimos pode ser utilizado para o cálculo dos parâmetros das funções conseqüentes das regras do modelo nebuloso funcional (PASSINO, YURKOVICH, 1998; ROSS, 2004).

Inicialmente, deve-se obter um conjunto de dados proveniente do processo. De posse destes dados, o modelo nebuloso funcional obtido pelo método dos quadrados mínimos é definido como:

$$f(x/\theta) = \theta^{T} \xi(x)$$
 (IV.8)

onde θ representa o vetor de parâmetros das funções conseqüentes do modelo nebuloso, demonstrado pela expressão IV.9, e $\xi(x)$ é definido pelos vetores IV.10 ou IV.11, para os modelos nebulosos funcionais de estruturas linear ou exponencial em relação aos parâmetros das funções conseqüentes, respectivamente:

$$\boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} a_{01} & a_{02} & \dots & a_{0r} & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1r} & \dots & a_{L1} & a_{L2} & a_{Lr} \end{bmatrix}^T$$
(IV.9)

$$\xi(x) = [\xi_1(x), ..., \xi_r(x), x_1\xi_1(x), ..., x_1\xi_r(x), ..., x_L\xi_1(x), ..., x_L\xi_r(x)]^T$$
(IV.10)

$$\xi(x) = [\xi_1(x), ..., \xi_r(x), exp(x_1)\xi_1(x), ..., exp(x_1)\xi_r(x), ..., exp(x_L)\xi_1(x), ..., exp(x_L)\xi_r(x)]^T$$
(IV.11)

sendo L o número de variáveis de entrada e r o número de regras do modelo nebuloso.

Assim, para se calcular a saída predita pelo modelo, deve-se obter os valores para $\theta \in \xi_k(x)$. Os $\xi_k(x)$ são então definidos pelo vetor de regressão:

$$\xi_k(x) = \frac{\mu_k(x)}{\sum_{j=1}^r \mu_j(x)}$$
(IV.12)

onde k = 1, ..., r. $\mu_k(x)$ é definida para uma determinada regra específica k como o produtório das funções de pertinência das variáveis de entrada do modelo, sendo expressa, no caso de funções de pertinência gaussianas, pela equação:

$$\mu_{k}(x) = \prod_{i=1}^{L} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x_{i} - c_{i}^{k}}{\sigma_{i}^{k}}\right)^{2}\right]$$
(IV.13)

onde c_i^k e σ_i^k são o centro e desvio-padrão, respectivamente, para a variável de entrada *i* na regra *k*.

Definidos os $\xi_k(x)$, é objetivada agora a obtenção de θ . Para isto, considera-se o seguinte vetor de dados de saída do processo, o qual possui dimensão *n* x 1:

$$Y(n) = [y^1, y^2, ..., y^n]^T$$
 (IV.14)

onde *n* representa o número de dados provenientes do processo que serão utilizados para treinamento do modelo.

Define-se ainda a seguinte matriz de dimensão *L.r* x *n*:

$$\Phi(n) = \left[\xi(x^{1}) \ \xi(x^{2}) \ \dots \ \xi(x^{n})\right]$$
(IV.15)

na qual os vetores de dados $\xi(x^j)$ são determinados pelas equações IV.10 ou IV.11.

O objetivo é minimizar o erro entre os dados provenientes do processo e os valores preditos pelo modelo nebuloso. Define-se então um vetor de erros, dado por:

$$E(n) = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, ..., \varepsilon_n]^T$$
(IV.16)

sendo os $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ expressos como:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{j} = \boldsymbol{y}^{j} - \boldsymbol{\theta}^{T} \boldsymbol{\xi} \left(\boldsymbol{x}^{j} \right) \tag{IV.17}$$

A qualidade da aproximação do modelo nebuloso com parâmetros θ para todos os dados é quantificada pelo seguinte critério de custo:

$$V(\theta) = \frac{1}{2}E^{T}E$$
 (IV.18)

Deste modo, deseja-se obter valores para θ tal que minimizem a função $V(\theta)$ dada pela equação IV.18. Sendo $V(\theta)$ convexa em θ , pode-se assegurar que um mínimo local seja um mínimo global. Define-se então $\hat{\theta}$ como o vetor θ que possibilita a minimização de $V(\theta)$ como:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \left(\boldsymbol{\Phi}^T \boldsymbol{\Phi}\right)^{-1} \boldsymbol{\Phi}^T \boldsymbol{Y} \tag{IV.19}$$

Assim, o modelo nebuloso funcional obtido pelo método dos quadrados mínimos pode ser novamente expresso a partir da seguinte equação:

$$f\left(x/\hat{\theta}\right) = \left(\hat{\theta}\right)^T \xi(x) \tag{IV.20}$$

com $\hat{\theta}$ definido pela equação IV.19 e $\xi(x)$ descrito pelas expressões IV.10 ou IV.11.

IV.5 VALIDAÇÃO DOS MODELOS NEBULOSOS

Construídos os modelos nebulosos a partir dos dados de treinamento, estes devem ser validados através da aplicação dos dados de teste. Para cada modelo nebuloso, os erros entre a saída predita pelo modelo na etapa de validação e a saída do processo são quantificados através do erro quadrático médio (MATTEDI, 2003; LIMA, 2006):

$$erro = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{m} (\overline{y_k} - y_k)^2}{m}}$$
(IV.21)

onde k representa o instante considerado, m é o número de instantes discretos considerados, $\overline{y_k}$ é a saída predita pelo modelo nebuloso no instante k e y_k é a saída do processo no instante k. Gráficos também são utilizados para ilustrar os resultados de validação dos modelos.

IV.6 DETERMINAÇÃO DE INTERAÇÕES ENTRADA-SAÍDA EM MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS MULTIVARIÁVEIS

A matriz de ganhos relativos (RGA - *Relative Gain Array*) é freqüentemente utilizada em processos lineares multivariáveis como uma medida das interações entre as variáveis, determinando-se, assim, os melhores pares de variáveis manipuladas e controladas para um conjunto de *loops* SISO. Quando o modelo representativo do sistema é não linear, é somente possível calcular a RGA local, devendo-se primeiramente linearizar o modelo ao redor de um ponto de operação.

Alternativamente, uma técnica baseada no cálculo de certo número de RGA's locais (MOLLOV et al., 2001) permite a determinação de interações entrada-saída em modelos nebulosos funcionais não lineares multivariáveis; isto pode proporcionar, particularmente para esta tese, uma avaliação sobre as condições de funcionamento ótimo para as malhas de controle híbrido preditivo multivariável propostas, as quais são baseadas em tais formulações.

O método original se baseia na utilização de modelos nebulosos não lineares tipo Takagi-Sugeno, com estrutura funcional linear para as variáveis de entrada em cada regra (equação IV.1). Por isso, esta consideração será aplicada para os desenvolvimentos pertinentes. Portanto, uma RGA local é obtida para cada regra do modelo, as quais podem indicar perfeitamente as interações presentes no processo. A RGA global é calculada a partir dos conseqüentes agregados em cada regra.

É importante citar que, além do objetivo geral da RGA, relativo à avaliação de interações entre as variáveis de um sistema, ela pode também ser utilizada para determinar a eventual necessidade de estratégias de controle mais complexas, quando interações significativas entre as malhas forem constatadas (DESHPANDE, 1989). Assim, as respectivas conclusões obtidas neste trabalho, as quais serão expostas no capítulo VI, reforçam ainda mais os desenvolvimentos de controle avançado propostos.

A RGA é definida para cada regra k do modelo nebuloso MIMO tipo Takagi-Sugeno (um modelo MISO para cada variável controlada) pela seguinte matriz:

$$\Lambda_{k} = G_{k} * (G_{k}^{-1})^{T} = \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \cdots & \lambda_{1m} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \cdots & \lambda_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_{p1} & \lambda_{p2} & \cdots & \lambda_{pm} \end{bmatrix}$$
(IV.22)

sendo G_k definido conforme a equação IV.23, onde $p \in m$ são os n^{os} de variáveis controladas e manipuladas, respectivamente:

$$G_{k} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1m} \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{p1} & g_{p2} & \cdots & g_{pm} \end{bmatrix}$$
(IV.23)

 g_{ij} são definidos pela equação IV.24, sendo $\overline{\Delta VP}$ e $\overline{\Delta VM}$ valores normalizados, em relação aos intervalos de operação, referentes, nesta ordem, às variáveis controladas e manipuladas:

$$g_{ij} = \frac{\overline{\Delta V P_i}}{\overline{\Delta V M_j}}$$
(IV.24)

Como a RGA é normalizada, a soma dos elementos de uma linha ou de uma coluna é sempre igual a 1,0 (BRISTOL, 1966). Os elementos λ_{ij} na equação IV.22 são interpretados segundo a tabela IV.1 (SEBORG et al., 1989).

Tabela IV.1. Interpretação da RGA.

Valor de λ_{ij}	Conclusão
1,0	Par ideal. Não há interações com as outras malhas.
> 1,0	As variáveis <i>i</i> e <i>j</i> interagem, mas também há interações com as
	outras malhas, sendo estas proporcionais aos valores de λ_{ij} .
< 0,0	Há interações indesejáveis entre as malhas e as variáveis não
	devem formar um par.
= 0,0	As variáveis <i>i</i> e <i>j</i> não interagem e, por isso, não devem formar
	um par.
$0{,}0<\lambda_{ij}<1{,}0$	Há interações entre as malhas e as variáveis <i>i</i> e <i>j</i> podem formar
	um par.

CAPÍTULO IV – IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS 77

Como desvantagem de tal técnica, pode-se citar o fato de cada sistema ser considerado apenas no estado estacionário, desconsiderando, portanto, a sua dinâmica.

IV.7 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

foi Neste capítulo, apresentada uma descrição detalhada sobre os desenvolvimentos necessários para a construção de modelos nebulosos dinâmicos funcionais. A metodologia utilizada neste trabalho foi descrita, bem como as principais etapas presentes no procedimento de modelagem a partir de um conjunto de dados proveniente do processo. Esses conceitos serão aplicados posteriormente para a obtenção de modelos nebulosos considerando dois casos de estudo (capítulos VI e VII). Como será mostrado no próximo capítulo, os modelos desenvolvidos serão utilizados internamente na estrutura de controle preditivo baseado em modelo (MPC) para a geração dos controladores híbridos propostos.

Ainda, a aplicação da técnica da matriz de ganhos relativos (RGA), para a determinação de interações entrada-saída em modelos nebulosos funcionais multivariáveis, foi exposta.
<u>CAPÍTULO V</u> <u>CONTROLE PREDITIVO BASEADO EM</u> <u>MODELO</u>

V.1 INTRODUÇÃO

O projeto de estratégias de controle para processos de polimerização é marcado pela presença de grandes inconvenientes decorrentes da complexidade dinâmica de tais sistemas, como fortes não linearidades e estados variantes ao longo do tempo e, por vezes, do espaço. Somam-se ainda a tais empecilhos, a indisponibilidade, na maioria dos casos, de medição em tempo real das variáveis mais importantes do processo, a necessidade de construção de malhas multivariáveis decorrente da existência de um grande número de variantes auto-influenciáveis e a presença de parâmetros físico-químicos continuamente mutáveis.

Controladores clássicos, mais especificamente o PID, são ainda hoje freqüentemente utilizados na indústria devido à simplicidade de projeto e execução, mas possuem muitas limitações. Entre estas, destacam-se os fatos de só atuarem no processo após este ter sido desviado de seu ponto de operação desejado (estratégia *feedback*) e de apresentarem desempenho insatisfatório quando aplicados a sistemas não lineares e/ou multivariáveis, nos quais se enquadra a maioria dos processos industriais de interesse da engenharia química. Portanto, visando atender às exigências de produção cada vez mais pré-determinadas, busca-se uma atuação de controle mais precisa e eficiente, proporcionando, assim, que os processos apresentem os mínimos desvios das condições desejadas, as quais levam em conta desde razões econômicas e de qualidade do produto, até questões de segurança e ambientais.

Visando superar essas dificuldades, e favorecidas pelo aumento no poder de cálculo dos computadores digitais, numerosas técnicas de controle avançado têm sido desenvolvidas. De acordo com Vandoren (1998), tais tecnologias, no início de seus desenvolvimentos, estavam disponíveis somente em laboratórios acadêmicos e na indústria aeroespacial, expandindo-se depois para as indústrias dos mais variados ramos, inclusive a química e a petroquímica. É importante citar que a maioria dos processos químicos funciona a um custo energético muito elevado (LUYBEN, 1990); logo, por menor que seja a melhoria no desempenho do sistema sob controle, os custos podem ser significativamente reduzidos.

Uma das primeiras técnicas de controle avançado multivariável a ser utilizada industrialmente foi a do controle preditivo baseado em modelo (MPC), a qual prediz o comportamento futuro do sistema utilizando um modelo dinâmico do processo internamente na sua estrutura. Este modelo atua em paralelo com a planta, o que faz com que os efeitos das variações impostas ao processo sejam rapidamente preditos, permitindo o acionamento do sistema de controle de forma apropriada. A idéia básica da estratégia de controle preditivo é o tratamento do problema de controle como um problema de otimização dinâmica em cada instante de amostragem, onde se busca minimizar uma função do erro entre as respostas preditas do processo e as trajetórias desejadas, através da utilização de um modelo explícito do processo que permita predizer as saídas do sistema (variáveis controladas) a partir de determinadas entradas (variáveis manipuladas). Uma trajetória de entradas futuras (ações de controle) é então calculada para cada variável manipulada, mas somente a primeira ação individual de controle é implementada entre uma amostragem e outra. Essa estratégia é denominada de "horizonte móvel", onde o horizonte, sobre o qual cada saída do processo é predita, é deslocado em um instante de amostragem na direção do futuro, a cada período de avaliação. Segundo Meleiro (2002), o controle MPC tornou-se a estratégia multivariável mais aplicada na indústria química, possuindo como uma grande vantagem, a capacidade de incorporar restrições nas variáveis de processo diretamente no projeto do controlador, o que previne a ocorrência de violações, resultando em uma estratégia de controle rigorosa. A figura V.1 ilustra a estrutura típica de um controlador MPC.

Embora a grande maioria dos processos químicos seja inerentemente não linear, o maior número de aplicações industriais de controle preditivo é, ainda, baseado em modelos de predição lineares (propriedades de preservação da escala e de sobreposição entre as variáveis); isto se deve a maior facilidade de obtenção de tais formulações e a vantagem da determinação da seqüência otimizada do controlador por um problema convexo, para o qual existem algoritmos de soluções ótimas (MATTEDI, 2003). Entre os controladores MPC que adotam tal princípio, merecem serem referenciadas as estratégias DMC e MAC (*Model Algorithmic Control*). Tais configurações utilizam modelos de convolução na forma de coeficientes de resposta ao degrau (DMC) ou ao impulso (MAC), obtidos diretamente do comportamento dinâmico do processo frente a perturbações em variáveis de entrada.



Figura V.1. Diagrama de bloco do controlador preditivo (ESPINOSA et al., 2005).

No entanto, tais estratégias, por serem baseadas em modelos lineares, possuem intervenção restrita a uma faixa de operação razoavelmente limitada, podendo não serem adequadas para controlar sistemas com fortes não linearidades e com faixas operacionais bastante variáveis (controle servo). Assim, o uso de técnicas MPC que utilizem modelos não lineares diretamente no algoritmo de cálculo do controlador, definidas como NMPC (*Nonlinear Model-based Predictive Control*), se apresenta de forma bastante promissora, já que se adéquam ao comportamento da maior parte dos processos químicos de interesse, como os de polimerização. Esta característica da estrutura MPC é muito importante, uma vez que propicia o manuseio de variáveis em uma larga faixa de operação. Contudo, devese atentar que a introdução de um modelo não linear no algoritmo de cálculo do controlador pode levar a uma perda na convexidade, dificultando a obtenção de uma solução que, se encontrada, não se pode garantir que seja ótima global. Todavia, felizmente, é relatada na literatura atual a grande capacidade de algumas técnicas de otimização para lidar com problemas de programação não linear.

Destarte, a identificação de um modelo não linear é o passo inicial para a implementação da estrutura NMPC. Várias classes de modelos podem ser aplicadas; todavia, como já discutido ao longo deste trabalho, a utilização de modelos

84

fenomenológicos apresenta grandes inconvenientes, de modo que a aplicação de técnicas de identificação de sistemas não lineares acopladas à inteligência artificial, especialmente as que se referem à formulação de modelos nebulosos, são altamente promissoras.

Logo, por todas as vantagens citadas referentes à configuração NMPC, esta metodologia foi adotada para o desenvolvimento dos controladores propostos nesta tese. Ainda, uma estrutura NMPC típica (NMPC-t) [modelo de predição composto por um sistema de equações diferenciais e algébricas] será delineada para fins de comparação de desempenho. A subrotina de otimização DNCONF da biblioteca IMSL do FORTRAN foi utilizada para a minimização da função objetivo dos controladores. Ela resolve um problema de programação não linear usando o algoritmo SQP (*Successive Quadratic Programming*) e cálculo de gradiente por diferenças finitas.

Assim, a seção V.2 descreve detalhadamente o algoritmo MPC multivariável, empregado para o desenvolvimento dos quatro controladores avançados não lineares multivariáveis sugeridos (L-NFMPC, E-NFMPC, L-ANFMPC e E-ANFMPC), de cujos princípios também são derivadas as técnicas DMC e NMPC-t (avaliadas para fins comparativos). Também, é apresentada uma descrição sobre as particularidades pertinentes a cada estratégia. A seção V.3 finaliza o capítulo com um esboço da abordagem adotada para a sintonia das seis configurações de controle analisadas.

V.2 ALGORITMO MPC MULTIVARIÁVEL

A metodologia de controle MPC multivariável baseia-se na minimização de uma função objetivo *J*, buscando-se encontrar os melhores valores futuros $(\Delta u_{Ii,k})^{new}$ das mudanças nas variáveis manipuladas *Ii* no instante de amostragem *k*. Esta função *J* pode ser definida como:

$$J = \sum_{I_{0}=1}^{NVO} \sum_{n=1}^{NP} w_{I_{0}} \cdot \left(y_{I_{0,n}}^{d} - \hat{y}_{I_{0,n}}^{CLpred}\right)^{2} + \sum_{I_{i}=1}^{NVI} \sum_{k=1}^{NC} \left[f_{I_{i}} \cdot \left(\Delta u_{I_{i,k}}\right)^{new}\right]^{2}$$
(V.1)

sujeita às seguintes restrições:

 $u_{Ii,\min} \le u_{Ii,k} \le u_{Ii,\max}$ $\Delta u_{Ii,\min} \le \Delta u_{Ii,k} \le \Delta u_{Ii,\max}$ $y_{Io,\min} \le y_{Io,n} \le y_{Io,\max}$

Na equação V.1, *NVO* e *NVI* representam o número de variáveis de saída e entrada, respectivamente; *Io* é o índice da variável de saída; *NP* é definido como 'Horizonte de Predição', significando o número de respostas futuras das variáveis de saída que se aproximem de uma trajetória ótima; *NC* é definido como 'Horizonte de Controle', referindo-se ao número de primeiras mudanças futuras nas variáveis manipuladas; w_{Io} são fatores de ponderação para as variáveis controladas; f_{Ii} são definidos como "fatores de supressão" para os movimentos calculados das variáveis manipuladas; e $y_{Io,n}^d$ e $\hat{y}_{Io,n}^{CLpred}$ representam, respectivamente, os valores desejado e predito da variável de saída *Io* no instante de predição *n. NP*, *NC*, w_{Io} e f_{Ii} são parâmetros de controle de extrema importância que deverão ser sintonizados para cada sistema.

Observa-se, pela equação V.1, que a função J é constituída pela soma de dois termos:

- 1. O quadrado dos erros ($y_{Io,n}^d \hat{y}_{Io,n}^{CLpred}$), multiplicados pelos pesos w_{Io} , somados sobre *NP* intervalos de tempo para cada variável controlada *Io*;
- 2. O quadrado das variações nas variáveis manipuladas multiplicadas pelos fatores de supressão, somadas sobre *NC* intervalos de tempo para cada variável manipulada *Ii.* f_{Ii} visam prevenir modificações bruscas nas variáveis de entrada, possuindo valores nulos para situações onde não há restrições. Com o incremento nos valores de f_{Ii} , cresce o amortecimento do sistema.

 $y_{lo,n}^{d}$ é definido pelo filtro de primeira ordem:

$$y_{lo,n}^{d} = \alpha_{lo} \cdot \hat{y}_{lo,n-1}^{medida} + (1 - \alpha_{lo}) \cdot y_{lo,n-1}^{set}$$
(V.2)

onde $\hat{y}_{Io,n-1}^{medida}$ e $y_{Io,n-1}^{set}$ representam, respectivamente, os valores medidos e o *setpoint* da variável de saída *Io* no instante imediatamente anterior. α_{Io} são definidos como parâmetros de trajetórias, os quais devem ser ajustados e determinam o quão rápido cada variável controlada atinge o *setpoint*, possuindo os limites: $0 \le \alpha_{Io} \le 1$.

Os valores de $\hat{y}_{lo,n}^{CLpred}$ poderiam ser obtidos diretamente do modelo de predição. No entanto, caso este não corresponda fielmente ao comportamento do sistema (o que

geralmente ocorre, principalmente quando são utilizados modelos lineares), a aplicação direta desses valores poderia resultar em um sistema de controle muito pouco robusto. De modo a evitar esse problema, uma ação corretiva é implementada através da seguinte expressão (SILVA, 1997):

$$\hat{y}_{lo,n}^{CLpred} = \hat{y}_{lo,n}^{CL} + \left(\hat{y}_{lo,n-1}^{medida} - \hat{y}_{lo,n-1}^{CL}\right)$$
(V.3)

sendo $\hat{y}_{lo,n}^{CL}$ diretamente proveniente do modelo de predição do processo. Considera-se, então, que a diferença entre o valor medido e o valor predito no instante anterior seja válida para o instante atual. Desta forma, o sistema de controle ganha robustez e acaba atingindo o valor desejado através de sucessivas correções, mesmo que o modelo interno do controlador apresente limitações quanto à precisão.

Somente o primeiro elemento do vetor $(\Delta u_{li,k})^{new}$ para cada variável manipulada *Ii* é implementado no processo, determinando as ações de controle correntes no instante *k* como:

$$u_{Ii,k} = u_{Ii,k-1} + \left(\Delta u_{Ii,k,1}\right)^{new}$$
(V.4)

Assim, o algoritmo MPC pode ser sintetizado nos seguintes procedimentos:

- Inicialização dos parâmetros do controlador (NP, NC, w_{Io}, f_{Ii}, α_{Io}) e do otimizador (responsável pela determinação das ações de controle);
- Cálculo das predições de saídas $\hat{y}_{Io,n}^{CLpred}$;
- Incorporação das correções sobre as trajetórias preditas;
- Cálculo da função objetivo conforme a equação V.1;
- Cálculo da seqüência de entradas para minimizar a função objetivo do controlador.

As diferenças entre as abordagens de controle preditivo tratadas neste trabalho estão justamente no modelo de predição adotado. Deste modo, uma descrição detalhada sobre as particularidades para cada técnica é apresentada a seguir.

V.2.1 Controle DMC Multivariável

O controle por matriz dinâmica foi desenvolvido por engenheiros da Cia. de Petróleo Shell (CUTLER, RAMAKER, 1979). Ele é um dos algoritmos de controle preditivo mais empregados na indústria química (LUYBEN, 1990; QIN, BADGWELL, 1997), fato decorrente de suas versatilidade, robustez e relativa simplicidade de projeto e implementação. A grande vantagem de tal estrutura reside na sua capacidade de considerar a influência direta das interações entre as variáveis envolvidas na malha multivariável, devido à utilização de modelos de predição (modelos de convolução) na forma de coeficientes de resposta ao degrau, no domínio do tempo, multiplicados pela magnitude das mudanças nas entradas. Por esses motivos, decidiu-se utilizá-lo como referência para a avaliação do desempenho dos controladores preditivos não lineares propostos.

Um modelo de convolução deve ser obtido para cada variável de saída analisada. Para isso, devem ser realizados os seguintes passos:

- 1. No tempo $t = t_{inicial}$, dá-se uma perturbação degrau em uma determinada variável manipulada $Ii (\Delta u_{Ii})$ e observa-se o comportamento de cada uma das respostas com o decorrer do tempo para cada instante de amostragem, de modo a obter-se quantos pontos forem possíveis até cada resposta atingir entre 95 e 99% do novo estado estacionário. Os coeficientes de resposta do modelo à perturbação degrau ($b_{Io,Ii}$) são calculados, em cada período de avaliação, pela divisão das mudanças instantâneas nas variáveis controladas pela variação proporcionada na variável manipulada,
- Repete-se o mesmo procedimento do item 1 para as outras variáveis manipuladas presentes nas respectivas malhas de controle;
- 3. Agora, observa-se qual a resposta mais lenta e define-se como 'Horizonte de Convolução' (*NS*) o número de pontos contidos no intervalo de $t = t_{inicial}$ ao tempo total de amostragem (tempo onde esta saída atinge entre 95 e 99% do novo estado estacionário). O valor de *NS* é devido ao próprio horizonte de predição, representando o seu possível valor máximo.

Assim, o modelo de convolução multivariável para cada variável de saída *Io* no instante de predição *n*, representado em variáveis desvio, pode ser definido pela equação V.5:

$$\hat{y}_{Io,n} = \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=1}^{NS} b_{Io,Ii,k} \Delta u_{Ii,n-k}$$
(V.5)

Observa-se, pela equação V.5, que os valores preditos são funções apenas dos coeficientes de resposta à perturbação degrau multiplicados pelas magnitudes das mudanças nas entradas.

Agora, supondo-se variações degrau programadas nas variáveis manipuladas e, de posse da equação V.5, obtém-se a seguinte expressão:

$$\hat{y}_{Io,n} = \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=1}^{NC} b_{Io,Ii,n+1-k} \Delta u_{Ii,k}$$
(V.6)

De modo a facilitar as operações matemáticas, introduz-se a equação V.7, a qual relaciona os coeficientes de resposta do modelo de perturbação degrau com os elementos da matriz dinâmica [de dimensão (NVOxNP,NVIxNC)] do DMC ($a_{Io,Ii}$):

$$b_{Io,Ii,n+1-k} = a_{Io,Ii,n,k}$$
 (V.7)

Portanto, o *n-ésimo* valor para cada variável de saída *Io* pode ser escrito pelo modelo de convolução multivariável de duas formas equivalentes:

$$\hat{y}_{Io,n} = \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=1}^{NC} b_{Io,Ii,n+1-k} \Delta u_{Ii,k} = \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=1}^{NC} a_{Io,Ii,n,k} \Delta u_{Ii,k}$$
(V.8)

A equação V.8 descreve como Δu_{li} afeta a *n-ésima* saída *Io* usando os coeficientes de resposta ao degrau do modelo de convolução. O somatório dá os efeitos de todos os *NC* termos usando o princípio da superposição.

Neste ponto, é fundamental compreender que cada variável de saída do processo continua a sofrer influências de variações passadas nas variáveis manipuladas, mesmo depois de determinado tempo. Desse modo, o modelo deve englobar tanto termos referentes a variações passadas quanto futuras nas variáveis de entrada. Assim, as respostas do sistema para os *n-ésimos* intervalos futuros, como uma função das variações passadas ($\Delta u_{li,k}$)^{old} nas

CAPÍTULO V – CONTROLE PREDITIVO BASEADO EM MODELO

variáveis manipuladas, serão aqui definidas como respostas em malha aberta, e são determinadas de acordo com o modelo de convolução multivariável na forma dos coeficientes de resposta a perturbação do tipo degrau, pela seguinte expressão:

$$\hat{y}_{Io,n}^{OL} = \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{Io,Ii,n+1-k} \left(\Delta u_{Ii,k} \right)^{old}$$
(V.9)

No instante presente de amostragem (n = 0) podem-se medir as *Io* saídas do processo $\hat{y}_{Io,0}^{medida}$. Se o modelo adotado for perfeito, ou melhor, se nenhum distúrbio não considerado na modelagem ocorrer, o valor predito no instante passado e o valor atual medido devem ser iguais. Todavia, geralmente este não é o caso. Assim, a diferença entre os dois valores é usada para corrigir o modelo dinamicamente, proporcionado uma melhor predição no futuro. Logo, as saídas preditas no tempo atual de amostragem são definidas pela equação:

$$\hat{y}_{Io,0}^{OL} = \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{Io,Ii,1-k} \left(\Delta u_{Ii,k} \right)^{old}$$
(V.10)

Então, os modelos utilizam as diferenças entre os valores atuais medidos $\hat{y}_{lo,0}^{medida}$ e os valores presentes preditos $\hat{y}_{lo,0}^{OL}$ em cada período de amostragem de forma a se obterem melhores predições das respostas em malha aberta:

$$\hat{y}_{Io,n}^{OL} = \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{Io,Ii,n+1-k} \left(\Delta u_{Ii,k} \right)^{old} + \hat{y}_{Io,0}^{medida} - \hat{y}_{Io,0}^{OL}$$
(V.11)

$$\hat{y}_{I_{o,n}}^{OL} = \sum_{I_{i=1}}^{NVI} \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{I_{o,I_{i,n+1-k}}} \left(\Delta u_{I_{i,k}} \right)^{old} + \hat{y}_{I_{o,0}}^{medida} - \sum_{I_{i=1}}^{NVI} \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{I_{o,I_{i,1-k}}} \left(\Delta u_{I_{i,k}} \right)^{old}$$
(V.12)

Rearranjando a equação V.12, obtém-se a seguinte expressão para o modelo de convolução de um sistema multivariável, com dimensão *NVOxNVI*, que prediz as respostas em malha aberta decorrentes de mudanças passadas nas variáveis manipuladas:

$$\hat{y}_{Io,n}^{OL} = \hat{y}_{Io,0}^{medida} + \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=0}^{-NP+1} \left[b_{Io,Ii,n+1-k} - b_{Io,Ii,1-k} \right] (\Delta u_{Ii,k})^{old}$$
(V.13)

Agora, deseja-se calcular os valores das respostas em malha fechada, isto é, sob ações de controle. Estas devem considerar os efeitos de mudanças futuras nas variáveis manipuladas $(\Delta u_{li,k})^{new}$, além dos efeitos futuros resultantes de modificações passadas nas próprias variáveis manipuladas através das respostas em malha aberta. Assim, as respostas em malha fechada são definidas como $\hat{y}_{lo,n}^{CL}$ para os valores no *n-ésimo* intervalo no futuro. Logo, e de posse da equação V.8, define-se a equação V.14, a qual prediz o comportamento das variáveis controladas quando *NC* mudanças nas variáveis manipuladas forem feitas no futuro:

$$\hat{y}_{Io,n}^{CL} = \hat{y}_{Io,n}^{OL} + \sum_{Ii=1}^{NVI} \sum_{k=1}^{NC} a_{Io,Ii,n,k} \left(\Delta u_{Ii,k} \right)^{new}$$
(V.14)

Como consideração final, é importante salientar que a matriz dinâmica $(a_{I_0,I_{i,n,k}})$ é calculada apenas uma vez, de forma *off-line*, e não em intervalos de tempo regulares.

V.2.2 Controle NMPC-t Multivariável

Para tal estratégia, os valores preditos $\hat{y}_{lo,n}^{CL}$ são obtidos do próprio modelo fenomenológico do processo. Como já descrito, tal configuração de controle será implementada no 1º caso de estudo analisado para fins de comparação de desempenho, cujo conjunto de equações diferenciais e algébricas é apresentado no capítulo VI.

V.2.3 Controle Híbrido L-NFMPC Multivariável

Nesta configuração, os valores preditos $\hat{y}_{lo,n}^{CL}$ são calculados a partir de um modelo nebuloso não linear MISO, tipo Takagi-Sugeno, para cada variável controlada, cuja estrutura já foi previamente definida nos capítulos III (equação III.64) e IV (equação IV.1).

V.2.4 Controle Híbrido E-NFMPC Multivariável

Para tal controlador, os valores preditos $\hat{y}_{Io,n}^{CL}$, para cada variável controlada, são calculados a partir de um modelo nebuloso não linear MISO funcional de estrutura exponencial para as variáveis manipuladas (modelo tipo Takagi-Sugeno modificado), cuja formulação já foi previamente definida no capítulo IV (equação IV.2).

V.2.5 Controle Híbrido Adaptativo L-ANFMPC Multivariável

Um processo polimérico, além de todas as peculiaridades já explanadas ao longo desta tese, como, por exemplo, à presença de fortes não linearidades, pode, em determinadas condições, apresentar múltiplos estados estacionários, modificando significativamente o seu comportamento dinâmico, além de outras características desconhecidas durante as etapas de projeto de um controlador. Desta forma, a incorporação de metodologias adaptativas na formulação do controle preditivo pode ser muito vantajosa, proporcionando grandes benefícios nas ações de controle; além disso, se bem projetadas, necessitam praticamente do mesmo esforço computacional.

De modo geral, pode-se descrever que o controle preditivo adaptativo baseia-se na necessidade de atualização, em tempo real, do modelo dinâmico de predição do processo. Com este foco, optou-se, neste trabalho, pela aplicação da **Estratégia de Controle Preditivo Adaptativo Baseado em Múltiplos Modelos**, proposta por Dougherty e Cooper (2003) e aplicada, com sucesso, a uma estrutura DMC. Para o caso particular do controlador L-ANFMPC, tal metodologia baseia-se na geração de múltiplos modelos nebulosos não lineares MISO de predição, tipo Takagi-Sugeno, para cada variável de saída. Os modelos delineados possuem faixas operacionais diferentes e a escolha de qual formulação utilizar em um dado instante de amostragem, para o cálculo dos valores preditos $\hat{y}_{lo,n}^{CL}$, é uma função do valor instantâneo medido para cada variável controlada em relação ao intervalo de aplicação de cada modelo nebuloso, sendo tais intervalos definidos na etapa de modelagem.

Como será observado durante a implementação dos controladores preditivos adaptativos nos dois processos examinados, a diminuição dos intervalos de operação para os modelos, se mantido o mesmo número de dados de identificação, possibilita melhorias na qualidade das predições, o que pode, conseqüentemente, proporcionar ações de controle mais efetivas.

V.2.6 Controle Híbrido Adaptativo E-ANFMPC Multivariável

Para esta estratégia, os valores preditos $\hat{y}_{lo,n}^{CL}$ são calculados pela mesma metodologia adotada para o projeto do controlador L-ANFMPC. Neste caso, porém, são gerados, para a predição de cada variável controlada, múltiplos modelos nebulosos funcionais não lineares MISO com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas (modelo tipo Takagi-Sugeno modificado).

V.3 SINTONIA DOS CONTROLADORES

Os parâmetros dos controladores desenvolvidos nesta tese serão ajustados através da avaliação conjunta entre os índices de desempenho, definidos pelas equações V.15-17, e a análise gráfica, devido à presença de comportamentos oscilatórios para os dois processos considerados como casos de estudo.

$$IAE = \int_{t_0}^{t_f} \left| y_{l_0}^{set}(t) - y_{l_0}^{atual}(t) \right| dt$$
 (V.15)

$$ITAE = \int_{t_0}^{t_f} t \left| y_{lo}^{set}(t) - y_{lo}^{atual}(t) \right| dt$$
 (V.16)

$$ISE = \int_{t_0}^{t_f} \left(y_{lo}^{set}(t) - y_{lo}^{atual}(t) \right)^2 dt$$
 (V.17)

Nas Equações V.15-17, *IAE* (*Integral of the Absolute value of the Error*) representa a soma dos valores absolutos dos erros, para cada variável controlada *Io*, tomados em cada tempo durante o intervalo considerado, *ITAE* (*Integral of the Time multiplied by the Absolute value of the Error*) é a soma do produto dos valores absolutos dos erros pelo respectivo valor do tempo tomados em cada instante durante o intervalo analisado, *ISE* (*Integral of the Square of the Error*) representa a soma dos quadrados dos erros tomados em cada tempo durante o intervalo avaliado, y_{Io}^{set} é o *setpoint* da variável de saída *Io* no tempo *t* e y_{Io}^{atual} é o seu valor presente instantâneo medido, sendo t_0 e t_f os instantes inicial e final, respectivamente, do período de avaliação.

Por definição, os parâmetros dos controladores devem ser ajustados de modo a minimizar os critérios *IAE*, *ITAE* e *ISE* para as variáveis controladas, ao mesmo tempo que proporcionem comportamentos aceitáveis para as variáveis de processo, com o objetivo de se alcançar um desempenho ótimo do sistema de controle. A escolha de qual índice considerar é uma função da característica transiente da resposta. Mais especificamente, o critério *IAE* é aplicado para suprimir erros de dimensão reduzida, por tratar com soma de valores absolutos, enquanto o *ISE* é mais indicado para a supressão de erros de grande intensidade, uma vez que os valores dos erros são elevados ao quadrado, proporcionando assim um maior valor para a integral. Fica claro que a utilização do critério *ISE* para eliminar erros de pequena dimensão não é uma boa escolha, pelo fato de que valores de erros menores que a unidade elevados ao quadrado tornam-se ainda menores, diminuindo, então, o valor da integral. Já o índice de desempenho *ITAE* é utilizado para a supressão de erros que persistem com o tempo, pois a presença do termo do tempo em cada instante de cálculo amplifica o efeito de pequenos erros no valor da integral.

V.4 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

O objetivo deste capítulo foi apresentar os principais conceitos referentes à estratégia de controle preditivo baseado em modelo (MPC), sendo dada maior atenção aos controladores preditivos baseados em modelos não lineares, definidos com NMPC. A metodologia MPC foi descrita de forma detalhada, sendo esta a abordagem multivariável empregada com maior freqüência e sucesso nos processos industriais. Tal estratégia foi adotada na obtenção dos quatro controladores híbridos avançados não lineares multivariáveis propostos, os quais utilizam modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis como preditores no algoritmo de controle. As particularidades sobre cada estratégia MPC avaliada nesta tese também foi apresentada.

Os próximos capítulos (VI e VII) apresentam o desenvolvimento de modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis para dois processos de copolimerização, com conseqüente geração dos controladores híbridos *fuzzy*-preditivos multivariáveis. Tais sistemas possuem dinâmicas complexas altamente não lineares, reforçando assim a importância da aplicação das abordagens sugeridas. Os quatro controladores híbridos *fuzzy*-preditivos projetados são comparados, posteriormente, as

configurações DMC (controle preditivo linear) e NMPC-t para o 1º caso de estudo (problemas regulatório e servo). Um confronto entre os controladores híbridos baseados em modelos nebulosos não lineares com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas (E-NFMPC e E-ANFMPC) é realizado para o 2º processo (controle servo).

<u>CAPÍTULO VI</u> <u>ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO</u> <u>DO METACRILATO DE METILA COM</u> <u>ACETATO DE VINILA</u>

VI.1 INTRODUÇÃO

O primeiro processo considerado nesta tese para a aplicação dos desenvolvimentos propostos corresponde à reação de copolimerização por radical livre, em solução, do metacrilato de metila com o acetato de vinila em um reator CSTR (CONGALIDIS et al., 1989; MANER, DOYLE III, 1997; LIMA, 2006; LIMA et al., 2007; LIMA et al., 2010).

Inicialmente, na seção VI.2, é realizada uma descrição detalhada do sistema, o qual possui uma malha de reciclo. O modelo fenomenológico do processo, assim como os respectivos parâmetros e constantes são apresentados posteriormente na seção VI.3. Esse modelo é considerado como planta virtual para a obtenção de informações dinâmicas e implementação das configurações de controle propostas, além de ser utilizado como modelo de predição do controlador NMPC-t. Na seção VI.4, é descrita a aplicação de uma estratégia de controle *feedforward* para compensar distúrbios introduzidos pela presença do *loop* de reciclo. Esse controlador possibilita a separação do controle do reator do restante do sistema, de modo que os desenvolvimentos subseqüentes (obtenção dos modelos nebulosos e geração dos controladores híbridos) considerarão o reator de forma isolada. A seção VI.5 apresenta o comportamento dinâmico do processo, via simulação computacional, para a ocorrência de uma perturbação externa, demonstrando também um estudo sobre as não linearidades presentes no meio reacional. Em seguida, são definidas duas malhas multivariáveis de controle (seção VI.6).

Assim, na seção VI.7, a primeira malha é inicialmente analisada. São construídos os respectivos modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis, sendo discutidos os desenvolvimentos presentes na etapa de identificação de dados, além dos passos de treinamento e validação dos modelos. Uma análise das interações entrada-saída, presentes nos modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno multivariáveis obtidos, também é apresentada utilizando a técnica da matriz de ganhos relativos (RGA - *Relative Gain Array*). Posteriormente, os controladores híbridos *fuzzy*-preditivos não lineares multivariáveis são gerados, os quais são comparados as estruturas DMC e NMPC-t para os problemas regulatório e servo.

Na seqüência, a seção VI.8 enfoca a segunda malha de controle. Do mesmo modo que para a 1^a malha, modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis são delineados, sendo descritos os procedimentos de identificação de dados, além das etapas de treinamento e validação dos modelos. As interações entrada-saída, presentes nos modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno multivariáveis formulados, são examinadas utilizando a técnica RGA. Por fim, os controladores híbridos *fuzzy*-preditivos não lineares multivariáveis são construídos e comparados as estratégias DMC e NMPC-t para o problema regulatório.

VI.2 DESCRIÇÃO DO PROCESSO

Na figura VI.1, está apresentado um diagrama esquemático do reator de copolimerização com um *loop* de reciclo. Para o presente estudo, o monômero A é o metacrilato de metila (MMA), o monômero B é o acetato de vinila (VAc), o solvente é o benzeno, o iniciador é o azobisisobutironitrila (AIBN) e o agente de transferência de cadeia é o acetaldeído. As vazões de monômero podem também conter inibidores tais como o *m*-dinitrobenzeno (*m*-DNB). Este sistema é interessante porque o metacrilato de metila é muito mais reativo que o acetato de vinila na copolimerização, como indicado pelas suas respectivas razões de reatividade de 26 e 0,03, ocorrendo o contrário na homopolimerização.

Os monômeros *A* e *B* são continuamente adicionados, juntamente com o iniciador, o solvente e o agente de transferência de cadeia. Em adição, o inibidor pode estar presente nestas correntes de entrada como uma impureza. Estas vazões de alimentação são combinadas (corrente 1) com a vazão de reciclo (corrente 2), originando a vazão de alimentação do reator (corrente 3), o qual é assumido ser um tanque agitado de mistura contínua (CSTR) com um sistema de refrigeração (jaqueta). Há um fluxo de refrigerante através da jaqueta com o objetivo de remover o calor da polimerização. Polímero, solvente, monômeros não reagidos, iniciador e agente de transferência de cadeia fluem do reator para o separador (corrente 4). Neste, polímero, iniciador residual e agente de transferência de cadeia são removidos (corrente 6). Geralmente, em processos industriais, o separador é composto por uma série de etapas, incluindo secadores e colunas de destilação. Monômeros não reagidos e solvente (corrente 7) são transportados ao ponto de purga (corrente 8), o qual

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 99

representa uma corrente de escape e outras perdas. A purga é requerida para prevenir acúmulo de inertes no sistema. Após a purga, os monômeros e solvente (corrente 9) são bombeados para o tanque de armazenamento, de forma a prevenir mudanças bruscas na vazão de reciclo e na composição. A corrente de reciclo (corrente 2) é então adicionada à corrente de alimentação.



Figura VI.1. Diagrama do processo de copolimerização do MMA/VAc (CONGALIDIS et al., 1989).

As condições de operação do estado estacionário consideradas estão apresentadas na tabela VI.1. Sob estas condições, o tempo de residência no reator é de aproximadamente 6 horas e a conversão global de monômero é de 20%. Essas condições asseguram que a viscosidade do meio reacional permaneça em um nível moderado.

As variáveis de saída do reator, importantes para o controle da qualidade do produto, são a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) , a fração molar do monômero A no

copolímero (Y_{ap}), o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) e a temperatura do reator (T_r). As entradas são as vazões do monômero A (G_{af}), do monômero B (G_{bf}), do iniciador (G_{if}), do agente de transferência de cadeia (G_{tf}), do solvente (G_{sf}), do inibidor (G_{zf}), a temperatura da jaqueta do reator (T_j) e a temperatura de alimentação do reator (T_{rf}). O reator, o separador e o tanque de armazenamento possuem, inicialmente, solvente puro pré-aquecido a 353,15 K. As entradas para o modelo não linear (descrito na próxima seção) foram então variadas de modo a serem obtidos valores de estado estacionário aceitáveis para as variáveis de saída. A tabela VI.1 também indica que a temperatura de alimentação do reator T_{rf} é praticamente igual à temperatura do reator T_r . Isso ocorre devido ao fato de ter-se escolhido simular a operação do reator com uma alimentação pré-aquecida, onde a única fonte de remoção de calor seja a troca térmica através da jaqueta.

Tabela VI.1. Condições operacionais para o reator de copolimerização do MMA/VAc

Entradas	Valores
Taxa de alimentação do monômero A (MMA)	G_{af} = 18,0 kg/h
Taxa de alimentação do monômero B (VAc)	G_{bf} = 90,0 kg/h
Taxa de alimentação do iniciador (AIBN)	$G_{if} = 0,18 \text{ kg/h}$
Taxa de alimentação do solvente (Benzeno)	G_{sf} = 36,0 kg/h
Taxa de alimentação do agente de transferência de cadeia (Acetaldeído)	G_{tf} = 2,7 kg/h
Taxa de alimentação do inibidor (<i>m</i> -DNB)	$G_{zf} = 0,0$
Temperatura da jaqueta do reator	$T_j = 336,15 \text{ K}$
Temperatura da alimentação do reator	T_{rf} = 353,15 K
Taxa de purga	$\xi = 0,05$
Parâmetros do Reator	
Volume do reator	$V_r = 1 \text{ m}^3$
Área de transferência de calor do reator	$S_r = 4,6 \text{ m}^2$
Saídas	
Taxa de produção do copolímero	$G_{pi} = 23.4 \text{ kg/h}$
Fração molar de A no copolímero	$Y_{ap} = 0,5581$
Peso molecular ponderal médio	$M_{pw} = 34899,53 \text{ kg/kmol}$
Temperatura do reator	$T_r = 353,18 \text{ K}$

(CONGALIDIS et al., 1989).

VI.3 MODELO FENOMENOLÓGICO

O modelo fenomenológico para o processo é apresentado a seguir (CONGALIDIS et al., 1989; MANER, DOYLE III, 1997; LIMA, 2006). Este é uma generalização de modelos que têm aparecido na literatura e têm sido verificados experimentalmente (HAMER et al., 1981; SCHMIDT, RAY, 1981; SCHMIDT et al., 1984). Como já discutido, o modelo descrito será considerado como planta virtual para a obtenção de dados dinâmicos e implantação das estratégias de controle sugeridas, além de ser utilizado como modelo de predição do controlador NMPC-t.

VI.3.1 Mecanismo Cinético

O seguinte mecanismo cinético de radical livre é postulado para a polimerização de monômeros $A \in B$ na presença de iniciador (I), solvente (S), agente de transferência de cadeia (T) e inibidor (Z). Neste mecanismo, $A_{n,m} \bullet e B_{n,m} \bullet$ representam as cadeias de polímero em crescimento (polímero "vivo") contendo n unidades do monômero A e munidades do monômero B, terminando em A e B, respectivamente. $P_{n,m}$ representa a cadeia de polímero "morto" contendo n unidades do monômero A e m unidades do monômero B. Para o cálculo das constantes de taxa de terminação cruzadas, é assumido que:

$$k_{cab} = \sqrt{k_{caa}k_{cbb}}$$
$$k_{dab} = \sqrt{k_{daa}k_{dbb}}$$

Iniciação:

$$I \xrightarrow{k_{i}} 2I \bullet$$

$$I \bullet + A \xrightarrow{k_{ia}} A_{1,0} \bullet$$

$$I \bullet + B \xrightarrow{k_{ib}} B_{0,1} \bullet$$

$$S \bullet + A \xrightarrow{k_{is}} A_{1,0} \bullet$$

$$S \bullet + B \xrightarrow{k_{is}} B_{0,1} \bullet$$

$$T \bullet + A \xrightarrow{k_{it}} A_{1,0} \bullet$$

$$T \bullet + B \xrightarrow{k_{it}} B_{0,1} \bullet$$

Propagação:

$$A_{n,m} \bullet + A \xrightarrow{k_{paa}} A_{n+1,m} \bullet$$
$$A_{n,m} \bullet + B \xrightarrow{k_{pab}} B_{n,m+1} \bullet$$
$$B_{n,m} \bullet + A \xrightarrow{k_{pba}} A_{n+1,m} \bullet$$
$$B_{n,m} \bullet + B \xrightarrow{k_{pbb}} B_{n,m+1} \bullet$$

Terminação por acoplamento:

$$A_{n,m} \bullet + A_{r,q} \bullet \xrightarrow{k_{caa}} P_{n+r,m+q}$$
$$A_{n,m} \bullet + B_{r,q} \bullet \xrightarrow{k_{cab}} P_{n+r,m+q}$$
$$B_{n,m} \bullet + B_{r,q} \bullet \xrightarrow{k_{cbb}} P_{n+r,m+q}$$

Terminação por desproporcionamento:

$$A_{n,m} \bullet + A_{r,q} \bullet \xrightarrow{k_{daa}} P_{n,m} + P_{r,q}$$

$$A_{n,m} \bullet + B_{r,q} \bullet \xrightarrow{k_{dab}} P_{n,m} + P_{r,q}$$

$$B_{n,m} \bullet + B_{r,q} \bullet \xrightarrow{k_{dbb}} P_{n,m} + P_{r,q}$$

Transferência de cadeia para solvente:

$$A_{n,m} \bullet + S \xrightarrow{k_{xas}} P_{n,m} + S \bullet$$
$$B_{n,m} \bullet + S \xrightarrow{k_{xbs}} P_{n,m} + S \bullet$$

Transferência de cadeia para monômero:

$$A_{n,m} \bullet + A \xrightarrow{k_{xaa}} P_{n,m} + A_{1,0} \bullet$$
$$A_{n,m} \bullet + B \xrightarrow{k_{xab}} P_{n,m} + B_{0,1} \bullet$$
$$B_{n,m} \bullet + A \xrightarrow{k_{xba}} P_{n,m} + A_{1,0} \bullet$$
$$B_{n,m} \bullet + B \xrightarrow{k_{xbb}} P_{n,m} + B_{0,1} \bullet$$

Transferência de cadeia para o agente:

$$A_{n,m} \bullet +T \xrightarrow{k_{xat}} P_{n,m} + T \bullet$$
$$B_{n,m} \bullet +T \xrightarrow{k_{xbt}} P_{n,m} + T \bullet$$

```
Inibição:

A_{n,m} \bullet + Z \xrightarrow{k_{za}} P_{n,m}

B_{n,m} \bullet + Z \xrightarrow{k_{zb}} P_{n,m}
```

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

$$k = Ae^{(-E/RT_r)}$$
(VI.1)

sendo A o fator de freqüência, E a energia de ativação e R a constante universal dos gases.

Os valores para o fator de freqüência, para a energia de ativação e para os parâmetros termodinâmicos referentes a cada uma das reações estão apresentados na tabela VI.2. Neste trabalho, o "efeito gel" não foi considerado sobre as constantes de taxa das reações, pelo fato deste se tornar importante apenas para altas conversões de monômero.

VI.3.2 Balanços de Massa e Energia

Assumindo-se que a copolimerização ocorre em um reator tanque agitado contínuo (CSTR) com volume reacional constante, pode-se escrever o seguinte balanço molar para as concentrações dos monômeros, iniciador, solvente, agente de transferência de cadeia e inibidor:

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{C_{kf} - C_k}{\theta_r} - R_k \tag{VI.2}$$

com a seguinte condição inicial:

 $C_k(0) = C_{k0}$, para k = a, b, i, s, t, z.

Na equação VI.2, C_k é a concentração do componente k no reator, C_{kf} é a concentração do componente k na alimentação do reator, R_k é a taxa de reação de consumo do componente k e θ_r é o tempo de residência do reator.

Tabela VI.2.	Parâmetros	cinéticos e	e termodinâmicos	para o	modelo	fenomeno	lógico	do

processo de copolimerização do MMA/VAc (CONGALIDIS et al., 1989).

Parâmetros Cinéticos			
ε (eficiência do iniciador) = 1	$E_i = 1,255.10^5 \text{kJ/kmol}$		
$A_i = 4,5.10^{14}$ l/s	$E_{caa} = 2,69.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{caa} = 4,209.10^{11} \mathrm{m}^{3}/\mathrm{kmol.s}$	$E_{cbb} = 4,00 \times 10^3 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{cbb} = 1,61.10^9 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{daa} = 0,0$		
$A_{daa} = 0,0$	$E_{dbb} = 0,0$		
$A_{dbb} = 0,0$	$E_{paa} = 2,42.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{paa} = 3,207.10^6 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{pab} = 2,42.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{pab} = 1,233.10^5 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{pba} = 1,80.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{pba} = 2,103.10^8 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{pbb} = 1,80.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{pbb} = 6,308.10^6 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{xaa} = 2,42.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{xaa} = 32,08 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{xab} = 2,42.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{xab} = 1,234 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{xas} = 2,42.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{xas} = 86,6 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{xat} = 2,42.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{xat} = 2085,0 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{xba} = 1,80.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{xba} = 5,257.10^4 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{xbb} = 1,80.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{xbb} = 1577,0 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{xbs} = 1,80.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{xbs} = 1514.0 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$	$E_{xbt} = 1,80.10^4 \text{ kJ/kmol}$		
$A_{xbt} = 4,163.10^{5} \text{ m}^{3}/\text{kmol.s}$	$E_{za} = 0,0$		
$A_{za} = 2,2 \text{ m}^{3}/\text{kmol.s}$	$E_{zb} = 0,0$		
$A_{zb} = 1,13.10^{\circ} \text{ m}^{3}/\text{kmol.s}$			
Parâmetros Termodinâmicos			
Entalpia de Reação			
$-\Delta H_{paa} = 54,0.$	10^3 kJ/kmol		
$-\Delta H_{pba} = 54,0.10^3 \text{kJ/kmol}$			
- $\Delta H_{pab} = 86,0.10^3 \text{ kJ/kmol}$			
- $\Delta H_{pbb} = 86,0.10^3 \text{ kJ/kmol}$			
Densidade da Massa Reacional			
$\rho_r = 8,79.10^2 \text{kg/m}^3$			
Calor Específico da Massa Reacional			
$C_r = 2,01 \text{ kJ/kg.K}$			
Coeficiente de Transferência de Calor do Reator			
$U_r = 6.0.10^{-2} \text{ kJ/m}^2 \text{ s.K}$			

A taxa de vazão volumétrica de alimentação do reator (Q_f) , as concentrações de alimentação (C_{kf}) e o tempo de residência no reator (θ_r) são calculados pelas seguintes equações:

$$Q_f = \sum_k \frac{F_{kf} M_k}{\rho_r}$$
(VI.3)

$$C_{kf} = \frac{F_{kf}}{Q_f} \tag{VI.4}$$

$$\theta_r = \frac{V_r}{Q_r} \tag{VI.5}$$

Estas equações para os balanços molares são acopladas ao seguinte balanço de energia para o reator:

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{T_{rf} - T_r}{\theta_r} + \frac{(-\Delta H_{paa})k_{paa}C_aC_a + (-\Delta H_{pba})k_{pba}C_aC_b}{\rho_r c_r} + \frac{(-\Delta H_{pab})k_{pab}C_bC_a + (-\Delta H_{pbb})k_{pbb}C_bC_b}{\rho_r c_r} - \frac{U_r S_r (T_r - T_j)}{V_r \rho_r c_r}$$
(VI.6)

com a seguinte condição inicial:

 $T_r(0) = T_{r0}$

Considerando-se a hipótese da cadeia longa (RAY, 1972), as expressões para determinação das taxas de reação são dadas por:

$$R_{a} = \{(k_{paa} + k_{xaa})C_{a\bullet} + (k_{pba} + k_{xba})C_{b\bullet}\}C_{a}$$
(VI.7)

$$R_{b} = \{(k_{pbb} + k_{xbb})C_{b\bullet} + (k_{pab} + k_{xab})C_{a\bullet}\}C_{b}$$
(VI.8)

$$R_i = k_i C_i \tag{VI.9}$$

$$R_s = (k_{xas}C_{a\bullet} + k_{xbs}C_{b\bullet})C_s$$
(VI.10)

$$R_t = (k_{xat}C_{a\bullet} + k_{xbt}C_{b\bullet})C_t$$
(VI.11)

$$R_{z} = (k_{za}C_{a\bullet} + k_{zb}C_{b\bullet})C_{z}$$
(VI.12)

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

$$G_{pi} = (R_a M_a + R_b M_b) V_r$$
(VI.13)

Assumindo-se a hipótese do estado quase-estacionário (RAY, 1972), as seguintes expressões podem ser deduzidas para calcular as concentrações totais de radicais livres no reator com terminação nos monômeros *A* ou *B*:

$$C_{a\bullet} = \frac{-l_2 + \sqrt{l_2^2 - 4l_1 l_3}}{2l_1}$$
(VI.14)

$$C_{b\bullet} = \beta C_{a\bullet} \tag{VI.15}$$

com as variáveis intermediárias definidas como:

$$\beta = \frac{(k_{pab} + k_{xab})C_b}{(k_{pba} + k_{xba})C_a}$$
(VI.16)

$$l_{1} = k_{caa} + k_{daa} + 2\beta(k_{cab} + k_{dab}) + \beta^{2}(k_{cbb} + k_{dbb})$$
(VI.17)

$$l_2 = C_z (k_{za} + \beta k_{zb}) \tag{VI.18}$$

$$l_3 = -2k_i C_i \mathcal{E} \tag{VI.19}$$

VI.3.3 Composição do Copolímero "Morto"

As concentrações molares dos dois monômeros no polímero "morto" ($\lambda_a \ e \ \lambda_b$) são calculadas pelos seguintes balanços molares:

$$\frac{d\lambda_a}{dt} = \frac{\lambda_{af} - \lambda_a}{\theta_r} + R_a$$
(VI.20)

$$\frac{d\lambda_b}{dt} = \frac{\lambda_{bf} - \lambda_b}{\theta_r} + R_b$$
(VI.21)

com as respectivas condições iniciais:

$$\lambda_a(0) = \lambda_{a0}$$
$$\lambda_b(0) = \lambda_{b0}$$

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

$$y_{ap} = \frac{\lambda_a}{\lambda_a + \lambda_b}$$
(VI.22)

VI.3.4 Pesos Moleculares Numérico e Ponderal Médios

Na primeira parte deste item (VI.3.4.1), o procedimento de cálculo dos momentos de ordem 0, 1 e 2 da distribuição de peso molecular (MWD) do copolímero "morto" é apresentado. Estes momentos são definidos como a seguir para $k = 0,1,...,\infty$:

$$\Psi_{k}^{p} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_{a} + mM_{b})^{k} P_{n,m}$$
(VI.23)

Na segunda parte (VI.3.4.2), estes momentos são derivados para os momentos da MWD do copolímero "vivo", os quais são definidos como a seguir para $k = 0, 1, ..., \infty$:

$$\Psi_{k}^{a\bullet} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_{a} + mM_{b})^{k} A_{n,m} \bullet$$
 (VI.24)

$$\Psi_{k}^{b\bullet} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_{a} + mM_{b})^{k} B_{n,m} \bullet$$
(VI.25)

Os pesos moleculares numérico e ponderal médios do copolímero "morto" (M_{pn} e M_{pw} , respectivamente) são calculados pelas seguintes relações:

$$M_{pn} = \frac{\Psi_1^p}{\Psi_0^p} \tag{VI.26}$$

$$M_{pw} = \frac{\Psi_2^p}{\Psi_1^p} \tag{VI.27}$$

VI.3.4.1 Momentos da MWD do Copolímero "Morto"

Considerando-se um reator tanque agitado contínuo (CSTR) e utilizando-se a técnica das funções geratrizes (*Generating Function*), as seguintes equações dinâmicas são derivadas conforme Tsoukas et al. (1982):

$$\frac{d\psi_{0}^{p}}{dt} = \frac{\psi_{0f}^{p} - \psi_{0}^{p}}{\theta_{r}} + \frac{1}{2} k_{caa} (\psi_{0}^{a\bullet})^{2} + k_{cab} \psi_{0}^{a\bullet} \psi_{0}^{b\bullet} + \frac{1}{2} k_{cbb} (\psi_{0}^{b\bullet})^{2} \quad (VI.28)$$

$$+ L_{1} \psi_{0}^{a\bullet} + L_{2} \psi_{0}^{b\bullet} \quad (VI.28)$$

$$\frac{d\psi_{1}^{p}}{dt} = \frac{\psi_{1f}^{p} - \psi_{1}^{p}}{\theta_{r}} + k_{caa} \psi_{0}^{a\bullet} \psi_{1}^{a\bullet} + k_{cab} (\psi_{0}^{a\bullet} \psi_{1}^{b\bullet} + \psi_{0}^{b\bullet} \psi_{1}^{a\bullet}) \quad (VI.29)$$

$$+ k_{cbb} \psi_{0}^{b\bullet} \psi_{1}^{b\bullet} + L_{1} \psi_{1}^{a\bullet} + L_{2} \psi_{1}^{b\bullet} \quad (VI.29)$$

$$\frac{d\psi_{2}^{p}}{dt} = \frac{\psi_{2f}^{p} - \psi_{2}^{p}}{\theta_{r}} + k_{caa} \{(\psi_{1}^{a\bullet})^{2} + \psi_{0}^{a\bullet} \psi_{2}^{a\bullet}\}$$

$$+ k_{cab} (2\psi_{1}^{a\bullet} \psi_{1}^{b\bullet} + \psi_{2}^{b\bullet} \psi_{0}^{a\bullet} + \psi_{2}^{a\bullet} \psi_{0}^{b\bullet}) + k_{cbb} \{(\psi_{1}^{b\bullet})^{2} + \psi_{0}^{b\bullet} \psi_{2}^{b\bullet}\} \quad (VI.30)$$

com as respectivas condições iniciais:

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

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

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

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

$$L_{1} = k_{xas}C_{s} + k_{xaa}C_{a} + k_{xab}C_{b} + k_{xat}C_{t} + k_{za}C_{z} + k_{daa}C_{a\bullet} + k_{dab}C_{b\bullet}$$
(VI.31)

$$L_{2} = k_{xbs}C_{s} + k_{xbb}C_{b} + k_{xba}C_{a} + k_{xbt}C_{t} + k_{zb}C_{z} + k_{dbb}C_{b\bullet} + k_{dab}C_{a\bullet}$$
(VI.32)

VI.3.4.2 Momentos da MWD do Copolímero "Vivo"

O método das funções geratrizes é usado para este cálculo (RAY, 1971a, b). Estes momentos são os mesmos para todas as reações e somente dependem do ambiente reacional local. Assim, as expressões analíticas para o cálculo dos momentos da MWD do copolímero "vivo" são definidas como a seguir:

$$\psi_0^{a\bullet} = \frac{B_3}{B_1} \tag{VI.33}$$

$$\psi_1^{a\bullet} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 V_1 (M_b + M_a) + \alpha_1 c_1 M_a}{B_1} - \frac{B_2 B_3}{B_1^2}$$
(VI.34)

$$\psi_{2}^{a\bullet} = \frac{-B_{3}\{(\alpha_{1} + \alpha_{2})M_{a}M_{b} + B_{2}(M_{a} + M_{b} - 1)\}}{B_{1}^{2}}$$

$$+ \frac{\alpha_{1}\alpha_{2}V_{1}(M_{a} + M_{b} - 1)(M_{a} + M_{b})}{B_{1}} + \frac{\alpha_{1}c_{1}M_{a}(M_{a} - 1)}{B_{1}} + \frac{2B_{2}^{2}B_{3}}{B_{1}^{3}} \qquad (VI.35)$$

$$+ \psi_{1}^{a\bullet} - \frac{2B_{2}\{\alpha_{1}\alpha_{2}V_{1}(M_{a} + M_{b}) + \alpha_{1}c_{1}M_{a}\}}{B_{1}^{2}}$$

$$\psi_0^{b\bullet} = \frac{B_4}{B_1}$$
(VI.36)

$$\psi_1^{b\bullet} = \frac{\alpha_1 \alpha_2 V_2 (M_b + M_a) + \alpha_2 c_4 M_b}{B_1} - \frac{B_2 B_4}{B_1^2}$$
(VI.37)

$$\psi_{2}^{b\bullet} = \frac{-B_{4}\{(\alpha_{1} + \alpha_{2})M_{a}M_{b} + B_{2}(M_{a} + M_{b} - 1)\}}{B_{1}^{2}}$$

+ $\frac{\alpha_{1}\alpha_{2}V_{2}(M_{a} + M_{b} - 1)(M_{a} + M_{b})}{B_{1}} + \frac{\alpha_{2}c_{4}M_{b}(M_{b} - 1)}{B_{1}}$ (VI.38)
+ $\frac{2B_{2}^{2}B_{4}}{B_{1}^{3}} + \psi_{1}^{b\bullet} - \frac{2B_{2}\{\alpha_{1}\alpha_{2}V_{2}(M_{a} + M_{b}) + \alpha_{2}c_{4}M_{b}\}}{B_{1}^{2}}$

As seguintes combinações dos parâmetros cinéticos são utilizadas nas equações VI.33-38:

$$\alpha_{1} = \frac{k_{paa}C_{a}}{\{(k_{caa} + k_{daa})C_{a\bullet} + (k_{cab} + k_{dab})C_{b\bullet} + (k_{paa} + k_{xaa})C_{a} + (k_{pab} + k_{xab})C_{b}}$$
(VI.39)
+ $k_{xal}C_{l} + k_{xas}C_{s} + k_{za}C_{z}\}$

$$\alpha_{2} = \frac{k_{pbb}C_{b}}{\{(k_{cbb} + k_{dbb})C_{b\bullet} + (k_{cab} + k_{dab})C_{a\bullet} + (k_{pbb} + k_{xbb})C_{b} + (k_{pba} + k_{xba})C_{a}}$$
(VI.40)
+ $k_{xbt}C_{t} + k_{xbs}C_{s} + k_{zb}C_{z}\}$
$$c_{1} = \frac{2k_{i}\varepsilon C_{i} + C_{s}(k_{xas}C_{a\bullet} + k_{xbs}C_{b\bullet})}{k_{paa}(C_{a} + C_{b})} + \frac{C_{t}(k_{xat}C_{a\bullet} + k_{xbt}C_{b\bullet})}{k_{paa}(C_{a} + C_{b})}$$
(VI.41)
+ $\frac{k_{xaa}C_{a\bullet} + k_{xba}C_{b\bullet}}{k_{paa}}$

$$c_{4} = \frac{2k_{i}\varepsilon C_{i} + C_{s}(k_{xas}C_{a\bullet} + k_{xbs}C_{b\bullet})}{k_{pbb}(C_{a} + C_{b})} + \frac{C_{t}(k_{xat}C_{a\bullet} + k_{xbt}C_{b\bullet})}{k_{pbb}(C_{a} + C_{b})} + \frac{k_{xbb}C_{b\bullet} + k_{xab}C_{a\bullet}}{k_{pbb}}$$
(VI.42)

$$r_1 = \frac{k_{paa}}{k_{pab}} \tag{VI.43}$$

$$r_2 = \frac{k_{pbb}}{k_{pba}} \tag{VI.44}$$

$$\gamma = \frac{k_{pba}}{k_{pab}} \tag{VI.45}$$

$$c_2 = c_4 r_2 \gamma \tag{VI.46}$$

$$c_3 = \frac{c_1 r_1}{\gamma} \tag{VI.47}$$

$$x = \frac{1}{r_1 r_2} \tag{VI.48}$$

$$V_1 = c_2 x - c_1$$
 (VI.49)

$$V_2 = c_3 x - c_4 (VI.50)$$

$$B_{1} = 1 - (\alpha_{1} + \alpha_{2}) + \alpha_{1}\alpha_{2}(1 - x)$$
(VI.51)

$$B_{2} = (M_{a} + M_{b})(1 - x)\alpha_{1}\alpha_{2} - \alpha_{1}M_{a} - \alpha_{2}M_{b}$$
(VI.52)

$$B_3 = \alpha_1 c_1 + \alpha_1 \alpha_2 V_1 \tag{VI.53}$$

$$B_4 = \alpha_2 c_4 + \alpha_1 \alpha_2 V_2 \tag{VI.54}$$

VI.3.5 Balanços Molares do Separador e do Tanque de Armazenamento

Estes equipamentos são modelados através de representações dinâmicas de 1ª ordem das concentrações das espécies, considerando-se os respectivos níveis constantes:

Separador:

$$\frac{dC_{ks}}{dt} = \frac{C_{ksf} - C_{ks}}{\theta_s}$$
(VI.55)

com a seguinte condição inicial: $C_{ks}(0) = C_{kso}$, para k = a, b, i, s, t, z.

Tanque de armazenamento:

$$\frac{dC_{kh}}{dt} = \frac{C_{khf} - C_{kh}}{\theta_h}$$
(VI.56)

com a condição inicial: $C_{kh}(0) = C_{kho}$, para k = a, b, i, s, t, z.

VI.4 CONTROLE FEEDFORWARD DO RECICLO

A corrente de reciclo introduz perturbações na alimentação do reator, fazendo com que as propriedades do polímero sejam desviadas de seus níveis desejados. Visando compensar tais distúrbios, é implementado um controlador *feedforward* no processo. Este atua através da manipulação das vazões de entrada do sistema de modo a manter constantes as vazões e composições na alimentação do reator. Esta ação permite que o reator seja analisado separadamente do restante do meio.

As equações do controle *feedforward* foram obtidas pelo balanço material por componente em torno do ponto de adição de reciclo. Para o monômero *A*, tem-se:

$$F_{a3} = F_{a1} + y_{a2}F_2 \tag{VI.57}$$

Na equação VI.57, F_{a3} e F_{a1} são as vazões molares do componente A nas correntes 3 e 1, respectivamente, F_2 é a vazão molar global da corrente 2 e y_{a2} representa a fração molar de A na corrente 2.

Como se deseja manter o fluxo de monômero A para o reator (F_{a3}) constante, a equação VI.57 é então resolvida para a vazão de A na entrada do sistema (F_{a1}) :

$$F_{a1} = F_{a3} - y_{a2}F_2 \tag{VI.58}$$

As equações correspondentes para as vazões do monômero B e do solvente na entrada do sistema (F_{b1} e F_{s1} , respectivamente) são apresentadas a seguir:

$$F_{b1} = F_{b3} - y_{b2}F_2 \tag{VI.59}$$

$$F_{s1} = F_{s3} - y_{s2}F_2 \tag{VI.60}$$

Portanto, qualquer distúrbio em F_2 ou nas composições da corrente 2 (y_{i2}) fará com que o controlador provoque variações na vazão de entrada do sistema (corrente 1) a fim de manter a alimentação do reator (corrente 3) constante. É importante destacar que se qualquer uma das equações de controle gerar um valor de vazão de alimentação negativo, este valor deve ser ajustado em zero.

Para a análise do controle *feedforward* e, posteriormente, obtenção dos modelos nebulosos e implementação dos controladores híbridos avançados, desenvolveu-se, para o processo, um programa de simulação computacional em linguagem FORTRAN 90 (Compaq Visual Fortran 6.6), o qual integra numericamente o modelo fenomenológico descrito na seção VI.3 (LIMA, 2006). O programa utiliza a rotina DIVPAG (rotina IMSL do FORTRAN) que se baseia nos métodos de Adams-Moulton's ou Gear, pelo fato do sistema de equações do reator ser um problema de valor inicial de equações diferenciais ordinárias. As concentrações iniciais (monômeros, iniciador, solvente, agente de transferência de cadeia e inibidor) no reator, assim como as suas condições operacionais de entrada, são apresentadas na tabela VI.3.

Assim, o desempenho do controle *feedforward* foi examinado através da análise das respostas das variáveis, resultantes de perturbações na taxa de purga para operação estacionária do reator. Inicialmente, a taxa de purga é igual a 0,05 (valor estacionário, conforme tabela VI.1). No instante de 30 horas, ela é alterada para o valor de 0,30 até o tempo de 60 horas, quando então retorna ao seu valor inicial. As figuras VI.2-4 ilustram o comportamento das vazões molares durante todo o intervalo de perturbação. É observado que as correntes de alimentação do reator são mantidas constantes devido à ação do controlador.

Deve-se salientar que as vazões de iniciador, agente de transferência de cadeia, bem como a temperatura da jaqueta do reator não são manipuladas durante a implementação do controle *feedforward*, já que esta estratégia é diretamente aplicada aos distúrbios provenientes da corrente de reciclo, a qual é composta somente pelos monômeros $A \in B$, e pelo solvente.

Deste modo, nos desenvolvimentos descritos a seguir, o controle *feedforward* do reciclo se encontra implementado no processo. O reator é então analisado isoladamente, onde este é definido estar em "malha aberta" para essa condição.

Tabela VI.3. Condições iniciais do processo de copolimerização do MMA/VAc (MANER,

Variável	Valor Inicial
C_{a0}	2,4500.10 ⁻¹ kmol/m ³
C_{b0}	5,6010 kmol/m ³
C_{i0}	1,8163.10 ⁻³ kmol/m ³
C_{s0}	2,7580 kmol/m ³
C_{t0}	3,6524.10 ⁻¹ kmol/m ³
C_{z0}	0,0 kmol/m³
T_{r0}	353,0161 K
$\lambda_{_{a0}}$	8,3092.10 ⁻¹ kmol/m ³
$\lambda_{_{b0}}$	6,5524.10 ⁻¹ kmol/m ³
ψ_{00}^{p}	6,6571.10 ⁻³ kmol/m ³
ψ_{10}^{p}	1,4133.10 ² kg/m ³
ψ_{20}^{p}	4,9458.10 ⁶ kg ² /kmol.m ³
C_{as0}	2,4500.10 ⁻¹ kmol/m ³
C_{bs0}	5,6010 kmol/m ³
C_{is0}	1,8163.10 ⁻³ kmol/m ³
C_{ss0}	2,7580 kmol/m ³
C_{ts0}	3,6524.10 ⁻¹ kmol/m ³
C_{zs0}	0,0 kmol/m³
C_{ah0}	2,9821.10 ⁻¹ kmol/m ³
${C}_{bh0}$	6,8176 kmol/m ³
C_{ih0}	0,0 kmol/m ³
${m C}_{sh0}$	3,3571 kmol/m ³
C_{th0}	0,0 kmol/m ³
C_{zh0}	0,0 kmol/m ³

DOYLE III, 1997).

-

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 115

λ_{af}	0,0 kmol/m ³
$\lambda_{_{bf}}$	0,0 kmol/m ³
ψ_{0f}^{p}	0,0 kmol/m³
ψ_{1f}^{p}	0,0 kg/m³
ψ_{2f}^{p}	0,0 kg²/kmol.m³
$R_{ibs} = F_{i1s}/F_{b3s}$	1,0485x10 ⁻³
M_{a}	100,12 kg/kmol
M_{b}	86,09 kg/kmol
M_{i}	164,21 kg/kmol
M_{s}	78,11 kg/kmol
M_{t}	44,05 kg/kmol
M_z	168,11 kg/kmol



Figura VI.2. Ação do controle *feedforward* nas vazões do monômero *A* para perturbações na taxa de purga.



Figura VI.3. Ação do controle *feedforward* nas vazões do monômero *B* para perturbações na taxa de purga.



Figura VI.4. Ação do controle *feedforward* nas vazões do solvente para perturbações na taxa de purga.
VI.5 ANÁLISE DINÂMICA DO PROCESSO

O comportamento dinâmico do processo foi simulado computacionalmente utilizando o *software* descrito na seção VI.4. As figuras VI.5-8 apresentam o comportamento das variáveis de saída do sistema em "malha aberta" para um distúrbio de 4000 ppm de inibidor, na vazão molar total de alimentação, no tempo t = 50 horas. Essa vazão molar total corresponde à soma das vazões molares de monômeros, iniciador, solvente e agente de transferência de cadeia na entrada do sistema.

A perturbação na concentração molar de inibidor é a mesma considerada por Congalidis et al. (1989) e Maner e Doyle III (1997), sendo esta escolha bastante relevante, pois se trata de um possível distúrbio para o processo. Um estudo do controle regulatório multivariável para as quatro variáveis de saída, considerando essa perturbação, será realizado nas seções VI.7 e VI.8, onde os controladores híbridos avançados propostos terão os seus desempenhos comparados entre si e com as configurações DMC e NMPC-t.



Figura VI.5. Resposta em "malha aberta" da taxa de produção do copolímero (G_{pi}) para uma perturbação de 4000 ppm de inibidor na vazão molar total de alimentação.



Figura VI.6. Resposta em "malha aberta" da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) para uma perturbação de 4000 ppm de inibidor na vazão molar total de alimentação.



Figura VI.7. Resposta em "malha aberta" do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para uma perturbação de 4000 ppm de inibidor na vazão molar total de alimentação.



Figura VI.8. Resposta em "malha aberta" da temperatura do reator (T_r) para uma perturbação de 4000 ppm de inibidor na vazão molar total de alimentação.

Ainda, analisando a dinâmica do processo, foi construída a figura VI.9 de modo a demonstrar as não linearidades presentes no sistema. Como exemplificação, foi escolhido o peso molecular ponderal médio como variável de saída e observado o seu comportamento em "malha aberta" para perturbações degrau de +/- 2% na temperatura da jaqueta do reator, no tempo t = 50 horas. Observa-se claramente na figura VI.9 um comportamento tanto não linear quanto invertido para esta malha de variáveis.

VI.6 SELEÇÃO DAS MALHAS MULTIVARIÁVEIS DE CONTROLE

Para isto, deve-se, inicialmente, considerar que a temperatura de alimentação do reator (T_{rf}) não é manipulável e que a taxa de purga (ξ) já se encontra sob a ação do controlador *feedforward*. Assim, as variáveis do processo envolvidas nos procedimentos de seleção das malhas multivariáveis de controle são mostradas na tabela VI.4.



Figura VI.9. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para perturbações degrau de +/- 2% sobre a temperatura da jaqueta do reator (T_i).

Deste modo, uma matriz de planejamento experimental, adquirida pelo desenvolvimento parcial de um planejamento fatorial fracionário 2⁶⁻² com 1 ponto central, foi obtida através da utilização do *software* STATISTICA 7.0. Assim, um conjunto de condições operacionais na entrada do reator foi gerado e, de posse do programa de simulação do processo descrito na seção VI.4, calculou-se o respectivo conjunto de resultados. Com estas informações, o referido planejamento fatorial fracionário foi completado e os efeitos de cada variável de entrada sobre cada uma das variáveis de saída do sistema foram avaliados. As figuras VI.10-13 apresentam os resultados da análise estatística (as variáveis, cujas barras horizontais ultrapassam a linha vertical tracejada de cor vermelha, possuem efeitos estatisticamente significativos, os quais são mais expressivos quanto maior é o tamanho da barra), enquanto a tabela VI.5 sumariza as devidas conclusões.

É importante citar que a opção pela realização de um planejamento fatorial fracionário é decorrente da necessidade apenas do cálculo qualitativo de influências entre as

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 121

variáveis de processo, não sendo, portanto, necessária a obtenção de um planejamento fatorial completo, onde, provavelmente, obter-se-iam as mesmas conclusões.

Tabela VI.4. Variáveis presentes nos procedimentos de seleção das malhas multivariáveis

de controle para o reator de copolimerização do MMA/VAc.

Entradas						
Taxa de alimentação do MMA (G_{af})						
Taxa de alimentação do VAc (G_{bf})						
Taxa de alimentação do iniciador (G_{if})						
Taxa de alimentação do solvente (G_{sf})						
Taxa de alimentação do agente de transferência						
de cadeia (G_{tf})						
Temperatura da jaqueta do reator (T_j)						

SaídasTaxa de produção do copolímero (G_{pi}) Fração molar de MMA no copolímero (Y_{ap}) Peso molecular ponderal médio (M_{pw}) Temperatura do reator (T_r)



Figura VI.10. Efeitos das variáveis de entrada sobre a taxa de produção do copolímero



Figura VI.11. Efeitos das variáveis de entrada sobre a fração molar do MMA no copolímero

 $(Y_{ap}).$



Figura VI.12. Efeitos das variáveis de entrada sobre o peso molecular ponderal médio



Figura VI.13. Efeitos das variáveis de entrada sobre a temperatura do reator (T_r) .

Tabela VI.5. Efeitos das variáveis de entrada sobre as variáveis de saída para o reator de

Ĩ	3
Saídas	Entradas com Efeitos
	Significativos
G_{pi}	$T_j > G_{if} > G_{bf}$
Y_{ap}	$T_j > G_{af} > G_{bf} > G_{if}$
M_{pw}	$T_j > G_{if} > G_{af}$
T_r	$T_i > G_{if} > G_{bf}$

copolimerização do MMA/VAc.

Logo, a partir da análise estatística, foram selecionadas duas malhas multivariáveis de controle para a implementação dos desenvolvimentos propostos, as quais são descritas na tabela VI.6. Assim, as próximas seções apresentam a modelagem nebulosa dinâmica multivariável e os resultados de controle para cada malha individualmente.

Malhas	Variáveis Manipuladas	Variáveis Controladas
3x2	T_{j},G_{if},G_{bf}	G_{pi}, T_r
4x4	T_{j},G_{if},G_{af} / G_{bf} , G_{bf}	$G_{pi}, Y_{ap}, M_{pw}, T_r$

Tabela VI.6. Malhas multivariáveis de controle para o reator de copolimerização do MMA/VAc.

VI.7 MALHA 3X2

Nesta seção, serão construídos os modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis para a malha de controle 3x2, sendo discutidos os desenvolvimentos presentes na etapa de identificação de dados, além dos passos de treinamento e validação dos modelos. A partir dos modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno obtidos, uma análise das interações presentes na malha multivariável também será apresentada utilizando a técnica RGA. Posteriormente, os controladores híbridos *fuzzy*-preditivos não lineares multivariáveis serão gerados e comparados as estruturas DMC e NMPC-t para os problemas regulatório e servo.

VI.7.1 Modelagem Nebulosa Dinâmica Funcional Não Linear Multivariável

Neste ponto, estabeleceu-se que os controladores híbridos adaptativos não lineares multivariáveis, L-ANFMPC e E-ANFMPC, serão compostos por três modelos nebulosos dinâmicos tipo Takagi-Sugeno e por três modelos nebulosos dinâmicos funcionais com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas (modelos tipo Takagi-Sugeno modificado), respectivamente. Nesta ordem, as configurações L-NFMPC e E-NFMPC utilizarão os primeiros modelos (maiores faixas operacionais) aplicados nas estratégias L-ANFMPC e E-ANFMPC.

Com essas considerações, inicialmente, um algoritmo para modelagem nebulosa dinâmica não linear multivariável, baseado em modelos tipo Takagi-Sugeno, foi desenvolvido usando os métodos do agrupamento subtrativo e dos quadrados mínimos (descritos com detalhes no capítulo IV), sendo este código posteriormente inserido no programa de simulação do processo em "malha aberta" (seção VI.4) para a geração dos três modelos nebulosos dinâmicos tipo Takagi-Sugeno MISO. Como já mencionado no capítulo

V, os modelos formulados possuem faixas operacionais diferentes e a escolha de qual representação utilizar, em um dado instante de amostragem, para o cálculo dos valores preditos na configuração L-ANFMPC, é uma função do valor instantâneo medido para cada variável controlada em relação ao intervalo de aplicação de cada modelo nebuloso.

Portanto, a próxima etapa no processo de modelagem refere-se à geração dos dados de identificação do sistema através de variações aleatórias nos valores das variáveis de entrada. t = 50 horas foi considerado o instante inicial. Os dados de treinamento (determinação dos parâmetros do modelo) e teste (validação), para cada modelo, devem diferir entre si de forma que seja garantida a flexibilidade dos modelos para diferentes condições de operação, dentro, é claro, dos limites estabelecidos como premissas do sistema. De posse dessas informações, o método do agrupamento subtrativo é aplicado para a determinação do número de regras r e dos parâmetros das funções de pertinência gaussianas (centro e desvio-padrão) da parte antecedente dos modelos nebulosos, enquanto o algoritmo dos quadrados mínimos é utilizado no cálculo dos parâmetros das funções conseqüentes da base de regras para cada modelo. Os valores obtidos para esses parâmetros, os quais serão apresentados na seqüência, proporcionam aos modelos uma melhor capacidade de representatividade em relação aos dados de identificação. Assim, três modelos nebulosos dinâmicos não lineares MISO tipo Takagi-Sugeno foram obtidos para cada variável de saída, sendo consideradas sete entradas para cada formulação, sendo duas referentes a cada variável manipulada (o valor atual e o valor imediatamente anterior) e uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada. Uma taxa de amostragem igual a 0,25 horas foi utilizada para um intervalo de simulação de 1230 horas (conjunto de dados contendo 4921 pontos).

Em seguida, e a partir do algoritmo para modelagem nebulosa dinâmica não linear multivariável baseada em modelos tipo Takagi-Sugeno, delineou-se um código computacional para a geração dos modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas (modelos tipo Takagi-Sugeno modificado), sendo este algoritmo implementado, na seqüência, no *software* de simulação do processo em "malha aberta" (seção VI.4). Deste modo, seguindo-se a mesma metodologia descrita anteriormente para a formulação dos três modelos nebulosos dinâmicos não lineares MISO tipo Takagi-Sugeno, os três modelos nebulosos dinâmicos di dinâmicos dinâmicos dinâmicos dinâmicos dinâmicos dinâmicos dinâm

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 126

funcionais não lineares MISO, com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas, foram obtidos para cada variável de saída, sendo também consideradas sete entradas para cada formulação, sendo duas referentes a cada variável manipulada (o valor atual e o valor imediatamente anterior) e uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada. Uma taxa de amostragem igual a 0,25 horas foi utilizada para um intervalo de simulação de 1230 horas (conjunto de dados contendo 4921 pontos). Do mesmo modo que anteriormente, os modelos gerados possuem faixas operacionais diferentes e a escolha de qual representação utilizar, em um dado instante de amostragem, para o cálculo dos valores preditos na configuração E-ANFMPC, é uma função do valor instantâneo medido para cada variável controlada em relação ao intervalo de aplicação de cada modelo nebuloso.

É importante destacar que os conjuntos de dados de identificação considerados na obtenção dos 1^{o^s} modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno e tipo Takagi-Sugeno modificado são idênticos. Isto também é válido para os 2^{o^s} e 3^{o^s} modelos nebulosos. Por definição neste trabalho, a faixas operacionais dos modelos seguem a relação: $1^o > 2^o > 3^o$.

Considerando, primeiramente, os 1^{os} modelos nebulosos, as figuras VI.14-16 apresentam os dados de treinamento e teste para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) e para as taxas de alimentação do iniciador (G_{if}) e do VAc (G_{bf}) , respectivamente. Nesta ordem, o comportamento correspondente da taxa de produção do copolímero (G_{pi}) e da temperatura do reator (T_r) é mostrado nas figuras VI.17-18.



Figura VI.14. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 3x2.



Figura VI.15. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 3x2.



Figura VI.16. Dados de identificação dos 1^{os} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 3x2.



Figura VI.17. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.18. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.

Avaliando agora os 2^{o^s} modelos nebulosos, as figuras VI.19-21 apresentam os dados de treinamento e teste para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) e para as taxas de alimentação do iniciador (G_{if}) e do VAc (G_{bf}) , respectivamente. Nesta ordem, o respectivo comportamento da taxa de produção do copolímero (G_{pi}) e da temperatura do reator (T_r) é mostrado nas figuras VI.22-23.



Figura VI.19. Dados de identificação dos 2^{os} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 3x2.



Figura VI.20. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 3x2.



Figura VI.21. Dados de identificação dos 2^{o^8} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 3x2.



Figura VI.22. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.23. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.

No caso dos 3° modelos nebulosos, as figuras VI.24-26 apresentam os dados de treinamento e teste para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) e para as taxas de alimentação do iniciador (G_{if}) e do VAc (G_{bf}) , respectivamente. Nesta ordem, o comportamento obtido para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) e para a temperatura do reator (T_r) é mostrado nas figuras VI.27-28.



Figura VI.24. Dados de identificação dos 3^{os} modelos nebulosos para a temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 3x2.



Figura VI.25. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 3x2.



Figura VI.26. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 3x2.



Figura VI.27. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.28. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.

As tabelas VI.7-12 mostram os resultados de simulação para os parâmetros dos três modelos nebulosos MISO tipo Takagi-Sugeno, enquanto nas tabelas VI.13-18 são apresentados os resultados para os parâmetros dos três modelos nebulosos MISO com estrutura exponencial para as variáveis de entrada.

	Número de Regras = 1											
	Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo											
	$r_a = 0.75$ $\eta = 4.50$ $\bar{\varepsilon} = 0.50$ $\underline{\varepsilon} = 0.50$						2 = 0,15					
	Parte Antecedente											
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$												
	$u_{111}(k), u_{111}(k-1)$											
	69,28				24,31							
	$u_{112}(k), u_{112}(k-1)$											
		28,39					25,12					
			U	$u_{113}(k),$	u113(k	-1)						
		59,39					23,25					
				<i>Y</i> 11	(k-1)							
		17,41					25,11					
	Parte Conseqüente											
	$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^{2}$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{113k} x 10^2$	$a_{113k-1}x10^2$	$b_{11k-1}x10^2$				
	0.47	-0.51	5.72	-5	54	2.49	-2.33	99.48				

Tabela VI.7. Parâmetros do 1º modelo nebuloso	o tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – M	Malha
---	--	-------

3x2.

	Número de Regras = 1											
	Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo											
	$r_a = 0$	0,75	$\eta = 4,80$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$							
	Parte Antecedente											
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$												
	$u_{111}(k), u_{111}(k-1)$											
65,42				19,45								
			U	$u_{112}(k),$	u ₁₁₂ (k	:-1)						
		32,71					20,10					
			U	$u_{113}(k),$	u ₁₁₃ (k	z-1)						
		57,52			18,60							
				<i>Y11</i>	(k-1)							
		26,00					19,90					
	Parte Conseqüente											
	$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{113k} x 10^2$	$a_{113k-1}xl$	102	$b_{11k-1}x10^2$			
	3,36	-3,39	6,99	-6	73	1,36	-1,12		99,31			

Tabela VI.8. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha

Número de Regras = 1											
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo											
$r_a = 0$	0,75	$\eta = 4,80$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$							
Parte Antecedente											
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$											
	$u_{111}(k), u_{111}(k-1)$										
	62,34					15,56					
		и	$k_{112}(k),$	u112(k	z-1)						
	36,17					16,08					
		U	$k_{113}(k),$	u ₁₁₃ (k	z-1)						
	56,01			14,88							
			<i>Y</i> 11	(k-1)							
	32,40					15,88					
Parte Conseqüente											
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	1x10 ²	$a_{113k} x 10^2$	$a_{113k-1}x10$)2	$b_{11k-1}x10^2$			
2,81	-2,81	7,35	-7.	00	1,68	-1,35		99,08			

Tabela VI.9. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha

	Número de Regras = 1										
	Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
	$r_a = 0$	0,75	$\eta = 4,60$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$						
	Parte Antecedente										
$c_i \ge 10^2$						$\sigma_i \ge 10^2$					
	$u_{211}(k), u_{211}(k-1)$										
	69,28						24,30				
			U	$u_{212}(k),$	u ₂₁₂ (k	:-1)					
		28,39			25,12						
			U	$u_{213}(k),$	u ₂₁₃ (k	z-1)					
		59,39			23,25						
				<i>Y</i> 21	(k-1)						
		24,17					24,67				
	Parte Conseqüente										
	$a_{211k} x 10^2$	$a_{211k-1}x10^2$	$a_{212k}x10^2$	a_{212k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{213k} x 10^2$	$a_{213k-1}x10^{2}$	$b_{21k-1}x10^2$			
	-0,08	-0,09	5,29	-3	36	0,64	-0,28	97,32			

Tabela VI.10. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 140

Número de Regras = 1										
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
$r_a = 0$	0,75	$\eta = 4,80$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$						
Parte Antecedente										
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$										
$u_{211}(k), u_{211}(k-1)$										
65,42				19,45						
		и	$k_{212}(k),$	u ₂₁₂ (k	z-1)					
	32,72					20,10				
		U	$k_{213}(k),$	u ₂₁₃ (k	z-1)					
	57,52			18,60						
			<i>Y</i> 21	(k-1)						
	28,98			20,22						
Parte Conseqüente										
$a_{211k} x 10^2$	$a_{211k-1}x10^2$	$a_{212k}x10^2$	a_{212k}	1x10 ²	$a_{213k}x10^2$	$a_{213k-1}x$	x10 ²	$b_{21k-1}x10^2$		
-0,90	-1,14	6,55	-4,	28	-0,51	0,99	9	96,97		

Tabela VI.11. Parâmetros do 2º	modelo nebuloso tipo) Takagi-Sugeno pa	ara a T_r – Malha
	$3x^2$		

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 141

	Número de Regras = 1									
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
$r_a = 0$),75	$\eta = 4,80$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$						
Parte Antecedente										
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$										
$u_{211}(k), u_{211}(k-1)$										
62,34				15,56						
		и	$k_{212}(k),$	u ₂₁₂ (k	z-1)					
	36,17			16,08						
		U	$k_{213}(k),$	u ₂₁₃ (k	z-1)					
	56,01			14,88						
			<i>Y</i> 21	(k-1)						
	33,52			16,39						
Parte Conseqüente										
$a_{211k} x 10^2$	$a_{211k-1}x10^2$	$a_{212k}x10^2$	a_{212k}	$_{l}x10^{2}$	$a_{213k}x10^2$	a _{213k}	_{k-1} x10 ²	$b_{21k-1}x10^2$		
0,73	-0,99	6,39	-3,	64	-0,21	0	,84	96,43		

Tabela VI.12. Parâmetros do 3	° modelo nebuloso tipo	Takagi-Sugeno para	a T_r – Malha
	3x2		

Tabela VI.13. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi}

Número de Regras = 1										
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
$r_a = 0.75$ $\eta = 4.50$					$\bar{\varepsilon} = 0,50$		<u>E</u>	= 0,15		
	Parte Antecedente									
$c_i \ge 10^2 \qquad \qquad \sigma_i \ge 10^2$										
	$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$									
	69,28			24,31						
		Иe	112(k),	u _{e112} (1	k-1)					
	28,39			25,12						
		<i>U</i> _e	113(k),	u _{e113} (1	k-1)					
	59,39					23,	25			
$y_{eII}(k-1)$										
17,41 25,11										
Parte Conseqüente										
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^{2}$	$a_{e112k} x 10^2$	a_{e112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{e113k} x 10^2$	$a_{e11.}$	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{e11k-1}x10^{2}$		
0.33	-0.36	3.26	-3.	22	1.34	_	1.28	99.71		

– Malha 3x2.

Tabela VI.14. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi}

Número de Regras = 1										
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
$r_a = 0.75$ $\eta = 4.60$					$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,$			= 0,15		
Parte Antecedente										
	$c_i \ge 10$	2				$\sigma_i x$	10 2			
	$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$									
	65,42			19,45						
	$u_{e112}(k), u_{e112}(k-1)$									
	32,71			20,10						
		<i>u</i> _e	113(k),	u _{e113} (1	k-1)					
	57,52			18,60						
<i>y_{e11}(k-1</i>)										
	26,00		19,90							
Parte Conseqüente										
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^{2}$	$a_{e112k}x10^{2}$	a_{e112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{e113k} x 10^2$	<i>a</i> _{e113}	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{e11k-1}x10^{2}$		
2.10	-2.14	4.10	-4	05	0.62	_(0.55	99.62		

– Malha 3x2.

Tabela VI.15. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi}

Número de Regras = 1										
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
$r_a = 0.75$ $\eta = 4.60$					$\bar{\varepsilon} = 0,50$		<u>E</u>	= 0,15		
Parte Antecedente										
	$c_i \ge 10^2$	2				<i>σi</i> x 10	2			
$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$										
	62,34			15,56						
	$u_{e112}(k), u_{e112}(k-1)$									
	36,17			16,08						
		<i>u</i> _e	113(k),	u _{e113} (1	k-1)					
	56,01			14,88						
y _{e11} (k-1)										
	32,40	15,88								
Parte Conseqüente										
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^2$	$a_{e112k}x10^{2}$	a_{e112k}	1x10 ²	$a_{e113k} x 10^2$	a _{e113k-1}	x10 ²	$b_{e11k-1}x10^{2}$		
1.84	-1.90	4.25	-4.	17	0.76	-0.6	57	99.49		

– Malha 3x2.

Número de Regras = 1										
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
$r_a = 0$),75	$\eta = 4,60$			$\bar{\varepsilon} = 0,50$	<u></u> <i>E</i> =	= 0,15			
Parte Antecedente										
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$										
	$u_{e211}(k), u_{e211}(k-1)$									
	69,28			24,31						
	$u_{e212}(k), u_{e212}(k-1)$									
	28,39					25,12				
		ι	1 _{e213} (k)), u _{e213} (1	k-1)					
	59,39					23,25				
$y_{e21}(k-1)$										
24,17 24,67										
Parte Conseqüente										
$a_{e211k} x 10^2$	$a_{e211k-1}x10^{2}$	$a_{e212k} x 10^2$	a_{e212i}	$k-1 \times 10^2$	$a_{e213k} x 10^2$	$a_{e213k-1}x10^{2}$	$b_{e21k-1}x10^{2}$			
0.08	-0.24	2.99	-2	.58	0.21	-0.20	98.95			

Tabela VI.16. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r

– Malha 3x2.

Número de Regras = 1										
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
$r_a = 0$	$r_a = 0.75$ $\eta = 4.70$ $\bar{\varepsilon} =$					<u></u> <i>E</i> :	= 0,15			
Parte Antecedente										
	$c_i \ge 10$	2		$\sigma_i \ge 10^2$						
	$u_{e211}(k), u_{e211}(k-1)$									
	65,42			19,45						
	$u_{e212}(k), u_{e212}(k-1)$									
	32,71					20,10				
		ι	1 _{e213} (k)), u _{e213} (1	k-1)					
	57,52					18,60				
$y_{e21}(k-1)$										
28,98 20,22										
Parte Conseqüente										
$a_{e211k} x 10^2$	$a_{e211k-1}x10^2$	$a_{e212k}x10^{2}$	a_{e212}	_{k-1} x10 ²	$a_{e213k} x 10^2$	$a_{e213k-1}x10^2$	$b_{e21k-1}x10^2$			
0,64	-0,84	3,76	-3	.31	-0,43	0,45	98,90			

Tabela VI.17. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r

– Malha 3x2.

Número de Regras = 1											
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo											
$r_a = 0$),75	$\eta = 4,80$ $\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$									
Parte Antecedente											
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$											
	$u_{e211}(k), u_{e211}(k-1)$										
62,34 15,56											
		u	u _{e212} (k)), $u_{e212}(1)$	k-1)						
	36,17					16,08					
		μ	1 _{e213} (k)), u _{e213} (1	k-1)						
	56,01					14,88					
$y_{e21}(k-1)$											
33,52 16,39											
Parte Conseqüente											
$a_{e211k} x 10^2$	$a_{e211k-1}x10^2$	$a_{e212k} x 10^2$	a_{e212}	$k-1 \times 10^{2}$	$a_{e213k} x 10^2$	$a_{e213k-1}x10^2$	$b_{e21k-1}x10^2$				
0.59	-0,81	3,62	-3	.11	-0,30	0,32	98,79				

Tabela VI.18. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r

– Malha 3x2.

A base de regras dos modelos nebulosos MISO tipo Takagi-Sugeno pode, então, ser descrita da seguinte forma:

SE $(u_{ih1}(k) \notin A_{ih1k}) = (u_{ih1}(k-1) \notin A_{ih1k-1}) = (u_{ih2}(k) \notin A_{ih2k}) = (u_{ih2}(k-1) \notin A_{ih2k-1}) = (u_{ih3}(k) \notin A_{ih3k}) = (u_{ih3}(k-1) \notin A_{ih3k-1}) = (y_{ih}(k-1) \notin B_{ihk-1})$

ENTÃO $y_{ih}(k+1) = a_{ih1k}.u_{ih1}(k) + a_{ih1k-1}.u_{ih1}(k-1) + a_{ih2k}.u_{ih2}(k) + a_{ih2k-1}.u_{ih2}(k-1) + a_{ih3k}.u_{ih3}(k) + a_{ih3k-1}.u_{ih3}(k-1) + b_{ihk-1}.y_{ih}(k-1)$

onde u_{ihj} referem-se as entradas do modelo referente a variável de saída *i*, na regra *h* para a variável de entrada *j* (*i* = 1, ..., *ny*; *h* = 1, ..., *r*; *j* = 1, ..., *nu*; sendo *ny* o número de variáveis controladas, *r* o número de regras e *nu* o número de variáveis manipuladas); y_{ih} referem-se a variável controlada *i* na regra *h*; *k* é o instante de tempo considerado; A_{ihjk} e B_{ihk-1} são funções de pertinência gaussianas referentes às variáveis manipuladas e controladas, respectivamente; a_{ihjk} e b_{ihk-1} são parâmetros das funções conseqüentes dos modelos nebulosos referentes as variáveis manipuladas e controlada, respectivamente.

Neste ponto, é interessante destacar que a base de conhecimento para cada modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno, construído para a malha de controle 3x2, é composta por apenas uma regra. Tal condição foi a que melhor representou o conjunto de dados de identificação para cada variável de saída do processo. Assim, para esta malha particularmente, os controladores não lineares L-NFMPC e L-ANFMPC baseados em tais formulações, os quais foram projetados exclusivamente para atacar problemas de altas complexidades, funcionarão como estratégias aproximadamente lineares de controle preditivo devido ao próprio comportamento da malha.

Os resultados de validação dos modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno estão apresentados nas figuras VI.29-34. Considerando o intervalo de simulação de 1230 horas, o erros quadráticos médios (equação IV.21, no capítulo IV) obtidos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) e para a temperatura do reator (T_r) são mostrados na tabela VI.19. De modo geral, conclui-se que os valores observados são bastante reduzidos tendo como referência a ordem de grandeza das saídas. Desta maneira, e a partir das análises gráficas, observa-se o grande potencial das estruturas propostas na predição das saídas do processo.



Figura VI.29. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 3x2.



Figura VI.30. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha



Figura VI.31. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha



Figura VI.32. Validação do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 3x2.



Figura VI.33. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 3x2.



Figura VI.34. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 3x2.

Modelos									
1° 2° 3°									
G_{pi}	T_r	G_{pi}	T_r	G_{pi}	T_r				
(kg/h)	(K)	(kg/h)	(K)	(kg/h)	(K)				
0,148	0,149	0,135	0,124	0,112	0,099				

Tabela VI.19. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 3x2.

Como observado na tabela VI.19, os erros quadráticos médios decrescem com a diminuição das faixas operacionais dos modelos nebulosos.

Para os modelos nebulosos MISO funcionais com estrutura exponencial para as variáveis de entrada, a base de regras pode ser exposta como:

SE $(u_{eih1}(k) \notin A_{eih1k}) \in (u_{eih1}(k-1) \notin A_{eih1k-1}) \in (u_{eih2}(k) \notin A_{eih2k}) \in (u_{eih2}(k-1) \notin A_{eih2k-1})$ e $(u_{eih3}(k) \notin A_{eih3k}) \in (u_{eih3}(k-1) \notin A_{eih3k-1}) \in (y_{eih}(k-1) \notin B_{eihk-1})$

 $ENTÃO y_{eih}(k+1) = a_{eih1k} exp(u_{eih1}(k)) + a_{eih1k-1} exp(u_{eih1}(k-1)) + a_{eih2k} exp(u_{eih2}(k)) + a_{eih2k-1} exp(u_{eih2}(k-1)) + a_{eih3k} exp(u_{eih3}(k)) + a_{eih3k-1} exp(u_{eih3}(k-1)) + b_{eihk-1} y_{eih}(k-1)$

sendo u_{eihj} , y_{eih} , A_{eihjk} , B_{eihk-1} , a_{eihjk} , b_{eihk-1} definidos como anteriormente para u_{ihj} , y_{ih} , A_{ihjk} , B_{ihk-1} , a_{ihjk} , b_{ihk-1} , respectivamente. k é o instante de tempo considerado.

Logo, os resultados de validação, para tal estrutura, estão apresentados nas figuras VI.35-40. Considerando o intervalo de simulação de 1230 horas, o erros quadráticos médios obtidos para as duas variáveis de saída analisadas são mostrados na tabela VI.20. De modo geral, conclui-se que estes valores possuem dimensões reduzidas tendo como referência a ordem de grandeza das saídas. Deste modo, e a partir das análises gráficas, observa-se que as estruturas de modelo propostas apresentam um enorme potencial para a predição das saídas do processo.


Figura VI.35. Validação do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2.



Figura VI.36. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2.



Figura VI.37. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 3x2.



Figura VI.38. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r -Malha 3x2.



Figura VI.39. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r – Malha 3x2.



Figura VI.40. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r -

Malha 3x2.

Modelos					
1°		2°		3°	
G_{pi}	T_r	G_{pi}	T_r	G_{pi}	T_r
(kg/h)	(K)	(kg/h)	(K)	(kg/h)	(K)
0,148	0,158	0,135	0,132	0,112	0,106

Tabela VI.20. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno modificado para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 3x2.

Do mesmo modo que para os modelos tipo Takagi-Sugeno, é observado na tabela VI.20 que os erros quadráticos médios decrescem com a diminuição das faixas operacionais dos modelos nebulosos.

Comparando-se as tabelas VI.19 e VI.20, vê-se que os valores dos erros são praticamente os mesmos (menores para os modelos apresentados na tabela VI.20, se todos os dígitos são mostrados), na predição da G_{pi} , para os modelos tipo Takagi-Sugeno e tipo Takagi-Sugeno modificado (estrutura exponencial para as variáveis manipuladas). Contudo, os modelos com estrutura exponencial possuem erros com valores ligeiramente superiores na predição da T_r . Isto pode ser explicado pelo fato de T_r possuir uma dependência aproximadamente linear com T_j , conforme observado pelo modelo fenomenológico apresentado na seção VI.3, uma vez que T_j é a variável de entrada com maiores efeitos significativos, como concluído pelo planejamento experimental realizado. Contudo, como será demonstrado nos resultados de controle (VI.7.3) na seqüência, erros de modelagem levemente menores não implicam, necessariamente, no melhor desempenho dos respectivos controladores.

VI.7.2 Análise da RGA

A metodologia de obtenção da RGA foi descrita com detalhes no capítulo IV. Assim, através dos modelos nebulosos MISO multivariáveis tipo Takagi-Sugeno desenvolvidos para a malha $3x^2$ e dos intervalos permitidos de mudanças para cada variável, obteve-se a seguinte matriz *G* (equação IV.23, no capítulo IV):

$$G = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,234 & 0,239 & 0,070 \\ 0,707 & 0,183 & 0,064 \end{bmatrix}$$
(VI.61)

onde, para os g_{ij} , *i* e *j* referem-se, respectivamente, às variáveis controladas e manipuladas; sendo *i* = 1 para G_{pi} , *i* = 2 para T_r , *j* = 1 para T_j , *j* = 2 para G_{if} e *j* = 3 para G_{bf} .

Como a matriz *G* não é quadrada, o sistema foi divido em três matrizes quadradas 2x2 visando ser possível a obtenção da matriz inversa. Em seguida, um *software* foi desenvolvido em linguagem FORTRAN 90, resultando a RGA (equação IV.22, no capítulo IV):

$$RGA \rightarrow \frac{G_{pi}}{T_r} - T_j G_{if} = \begin{bmatrix} -0.338 & 1.338 \\ 1.338 & -0.338 \end{bmatrix}$$
$$RGA \rightarrow \frac{G_{pi}}{T_r} - T_j G_{bf} = \begin{bmatrix} -0.435 & 1.435 \\ 1.435 & -0.435 \end{bmatrix}$$
(VI.62)
$$RGA \rightarrow \frac{G_{pi}}{T_r} - G_{if} G_{bf} = \begin{bmatrix} 6.016 & -5.016 \\ -5.016 & 6.016 \end{bmatrix}$$

Assim, e de posse da tabela IV.1 (no capítulo IV), conclui-se que há muitas interações entre as variáveis e estas mudam para cada par, reforçando ainda mais a necessidade dos desenvolvimentos de controle avançado propostos. Além disso, observa-se que, para um bom funcionamento de controle, G_{pi} deve ser prioritariamente controlada por G_{if} e/ou G_{bf} e T_r deve ser prioritariamente controlada por T_j .

VI.7.3 Resultados de Controle

Nesta seção, são apresentados os resultados de simulação para os quatro controladores híbridos preditivos não lineares multivariáveis, baseados em modelos nebulosos funcionais, propostos. Inicialmente, os algoritmos para as configuração de controle foram desenvolvidos em linguagem de programação FORTRAN 90, sendo posteriormente acoplados ao *software* de simulação do processo em "malha aberta" descrito na seção VI.4. Os critérios *IAE* (equação V.15, no capítulo V), *ITAE* (equação V.16) e *ISE* (equação V.17) foram utilizados para o ajuste dos parâmetros dos controladores, juntamente

com a análise gráfica, devido à presença de comportamentos oscilatórios, buscando-se o melhor conjunto de ações. As estratégias de controle sugeridas foram comparadas entre si e com os controladores DMC e NMPC-t para os problemas regulatório e servo.

Controle Regulatório

Para a análise do problema regulatório, foi considerada uma perturbação de 4000 ppm de inibidor, na vazão molar total de alimentação, no tempo t = 50 horas. Esta é uma possível perturbação para o processo de acordo com Congalidis et al. (1989) e Maner e Doyle III (1997). O intervalo de ação dos controladores é de 0,25 horas. A tabela VI.21 mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores preditivos multivariáveis, bem como fornece informações sobre os índices de desempenho e os tempos computacionais (t_c). Foi utilizado um microcomputador com processador Intel Core 2 Duo E7500 (2,93 GHz) e 4 GB de memória RAM.

As figuras VI.41-52 apresentam uma análise gráfica do comportamento das variáveis controladas, sob as ações de controle regulatório, no intervalo de tempo de 100 horas, enquanto as figuras VI.53-55 mostram os respectivos movimentos das variáveis manipuladas.

Parâmetros	DMC	NMPC-t	L-NFMPC	E-NFMPC	L-ANFMPC	E-ANFMPC
NS	65	-	-	-	-	-
NP	9	2	12	6	12	6
NC	1	1	1	1	1	1
$f(T_j)$		114,590	0,337	0,277	0,307	0,479
$f(G_{if})$	0,900	1,000	0,091	0,091	0,111	0,090
$f(G_{bf})$		2,708	0,035	0,055	0,095	0,125
$\alpha(G_{pi})$		0,013	0,550	0,440	0,424	0,640
$\alpha(T_r)$	0,001	0,001	0,002	0,002	0,003	0,001
$w(G_{pi})$	1,000	3,800	2,000	2,000	1,500	2,000
$w(T_r)$	1,000	5,200	2,800	2,800	8,800	2,160
$t_{c}(s)$	2	11	3	3	7	6
Taxa de produção de copolímero, G_{pi}						
IAE (kg/h)	17,46	9,10	11,99	7,87	10,70	7,82
ITAE (kg)	68,95	67,14	97,61	60,50	90,52	58,41
ISE (kg²/h²)	9,92	1,91	3,14	1,65	2,19	1,49
Temperatura do reator, T _r						
IAE (K)	1,58	5,54	4,98	4,88	1,20	3,96
ITAE (K.h)	13,09	43,20	58,47	47,08	17,87	51,81
ISE (K ²)	0,06	0,56	0,42	0,41	0,02	0,17

Tabela VI.21. Parâmetros dos controladores preditivos multivariáveis para o problema

regulatório – Malha 3x2.



Figura VI.41. Resultados do controle DMC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.42. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.43. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.44. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.45. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.46. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.47. Resultados do controle DMC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.48. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a temperatura do reator (T_r) - Malha 3x2.



Figura VI.49. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.50. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.51. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.52. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.53. Comportamento regulatório da temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha

3x2.



Figura VI.54. Comportamento regulatório da vazão de alimentação de iniciador (G_{if}) – Malha 3x2.



Figura VI.55. Comportamento regulatório da vazão de alimentação de VAc (G_{bf}) – Malha 3x2.

Como observado na tabela VI.21 e nas figuras VI.41-55, todas as configurações de controle desenvolvidas apresentam desempenhos satisfatórios. No entanto, mais especificamente, vê-se claramente que o controlador E-ANFMPC promove o melhor comportamento para o controle da G_{pi} e os controladores L-ANFMPC (critérios *IAE* e *ISE*) e DMC (critério *ITAE*) proporcionam o melhor desempenho para o controle da T_r . Além disso, observa-se comportamentos oscilatórios para as cinco estratégias não lineares analisadas. Também, através das figuras VI.53 e VI.55, notam-se, respectivamente, desvios mínimos na T_j e na G_{bf} devido a ação NMPC-t.

Como particularidades, vê-se, na tabela VI.21, que os valores do fator f são maiores para o controlador NMPC-t, principalmente na supressão da temperatura da jaqueta do reator (T_j), indicando uma maior necessidade de amortecimento para tal estrutura. Além disso, a estratégia NMPC-t possui o maior tempo computacional, sendo este parâmetro menor para o DMC, como esperado.

Controle Servo

Os controladores também foram analisados para situações de mudanças no *setpoint*, com um intervalo de ação de 0,25 horas. A tabela VI.22 mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores preditivos multivariáveis para 8 novas condições ótimas, bem como fornece informações sobre os índices de desempenho e os tempos computacionais (t_c). Do mesmo modo que na análise regulatória, foi utilizado um microcomputador com processador Intel Core 2 Duo E7500 (2,93 GHz) e 4 GB de memória RAM.

Parâmetros	DMC	NMPC-t	L-NFMPC	E-NFMPC	L-ANFMPC	E-ANFMPC
NS	65	-	-	-	-	-
NP	15	2	18	6	18	6
NC	1	1	1	1	1	1
$f(T_j)$		15,000	0,565	0,336	0,307	0,135
$f(G_{if})$	6,000	8,000	0,440	0,149	0,411	0,171
$f(G_{bf})$		30,100	0,145	0,364	0,195	0,533
$\alpha(G_{pi})$	0,001	0,001	0,541	0,442	0,525	0,654
$\alpha(T_r)$		0,001	0,003	0,002	0,001	0,001
$w(G_{pi})$	1,000	81,900	2,600	2,000	1,300	2,400
$w(T_r)$	1,000	133,300	3,300	3,600	1,000	3,600
t_c (s)	5	148	21	24	55	42
Taxa de produção de copolímero, G_{pi}						
IAE (kg/h)	215,2	294,5	299,0	212,7	275,0	259,0
ITAE (kg)	1453,8	2554,9	2554,0	1225,3	2196,9	1847,6
ISE (kg²/h²)	164,4	232,2	253,2	163,7	223,1	234,4
		T	emperatura do	reator, T_r		
IAE (K)	342,2	395,8	329,8	339,9	367,8	319,4
ITAE (K.h)	1730,9	3121,6	1769,5	1545,2	1892,8	1947,8
ISE (K ²)	702,3	678,9	665,4	675,0	798,4	561,4

Tabela VI.22. Parâmetros dos controladores preditivos multivariáveis para o problema

servo – Malha 3x2.

As figuras VI.56-67 apresentam uma análise gráfica do comportamento das variáveis controladas, sob as ações de controle servo, no intervalo de tempo de 800 horas, enquanto as figuras VI.68-70 mostram os respectivos movimentos das variáveis manipuladas.



Figura VI.56. Resultados do controle DMC servo para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.57. Resultados do controle NMPC-t servo para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.58. Resultados do controle L-NFMPC servo para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.59. Resultados do controle E-NFMPC servo para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.60. Resultados do controle L-ANFMPC servo para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.61. Resultados do controle E-ANFMPC servo para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 3x2.



Figura VI.62. Resultados do controle DMC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha

3x2.



Figura VI.63. Resultados do controle NMPC-t servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.64. Resultados do controle L-NFMPC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.65. Resultados do controle E-NFMPC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.66. Resultados do controle L-ANFMPC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.67. Resultados do controle E-ANFMPC servo para a temperatura do reator (T_r) – Malha 3x2.



Figura VI.68. Comportamento servo da temperatura da jaqueta do reator (T_i) – Malha 3x2.



Figura VI.69. Comportamento servo da vazão de alimentação de iniciador (G_{if}) – Malha



Figura VI.70. Comportamento servo da vazão de alimentação de VAc (G_{bf}) – Malha 3x2.

Como observado na tabela VI.22 e nas figuras VI.56-70, todas as configurações de controle desenvolvidas apresentam desempenhos satisfatórios. No entanto, mais especificamente, há uma ligeira superioridade do controlador E-NFMPC no controle da G_{pi} e dos controladores E-ANFMPC (critérios *IAE* e *ISE*) e E-NFMPC (critério *ITAE*) no controle da T_r . Além disso, observa-se comportamentos oscilatórios para as cinco estratégias não lineares analisadas, principalmente no controle da G_{pi} . Também, através da figura VI.70, notam-se desvios mínimos na G_{bf} devido as ações DMC e NMPC-t.

Como particularidades, vê-se, na tabela VI.22, que, do mesmo modo que para o controle regulatório, os valores do fator f são maiores para o controlador NMPC-t, indicando uma maior necessidade de amortecimento para tal estrutura. Além disso, a estratégia NMPC-t possui o maior tempo computacional, sendo este parâmetro bem menor para o DMC.

VI.8 MALHA 4X4

Para esta malha multivariável, é importante destacar a presença de grandes desafios de sintonia se tratada de forma integral, o que já havia sido descrito na literatura (MANER, DOYLE III, 1997) e foi comprovado computacionalmente durante os desenvolvimentos pertinentes a esta tese. Assim, visando solucionar tais empecilhos, optouse pela divisão de tal *loop* em duas malhas de controle, uma multivariável e outra monovariável, conforme exposto na tabela VI.23.

Tabela VI.23. Malha multivariável 4x4 de controle para o reator de copolimerização do

Malhas	Variáveis Manipuladas	Variáveis Controladas
3x3	$G_{\it if}$, $G_{\it af}$ / $G_{\it bf}$, $G_{\it bf}$	G_{pi}, Y_{ap}, M_{pw}
1x1	T_j	T_r

MMA/VAc.

De acordo com Maner e Doyle III (1997), há várias razões práticas para fechar o *loop* de temperatura com uma malha SISO: por exemplo, amostras dos valores de temperatura podem ser obtidas mais freqüentemente que das outras três variáveis de saída; uma segunda razão é em relação a normas de segurança industriais que podem requerer que a temperatura do reator seja omitida de uma estratégia de controle MIMO.

É importante observar que, apesar do fechamento do *loop* de temperatura proporcionar a obtenção de uma nova forma estrutural da malha 4x4 no projeto dos controladores (problema de controle 3x3 melhor condicionado), a complexidade do problema global de controle não é reduzida, pois ele ainda consiste de 4 entradas e 4 saídas com o *loop* SISO afetando o *loop* MIMO e vice-versa.

Com estas considerações, serão construídos, nesta seção, os modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis para a malha de controle 4x4, sendo discutidos os desenvolvimentos presentes na etapa de identificação de dados, além dos passos de treinamento e validação dos modelos. A partir dos modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno obtidos, uma análise das interações presentes na malha multivariável também será apresentada utilizando a técnica RGA. Posteriormente, os controladores

híbridos *fuzzy*-preditivos não lineares multivariáveis serão gerados e comparados as estruturas DMC e NMPC-t para o problema regulatório.

VI.8.1 Modelagem Nebulosa Dinâmica Funcional Não Linear Multivariável

Neste ponto, do mesmo modo que para a malha 3x2, estabeleceu-se que os controladores híbridos adaptativos não lineares multivariáveis, L-ANFMPC e E-ANFMPC, serão compostos por três modelos nebulosos dinâmicos tipo Takagi-Sugeno e por três modelos nebulosos dinâmicos funcionais com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas (modelos tipo Takagi-Sugeno modificado), respectivamente. Nesta ordem, as configurações L-NFMPC e E-NFMPC utilizarão os primeiros modelos (maiores faixas operacionais) aplicados nas estratégias L-ANFMPC e E-ANFMPC.

Com essas considerações, inicialmente, o algoritmo para modelagem nebulosa dinâmica não linear multivariável, baseado em modelos tipo Takagi-Sugeno, desenvolvido previamente para a malha 3x2, foi adaptado e implementado no programa de simulação do processo em "malha aberta" (seção VI.4) para a geração dos três modelos nebulosos dinâmicos tipo Takagi-Sugeno MISO. Como já mencionado para a malha 3x2, os modelos formulados possuem faixas operacionais diferentes e a escolha de qual representação utilizar, em um dado instante de amostragem, para o cálculo dos valores preditos na configuração L-ANFMPC, é uma função do valor instantâneo medido para cada variável controlada em relação ao intervalo de aplicação de cada modelo nebuloso.

Portanto, do mesmo modo que descrito na seção VI.7.1 para a malha 3x2, a próxima etapa no processo de modelagem refere-se à geração dos dados de identificação (treinamento e teste) do sistema através de variações aleatórias nos valores das variáveis de entrada. t = 50 horas foi considerado o instante inicial. De posse dessas informações, o método do agrupamento subtrativo é aplicado para a determinação do número de regras r e dos parâmetros das funções de pertinência gaussianas (centro e desvio-padrão) da parte antecedente dos modelos nebulosos, enquanto o algoritmo dos quadrados mínimos é utilizado no cálculo dos parâmetros das funções conseqüentes da base de regras para cada modelo. Assim, três modelos nebulosos dinâmicos não lineares MISO tipo Takagi-Sugeno foram obtidos para cada variável de saída, sendo consideradas sete entradas para os modelos das variáveis G_{pi} , Y_{ap} e M_{pw} - sendo duas referentes a cada variável manipulada (o

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 179

valor atual e o valor imediatamente anterior) e uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada - e três entradas para os modelos da variável T_r - sendo duas referentes a variável manipulada (o valor atual e o valor imediatamente anterior) e uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada. Uma taxa de amostragem igual a 0,25 horas foi utilizada para um intervalo de simulação de 1230 horas (conjunto de dados contendo 4921 pontos).

Em seguida, o algoritmo para modelagem nebulosa dinâmica não linear multivariável, baseada em modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas (modelos tipo Takagi-Sugeno modificado), desenvolvido previamente para a malha 3x2, foi adaptado e implementado no software de simulação do processo em "malha aberta" (seção VI.4) para a geração dos três modelos nebulosos dinâmicos MISO tipo Takagi-Sugeno modificado. Deste modo, seguindo-se a mesma metodologia descrita anteriormente para a malha 3x2, os três modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares MISO, com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas, foram obtidos para cada variável de saída, sendo também consideradas sete entradas para os modelos das variáveis G_{pi} , Y_{ap} e M_{pw} sendo duas referentes a cada variável manipulada (o valor atual e o valor imediatamente anterior) e uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada e três entradas para os modelos da variáveis T_r - sendo duas referentes a variável manipulada (o valor atual e o valor imediatamente anterior) e uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada. Uma taxa de amostragem igual a 0,25 horas foi utilizada para um intervalo de simulação de 1230 horas (conjunto de dados contendo 4921 pontos). Como já mencionado para a malha 3x2, os modelos formulados possuem faixas operacionais diferentes e a escolha de qual representação utilizar, em um dado instante de amostragem, para o cálculo dos valores preditos na configuração E-ANFMPC, é uma função do valor instantâneo medido para cada variável controlada em relação ao intervalo de aplicação de cada modelo nebuloso.

É importante destacar que, do mesmo modo que para a malha 3x2, os conjuntos de dados de identificação considerados na obtenção dos 1^{os} modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno e tipo Takagi-Sugeno modificado são idênticos. Isto também é válido para os 2^{os} e

 $3^{\circ s}$ modelos nebulosos. Por definição, a faixas operacionais dos modelos seguem a relação: $1^{\circ} > 2^{\circ} > 3^{\circ}$.

Malha Multivariável 3x3

Considerando, primeiramente, os 1^{os} modelos nebulosos, as figuras VI.71-73 apresentam os dados de treinamento e teste para a taxa de alimentação do iniciador (G_{if}), a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) e a taxa de alimentação do VAc (G_{bf}), respectivamente. Nesta ordem, o comportamento correspondente da taxa de produção do copolímero (G_{pi}), da fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) e do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) é mostrado nas figuras VI.74-76.



Figura VI.71. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 4x4.



Figura VI.72. Dados de identificação dos 1° modelos nebulosos para a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) – Malha 4x4.



Figura VI.73. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 4x4.



Figura VI.74. Dados de identificação dos 1^{os} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.75. Dados de identificação dos 1^{os} modelos nebulosos para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.76. Dados de identificação dos 1^{o^s} modelos nebulosos para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.

Avaliando agora os 2^{o^s} modelos nebulosos, as figuras VI.77-79 apresentam os dados de treinamento e teste para a taxa de alimentação do iniciador (G_{if}), a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) e a taxa de alimentação do VAc (G_{bf}), respectivamente. Nesta ordem, o respectivo comportamento da taxa de produção do copolímero (G_{pi}), da fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) e do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) é mostrado nas figuras VI.80-82.



Figura VI.77. Dados de identificação dos 2^{os} modelos nebulosos para a vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 4x4.



Figura VI.78. Dados de identificação dos 2^{os} modelos nebulosos para a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) – Malha 4x4.



Figura VI.79. Dados de identificação dos 2^{os} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 4x4.



Figura VI.80. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.81. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.82. Dados de identificação dos 2^{o^s} modelos nebulosos para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 187

No caso dos 3^{os} modelos nebulosos, as figuras VI.83-85 apresentam os dados de treinamento e teste para a taxa de alimentação do iniciador (G_{if}), a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) e a taxa de alimentação do VAc (G_{bf}), respectivamente. Nesta ordem, o comportamento obtido para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}), para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) e para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) é mostrado nas figuras VI.86-88.



Figura VI.83. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para vazão de iniciador na alimentação do reator (G_{if}) – Malha 4x4.



Figura VI.84. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a razão entre as vazões de alimentação do MMA e VAc no reator (G_{af}/G_{bf}) – Malha 4x4.



Figura VI.85. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a vazão de VAc na alimentação do reator (G_{bf}) – Malha 4x4.


Figura VI.86. Dados de identificação dos 3^{os} modelos nebulosos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.87. Dados de identificação dos 3^{o^s} modelos nebulosos para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.88. Dados de identificação dos 3^{os} modelos nebulosos para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.

As tabelas VI.24-32 mostram os resultados de simulação para os parâmetros do 3 modelos nebulosos MISO tipo Takagi-Sugeno, enquanto nas tabelas VI.33-41 são apresentados os resultados para os parâmetros dos três modelos nebulosos MISO com estrutura exponencial para as variáveis de entrada.

Número de Regras = 1								
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo								
$r_a = 0$),95	$\eta = 5,70$	$0 \qquad \bar{\varepsilon} = 0,50 \qquad \underline{\varepsilon} = 0,15$					
		Pa	arte Ai	nteced	ente			
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$								
		U	$k_{111}(k),$	u111(k	z-1)			
24,72 32,70								
		и	$_{112}(k),$	u112(k	z-1)			
	50,18					30,	89	
		и	$k_{113}(k),$	u113(k	<i>:-1</i>)			
	74,12					29,	48	
$y_{11}(k-1)$								
	13,92 25,64							
		Pa	rte Co	nseqü	ente			
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	$a_{113k}x10^2$ $a_{113k}x10^2$ $a_{113k-1}x10^2$ b_{11k}				$b_{11k-1}x10^2$
0,71	-0,71	0,69	-0.	65	1,40	-	1,38	99,86

Tabela VI.24. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha

Número de Regras = 1								
	Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo							
$r_a = 0$),95	$\eta = 5,60$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$				
		Pa	arte Ai	nteced	ente			
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$								
		U	$k_{111}(k),$	<i>u</i> 111(<i>k</i>	-1)			
27,36 27,61								
		и	$k_{112}(k),$	u112(k	-1)			
	50,14					24,02		
		U	$k_{113}(k),$	u ₁₁₃ (k	-1)			
	68,09					22,11		
$y_{11}(k-1)$								
18,35 24,46								
	Parte Conseqüente							
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{113k} x 10^2$	$a_{113k-1}x10$	$b_{11k-1}x10^2$	
0,63	-0,61	0,54	-0	50	1,08	-1,07	99,87	

Tabela VI.25. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha

Tabela VI.26. Parâmetros do 3	3° modelo nebuloso	tipo Takagi-Sugeno	para a G_{pi} – Malha
-------------------------------	--------------------	--------------------	-------------------------

Número de Regras = 1									
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo									
$r_a = 0$	0,75	$\eta = 4,80$			$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$				
		Pa	arte Ai	nteced	ente				
	<i>c</i> _{<i>i</i>} x 10	2				$\sigma_i \ge 10^2$			
		U	$k_{111}(k),$	<i>u</i> 111(<i>k</i>	-1)				
29,84 22,30									
		и	$k_{112}(k),$	u112(k	-1)				
	50,10					17,16			
		U	$k_{113}(k),$	u113(k	-1)				
	62,06					14,74			
	$y_{11}(k-1)$								
	27,78 22,71								
		Pa	rte Co	onseqü	ente				
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{113k} x 10^2$	$a_{113k-1}x10^{-1}$	$b_{11k-1}x10^2$		
0,99	-0,93	1,13	-1	12	1,76	-1,76	99,90		

4x4.

Número de Regras = 1								
	Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo							
$r_a = 0$	9,95	$\eta = 6,40$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$				
		Pa	arte Ai	nteced	ente			
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$								
		и	$k_{111}(k),$	<i>u</i> 111(<i>k</i>	-1)			
73,92 32,70								
		и	$k_{112}(k),$	u112(k	-1)			
	77,88				30,89			
		U	$k_{113}(k),$	u113(k	-1)			
	74,01 29,48							
$y_{11}(k-1)$								
87,87 28,66								
		Pa	rte Co	onseqü	ente			
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	$a_{113k}x10^2$ $a_{113k}x10^2$ $a_{11}a_{11}x^2$		$a_{113k-1}x10^2$	$b_{11k-1}x10^2$	
0,20	-0,08	0,41	-0,	17	0,52	-0,50	99,78	

Tabela VI.27. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha

Tabela VI.28. Parâmetros do 2º modelo nebulos	oso tipo Takagi-Sugeno para a Y _{ap} – M	alha
---	---	------

Número de Regras = 1								
	Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo							
$r_a = 0$	9,95	$\eta = 6,40$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$				
		Pa	arte Ai	nteced	ente			
$c_i \ge 10^2 \qquad \qquad \sigma_i \ge 10^2$					$\sigma_i \ge 10^2$			
		и	111(k),	<i>u</i> 111(<i>k</i>	-1)			
68,89 27,61								
		и	$_{112}(k),$	<i>u</i> ₁₁₂ (<i>k</i>	-1)			
	71,68					24,02		
		U	$_{113}(k),$	u113(k	-1)			
	68,01					22,11		
<i>y</i> ₁₁ (<i>k</i> -1)								
	84,52 23,09							
		Pa	rte Co	onseqü	ente			
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k}x10^2$	a_{112k}	₁ x10 ²	$a_{113k}x10^2$	$a_{113k-1}x10^2$	$b_{11k-1}x10^2$	
0,04	0,09	0,18	0,	05	0,22	-0,19	99,78	

4x4.

Número de Regras = 1									
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo									
$r_a = 0$),95	$\eta = 6,40$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,15$					
		Pa	arte Ai	nteced	ente				
$c_i \ge 10^2 \qquad \qquad \sigma_i \ge 10^2$									
		U	$k_{111}(k),$	u111(k	-1)				
	63,38					22,3	30		
		U	$u_{112}(k),$	u112(k	-1)				
	65,49					17,1	16		
		U	$u_{113}(k),$	u ₁₁₃ (k	-1)				
	62,00					14,7	74		
$y_{11}(k-1)$									
80,00 18,19									
		Pa	arte Co	onseqü	ente				
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{113k} x 10^2$	<i>a</i> ₁₁₃	$_{k-1} x 10^2$	$b_{11k-1}x10^2$	
0,05	0,09	0,19	0,	04	0,08	-(0,06	99,78	

Tabela VI.29. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha

4x4.

Tabela VI.30. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malh
--

Número de Regras = 1										
	Parâme	etros do Mé	todo d	o Agrı	upamento S	ubtrativo				
$r_a = 0$),90	$\eta = 4,20$)		$\underline{\varepsilon} = 0,15$					
		Pa	arte Ai	nteced	ente					
	$c_i \ge 10^6$	2		$\sigma_i \ge 10^2$						
$u_{111}(k), u_{111}(k-1)$										
	24,72					30,98				
$u_{112}(k), u_{112}(k-1)$										
	50,18			29,26						
		U	$k_{113}(k),$	u113(k	-1)					
	74,12			27,93						
			<i>Y</i> 11	(k-1)						
	28,74					31,10				
		Pa	rte Co	onseqü	ente					
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	1x10 ²	$a_{113k} x 10^2$	$a_{113k-1}x10$	$b^2 b_{11k-1} x 10^2$			
0,28	0,20	0,15	0,	13	0,17	-0,38	99,49			

4x4.

Número de Regras = 1										
	Parâme	etros do Mé	todo d	o Agr	upamento S	ubtrat	tivo			
$r_a = 0$),90	$\eta = 4,10$)		$\bar{\varepsilon} = 0,50$		<u>E</u>	= 0,15		
		Pa	arte Ai	nteced	ente					
	$c_i \ge 10^6$		$\sigma_i \ge 10^2$							
$u_{111}(k), u_{111}(k-1)$										
	27,36			26,15						
		и	$k_{112}(k),$	u ₁₁₂ (k	z-1)					
	50,14			22,76						
		U	$k_{113}(k),$	u ₁₁₃ (k	z-1)					
	68,09			20,94						
			<i>Y</i> 11	(<i>k</i> -1)						
	36,50					27,0)7			
		Pa	rte Co	nseqü	ente					
$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{113k} x 10^2$	a _{113k}	$k_{-1} x 10^{2}$	$b_{11k-1}x10^2$		
0,42	0,15	-0,02	0,	35	-0,04	-0),17	99,42		

Tabela VI.31. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha

4x4.

	Número de Regras = 1											
		Parâme	etros do Mé	todo d	o Agr	upamento S	ubtra	ativo				
	$r_a = 0$	9,90	$\eta = 4,20$)		$\bar{\varepsilon} = 0,50$		$\underline{\mathcal{E}}$	= 0,15			
			Pa	arte Ai	nteced	ente						
$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$							10 2					
	$u_{111}(k), u_{111}(k-1)$											
		29,84			21,12							
			и	$k_{112}(k),$	u112(k	z-1)						
		50,10			16,26							
			U	$k_{113}(k),$	u ₁₁₃ (k	<i>c-1</i>)						
		62,06			13,96							
				<i>Y</i> 11	(k-1)							
		45,49					20,	50				
			Pa	rte Co	nseqü	ente						
	$a_{111k} x 10^2$	$a_{111k-1}x10^2$	$a_{112k} x 10^2$	a_{112k}	1x10 ²	$a_{113k} x 10^2$	<i>a</i> ₁₁	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{11k-1}x10^2$			
	0,20	0,56	0,12	0,	32	-0,05	-	0,12	99,19			

Tabela VI.32. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha

Tabela VI.33. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi}

Número de Regras = 1										
	Parâmo	etros do Mé	todo d	o Agrı	ipamento S	ubtrativo				
$r_a = 0$	$= 0.95 \qquad \eta = 5.70 \qquad \bar{\varepsilon} = 0.50$				$\bar{\varepsilon} = 0,50$		<u>E</u>	= 0,15		
		Pa	arte Ai	nteced	ente					
	$c_i \ge 10^6$		$\sigma_i \ge 10^2$							
$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$										
	24,72			32,70						
		Иe	_{e112} (k),	u _{e112} (1	k-1)					
	50,18			30,89						
		<i>U</i> _e	$k_{113}(k),$	u _{e113} (1	k-1)					
	74,12			29,48						
			y _{e1}	(k-1)						
	13,92					25,64				
		Pa	rte Co	nseqü	ente					
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^{2}$	$a_{e112k} x 10^2$	a_{e112k}	₁ x10 ²	$a_{e113k} x 10^2$	$a_{e113k-1}xl$	O^2	$b_{e11k-1}x10^{2}$		
0.49	-0.51	0.42	-0	40	0.86	-0.86		99.91		

– Malha 4x4.

Tabela VI.34. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi}

Número de Regras = 1											
	Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo										
$r_a = 0$	$r_a = 0.95$ $\eta = 5.60$						<u></u>	= 0,15			
		Pa	arte Ai	nteced	ente						
$c_i \ge 10^2$					$\sigma_i \ge 10^2$						
$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$											
	27,36				27,61						
		Иe	$k_{112}(k),$	u _{e112} (k-1)						
	50,14			24,02							
		Иe	113(k),	u _{e113} (1	k-1)						
	68,09			22,11							
			y _{e1}	(k-1)							
	18,35					24,40	6				
		Pa	rte Co	onseqü	ente						
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^2$	$a_{e112k}x10^2$	a_{e112k}	_1x10 ²	$a_{e113k}x10^2$	a_{e113k}	-1x10 ²	$b_{e11k-1}x10^{2}$			
0.36	-0.36	0.34	-0.	.33	0.68	-0.	.68	99.93			

– Malha 4x4.

Tabela VI.35. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi}

Número de Regras = 1										
	Parâm	etros do Mé	todo d	o Agrı	upamento S	ubtra	tivo			
$r_a = 0$	9,95	$\eta = 5,10$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon}$			= 0,15			
		Pa	arte Ai	nteced	ente					
	$c_i \ge 10$	2		$\sigma_i \ge 10^2$						
$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$										
	29,84				22,30					
$u_{e112}(k), u_{e112}(k-1)$										
	50,10			17,16						
		И _е	113(k),	u _{e113} (1	k-1)					
	62,06			14,74						
			y _{e1}	(k-1)						
	27,78					22,	71			
		Pa	rte Co	onseqü	ente					
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^{2}$	$a_{e112k}x10^2$	a_{e112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{e113k} x 10^2$	<i>a</i> _{e11}	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{e11k-1}x10^{2}$		
0.63	-0.62	0.70	-0	70	1.09	_	1.10	99.95		

– Malha 4x4.

Tabela VI.36. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap}

Número de Regras = 1										
	Parâmo	etros do Mé	todo d	o Agr	upamento S	ubtra	ativo			
$r_a = 0$	9,95	$\eta = 6,40$)		$\bar{\varepsilon} = 0,50$		$\underline{\mathcal{E}}$	= 0,15		
		Pa	arte Ai	nteced	ente					
	$c_i \ge 10^6$		$\sigma_i \ge 10^2$							
$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$										
	73,92			32,70						
		Иe	_{e112} (k),	<i>u</i> _{e112} (k-1)					
	77,88			30,89						
		И _е	113(k),	u _{e113} (k-1)					
	74,01			29,48						
			y _{e1}	(<i>k</i> -1)						
	87,87					28,	66			
		Pa	irte Co	nseqü	ente					
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^{2}$	$a_{e112k} x 10^2$	a_{e112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{e113k} x 10^2$	a_{e11}	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{e11k-1}x10^{2}$		
0.10	-0.03	0.23	-0	07	0.31	_	0.32	99.53		

– Malha 4x4.

Tabela VI.37. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap}

Número de Regras = 1										
	Parâme	etros do Mé	todo d	o Agri	upamento S	ubtra	ativo			
$r_a = 0$),95	$\eta = 6,40$)		$\bar{\varepsilon} = 0,50$		<u>E</u>	= 0,15		
		Pa	arte Ai	iteced	ente					
	$c_i \ge 10^6$		$\sigma_i \ge 10^2$							
$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$										
	68,89			27,61						
		И _е	e112(k),	<i>u</i> _{e112} (k-1)					
	71,68			24,02						
		И _е	113(k),	u _{e113} (k-1)					
	68,01			22,11						
			y _{e1}	(<i>k</i> -1)						
	84,52			23,09						
		Pa	rte Co	nseqü	ente					
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^2$	$a_{e112k}x10^2$	a_{e112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{e113k}x10^2$	<i>a</i> _{e11}	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{e11k-1}x10^2$		
0.02	0.06	0.10	0.)5	0.10	_	0.13	99.59		

– Malha 4x4.

Tabela VI.38. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap}

Número de Regras = 1										
	Parâme	etros do Mé	todo d	o Agr	upamento S	ubtra	ativo			
$r_a = 0$),95	$\eta = 6,40$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon}$			$\underline{\mathcal{E}}$	= 0,15		
		Pa	arte Ai	nteced	ente					
	$c_i \ge 10^6$		$\sigma_i \ge 10^2$							
$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$										
	63,38			22,30						
		Иe	e112(k),	<i>u_{e112}(</i>	k-1)					
	65,49			17,16						
		И _е	113(k),	u _{e113} (k-1)					
	62,00			14,74						
			Ye1	(<i>k</i> -1)						
	80,00					18,	18			
		Pa	rte Co	nseqü	ente			_		
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^2$	$a_{e112k}x10^2$	a_{e112k}	$_{1}x10^{2}$	$a_{e113k}x10^2$	<i>a</i> _{e11}	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{e11k-1}x10^2$		
0.02	0.06	0.10	0.)3	0.01	_	0.06	99.67		

– Malha 4x4.

Tabela VI.39. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o

Número de Regras = 1									
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo									
$r_a = 0$),90	$\eta = 4,20$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0$			= 0,15		
	Parte Antecedente								
	<i>c</i> _{<i>i</i>} x 10	2		$\sigma_i \ge 10^2$					
		И _е	$k_{111}(k),$	u _{e111} (1	k-1)				
	24,72				30,98				
$u_{e112}(k), u_{e112}(k-1)$									
	50,18					29,	26		
	$u_{e113}(k), u_{e113}(k-1)$								
	74,12					27,	93		
y _{e11} (k-1)									
28,74 31,10									
	Parte Conseqüente								
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^{2}$	$a_{e112k}x10^2$	a_{e112k}	_1x10 ²	$a_{e113k} x 10^2$	a_{e11}	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{e11k-1}x10^{2}$	
0,12	0,06	0,08	0.	0.02 0.06 -0.24 99				99,64	

 M_{pw} – Malha 4x4.

Tabela VI.40. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o

Número de Regras = 1									
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo									
$r_a = 0$),90	$\eta = 4,10$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0$			= 0,15		
	Parte Antecedente								
	<i>c</i> _{<i>i</i>} x 10	2		$\sigma_i \ge 10^2$					
		Иe	(k),	u _{e111} (1	k-1)				
27,36					26,15				
$u_{e112}(k), u_{e112}(k-1)$									
	50,14					22,	76		
	$u_{e113}(k), u_{e113}(k-1)$								
	68,09					20,	94		
<i>y_{e11}(k-1)</i>									
36,50 27,07									
Parte Conseqüente									
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^{2}$	$a_{e112k}x10^2$	a_{e112k}	_1x10 ²	$a_{e113k} x 10^2$	<i>a</i> _{e11}	$_{3k-1} x 10^2$	$b_{e11k-1}x10^{2}$	
0.22	0.00	-0.01	0.	.13 -0.11 -0.09 99.				99.58	

Tabela VI.41. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o

Número de Regras = 1								
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo								
$r_a = 0$),90	$\eta = 4,20$)	$\bar{\varepsilon} = 0,50$ $\underline{\varepsilon} = 0,7$			= 0,15	
		Pa	arte Ai	nteced	ente			
	$c_i \ge 10^{\circ}$	2		$\sigma_i \ge 10^2$				
		И _е	111(k),	u _{e111} (k-1)			
29,84 21,12								
		и _е	112(k),	u _{e112} (k-1)			
	50,10					16,26		
		И _е	113(k),	<i>u_{e113}(1</i>	k-1)			
	62,06 13,96							
$y_{e11}(k-1)$								
45,49 20,50								
	Parte Conseqüente							
$a_{e111k} x 10^2$	$a_{e111k-1}x10^2$	$a_{e112k} x 10^2$	a_{e112k}	.1x10 ²	$a_{e113k} x 10^2$	$a_{e113k-1}x10^{2}$	$b_{e11k-1}x10^{2}$	
0,10	0,24	0,06	0,11		-0,17	-0,10	99,36	

A base de regras dos modelos nebulosos MISO tipo Takagi-Sugeno para as variáveis de saída G_{pi} , $Y_{ap} \in M_{pw}$ pode, então, ser descrita da seguinte forma:

SE $(u_{ih1}(k) \notin A_{ih1k})$ e $(u_{ih1}(k-1) \notin A_{ih1k-1})$ e $(u_{ih2}(k) \notin A_{ih2k})$ e $(u_{ih2}(k-1) \notin A_{ih2k-1})$ e $(u_{ih3}(k) \notin A_{ih3k})$ e $(u_{ih3}(k-1) \notin A_{ih3k-1})$ e $(y_{ih}(k-1) \notin B_{ihk-1})$

ENTÃO $y_{ih}(k+1) = a_{ih1k}.u_{ih1}(k) + a_{ih1k-1}.u_{ih1}(k-1) + a_{ih2k}.u_{ih2}(k) + a_{ih2k-1}.u_{ih2}(k-1) + a_{ih3k}.u_{ih3}(k) + a_{ih3k-1}.u_{ih3}(k-1) + b_{ihk-1}.y_{ih}(k-1)$

onde u_{ihj} referem-se as entradas do modelo referente a variável de saída *i*, na regra *h* para a variável de entrada *j* (*i* = 1, ..., *ny*; *h* = 1, ..., *r*; *j* = 1, ..., *nu*; sendo *ny* o número de variáveis controladas, *r* o número de regras e *nu* o número de variáveis manipuladas); y_{ih} referem-se a

variável controlada *i* na regra *h*; *k* é o instante de tempo considerado; A_{ihjk} e B_{ihk-1} são funções de pertinência gaussianas referentes às variáveis manipuladas e controladas, respectivamente; a_{ihjk} e b_{ihk-1} são parâmetros das funções conseqüentes dos modelos nebulosos referentes as variáveis manipuladas e controlada, respectivamente.

Os resultados de validação dos modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno para as variáveis de saída G_{pi} , Y_{ap} e M_{pw} estão apresentados nas figuras VI.89-97. Considerando o intervalo de simulação de 1230 horas, o erros quadráticos médios (equação IV.21, no capítulo IV) obtidos para a taxa de produção do copolímero (G_{pi}), para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) e para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) são mostrados na tabela VI.42. De modo geral, conclui-se que estes valores são bastante reduzidos tendo como referência a ordem de grandeza das saídas. Desta maneira, e a partir das análises gráficas, observa-se o grande potencial das estruturas propostas na predição das saídas do processo.



Figura VI.89. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 4x4.



Figura VI.90. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha 4x4.



Figura VI.91. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a G_{pi} – Malha



Figura VI.92. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha 4x4.



Figura VI.93. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Yap – Malha



Figura VI.94. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a Y_{ap} – Malha 4x4.



Figura VI.95. Validação do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha



Figura VI.96. Validação do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha 4x4.



Figura VI.97. Validação do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para o M_{pw} – Malha

Tabela VI.42. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 3x3.

Modelos								
1° 2° 3°								
G_{pi}	Y_{ap}	M_{pw}	G_{pi}	Y_{ap}	M_{pw}	G_{pi}	Y_{ap}	M_{pw}
(kg/h)	(-)	(kg/kmol)	(kg/h)	(-)	(kg/kmol)	(kg/h)	(-)	(kg/kmol)
0,0474	0,0010	92,7458	0,0398	0,0008	75,8531	0,0364	0,0006	57,4174

Como observado na tabela VI.42, os erros quadráticos médios decrescem com a diminuição das faixas operacionais dos modelos nebulosos.

Para os modelos nebulosos MISO funcionais, com estrutura exponencial para as variáveis de entrada, das variáveis de saída G_{pi} , $Y_{ap} \in M_{pw}$, a base de regras pode ser exposta como:

SE $(u_{eih1}(k) \notin A_{eih1k}) = (u_{eih1}(k-1) \notin A_{eih1k-1}) = (u_{eih2}(k) \notin A_{eih2k}) = (u_{eih2}(k-1) \notin A_{eih2k-1})$ e $(u_{eih3}(k) \notin A_{eih3k}) = (u_{eih3}(k-1) \notin A_{eih3k-1}) = (y_{eih}(k-1) \notin B_{eihk-1})$

 $ENTÃO y_{eih}(k+1) = a_{eih1k}.exp(u_{eih1}(k)) + a_{eih1k-1}.exp(u_{eih1}(k-1)) + a_{eih2k}.exp(u_{eih2}(k)) + a_{eih2k-1}.exp(u_{eih2}(k-1)) + a_{eih3k}.exp(u_{eih3}(k)) + a_{eih3k-1}.exp(u_{eih3}(k-1)) + b_{eihk-1}.y_{eih}(k-1)$

sendo u_{eihj} , y_{eih} , A_{eihjk} , B_{eihk-1} , a_{eihjk} , b_{eihk-1} definidos como anteriormente para u_{ihj} , y_{ih} , A_{ihjk} , B_{ihk-1} , a_{ihjk} , b_{ihk-1} , respectivamente. k é o instante de tempo considerado.

Logo, os resultados de validação, para tal estrutura, estão apresentados nas figuras VI.98-106 para as variáveis de saída G_{pi} , $Y_{ap} \in M_{pw}$. Considerando o intervalo de simulação de 1230 horas, o erros quadráticos médios obtidos para as três variáveis de saída analisadas são mostrados na tabela VI.43. De modo geral, conclui-se que estes valores possuem dimensões reduzidas tendo como referência a ordem de grandeza das saídas. Deste modo, e a partir das análises gráficas, observa-se que as estruturas de modelo propostas apresentam um enorme potencial para a predição das saídas do processo.



Figura VI.98. Validação do 1° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} - Malha 4x4.



Figura VI.99. Validação do 2° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} - Malha 4x4.



Figura VI.100. Validação do 3° modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a G_{pi} – Malha 4x4.



Figura VI.101. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4.



Figura VI.102. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4.



Figura VI.103. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Y_{ap} – Malha 4x4.



Figura VI.104. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4.



Figura VI.105. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4.



Figura VI.106. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para o M_{pw} – Malha 4x4.

Tabela VI.43. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno modificado para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 3x3.

Modelos								
1º 2º 3º				3°				
G_{pi}	Y_{ap}	M_{pw}	G_{pi}	Y_{ap}	M_{pw}	G_{pi}	Y_{ap}	M_{pw}
(kg/h)	(-)	(kg/kmol)	(kg/h)	(-)	(kg/kmol)	(kg/h)	(-)	(kg/kmol)
0,0446	0,0011	89,1679	0,0396	0,0008	76,1336	0,0361	0,0006	60,8419

Do mesmo modo que para os modelos tipo Takagi-Sugeno, é observado na tabela VI.43 que os erros quadráticos médios decrescem com a diminuição das faixas operacionais dos modelos nebulosos.

Comparando-se as tabelas VI.42 e VI.43, vê-se que os valores dos erros são praticamente os mesmos para os modelos tipo Takagi-Sugeno e tipo Takagi-Sugeno modificado (estrutura exponencial para as variáveis manipuladas), na predição das três variáveis de saída examinadas.

Malha Monovariável 1x1

As figuras VI.107-109 apresentam os dados de treinamento e teste para os três modelos nebulosos da temperatura da jaqueta do reator (T_j) . O comportamentos correspondentes da temperatura do reator (T_r) são mostrados nas figuras VI.110-112.



Figura VI.107. Dados de identificação do 1º modelo nebuloso para a temperatura da jaqueta do reator (T_i) – Malha 4x4.



Figura VI.108. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para a temperatura da jaqueta do reator (T_i) – Malha 4x4.



Figura VI.109. Dados de identificação do 3º modelo nebuloso para a temperatura da jaqueta do reator (T_i) – Malha 4x4.



Figura VI.110. Dados de identificação do 1º modelo nebuloso para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4.



Figura VI.111. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4.



Figura VI.112. Dados de identificação do 3º modelo nebuloso para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4.

As tabelas VI.44-46 mostram os resultados de simulação para os parâmetros dos três modelos nebulosos MISO tipo Takagi-Sugeno, enquanto nas tabelas VI.47-49 são apresentados os resultados para os parâmetros dos três modelos nebulosos MISO com estrutura exponencial para as variáveis de entrada.

Número de Regras = 2							
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo							
$r_a = 0,95$	$\eta = 1,10$	$\bar{\varepsilon} = 0,50$	$\underline{\varepsilon} = 0,15$				
	Parte Ant	ecedente					
Regra	C _i X	102	$\sigma_i \ge 10^2$				
		$u_1(k), u_1(k)$	-1)				
	40	40,95					
1		<i>y₁(k-1)</i>					
	46	46,68					
		$u_2(k), u_2(k-1)$					
	77	,88	30,12				
2		<i>y</i> ₂ (<i>k</i> -1)					
	79	,68	27,54				
Parte Consequente							
Regra	$a_k x 10^2$	$a_{k-1}x10^2$	$b_{k-1}x10^2$				
1	8,38	2,36	90,95				
2	8.88	7.82	83.48				

Tabela VI.44. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha

4x4.

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 225

Número de Regras = 2							
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo							
$r_a = 0.95$		$\eta = 1,10$ $\bar{\varepsilon} = 0,50$		$\underline{\varepsilon} = 0.15$			
Parte Antecedente							
Regra		$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$			$\sigma_i \ge 10^2$		
			$u_{1}(k), u_{1}(k)$	(k-1)			
		42,76			24,10		
1		<i>y</i> ₁ (<i>k</i> -1)					
		48,35			22,29		
		$u_2(k), u_2(k-1)$					
		72	2,30		24,10		
2		<i>y</i> ₂ (<i>k</i> -1)					
		74,89			22,29		
		Parte Cor	nseqüente				
Regra	a	_k x10 ²	$a_{k-1}x10^2$		$b_{k-1}x10^2$		
1	2	4,69	6,26		90,66		
2	1	7.87	-0.64		83.19		

Tabela VI.45. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha

4x4.

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 226

Número de Regras = 2							
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo							
$r_a = 0.95$		$\eta = 1,10$ $\bar{\varepsilon} = 0,50$		$\underline{\varepsilon} = 0,15$			
Parte Antecedente							
Regra		$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$			$\sigma_i \ge 10^2$		
			$u_1(k), u_1$	(k-1)			
		44,57			18,07		
1		y ₁ (k-1)					
		50,03			16,88		
		$u_2(k), u_2(k-1)$					
		66,96			18,07		
2		y ₂ (k-1)					
		70,02			16,88		
		Parte Cor	nseqüente				
Regra	a	_k x10 ²	$a_{k-1}x10^2$		$b_{k-1}x10^2$		
1	1	3,25	-2,31		90,52		
2	-	7.50	10,37		82.83		

Tabela VI.46. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha

4x4.

Tabela VI.47. Parâmetros do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r

Número de Regras = 2							
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo							
$r_a = 0.95$	$\eta = 1,05$	$\bar{\varepsilon} = 0,50$	<u></u> <i>E</i> = 0,15				
Parte Antecedente							
Regra	Ci	$c_i \ge 10^2$ $\sigma_i \ge 10^2$					
		$u_{e1}(k), u_{e1}(k)$	(<i>k</i> -1)				
	4	0,95	30,12				
1		$y_{el}(k-1)$					
	4	6,68	27,54				
		$u_{e2}(k), u_{e2}(k-1)$					
	7	7,88	30,12				
2		y _{e2} (k-1)					
	7	9,08	27,54				
	Parte Co	nseqüente					
Regra	$a_{ek}x10^2$	$a_{ek-1}x10^2$	$b_{ek-1}x10^2$				
1	5,27	-4,87	97,98				
2	3.55	6,50	72,57				

– Malha 4x4.

Tabela VI.48. Parâmetros do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r

Número de Regras = 2						
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo						
$r_a = 0,99$		$\eta = 1,05$	$\bar{\varepsilon} = 0,50$)	$\underline{\varepsilon} = 0,15$	
Parte Antecedente						
Regra		C_i	x 10 ²		$\sigma_i \ge 10^2$	
			$u_{e1}(k), u_e$	$_{l}(k-1)$		
		44,28			25,11	
1		<i>y_{e1}(k-1</i>)				
		49,13			23,23	
		$u_{e2}(k), u_{e2}(k-1)$				
		72,61			25,11	
2		y _{e2} (k-1)				
		75,87			23,23	
		Parte Con	nseqüente			
Regra	a	_{ek} x10 ²	$a_{ek-1}x10^2$		$b_{ek-1}x10^2$	
1	,	2,35	-1,73		97,33	
2		8.71	1.70		71.48	

– Malha 4x4.

Tabela VI.49. Parâmetros do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a Tr

Número de Regras = 2							
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo							
$r_a = 0,99$		$\eta = 1,05$	$\bar{\varepsilon} = 0,50$)	$\underline{\varepsilon} = 0.15$		
Parte Antecedente							
Regra		$C_i \Sigma$	$\sigma_i \ge 10^2$				
			$u_{e1}(k), u_{e1}(k)$	$_{l}(k-1)$			
1		45,71			18,83		
		<i>y_{e1}(k-1)</i>					
		50,60			17,59		
		$u_{e2}(k), u_{e2}(k-1)$					
2		66,96			18,83		
2		$y_{e2}(k-1)$					
		70,78			17,59		
		Parte Cor	iseqüente				
Regra	a	_{ek} x10 ²	$a_{ek-1}x10^{2}$		$b_{ek-1}x10^2$		
1		8,19	-7,29		96,60		
2		1,82	7,58		73,98		

– Malha 4x4.

A base de regras dos modelos nebulosos MISO tipo Takagi-Sugeno para a variável de saída T_r pode, então, ser descrita da seguinte forma:

SE
$$(u_h(k) \notin A_{hk})$$
 e $(u_h(k-1) \notin A_{hk-1})$ e $(y_h(k-1) \notin B_{hk-1})$

ENTÃO
$$y_h(k+1) = a_{hk}.u_h(k) + a_{hk-1}.u_h(k-1) + b_{hk-1}.y_h(k-1)$$

onde u_h referem-se as entradas do modelo na regra h (h = 1, ..., r; sendo r o número de regras); y_h referem-se a variável controlada na regra h; k é o instante de tempo considerado; A_{hk} e B_{hk-1} são funções de pertinência gaussianas referentes às variáveis manipulada e controlada, respectivamente; a_{hk} e b_{hk-1} são parâmetros das funções conseqüentes dos modelos nebulosos referentes as variáveis manipulada e controlada, respectivamente.

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 230

Os resultados de validação dos modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno para a variável de saída T_r estão apresentados nas figuras VI.113-115. Considerando o intervalo de simulação de 1230 horas, o erros quadráticos médios (equação IV.21, no capítulo IV) obtidos para a temperatura do reator (T_r) são mostrados na tabela VI.50. De modo geral, conclui-se que estes valores são bastante reduzidos tendo como referência a ordem de grandeza da saída. Desta maneira, e a partir das análises gráficas, observa-se o grande potencial das estruturas propostas na predição das saídas do processo.



Figura VI.113. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 4x4.



Figura VI.114. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r – Malha 4x4.



Figura VI.115. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno para a T_r - Malha

Modelos					
1º	2°	3°			
0,0633	0,0528	0,0362			

Tabela VI.50. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 1x1.

Como observado na tabela VI.50, os erros quadráticos médios decrescem com a diminuição das faixas operacionais dos modelos nebulosos.

Para os modelos nebulosos MISO funcionais, com estrutura exponencial para as variáveis de entrada, da variável de saída T_r , a base de regras pode ser exposta como:

SE
$$(u_{eh}(k) \notin A_{ehk})$$
 e $(u_{eh}(k-1) \notin A_{ehk-1})$ e $(y_{eh}(k-1) \notin B_{ehk-1})$

ENTÃO
$$y_{eh}(k+1) = a_{ehk}.exp(u_{eh}(k)) + a_{ehk-1}.exp(u_{eh}(k-1)) + b_{ehk-1}.y_{eh}(k-1)$$

sendo u_{eh} , y_{eh} , A_{ehk} , B_{ehk-1} , a_{ehk} , b_{ehk-1} definidos como anteriormente para u_h , y_h , A_{hk} , B_{hk-1} , a_{hk} , b_{hk-1} , respectivamente. k é o instante de tempo considerado.

Logo, os resultados de validação, para tal estrutura, estão apresentados nas figuras VI.116-118 para a variável de saída T_r . Considerando o intervalo de simulação de 1230 horas, o erros quadráticos médios obtidos são mostrados na tabela VI.51. De modo geral, conclui-se que estes valores possuem dimensões reduzidas tendo como referência a ordem de grandeza da saída. Deste modo, e a partir das análises gráficas, observa-se que as estruturas de modelo propostas apresentam um enorme potencial para a predição das saídas do processo.



Figura VI.116. Validação do 1º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r - Malha 4x4.



Figura VI.117. Validação do 2º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r - Malha 4x4.



Figura VI.118. Validação do 3º modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno modificado para a T_r - Malha 4x4.

Tabela VI.51. Erros quadráticos médios dos modelos tipo Takagi-Sugeno modificado para o reator de copolimerização do MMA/VAc – Malha 1x1.

Modelos					
1°	2°	3°			
0,0703	0,0565	0,0403			

Do mesmo modo que para os modelos tipo Takagi-Sugeno, é observado na tabela VI.51 que os erros quadráticos médios decrescem com a diminuição das faixas operacionais dos modelos nebulosos.

VI.8.2 Análise da RGA

Como as interações presentes no loop 1x1 já são óbvias, a RGA foi obtida para a malha 3x3. Assim, através do modelo nebuloso multivariável tipo Takagi-Sugeno desenvolvido e dos intervalos permitidos de mudanças para cada variável, obteve-se a seguinte matriz *G*:

$$G = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,296 & 0,192 & 0,074 \\ -0,240 & 0,448 & -0,291 \\ -0,335 & 0,298 & -0,293 \end{bmatrix}$$
(VI.63)

onde, para os g_{ij} , $i \in j$ referem-se, respectivamente, às variáveis controladas e manipuladas; sendo i = 1 para G_{pi} , i = 2 para Y_{ap} , i = 3 para M_{pw} , j = 1 para G_{if} , j = 2 para G_{af}/G_{bf} e j = 3para G_{bf} .

Em seguida, um *software* foi desenvolvido em linguagem FORTRAN 90, resultando a RGA:

$$RGA \rightarrow \begin{bmatrix} 0,629 & 0,314 & 0,057 \\ 0,080 & 0,488 & 0,433 \\ 0,291 & 0,199 & 0,510 \end{bmatrix}$$
(VI.64)

Assim, observa-se um panorama de controle mais complicado que o concluído para a malha 3x2. Há muitas e fortes interações entre cada par de variáveis, significando que a malha 3x3 é de difícil sintonia, pois nenhum elemento da RGA possui valor igual ou próximo a 1,0; contudo, todas as variáveis manipuladas afetam as controladas em algum grau e podem ser emparelhadas, pois nenhum elemento é igual a 0,0 ou possui valor negativo. Todas estas conclusões tornam imperativa a necessidade de desenvolvimentos de controle avançado para tal sistema, como os propostos nesta tese.

Logo, observa que, para um bom funcionamento de um sistema de controle, G_{pi} deve ser prioritariamente controlada por G_{if} , Y_{ap} deve ser prioritariamente controlada por G_{af}/G_{bf} e/ou por G_{bf} e M_{pw} deve ser prioritariamente controlada por G_{bf} .

VI.8.3 Resultados de Controle

Nesta seção, são apresentados os resultados de simulação para os quatro controladores híbridos preditivos não lineares multivariáveis, baseados em modelos nebulosos funcionais, propostos. Inicialmente, os algoritmos para as configuração de controle desenvolvidos em linguagem de programação FORTRAN 90 e aplicados para a malha de controle 3x2, foram adaptados para a malha 4x4 e, posteriormente, acoplados ao *software* de simulação do processo em "malha aberta" descrito na seção VI.4. Os critérios

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 236

IAE (equação V.15, no capítulo V), *ITAE* (equação V.16) e *ISE* (equação V.17) foram utilizados para o ajuste dos parâmetros dos controladores, juntamente com a análise gráfica, devido à presença de comportamentos oscilatórios, buscando-se o melhor conjunto de ações. As estratégias de controle sugeridas foram comparadas entre si e com os controladores DMC e NMPC-t para o problema regulatório.

Uma perturbação de 4000 ppm de inibidor, na vazão molar total de alimentação, foi considerada no tempo t = 50 horas. Esta é uma possível perturbação para o processo de acordo com Congalidis et al. (1989) e Maner e Doyle III (1997). O intervalo de ação dos controladores é de 0,25 horas. A tabela VI.52 mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores preditivos multivariáveis, bem como fornece informações sobre os índices de desempenho e os tempos computacionais (t_c). Do mesmo modo que para a malha 3x2, foi utilizado um microcomputador com processador Intel Core 2 Duo E7500 (2,93 GHz) e 4 GB de memória RAM.

As figuras VI.119-142 apresentam uma análise gráfica do comportamento das variáveis controladas, sob as ações de controle regulatório, no intervalo de tempo de 130 horas, enquanto as figuras VI.143-146 mostram os respectivos movimentos das variáveis manipuladas.

Parâmetros	DMC	NMPC-t	L-NFMPC	E-NFMPC	L-ANFMPC	E-ANFMPC	
NS							
(Malha 3x3)	111	-	-	-	-	-	
NS	_						
(Malha 1x1)	9	-	-	-	-	-	
NP							
(Malha 3x3)	7	5	3	3	3	3	
NP							
(Malha 1x1)	5	2	3	3	3	3	
NC	1	1	1	1	1	1	
$f(G_{if})$	0,529	1,290	0,269	0,305	0,235	0,335	
$f(G_{af}/G_{bf})$	0,549	0,309	0,199	0,199	0,149	0,166	
$f(G_{bf})$	0,280	0,150	0,160	0,140	0,120	0,008	
$f(T_i)$	0,129	0,221	0,119	0,119	0,119	0,113	
$\alpha(G_{pi})$	0,001	0,001	0,480	0,610	0,480	0,610	
$\alpha(Y_{ap})$	0,830	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	
$\alpha(M_{pw})$	0,011	0,001	0,002	0,002	0,002	0,001	
$\alpha(T_r)$	0,001	0,001	0,200	0,200	0,200	0,020	
$w(G_{pi})$	3,200	0,510	14,200	14,200	12,200	14,200	
$w(Y_{ap})$	0,800	0,740	3,000	2,700	3,000	2,700	
$w\left(M_{pw}\right)$	2,100	1,740	4,000	4,500	4,000	4,700	
$w(T_r)$	2,000	0,720	2,300	2,300	2,300	2,400	
t_{c} (s)	2	46	2	3	5	6	
Taxa de produção de copolímero, G_{vi}							
IAE (kg/h)	64,90	40,35	34,08	32,05	24,12	21,40	
ITAE (kg)	988,98	349,14	463,20	428,48	297,96	385,86	
$ISE (kg^2/h^2)$	37,41	32,60	13,98	12,30	8,67	6,20	

Tabela VI.52. Parâmetros dos controladores preditivos multivariáveis para o problema

regulatório – Malha 4x4.

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 238

Fração molar do metacrilato de metila no copolímero, Y _{ap}								
IAE (-)	3,00	2,25	3,50	3,35	2,90	3,12		
ITAE (h)	47,72	36,37	58,01	53,76	41,91	48,22		
<i>ISE</i> (-)	0,09	0,06	0,12	0,12	0,09	0,11		
Peso molecular médio ponderal, M _{pw}								
<i>IAE</i> (kg/kmol)	82.380	54.378	62.979	62.343	46.744	42.554		
ITAE (kg.h/kmol)	1,39x10 ⁶	0,75x10 ⁶	$1,23 \times 10^{6}$	$1,25 \times 10^{6}$	0,82x10 ⁶	1,01x10 ⁶		
<i>ISE</i> (kg²/kmol²)	55,95x10 ⁶	38,66x10 ⁶	35,18x10 ⁶	32,98x10 ⁶	21,29x10 ⁶	$14,28 \times 10^6$		
$Temperatura do reator, T_r$								
IAE (K)	5,39	1,68	1,11	1,21	1,07	0,81		
ITAE (K.h)	79,72	19,76	37,49	34,97	28,76	17,52		
ISE (K ²)	0,49	0,04	0,03	0,04	0,04	0,03		



Figura VI.119. Resultados do controle DMC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.120. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.121. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.122. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.123. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.124. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a taxa de produção de copolímero (G_{pi}) – Malha 4x4.



Figura VI.125. Resultados do controle DMC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.126. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.127. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.128. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.129. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.130. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a fração molar do MMA no copolímero (Y_{ap}) – Malha 4x4.



Figura VI.131. Resultados do controle DMC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.



Figura VI.132. Resultados do controle NMPC-t regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.



Figura VI.133. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.



Figura VI.134. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.



Figura VI.135. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.



Figura VI.136. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) – Malha 4x4.



Figura VI.137. Resultados do controle DMC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4.



Figura VI.138. Resultados do controle NMPC-t regulatório para a temperatura do reator (T_r) - Malha 4x4.



Figura VI.139. Resultados do controle L-NFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4.



Figura VI.140. Resultados do controle E-NFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4.



Figura VI.141. Resultados do controle L-ANFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4.



Figura VI.142. Resultados do controle E-ANFMPC regulatório para a temperatura do reator (T_r) – Malha 4x4.



Figura VI.143. Comportamento regulatório da vazão de alimentação de iniciador (G_{if}) – Malha 4x4.



Figura VI.144. Comportamento regulatório da razão entre as vazões de MMA e VAc na alimentação do reator (G_{af}/G_{bf}) – Malha 4x4.



Figura VI.145. Comportamento regulatório da vazão de alimentação de VAc (G_{bf}) – Malha



Figura VI.146. Comportamento regulatório da temperatura da jaqueta do reator (T_j) – Malha 4x4.

Como observado na tabela VI.52 e nas figuras VI.119-146, todas as configurações de controle desenvolvidas apresentam desempenhos satisfatórios. No entanto, há alguns resultados marcantes:

1°. Particularmente no controle da G_{pi} , as configurações E-ANFMPC (critérios *IAE* e *ISE*) e L-ANFMPC (critério *ITAE*) forneceram os melhores resultados.

2°. Analisando o controle da Y_{ap} , o controlador NMPC-t possui o melhor desempenho (em todos os critérios), seguido pelo L-ANFMPC.

3°. Para o controle do M_{pw} , as configurações E-ANFMPC (critérios *IAE* e *ISE*), L-ANFMPC (critério *ITAE*) e NMPC-t (critério *ITAE*) forneceram os melhores resultados.

4°. Considerando o controle da T_r , as estratégias E-ANFMPC (em todos os critérios) e L-NFMPC (critério *ISE*) promovem os melhores resultados.

5°. A estrutura DMC, com exceção do controle da Y_{ap} , apresentou desempenho bastante inferior que o resultante dos demais controladores analisados.

6°. São observados comportamentos oscilatórios para as cinco estratégias não lineares analisadas, principalmente no controle da G_{pi} , do M_{pw} e da T_r .

7°. O controlador NMPC-t possui o maior tempo computacional, sendo o valor deste parâmetro praticamente o mesmo para as demais estratégias.

Assim, de posse dos resultados obtidos para a malha 4x4 e dos provenientes do controle da malha 3x2, pode-se concluir que as configurações de controle propostas apresentam desempenhos comparáveis e, em várias circunstâncias, superiores aos provenientes das ações DMC e NMPC-t.

Mais especificamente, a estrutura adaptativa E-ANFMPC apresenta o melhor desempenho global. Por isso, ela foi selecionada para o controle multivariável do 2º caso de estudo (capítulo VII), onde será comparada ao controle E-NFMPC. Tais controladores diferem apenas nos número de modelos nebulosos, com estrutura exponencial, utilizados na predição dos valores futuros das respectivas variáveis controladas.

VI.9 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Este capítulo apresentou os resultados de simulação referentes à aplicação de quatro diferentes estratégias de controle híbrido *fuzzy*-preditivo não linear multivariável para o processo de copolimerização do metacrilato de metila com o acetato de vinila. Tal sistema possui um comportamento altamente não linear, o que reforça a busca por modernas configurações de controle, tais como as metodologias aqui descritas. Duas malhas multivariáveis de controle foram consideradas para a implementação dos desenvolvimentos propostos, sendo a 1ª analisada para os problemas regulatório e servo, e a 2ª examinada para a supressão de uma perturbação externa. Os controladores híbridos preditivos não lineares foram gerados a partir do desenvolvimento de modelos dinâmicos nebulosos funcionais tipo Takagi-Sugeno e com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas, e tiveram os seus desempenhos comparados aos controles preditivos DMC e NMPC-t. Os resultados de simulação demonstraram o grande potencial das abordagens propostas no campo do controle avançado, apresentando-as como uma nova alternativa de projeto de controladores não lineares baseados em dados dinâmicos do processo.

CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA COM ACETATO DE VINILA 254

É importante destacar que os três modelos nebulosos presentes nas configurações L-ANFMPC e E-ANFMPC, para as duas malhas do processo analisado, poderiam possuir faixas de operação com intervalos mais distantes um do outro, o que conseqüentemente melhoraria a qualidade das predições para os dois modelos com menores faixas operacionais e, muito provavelmente, o desempenho dos controladores. Além disso, com as mesmas finalidades, um maior número de modelos nebulosos poderia ter sido construído. Todavia, o objetivo foi apresentar a metodologia de funcionamento de tais estratégias, onde já foram observados comportamentos melhores frente aos obtidos das ações baseadas em um único modelo nebuloso.

<u>CAPÍTULO VII</u> <u>ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO</u> <u>DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR</u> <u>ZIEGLER-NATTA</u>

VII.1 INTRODUÇÃO

O segundo caso de estudo considerado nesta tese para a implementação dos desenvolvimentos propostos corresponde à reação industrial de copolimerização do eteno com 1-buteno, usando catalisador Ziegler-Natta solúvel, em um sistema em série composto por dois reatores PFR e um CSTR (EMBIRUÇU, 1998; EMBIRUÇU et al., 2000; PONTES, 2005; LIMA, 2006; LIMA et al., 2009).

Inicialmente, na seção VII.2, é realizada uma descrição detalhada do sistema. A seção VII.3 apresenta o mecanismo cinético para a copolimerização do eteno em solução com alfa-olefina usando catalisador Ziegler-Natta. O modelo matemático fenomenológico do processo é apresentado posteriormente na seção VII.4, com as respectivas taxas de reação descritas no apêndice A. Esse modelo é considerado como planta virtual para a obtenção de informações dinâmicas e implementação das configurações de controle propostas. Na seção VII.5, é analisado o comportamento dinâmico do processo via simulação computacional para a ocorrência de perturbações externas, sendo demonstrado também um estudo sobre as não linearidades presentes no meio reacional. Em seguida, uma malha multivariável é definida para o controle do processo (seção VII.6). Posteriormente, na seção VII.7, modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis são construídos, sendo discutidos os desenvolvimentos referentes à identificação de dados, além das etapas de treinamento e validação dos modelos. Finalmente, a seção VII.8 apresenta os resultados de simulação para os controladores híbridos *fuzzy*-preditivos não lineares multivariáveis E-NFMPC e E-ANFMPC, sendo analisado o problema servo.

VII.2 DESCRIÇÃO DO PROCESSO

A figura VII.1 apresenta a configuração básica do processo. Ele é composto de dois reatores tubulares e um CSTR não ideal (reator central). A operação é adiabática. A vazão de alimentação constitui de uma mistura de eteno (monômero), 1-buteno (comonômero), cicloexano (solvente), hidrogênio (agente de transferência de cadeia) e um composto de catalisador e co-catalisador Ziegler-Natta. Catalisador e co-catalisador são postos em contato antes de serem alimentados ao sistema, de forma que já se possa supor a presença do catalisador em sua forma ativa na alimentação. As correntes de alimentação

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 258

com diferentes composições podem ser introduzidas em diferentes pontos, de modo que as políticas de alimentação sejam muito flexíveis. Como mostrado na figura VII.1, diferentes modos de operação podem ser usados, já que todos os equipamentos são equipados com variados pontos de injeção. Usualmente, monômero, comonômero, solvente, hidrogênio e catalisador Ziegler-Natta ativo são inseridos no primeiro reator da série (podendo ser o PFR-1 ou o CSTR-NI), e hidrogênio é injetado ao longo do sistema, o qual influi diretamente nas características finais da resina. O PFR-2 age no sentido de aumentar a conversão do monômero e/ou diminuir a quantidade de catalisador utilizado. Adicionalmente, os agitadores do CSTR-NI podem ser desligados, fazendo com que este reator se comporte como um reator tubular de largo diâmetro. Conseqüentemente, dependendo do modo de operação, os dois reatores podem ser combinados em várias configurações em série e em paralelo, de modo que o tipo de reator resultante para o sistema possa variar de um CSTR quase ideal até um reator tubular típico ou qualquer outro tipo de configuração entre ambos. Vale ressaltar que mudanças no modo de operação afetam significativamente a distribuição de peso molecular do polímero, bem como outras propriedades do produto final.



Figura VII.1. Configuração básica do processo de copolimerização do eteno com 1-buteno (EMBIRUÇU et al., 2000).

Dois modos de operação são mais freqüentemente utilizados, sendo detalhados como a seguir:

• Configuração 1: é também conhecida como modo agitado, onde o catalisador ativo é injetado apenas no CSTR-NI, de modo que é nele onde tem início a reação. Desta forma, os agitadores do CSTR-NI são ligados e o PFR-1 funciona apenas como uma tubulação, por onde são alimentados o monômero, o comonômero, o solvente e o hidrogênio. Esta alimentação pode se dar também através de duas entradas laterais no CSTR-NI. As alimentações laterais possuem a função de melhorar o grau de mistura no interior do reator. O grau de mistura é controlado através da manipulação da velocidade do agitador e da taxa de alimentação lateral. O trabalho do agitador não impede que zonas de mistura distintas estejam presentes no reator e que gradientes axiais de temperatura possam ser observados. O PFR-2 tem a finalidade de completar a conversão. Assim, o processo é composto de um CSTR não-ideal em série com um reator tubular e é usado para produzir classes de polímeros com distribuições de peso molecular estreitas;

• Configuração 2: é também denominada de modo tubular, onde o agitador do CSTR-NI fica desligado, de modo que ele funciona como um reator tipo PFR de largo diâmetro, apesar de apresentar certo grau de mistura. Nesse caso, portanto, têm-se três reatores tubulares em série. Neste modo de operação, monômeros e solvente são injetados na entrada do PFR-1, e a mistura catalisador/co-catalisador e agente de transferência de cadeia (H₂) podem ser adicionados em diversos pontos ao longo do comprimento do primeiro PFR. Na prática, entretanto, apenas um desses pontos está alinhado de cada vez. O hidrogênio atua no controle da distribuição de peso molecular do polímero formado. Um controle apropriado da temperatura de alimentação é de fundamental importância nesta configuração, para evitar precipitação do polímero no interior do reator. Este modo de operação é usado para produzir classes de polímeros com distribuições largas de peso molecular.

Devido à ocorrência de um tempo de residência muito pequeno no CSTR-NI e pelo fato de seus agitadores estarem desligados quando a operação do sistema está no modo tubular, um certo grau de mistura ocorre em seu interior, em função de seu largo diâmetro e da ação de internos (agitadores, defletores) atuando como misturadores estáticos. Estudos mostram que o CSTR-NI comporta-se como uma série de CSTRs não ideais uniformes

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 260

quando no modo tubular. Tentativas de modelá-lo como um PFR padrão, quando nesta configuração, foram mal sucedidas, porque isto requereria a estimação de diferentes conjuntos de constantes cinéticas para as duas modalidades de operação, o que não é razoável. Assim, a suposição de que o reator se comporta como um trem de CSTRs não ideais permite a estimação de um único conjunto de constantes cinéticas para ambas as estratégias de operação quando do uso do mesmo tipo de catalisador.

O sistema de reação pode ser modelado de acordo com a figura VII.2 (EMBIRUÇU, 1998), onde W, F, R e B representam vazões mássicas. Os PFRs em série e os misturadores entre eles conseguem representar os vários pontos de injeção da mistura catalisador/co-catalisador e do hidrogênio existentes para o PFR-1 (modo tubular). O CSTR-NI é representado por uma seqüência de vários CSTRs em série com correntes de reciclo entre eles, as quais fornecem ao reator um determinado grau de mistura. As alimentações laterais podem ser representadas pelas correntes F. A configuração 2 - na qual o agitador do CSTR-NI fica desligado e o reator funciona como um PFR não ideal (existe mistura axial resultante dos refluxos) - pode ser modelada alterando-se o grau de agitação, de modo a representar o PFR.

O modo agitado é considerado nesta tese para o desenvolvimento dos modelos nebulosos dinâmicos funcionais e para a implementação das estratégias de controle híbrido *fuzzy*-preditivo não linear multivariável E-NFMPC e E-ANFMPC. Para isto, o CSTR-NI é modelado como uma série de cinco CSTRs ideais com correntes de refluxo entre eles, cada um sendo uma zona de agitação. As alimentações laterais ocorrem através das zonas 1 e 4, com numeração crescente no sentido da base para o topo do reator. Já o PFR-2 é considerado como composto por dois PFRs em série.



Figura VII.2. Representação do processo de copolimerização do eteno com 1-buteno (EMBIRUÇU, 1998).

As condições de operação do estado estacionário utilizadas estão apresentadas na tabela VII.1 (os valores numéricos encontram-se na forma adimensional devido à impossibilidade de divulgação dos dados reais de processo). Como observado, os monômeros são adicionados ao sistema através de duas correntes (principal e zona 4 do CSTR-NI), sendo que o hidrogênio está presente apenas na alimentação principal. A mistura de catalisador e co-catalisador é somente inserida pela base do CSTR-NI (zona 1). As variáveis de interesse na saída do processo são a conversão (x), a taxa de produção de polímero (W_U), a temperatura (T_s), os pesos moleculares médios numérico e ponderal (M_n e M_w , respectivamente), a polidispersão (PD), o índice de fluidez (MI), o SE (SE) e a densidade do polímero sólido (ρ).
Tabela VII.1. Condições operacionais para o reator de copolimerização do eteno com 1-

buteno (LIMA, 2006).

Entradas	Valores (Adimensionais)	
Pressão de entrada	1,25	
Rotação do agitador do CSTR-NI	0,80	
Alimentação Principal		
Vazão	9,306	
% em massa de eteno	2,475	
Razão mássica 1-buteno/eteno	1,800	
Concentração de hidrogênio	0,767	
Temperatura	0,17	
Alimentação da Zona I (base) do CSTR-NI	0.001	
Vazao	0,001	
Concentração de catalisador	1,417	
Razão co-catalisador/catalisador	1,360	
Temperatura	1,50	
Alimentação da zona 4 do CSTR-NI		
Vazão	1,034	
% em massa de eteno	0,275	
Razão mássica 1-buteno/eteno	0,200	
Concentração de hidrogênio	0	
Temperatura	0,33	
Saídas		
Conversão do monômero	x = 19,258	
Taxa de produção do copolímero	$W_U = 2,196$	
Temperatura	$T_{s} = 1,679$	
Peso molecular numérico médio	$M_n = 2,575$	
Peso molecular ponderal médio	$M_w = 6,501$	
Polidispersão	PD = 0.840	
MI – Melt Index (índice de fluidez)	MI = 1.045	
SE – Strees Exponent	SE = 0.851	
Densidade do polímero sólido	$\rho = 0.966$	

VII.3 MECANISMO CINÉTICO

O modelo cinético adotado para o processo é apresentado a seguir (PONTES, 2005). Este tem como base os mecanismos desenvolvidos por Carvalho et al. (1989), Embiruçu et al. (2000), Cozewith (1988), Kim e Choi (1991) e Xie et al. (1995), contemplando todas as possíveis reações desses modelos e a multiplicidade de sítios ativos. As espécies envolvidas no mecanismo são apresentadas na tabela VII.2.

Símbolo	Descrição
С	Catalisador
CC	Co-catalisador
C^*	Espécie catalítica ativa
I_C	Impurezas que atacam todo o catalisador
I_{C^*}	Impurezas que atacam a espécie ativa
I_{CC}	Impurezas que atacam o co-catalisador
CCD	Co-catalisador desativado por impurezas
CD	Espécie catalítica desativada
H_2	hidrogênio
M_1	Monômero do tipo 1, ou simplesmente o monômero
M_2	Monômero do tipo 2, ou simplesmente o co-monômero
$P_{j,k}$	Polímero "vivo" com o mero 1 como molécula ativa, de j unidades
	do mero 1 e k unidades do mero 2
$Q_{j,k}$	Polímero "vivo" com o mero 2 como molécula ativa, de j unidades
	do mero 1 e k unidades do mero 2
$U_{i,k}$	Polímero "morto" de j unidades do mero 1 e k unidades do mero 2

Tabela VII.2. Espécies envolvidas no modelo cinético.

VII.3.1 Formação do Sítio Ativo (Sítio de Iniciação) ou Ativação

$$C_n + CC \xrightarrow{k_{f',n}} C_n^* \qquad r_{f',n} = -k_{f',n} \cdot [C_n] \cdot [CC] \qquad (\text{VII.1})$$

onde C_n e C_n^* são o catalisador e a espécie catalítica ativa tipos *n*, respectivamente.

VII.3.2 Envenenamento por Impureza

$$I_{CC} + CC \xrightarrow{k_{lcc'}} CCD \qquad r_{ICC'} = -k_{ICC'} \cdot [I_{CC}] \cdot [CC] \qquad (VII.2)$$

$$I_{C^*} + C^* \xrightarrow{k_{ic^*,n}} CD_n \qquad \qquad r_{IC',n} = -k_{IC',n} \cdot [I_{C^*}] \cdot [C^*_n] \qquad (VII.3)$$

onde CD_n é a espécie ativa desativada do tipo n.

VII.3.3 Iniciação da Cadeia (Sítio de Propagação)

$$C_{n}^{*} + M_{1} \xrightarrow{k_{i1,n}} P_{1,0,n}$$
 $r_{i1,n} = -k_{i1,n} \cdot [C_{n}^{*}] \cdot [M_{1}]$ (VII.4)

$$C *_{n} + M_{2} \xrightarrow{k_{i2,n}} Q_{1,0,n}$$
 $r_{i2,n} = -k_{i2,n} \cdot [C *_{n}] \cdot [M_{2}]$ (VII.5)

VII.3.4 Propagação da Cadeia

A reação de propagação com o 1-buteno como co-monômero forma uma ramificação curta composta por dois carbonos. Considerando-se um modelo tipo-terminal, as constantes da taxa de propagação dependem do último monômero da cadeia (ligado ao sítio catalítico), não sendo influenciadas pelo penúltimo monômero.

$$P_{j,k,n} + M_1 \xrightarrow{k_{p_{1,l,n}}} P_{j+1,k,n} \qquad r_{p_{1,l,n}} = -k_{p_{1,l,n}} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [M_1] \qquad (\text{VII.6})$$

$$P_{j,k,n} + M_2 \xrightarrow{k_{p1,2,n}} Q_{j,k+1,n} \qquad r_{p1,2,n} = -k_{p1,2,n} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [M_2] \qquad (\text{VII.7})$$

$$Q_{j,k,n} + M_1 \xrightarrow{k_{p_{2,1,n}}} P_{j+1,k,n} \qquad r_{p_{2,1,n}} = -k_{p_{2,1,n}} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [M_1] \qquad (VII.8)$$

$$Q_{j,k,n} + M_2 \xrightarrow{k_{p2,2,n}} Q_{j,k+1,n} \qquad r_{p2,2,n} = -k_{p2,2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [M_2] \qquad (\text{VII.9})$$

VII.3.5 Transferência

Cadeias de polímero "morto" são formadas nestas reações. O sítio ativo pode então passar novamente por reações de propagação ou de iniciação para produzir sítios de propagação.

• Transferência para o monômero

Neste tipo de reação de transferência, U_{j,k} termina com uma dupla ligação.

$$P_{j,k,n} + M_1 \xrightarrow{k_{jm1,1,n}} P_{1,0,n} + U_{j,k} \qquad r_{jm1,1,n} = -k_{jm1,1,n} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [M_1] \qquad (\text{VII.10})$$

$$P_{j,k,n} + M_2 \xrightarrow{k_{p_{1,2,n}}} Q_{0,1,n} + U_{j,k} \qquad r_{fm_{1,2,n}} = -k_{fm_{1,2,n}} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [M_2] \qquad (\text{VII.11})$$

$$Q_{j,k,n} + M_1 \xrightarrow{k_{jm2,1,n}} P_{1,0,n} + U_{j,k} \qquad r_{jm2,1,n} = -k_{jm2,1,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [M_1] \qquad (\text{VII.12})$$

$$Q_{j,k,n} + M_2 \xrightarrow{k_{p2,2,n}} Q_{0,1,n} + U_{j,k} \qquad r_{fm2,2,n} = -k_{fm2,2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [M_2] \qquad (\text{VII.13})$$

• Transferência para hidrogênio

$$P_{j,k,n} + H_2 \xrightarrow{k_{fh1,n}} C_n^* + U_{j,k} \qquad r_{fh1,n} = -k_{fh1,n} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [H_2]^{ofh1} \qquad (\text{VII.14})$$

$$Q_{j,k,n} + H_2 \xrightarrow{k_{fh2,n}} C_n^* + U_{j,k} \qquad r_{fh2,n} = -k_{fh2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [H_2]^{ofh2} \qquad (\text{VII.15})$$

onde *ofh1* e *ofh2* são as ordens de reação em relação ao hidrogênio, sendo iguais a 0,5. Este valor é o mesmo adotado por Kim e Choi (1991) e Embiruçu (1998).

• Transferência para o organometálico (alquil-alumínio)

Esta reação ocorre com o organometálico que sobra da reação de formação do catalisador.

$$P_{j,k,n} + CC \xrightarrow{k_{fCC1,n}} C^*_{n} + U_{j,k} \qquad r_{fCC1,n} = -k_{fCC1,n} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [CC]^{ofCC1} \quad (VII.16)$$

$$Q_{j,k,n} + CC \xrightarrow{k_{fCC2,n}} C^*_n + U_{j,k} \qquad r_{fCC2,n} = -k_{fCC2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [CC]^{ofCC2}$$
(VII.17)

onde *ofCC1* e *ofCC2* são as ordens de reação em relação ao organometálico, sendo iguais a 0,5. Este valor é o mesmo adotado por Kim e Choi (1991) e Embiruçu (1998).

• Transferência espontânea

$$P_{j,k,n} \xrightarrow{k_{f1,n}} C *_{n} + U_{j,k} \qquad r_{f1,n} = -k_{f1,n} \cdot [P_{j,k,n}] \qquad (\text{VII.18})$$

$$Q_{j,k,n} \xrightarrow{k_{f2,n}} C^*{}_n + U_{j,k} \qquad r_{f2,n} = -k_{f2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \qquad (\text{VII.19})$$

VII.3.6 Desativação Catalítica Espontânea

$$C *_{n} \xrightarrow{k_{d,n}} CD$$
 $r_{f_{1,n}} = -k_{d,n} \cdot [C *_{n}]$ (VII.20)

A desativação não ocorre para todos os sítios ativos, em virtude do tempo de residência no reator ser muito pequeno. Logo, é sugerida uma diferença de estabilidade para os diferentes tipos de sítios, sendo que, para alguns deles, k_d é nula.

VII.3.7 Terminação

Cadeias de polímero "morto" e sítios desativados são formados nestas reações.

• Terminação com os monômeros

$$P_{j,k,n} + M_1 \xrightarrow{k_{im1,1,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{im1,1,n} = -k_{im1,1,n} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [M_1] \qquad (\text{VII.21})$$

$$P_{j,k,n} + M_2 \xrightarrow{k_{tm1,2,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{tm1,2,n} = -k_{tm1,2,n} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [M_2] \qquad (\text{VII.22})$$

$$Q_{j,k,n} + M_1 \xrightarrow{k_{im2,1,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{im2,1,n} = -k_{im2,1,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [M_1] \qquad (\text{VII.23})$$

$$Q_{j,k,n} + M_2 \xrightarrow{k_{im2,2,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{im2,2,n} = -k_{im2,2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [M_2] \qquad (\text{VII.24})$$

• Terminação com hidrogênio

$$P_{j,k,n} + H_2 \xrightarrow{k_{th1,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{th1,n} = -k_{th1,n} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [H_2]^{oth1} \qquad (\text{VII.25})$$

$$Q_{j,k,n} + H_2 \xrightarrow{k_{th2,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{th2,n} = -k_{th2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [H_2]^{oth2} \qquad (\text{VII.26})$$

onde *oth1* e *oth2* são as ordens de reação em relação ao hidrogênio, sendo iguais a 0,5. Este valor é o mesmo adotado por Embiruçu (1998).

• *Terminação com organometálico (alquil-alumínio)*

$$P_{j,k,n} + CC \xrightarrow{k_{tCC1,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{tCC1,n} = -k_{tCC1,n} \cdot [P_{j,k,n}] \cdot [CC]^{otCC1} \quad (\text{VII.27})$$

$$Q_{j,k,n} + CC \xrightarrow{k_{tCC2,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{tCC2,n} = -k_{tCC2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \cdot [CC]^{otCC2} \quad (\text{VII.28})$$

onde *otCC1* e *otCC2* são as ordens de reação em relação ao hidrogênio, sendo iguais a 0,5. Este valor é o mesmo adotado por Embiruçu (1998).

• Terminação espontânea

$$P_{j,k,n} \longrightarrow CD + U_{j,k} \qquad r_{t1,n} = -k_{t1,n} \cdot [P_{j,k,n}] \qquad (\text{VII.29})$$

$$Q_{j,k,n} \xrightarrow{k_{t2,n}} CD + U_{j,k} \qquad r_{t2,n} = -k_{t2,n} \cdot [Q_{j,k,n}] \qquad (\text{VII.30})$$

VII.4 MODELO FENOMENOLÓGICO

Apresenta-se, a seguir, o modelo matemático fenomenológico para o processo de copolimerização do eteno com 1-buteno (PONTES, 2005). As equações desenvolvidas utilizam como base a representação do processo mostrada na figura VII.2. O modelo descrito será considerado como planta virtual para a implementação das estruturas de controle propostas.

Como serão observadas, expressões para as taxas de reação estão presentes nas equações dos balanços de massa por componente e energia, as quais são aqui consideradas elementares. Assim, uma descrição detalhada para estes termos é apresentada no apêndice A para cada um dos componentes presentes no meio reacional.

VII.4.1 Modelo do CSTR

O reator CSTR-NI é dividido em zonas de CSTR ideais com reciclo (B) entre elas, as quais são representadas pelo subscrito *r*, de modo a ser modelada sua não idealidade.

• Balanço de massa global

Assumindo-se que o volume da zona se mantém constante, tem-se:

$$W_{r} = W_{r-1} + F_{r} + B_{r+1} - R_{r} - B_{r} - V_{r} \cdot \frac{d\rho_{r}}{dt}$$
(VII.31)

onde W, F, B, R são vazões mássicas, V_r é o volume da zona e ρ_r é a densidade da mistura reacional na zona específica.

Como não existe reciclo saindo da primeira zona, nem reciclo entrando na última zona, têm-se as seguintes condições de contorno:

$$r = 1 \Longrightarrow B_r = 0$$

 $r = N \Longrightarrow B_{r+1} = 0$, sendo N o número de zonas.

• Modelo de mistura

Sabe-se que uma abordagem bastante empregada para o modelo de mistura é a combinação de vários elementos ideais. As correntes de reciclo B entre esses elementos, conforme mostradas na figura VII.2, conseguem representar a não-idealidade de um CSTR e a dispersão axial em um reator tubular através de um modelo de grau de mistura (PONTES, 2005).

Embiruçu (1998) propôs o seguinte modelo para o grau de mistura:

Assume-se, portanto, que a mistura seja uma função aditiva de uma dispersão inerente, da presença de um agitador mecânico e das vazões de alimentação laterais. A corrente de reciclo é então definida pela seguinte equação (EMBIRUÇU, 1998):

$$B_r = \frac{\rho_r \cdot V_r}{\mu_r} \cdot \left(D_{0,r} + D_{Rot,r} \cdot Rot + D_{F,r} \cdot \frac{F_r}{\sum_{r=1}^{Nr} F_r + W_1} \right)$$
(VII.33)

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 1 \Longrightarrow B_r = 0$$
$$r = N \Longrightarrow B_{r+1} = 0$$

onde μ é a viscosidade da solução polimérica, *Rot* é a rotação do agitador, *F* é a vazão lateral de entrada na zona e D_0 , D_{Rot} e D_F são coeficientes constantes que devem ser estimados. Considera-se que os parâmetros de cada zona individual são iguais entre si, de forma a minimizar o número de parâmetros a serem estimados.

• Balanço de massa por componente

Considerando-se o volume de uma determinada zona r constante e definindo-se um componente genérico c, tem-se:

$$\frac{d[C]_{r}}{dt} = \frac{W_{r-1} \cdot [C]_{r-1}}{V_{r} \cdot \rho_{r-1}} + \frac{F_{r} \cdot [C]_{Fr}}{V_{r} \cdot \rho_{Fr}} + \frac{B_{r+1} \cdot [C]_{r+1}}{V_{r} \cdot \rho_{r+1}} - \frac{(R_{r} + B_{r} + W_{r}) \cdot [C]_{r}}{V_{r} \cdot \rho_{r}} + r_{c,r}$$
(VII.34)
$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_{n}, CD, M_{1}, M_{2}, H_{2}, CC, S, C*_{n}$$

com as condições de contorno:

$$r = 1 \Longrightarrow B_r = 0$$
$$r = N \Longrightarrow B_{r+1} = 0$$

onde W, F, B, R são as vazões mássicas, t é o tempo, V_r é o volume da zona, ρ_r é a densidade da mistura reacional na zona particular, [C] é a concentração em mol por volume de uma espécie presente no meio reacional, $r_{c,r}$ é a taxa de geração ou consumo em mol por volume por tempo do componente c na zona, EA simboliza a espécie ativa tipo $n \in \lambda$ representa os momentos do polímero "morto".

• Balanço de energia

Desprezando-se as variações de energia cinética e potencial e os efeitos de variação de pressão, negligenciando-se o trabalho externo do agitador e considerando-se o sistema adiabático a volume constante, tem-se:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{e=1}^{m} W_e \int_r^e Cp_e dT}{V \cdot \rho \cdot Cp} - \frac{V \cdot r_p \cdot \left(\Delta \overline{H}_p^o + 2 \cdot PM_{M_1} \cdot \int_o^r (\hat{C}p_P \cdot \hat{C}p_{M_1}) dT + 2 \cdot PM_{M_2} \cdot \int_o^r (\hat{C}p_Q \cdot \hat{C}p_{M_2}) dT \right)}{V \cdot \rho \cdot Cp}$$
(VII.35)

sendo:

$$e = F_r, W_{r-1}B_{r+1}$$

$$r = 1 \Longrightarrow B_r = 0 \qquad r = N \Longrightarrow B_{r+1} = 0$$

onde W_e são vazões mássicas de entrada na zona, V é o volume da zona, ρ a densidade do meio, Cp é o calor específico da mistura reacional, Cp_e é o calor específico da vazão de entrada, Cp_P , Cp_Q , Cp_{M1} e Cp_{M2} são os calores específicos dos polímeros "vivos" terminados pelo monômero tipo 1 e tipo 2 e os calores específicos dos monômeros tipo 1 e tipo 2, respectivamente, PM é o peso molecular, T é a temperatura e r_p e $\Delta \overline{H}_p^o$ são a taxa e a entalpia padrão da reação de propagação, respectivamente.

VII.4.2 Modelo do PFR

Para a modelagem dos PFRs, conforme ilustrado na figura VII.2, somente são consideradas uma entrada e uma saída, pois as alimentações e retiradas laterais só ocorrem nos misturadores que antecedem os segmentos de reatores tubulares. Pode-se considerar também a inexistência de dispersão axial, uma vez que o escoamento deve estar em regime turbulento para atingir as condições de fluxo pistonado.

Ao contrário do CSTR, onde o modelo é representado por um conjunto de equações diferenciais ordinárias, o modelo do PFR, como será observado, é composto por um sistema de equações diferenciais parciais.

• Balanço de massa global

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial W}{\partial z}$$
(VII.36)

onde ρ é a densidade do meio reacional, *W* é a vazão mássica, *z* é a coordenada axial e *A* é a área da seção transversal.

• Balanço de massa por componente

$$\frac{\partial [C]}{\partial t} + \frac{\partial v \cdot [C]}{\partial z} = r_c \tag{VII.37}$$

$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_n, CD, M_1, M_2, H_2, CC, S, C*_n$$

onde [*C*] é a concentração de uma espécie presente no meio reacional, r_c é a taxa de geração ou consumo do componente *c* e v é a velocidade de escoamento de um elemento de fluido no reator.

• Balanço de energia

As mesmas hipóteses feitas anteriormente para o CSTR são válidas para o balanço de energia do PFR, tais como: são desprezados os efeitos de variação de pressão, as mudanças de energias cinética e potencial e a não idealidade dos efeitos de mistura; a reação é adiabática; não existe agitador, tendo conseqüentemente trabalho de eixo nulo; são utilizadas as definições de taxa de geração de calor através da reação química e do Cp da mistura. Deste modo, obtém-se:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{r_p \cdot \Delta H_p^o}{\rho \cdot Cp}$$
(VII.38)

onde *T* é a temperatura, *Cp* é o calor específico do meio reacional e r_p e $\Delta \overline{H}_p^o$ são, respectivamente, a taxa e a entalpia padrão da reação de propagação.

VII.4.3 Modelo do Misturador

Como pode ser observado na figura VII.2, há um misturador de correntes antes de cada PFR, o qual também necessita ser modelado. A figura VII.3 mostra uma representação genérica deste misturador, existindo duas correntes de alimentação e duas correntes de saída, não possuindo acúmulo e cujo objetivo é calcular a vazão, as concentrações e a temperatura de saída.



Figura VII.3. Misturador de correntes (PONTES, 2005).

• Balanço de massa global

$$W_s = W_e + W_F - W_a \tag{VII.39}$$

• Balanço de massa por componente

$$[C]_{s} = \frac{\frac{W_{e} \cdot [C]_{e}}{\rho_{e}} + \frac{W_{F} \cdot [C]_{F}}{\rho_{F}} - \frac{W_{a} \cdot [C]_{a}}{\rho_{a}}}{WQ_{s}}$$
(VII.40)

$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_n, CD, M_1, M_2, H_2, CC, S, C*_n$$

onde WQs representa a vazão volumétrica de saída.

• Balanço de energia

A expressão para o balanço de energia no misturador é obtida a partir do balanço de energia desenvolvido para o CSTR, considerando-se a inexistência de acúmulo de energia e supondo-se nula também a taxa de reação.

no

$$\frac{dT}{dt} = 0 = \frac{\sum_{e=1}^{m} W_e \int_s^e Cp_e dT}{V \cdot \rho \cdot Cp}$$

$$e = W_e, W_E$$
(VII.41)

Assumindo-se que o Cp é constante em relação à temperatura, sendo igual para as misturas das duas entradas, o balanço de energia pode ser simplificado, obtendo-se:

$$T_s = \frac{W_e \cdot T_e + W_F \cdot T_F}{W_e + W_F}$$
(VII.42)

VII.4.4 Propriedades Físicas

As propriedades físicas presentes no modelo são a densidade, o calor específico e a viscosidade. Considerando a hipótese da aditividade, as propriedades da mistura são calculadas a partir das propriedades dos componentes puros.

• Densidade

Para o cálculo da densidade da mistura, são considerados apenas os monômeros, o solvente e o polímero como presentes na mistura reacional. É utilizada a definição de fração volumétrica, obtendo-se:

$$\rho_{r} = \frac{[M_{1}]_{r} \cdot PM_{m1}}{\rho_{m1,r}} (\rho_{m1,r} - \rho_{U,r}) + \frac{[M_{2}]_{r} \cdot PM_{m2}}{\rho_{m2,r}} (\rho_{m2,r} - \rho_{U,r}) + \frac{[S]_{r} \cdot PM_{s}}{\rho_{s,r}} (\rho_{s,r} - \rho_{U,r}) + \rho_{U,r}$$
(VII.43)

onde [] é a concentração do componente *i* na mistura, PM_i é o peso molecular de *i* e ρ_i é a densidade do componente *i*.

As densidades dos componentes puros são obtidas por:

$$\boldsymbol{\rho}_{i,r} = f_i(T_r) \tag{VII.44}$$

• Calor específico

O calor específico da mistura também pode ser definido como uma função das frações dos componentes puros, de acordo com a seguinte equação:

$$Cp = \sum_{i=1}^{nc} w_i Cp_i$$
(VII.45)

Analogamente à densidade:

$$Cp = \frac{[M_{1}] \cdot PM_{m1}}{\rho_{m1}} (Cp_{m1} - Cp_{U}) + \frac{[M_{2}] \cdot PM_{m2}}{\rho_{m2}} (Cp_{m2} - Cp_{U}) + \frac{[S] \cdot PM_{s}}{\rho_{s}} (Cp_{s} - Cp_{U}) + Cp_{U}$$
(VII.46)

onde os calores específicos dos componentes puros são dados por:

$$Cp_{i,r} = f_i(T_r) \tag{VII.47}$$

• Viscosidade

Como a viscosidade da mistura depende basicamente da distribuição de peso molecular do polímero produzido, e devido ao fato da concentração do polímero não variar muito, pode ser obtida a seguinte expressão relacionando-a ao MI (EMBIRUÇU, 1998):

$$\mu = a \cdot MI^{b} \tag{VII.50}$$

onde a e b são parâmetros a serem estimados.

VII.4.5 Momentos da Distribuição

As distribuições de pesos moleculares podem ser caracterizadas pelos momentos do polímero "morto", simbolizados por λ . Estes descrevem apenas quantidades médias, mas possuem grande importância do ponto de vista prático. Em geral, somente os três primeiros momentos são suficientes, podendo ser utilizados outros de ordem superior, caso seja necessário.

Os momentos do polímero "morto" para sistemas de copolimerização podem ser definidos de acordo com a seguinte equação:

$$\lambda_{m,n} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p^m \cdot q^n \cdot \left[U_{p,q} \right] \quad m,n = 0,1,2,...$$
(VII.51)

onde *m* e *n* são as ordens do momento em relação aos monômeros tipos 1 e 2, *p* e *q* representam o número de monômeros dos tipos 1 e 2, respectivamente, e $U_{p,q}$ é a concentração do copolímero "morto" de comprimento *p*+*q*.

Seis momentos cruzados são necessários para caracterizar a distribuição de peso molecular, como mostrados a seguir:

$$\lambda_{0,0} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} \left[U_{p,q} \right]$$
(VII.52)

$$\lambda_{1,0} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p \cdot \left[U_{p,q} \right]$$
(VII.53)

$$\lambda_{0,1} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} q \cdot \left[U_{p,q} \right]$$
(VII.54)

$$\lambda_{1,1} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p \cdot q \cdot \left[U_{p,q} \right]$$
(VII.55)

$$\lambda_{2,0} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p^2 \cdot \left[U_{p,q} \right]$$
(VII.56)

$$\lambda_{0,2} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} q^2 \cdot \left[U_{p,q} \right]$$
(VII.57)

onde $\lambda_{0,0}$ corresponde à concentração do copolímero "morto" em moles por volume, os momentos de ordem 1 representam o número de moles por volume de monômero incorporado ao copolímero e os momentos de ordem 2 não têm significado físico.

VII.4.6 Variáveis de Saída e Propriedades de Uso Final do Polímero

A tabela VII.1 mostrada na seção VII.2 apresenta as principais variáveis de saída consideradas para o processo. A conversão e a taxa de produção são importantes para a avaliação de desempenho, sendo definidas a seguir, juntamente com as percentagens em peso do monômero e do polímero. Os pesos moleculares médios, a polidispersão, o MI (índice de fluidez), o SE (medida do grau de comportamento não-Newtoniano do polímero fluido) e a densidade do polímero sólido são relacionadas às características de uso final do polímero e também são definidas na seqüência.

• Conversão

A conversão é definida como o número de monômeros incorporados ao polímero em relação ao número total de monômeros, sendo expressa por:

$$x = 100 \cdot \frac{\lambda_{1,0} + \lambda_{0,1}}{[M_1] + [M_2] + \lambda_{1,0} + \lambda_{0,1}}$$
(VII.58)

Na equação VII.51, $\lambda_{1,0}$ e $\lambda_{0,1}$ representam o número de moles por volume de monômeros tipos 1 e 2 incorporados ao polímero, sendo definidos como momentos de ordem 1 do polímero " morto" em relação aos monômeros tipos 1 e 2, respectivamente.

• Percentagem em peso do monômero tipo 1

A percentagem em peso do monômero tipo 1 corresponde à massa de monômero tipo 1 em relação à massa da mistura, sendo dada pela equação:

$$PP_{m1} = 100 \cdot \frac{[M_1] \cdot PM_{m1}}{\rho} \tag{VII.59}$$

onde PM_{m1} representa o peso molecular do monômero tipo 1.

• Percentagem em peso do polímero

A percentagem em peso do polímero é expressa pela seguinte equação:

$$PP_{U} = 100 \cdot \frac{PM_{m1} \cdot \lambda_{1,0} + PM_{m2} \cdot \lambda_{0,1}}{\rho}$$
(VII.60)

Uma forma alternativa pode ser dada em função do peso molecular numérico médio, como:

$$PP_U = 100 \cdot \frac{\lambda_{0,0} \cdot PM_n}{\rho}$$
(VII.61)

onde *PM*_n é o peso molecular numérico médio do polímero, sendo definido na seqüência, e $\lambda_{0,0}$ é o momento de ordem zero do polímero "morto".

• Taxa de produção do polímero

A taxa de produção do polímero é definida como:

$$W_U = W \cdot \frac{PP_U}{100} \tag{VII.62}$$

• Peso molecular numérico médio

O peso molecular numérico médio é definido como a seguir (VERROS, 2003):

$$M_{n} = \frac{PM_{m1} \cdot \lambda_{1,0} + PM_{m2} \cdot \lambda_{0,1}}{\lambda_{0,0}}$$
(VII.63)

• Peso molecular ponderal médio

Segundo Verros (2003), o peso molecular ponderal médio pode ser expresso como:

$$M_{w} = \frac{PM_{m1} \cdot (\lambda_{2,0} + \lambda_{1,1}) + PM_{m2} \cdot (\lambda_{0,2} + \lambda_{1,1})}{\lambda_{1,0} + \lambda_{0,1}}$$
(VII.64)

onde $\lambda_{1,1}$ é o momento de ordem 1 do polímero "morto" em relação aos dois monômeros, sendo $\lambda_{2,0}$ e $\lambda_{0,2}$ momentos de ordem 2 do polímero "morto" em relação aos monômeros tipos 1 e 2, respectivamente.

• Polidispersão

A polidispersão é calculada relacionando-se os pesos moleculares médios da seguinte forma:

$$PD = \frac{M_w}{M_n} \tag{VII.65}$$

• *MI*

Uma propriedade freqüentemente usada industrialmente para caracterizar a resina polimérica final é o índice de fluidez (MI). O MI pode ser definido como a massa de polímero que escoa no tempo de 10 minutos através de um dado orifício a pressão e temperaturas especificadas. O MI é essencialmente uma medida indireta da viscosidade e do peso molecular ponderal médio do polímero, sendo inversamente proporcional a este último. Apesar da complexidade da relação entre a distribuição de peso molecular e as propriedades de escoamento do polímero, um modelo empírico típico usado em plantas industriais tem a seguinte forma (GAHLEITNER et al., 1996; EMBIRUÇU, 1998):

$$MI = \alpha \cdot (M_w)^{\beta} \tag{VII.66}$$

onde α e β são coeficientes a serem estimados. Pontes (2005) obteve os seguintes valores para tais parâmetros referentes ao processo em estudo: $\alpha = 1,0254E+019$ e $\beta = -3,7096$.

• *SE*

Outra propriedade usada industrialmente neste processo para caracterizar a resina polimérica final é o SE, definida como:

$$SE = \frac{\log\left(\frac{MI[3p]}{MI[p]}\right)}{\log 3}$$
(VII.67)

onde p é o peso usado no teste padrão do MI, MI[p] é o valor de MI obtido no teste padrão e MI[3p] é o valor de MI no teste com um peso 3 vezes maior do que aquele utilizado no teste padrão.

O SE é uma medida do comportamento não-newtoniano do polímero fluido e pode ser usado para avaliar a processabilidade da resina polimérica. Segundo Embiruçu (1998), o SE também é um indicador da largura da distribuição de peso molecular, podendo ser correlacionado à polidispersão através da seguinte expressão:

$$SE = \frac{1}{\frac{1}{\frac{1}{SE_{M}} + \frac{\left(\frac{1}{SE_{m}} - \frac{1}{SE_{M}}\right)}{\exp\beta} \cdot \exp(\beta \cdot PD)}}$$
(VII.68)

onde SE_M é o valor limite do SE quando a polidispersão tende a infinito e SE_m é o valor de SE quando a polidispersão tende a 1. A expressão VII.68 pode ser reescrita como a seguir, sendo $\alpha e \gamma$ parâmetros a serem estimados (PONTES, 2005):

$$SE = \frac{1}{\alpha + \gamma \cdot \exp(\beta \cdot PD)}$$
(VII.69)

• Densidade do polímero sólido

Outra importante propriedade de uso final é a densidade do polímero sólido. Ela é tipicamente usada como uma medida da cristalinidade do polímero e do grau de ramificações das cadeias poliméricas, estando diretamente relacionada com a composição do copolímero final, já que a presença do co-monômero introduz ramificações curtas na cadeia polimérica, causando redução na cristalinidade e, conseqüentemente, na densidade do polímero.

A densidade também é influenciada pelos pesos moleculares médios, possuindo uma proporcionalidade inversa, de modo que ela também pode ser expressa como função do MI e do SE.

Assim, a densidade do polímero sólido pode ser definida através da seguinte expressão (EMBIRUÇU, 1998):

$$\rho = \alpha + \beta \cdot \log(MI) + \gamma \cdot SE + \delta \cdot [CM]_{e}^{\varepsilon}$$
(VII.70)

onde α , β , γ , $\delta e \varepsilon$ são parâmetros a serem estimados e $[CM]_e$ representa a concentração de co-monômero na alimentação.

VII.5 ANÁLISE DINÂMICA DO PROCESSO

Um programa de simulação computacional foi desenvolvido em linguagem FORTRAN 90/95 (Fortran PowerStation 4.0) (PONTES, 2005; LIMA, 2006), sendo utilizado para a análise do comportamento dinâmico do processo e, posteriormente, para a obtenção dos modelos nebulosos e implementação dos controladores híbridos avançados. Este programa integra numericamente as equações diferenciais ordinárias do CSTR através da sub-rotina LSODE (*Livermore Solver of Ordinary Differential Equations*, solucionador de equações diferenciais ordinárias, feito em *Livermore*). No caso do modelo do PFR com parâmetros distribuídos, o método das características foi primeiramente utilizado para

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 280

transformar o sistema de equações diferenciais parciais em um sistema de equações diferenciais ordinárias, sendo assim possível de ser resolvido pelo LSODE. As novas equações para o PFR resultantes da aplicação do método são apresentadas no apêndice B, onde também são discutidos outros aspectos referentes à implementação numérica do modelo.

Os resultados de simulação computacional para a análise dinâmica do processo em "malha aberta", considerando, como exemplo, duas variáveis de saída do sistema, são apresentados a seguir. As figuras VII.4-5 mostram, respectivamente, os comportamentos da temperatura de saída (T_s) e do peso molecular numérico médio (M_n), ambos para um distúrbio de – 10 % na concentração de catalisador na alimentação da zona 1 (base) do CSTR-NI. A perturbação ocorre no tempo t = 21, mas, como observado, o sistema começa a responder no tempo de aproximadamente 23. O atraso é decorrente da própria dinâmica do processo.



Figura VII.4. Resposta em "malha aberta" da temperatura na saída do sistema (T_s) para uma perturbação de -10 % na concentração de catalisador na alimentação da zona 1 (base) do CSTR-NI.



Figura VII.5. Resposta em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (M_n) para uma perturbação de -10 % na concentração de catalisador na alimentação da zona 1 (base) do CSTR-NI.

Ainda analisando a dinâmica do processo, a figura VII.6 foi construída de modo a demonstrar a presença de não linearidades no sistema. Como exemplificação, foi escolhido o peso molecular numérico médio como variável de saída e observado o seu comportamento em "malha aberta" para perturbações degrau de +/- 20 % na fração mássica de eteno na alimentação principal. Observa-se na figura VII.6 um comportamento altamente não linear para esta malha de variáveis.



Figura VII.6. Comportamento dinâmico em "malha aberta" do peso molecular numérico médio (M_n) para perturbações degrau de +/- 20 % sobre a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef}) no tempo 21.

VII.6 SELEÇÃO DA MALHA MULTIVARIÁVEL DE CONTROLE

Para isto, deve-se, inicialmente, considerar que, na tabela VII.1, a pressão de entrada, a rotação do agitador do CSTR-NI, a vazão total e a temperatura da alimentação principal, as propriedades na alimentação da zona 1 (base) do CSTR-NI e a vazão e concentrações na alimentação da zona 4 do CSTR-NI não são manipuláveis. Assim, as variáveis do processo envolvidas nos procedimentos de seleção da malha multivariável de controle são mostradas na tabela VII.3. O *MI*, o *SE* e a densidade do polímero sólido não são avaliadas pelo de fato de serem diretamente dependentes de outras variáveis de saída, conforme as equações VII.66-70, as quais já são consideradas.

Tabela VII.3. Variáveis presentes nos procedimentos de seleção da malha multivariável de

controle para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno.

	Entradas
Fração	o mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef})
Razão	mássica 1-buteno/eteno na alimentação principal
	(R_{f})
Conce	ntração de hidrogênio (agente de transferência de
	cadeia) na alimentação principal (C_{H2f})
Temper	ratura da alimentação da zona 4 do CSTR-NI (T_{f4})
	Saídas
	Conversão do monômero (x)
	Taxa de produção do copolímero (W_U)
	Temperatura de saída (T_s)
	Peso molecular numérico médio (M_n)
	Peso molecular ponderal médio (M_w)
	Polidispersão (PD)

Deste modo, uma matriz de planejamento experimental, adquirida pelo desenvolvimento parcial de um planejamento fatorial fracionário 2⁴⁻¹ com 1 ponto central, foi obtida através da utilização do *software* STATISTICA 7.0. Assim, um conjunto de condições operacionais na entrada do sistema foi gerado e, de posse do programa de simulação do processo em "malha aberta" descrito na seção VII.5, calculou-se o respectivo conjunto de resultados. Com estas informações, o referido planejamento fatorial fracionário foi completado e os efeitos de cada variável de entrada considerada sobre cada uma das variáveis de saída do sistema foram avaliados. As figuras VII.7-12 apresentam os resultados da análise estatística (as variáveis, cujas barras horizontais ultrapassam a linha vertical tracejada de cor vermelha, possuem efeitos estatisticamente significativos, os quais são mais expressivos quanto maior é o tamanho da barra), enquanto a tabela VII.4 sumariza as devidas conclusões.

É importante citar que, do mesmo modo que para o 1º caso de estudo, a opção pela realização de um planejamento fatorial fracionário é decorrente da necessidade apenas do cálculo qualitativo de influências entre as variáveis de processo, não sendo, portanto,

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 284

necessária a obtenção de um planejamento fatorial completo, onde, provavelmente, obterse-iam as mesmas conclusões.



Figura VII.7. Efeitos das variáveis de entrada sobre a conversão do monômero (x).



Figura VII.8. Efeitos das variáveis de entrada sobre a taxa de produção do copolímero (W_U) .



Figura VII.9. Efeitos das variáveis de entrada sobre a temperatura de saída (T_s) .



Figura VII.10. Efeitos das variáveis de entrada sobre o peso molecular numérico médio



Figura VII.11. Efeitos das variáveis de entrada sobre o peso molecular ponderal médio (M_w) .



Figura VII.12. Efeitos das variáveis de entrada sobre a polidispersão (PD).

Saídas	Entradas com Efeitos Significativos
X	Y_{ef}
W_U	Y_{ef}
T_s	Y_{ef}
M_n	$Y_{ef} > C_{H2f}$
M_w	C_{H2f}
PD	-

Tabela VII.4. Efeitos das variáveis de entrada sobre as variáveis de saída para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno.

Logo, a partir da análise estatística, observa-se que, no máximo, uma malha multivariável 2x2 de controle pode ser formada visando à implementação dos desenvolvimentos propostos; o *loop* selecionado é mostrado na tabela VII.5. Assim, as próximas seções apresentam a modelagem nebulosa dinâmica multivariável e os respectivos resultados de controle. Os modelos nebulosos delineados para a variável T_s serão apenas funções da entrada Y_{ef} , já que, como mostrado na tabela VII.4, a variável C_{H2f} não possui influência estatisticamente significativa sobre a respectiva saída.

Tabela VII.5. Malha multivariável de controle para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno

Malhas	Variáveis Manipuladas	Variáveis Controladas
2x2	Y_{ef}, C_{H2f}	T_s, M_n

VII.7 MODELAGEM NEBULOSA DINÂMICA FUNCIONAL NÃO LINEAR MULTIVARIÁVEL

Esta seção descreve a construção dos modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis para a malha de controle 2x2, sendo discutidos os desenvolvimentos presentes na etapa de identificação de dados, além dos passos de treinamento e validação dos modelos. Posteriormente, os controladores híbridos *fuzzy*-preditivos não lineares

multivariáveis E-NFMPC e E-ANFMPC serão gerados e comparados entre si para o problema servo.

Neste ponto, estabeleceu-se que o controlador híbrido adaptativo não linear multivariável E-ANFMPC será composto por três modelos nebulosos dinâmicos funcionais com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas (modelos tipo Takagi-Sugeno modificado). Portanto, a configuração E-NFMPC utilizará o primeiro modelo (maior faixa operacional) aplicado na estratégia E-ANFMPC.

Com essas considerações, o algoritmo para modelagem nebulosa dinâmica não linear multivariável, baseado em modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares multivariáveis com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas, desenvolvido previamente para o 1º caso de estudo, foi adaptado e implementado no programa de simulação do processo em "malha aberta" (descrito na seção VII.5) para a geração dos três modelos nebulosos dinâmicos MISO tipo Takagi-Sugeno modificado. Como já mencionado no capítulo V, os modelos formulados possuem faixas operacionais diferentes e a escolha de qual representação utilizar, em um dado instante de amostragem, para o cálculo dos valores preditos na configuração E-ANFMPC, é uma função do valor instantâneo medido para cada variável controlada em relação ao intervalo de aplicação de cada modelo nebuloso.

Portanto, a próxima etapa no processo de modelagem refere-se à geração dos dados de identificação do sistema através de variações aleatórias nos valores das variáveis de entrada. t = 30 foi considerado o instante inicial. Os dados de treinamento (determinação dos parâmetros do modelo) e teste (validação), para cada modelo, devem diferir entre si de forma que seja garantida a flexibilidade dos modelos para diferentes condições de operação, dentro, é claro, dos limites estabelecidos como premissas do sistema. De posse dessas informações, o método do agrupamento subtrativo é aplicado para a determinação do número de regras r e dos parâmetros das funções de pertinência gaussianas (centro e desviopadrão) da parte antecedente dos modelos nebulosos, enquanto o algoritmo dos quadrados mínimos é utilizado no cálculo dos parâmetros das funções conseqüentes da base de regras para cada modelo, conforme definidos no capítulo IV. Os valores obtidos para esses parâmetros, os quais serão apresentados na seqüência, proporcionam aos modelos uma melhor capacidade de representatividade em relação aos dados de identificação. Assim, três

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 289

modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares MISO, com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas, foram obtidos para cada variável de saída, sendo consideradas três entradas para os modelos da variáveis T_s - sendo duas referentes a variável manipulada (o valor atual e o valor imediatamente anterior) e uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada – e cinco entradas para os modelos da variável M_n - sendo duas referentes a cada variável manipulada (o valor atual e o valor imediatamente anterior) e uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada. Uma referente ao valor imediatamente anterior da respectiva variável controlada. Uma taxa de amostragem igual a 0,5 foi utilizada para um intervalo de simulação de 570 (conjunto de dados contendo 1140 pontos). Por definição nesta tese, a faixas operacionais dos modelos seguem a relação: 1° > 2° > 3°.

Considerando, primeiramente, o 1° modelo nebuloso, as figuras VII.13-14 apresentam os dados de treinamento e teste para a fração mássica de eteno (Y_{ef}) e para a concentração de hidrogênio (C_{H2f}) , respectivamente, ambas na alimentação principal. Nesta ordem, o comportamento correspondente da temperatura de saída do sistema (T_s) e do peso molecular numérico médio (M_n) é mostrado nas figuras VII.15-16.



Figura VII.13. Dados de identificação do 1º modelo nebuloso para a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef}) .



Figura VII.14. Dados de identificação do 1° modelo nebuloso para a concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H2f}).



Figura VII.15. Dados de identificação do 1º modelo nebuloso para a temperatura de saída do sistema (T_s) .



Figura VII.16. Dados de identificação do 1º modelo nebuloso para o peso molecular numérico médio (M_n) .

Avaliando agora o 2° modelo nebuloso, as figuras VII.17-18 apresentam os dados de treinamento e teste para a fração mássica de eteno (Y_{ef}) e para a concentração de hidrogênio (C_{H2f}), respectivamente, ambas na alimentação principal. Nesta ordem, o comportamento correspondente da temperatura de saída do sistema (T_s) e do peso molecular numérico médio (M_n) é mostrado nas figuras VII.19-20.



Figura VII.17. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef}) .



Figura VII.18. Dados de identificação do 2° modelo nebuloso para a concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H2f}).



Figura VII.19. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para a temperatura de saída do sistema (T_s) .



Figura VII.20. Dados de identificação do 2º modelo nebuloso para o peso molecular numérico médio (M_n) .

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 294

No caso dos 3° modelo nebuloso, as figuras VII.21-22 apresentam os dados de treinamento e teste para a fração mássica de eteno (Y_{ef}) e para a concentração de hidrogênio (C_{H2f}) , respectivamente, ambas na alimentação principal. Nesta ordem, o comportamento obtido para a temperatura de saída do sistema (T_s) e para o peso molecular numérico médio (M_n) é mostrado nas figuras VII.23-24.



Figura VII.21. Dados de identificação do 3º modelo nebuloso para a fração mássica de eteno na alimentação principal (Y_{ef}) .



Figura VII.22. Dados de identificação do 3º modelo nebuloso para a concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H2f}).



Figura VII.23. Dados de identificação do 3º modelo nebuloso para a temperatura de saída do sistema (T_s) .



Figura VII.24. Dados de identificação do 3° modelo nebuloso para o peso molecular numérico médio (M_n) .

As tabelas VII.6-11 mostram os resultados de simulação para os parâmetros dos três modelos nebulosos MISO funcionais com estrutura exponencial.

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 297

Tabela VII.6. Parâmetros do 1º modelo nebuloso funcional para a temperatura de saída do

Número de Regras = 11					
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo					
$r_a = 0,70$	$\eta = 0,40$	$\bar{\varepsilon} = 0,50$	$\underline{\varepsilon} = 0.15$		
	Parte Ant	ecedente			
Regra		$c_i \ge 10^2$	$\sigma_i \ge 10^2$		
		$u_{e111}(k), u_{e111}(k-1)$			
1		38,33	23,96		
1		y _{e11} (k-1)			
		43,15	22,30		
		$u_{e121}(k), u_{e121}(k-1)$			
2		26,07	23,96		
2		<i>y_{e12}(k-1)</i>			
		27,69	22,30		
		$u_{e_{131}}(k), u_{e_{131}}(k-1)$			
2		50,76	23,96		
3		y _{e13} (k-1)			
		58,26	22,30		
		$u_{e141}(k), u_{e141}(k-1)$			
		12,34	23,96		
4		<i>y</i> _{<i>e</i>14} (<i>k</i> -1)			
		14,50	22,30		
		$u_{e151}(k), u_{e151}(k-1)$			
5		73,71	23,96		
		<i>y_{e15}(k-1)</i>			
		84,68	22,30		
6		$u_{e161}(k),$	<i>u</i> _{e161} (<i>k</i> -1)		
		48,50	23,96		
		y _{e16} (k-1)			
		29,05	22,30		

sistema (T_s) .
	7		$u_{e171}(k), u_{e171}(k-1)$		
			23,96		
7			<u>(k-1)</u>		
		57,03	22,30		
		$u_{e_{181}}(k), u_{e_{181}}(k-1)$			
			23,96		
	8	y _{e18} (k-1)			
		45,71	22,30		
		$u_{e^{19l}}(k),$	$u_{e_{191}}(k-1)$		
	0	60,46	23,96		
	У		(k-1)		
		73,88	22,30		
		$u_{e_{1101}}(k),$	<i>u</i> _{e1101} (<i>k</i> -1)		
	10	12,34	23,96		
	10	<i>y</i> _{e110} (<i>k</i> -1)			
		40,59	22,30		
			<i>u</i> _{e1111} (<i>k</i> -1)		
	11	91,04	23,96		
	11		l(k-1)		
		92,21	22,30		
	Parte	Conseqüente			
Regra i	$a_{e1i1k}x10^2$	$a_{e1i1k-1}x10^2$	$b_{e1ik-1}x10^{2}$		
<i>i</i> = 1	41,77	- 54,71	101,12		
<i>i</i> = 2	56,36	- 62,86	26,32		
<i>i</i> = 3	105,64	- 14,35	- 80,60		
<i>i</i> = 4	- 42,02	41,46	82,00		
<i>i</i> = 5	65,86	3,34	- 24,26		
<i>i</i> = 6	- 30,66	38,41	5,05		
<i>i</i> = 7	<i>i</i> = 7 - 61,33		123,33		
<i>i</i> = 8	73,59	68,64	- 186,34		
<i>i</i> = 9	- 79,39	18,57	204,95		
<i>i</i> = 10	120,59	- 132,82	104,71		
<i>i</i> = 11	- 3,46	23,27	21,21		

Tabela VII.7. Parâmetros do 2º modelo nebuloso funcional para a temperatura de saída do

Número de Regras = 13					
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo					
$r_a = 0,85$	$\eta = 0,35$	$\bar{\varepsilon} = 0,50$	$\underline{\varepsilon} = 0,15$		
	Parte Antecedente				
Regra		$c_i \ge 10^2$	$\sigma_i \ge 10^2$		
		$u_{e111}(k),$	$u_{e111}(k-1)$		
1		42,71	19,77		
1		Ye11	(<i>k</i> -1)		
		48,32	22,05		
		$u_{e121}(k),$	$u_{e121}(k-1)$		
2		35,27	19,77		
2		y _{e12} (k-1)			
		34,07	22,05		
		$u_{e131}(k), u_{e131}(k-1)$			
2		54,80	19,77		
5		Ye13	(k-1)		
		60,40	22,05		
		$u_{e_{1}4_{1}}(k), u_{e_{1}4_{1}}(k-1)$			
1		42,71	19,77		
4		y _{e14} (k-1)			
		66,44	22,05		
		$u_{e151}(k), u_{e151}(k-1)$			
5		25,04	19,77		
5		<i>y_{e15}(k-1)</i>			
		41,56	22,05		
		$u_{e161}(k),$	$u_{e161}(k-1)$		
٢		25,04	19,77		
0		ye16	(k-1)		
		50,43	22,05		

• .	(\mathbf{n})
sistema	$(T_{a}).$
	(-3)

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 300

	7	$u_{e171}(k), u_{e171}(k-1)$		
		54,80	19,77	
		<i>y</i> _{<i>e</i>17} (<i>k</i> -1)		
		37,59	22,05	
		$u_{e_{181}}(k),$	$u_{e181}(k-1)$	
	0	22,85	19,77	
	8	<i>y_{e18}(k-1)</i>		
		76,84	22,05	
		$u_{e_{191}}(k),$	$u_{e_{191}}(k-1)$	
	0	45,41	19,77	
	9	ye19	(<i>k</i> -1)	
		41,87	22,05	
		$u_{e_{1101}}(k),$	$u_{e_{1101}}(k-1)$	
	10	37,79	19,77	
	10	<i>y</i> _{e110} (<i>k</i> -1)		
		24,05	22,05	
		$u_{e1111}(k),$	$u_{e1111}(k-1)$	
	11	73,43	19,77	
	11	<i>y_{e111}(k-1)</i>		
		27,68	22,05	
		$u_{e1121}(k), u_{e1121}(k-1)$		
	12	42,71 19,77		
	12	y _{e112} (k-1)		
		69,16	22,05	
		$u_{e_{1131}}(k),$	$u_{e_{1131}}(k-1)$	
13		35,27	19,77	
	15		(<i>k</i> -1)	
		88,33	22,05	
	Parte (Conseqüente		
Regra i	$a_{e1i1k}x10^2$	$a_{e1ilk-1}x10^2$	$b_{e1ik-1}x10^2$	
<i>i</i> = 1	2110,65	- 561,92	- 2938,62	
<i>i</i> = 2	- 1261,16	1084,60	- 1238,10	

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 301

<i>i</i> = 3	- 718,13	318,50	506,77
<i>i</i> = 4	184,88	- 130,55	131,04
<i>i</i> = 5	959,25	- 744,57	- 203,16
<i>i</i> = 6	1076,03	- 302,97	- 172,08
<i>i</i> = 7	920,16	- 4488,15	1452,67
i = 8	223,19	- 110,64	- 71,99
<i>i</i> = 9	862,15	- 852,30	1338,32
i = 10	- 154,54	103,45	18,31
<i>i</i> = 11	5686,22	- 4559,39	2877,80
<i>i</i> = 12	52,56	79,08	- 114,82
<i>i</i> = 13	- 51,95	55,24	68,07

Tabela VII.8. Parâmetros do 3º modelo nebuloso funcional para a temperatura de saída do

Número de Regras = 13				
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo				
$r_a = 0,75$	$\eta = 0.35$	$\bar{\varepsilon} = 0.50$		$\underline{\varepsilon} = 0.15$
	Parte A	ntecedente		
Regra		$c_i \ge 10^2$		$\sigma_i \ge 10^2$
		<i>U</i> _{e111}	$u(k), u_{e111}(k)$	k-1)
1		47,21		9,43
			<i>y</i> _{<i>e</i>11} (<i>k</i> -1)	
		54,38		12,85
		<i>U</i> _{e121}	$u(k), u_{e121}(k)$	k-1)
2		42,71		9,43
2		y _{e12} (k-1)		
		48,20	12,85	
		$ue_{131}(k), ue_{131}(k-1)$		
3		51,78	9,43	
5		<i>y_{e13}(k-1)</i>		
		60,57		12,85
		$u_{e141}(k), u_{e141}(k-1)$		
4		37,66		9,43
		<i>y_{e14}(k-1)</i>		
		42,75	12,85	
		U _e 151	$u(k), u_{e_{151}}(k)$	k-1)
5		44,55	9,43	
5			$y_{e15}(k-1)$	
		63,16		12,85
		<i>U</i> _{e161}	$u(k), u_{e161}(k)$	k-1)
6		50,95		9,43
0		y _{e16} (k-1)		
		45,64		12,85

• ,	$\langle \mathbf{T} \rangle$
sistema	$(T_{c}).$
	(- 3)

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 303

		$u_{e_{171}}(k), u_{e_{171}}(k-1)$		
7		55,34	9,43	
			₁₁₇ (k-1)	
		69,48	12,85	
		$u_{e_{181}}(k), u_{e_{181}}(k-1)$		
	0	37,66	9,43	
	δ	<i>y_{e18}(k-1)</i>		
		55,48	12,85	
		<i>u_e191</i> (<i>k</i>), $u_{e191}(k-1)$	
	0	53,75	9,43	
	2	ye	19(k-1)	
		48,20	12,85	
		<i>u_{e1101}(k</i>), $u_{e_{1101}}(k-1)$	
	10	37,66 9,43		
	10	<i>y_{e110}(k-1)</i>		
		53,27	12,85	
		<i>u_{e1111}(k</i>), $u_{e1111}(k-1)$	
	11	61,66	9,43	
		Ye	₁₁₁ (k-1)	
		74,88	12,85	
		$u_{e1121}(k), u_{e1121}(k-1)$		
	12	44,55 9,43		
		<u> </u>	112(<i>k</i> -1)	
		65,66	12,85	
		<u>u_{e1131}(k</u>), $u_{e1131}(k-1)$	
13		58,54	9,43	
		ye.	113(k-1)	
		60,55	12,85	
	Pa	rte Conseqüente	1 102	
Kegra i	$\frac{a_{e1i1k} x10^2}{102.00}$	$a_{e1i1k-1}x10^{2}$	$D_{e1ik-1}XIO^2$	
l = 1	103,00	- 89,37	97,18 50,80	
i = 2	- /,5/	23,98	39,80	

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 304

<i>i</i> = 3	- 32,47	36,92	119,68
<i>i</i> = 4	32,73	- 28,50	62,05
<i>i</i> = 5	- 166,74	166,77	69,99
<i>i</i> = 6	21,51	- 13,16	88,32
<i>i</i> = 7	- 16,59	28,57	64,48
<i>i</i> = 8	43,74	- 78,38	178,45
<i>i</i> = 9	14,86	- 8,91	57,54
<i>i</i> = 10	- 67,77	97,70	19,42
<i>i</i> = 11	13,44	7,85	51,45
<i>i</i> = 12	- 33,49	7,09	118,33
<i>i</i> = 13	26,24	- 12,72	65,46

Tabela VII.9. Parâmetros do 1° modelo nebuloso funcional para o peso molecular numérico médio (M_n) .

Número de Regras = 8					
Parâi	Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo				
$r_a = 0,80$	$\eta = 0,75$	$\bar{\varepsilon} = 0,50$	$\underline{\varepsilon} = 0.15$		
	Parte Ante	ecedente			
Regra	$c_i \ge 1$	02	$\sigma_i \ge 10^2$		
		$u_{e211}(k), u_{e211}(k-1)$			
	40,8	40,81 27,38			
1		$u_{e212}(k), u_{e212}(k-1)$			
1	48,8	3	25,74		
		$y_{e21}(k-1)$			
	48,4	3	25,29		
		$u_{e221}(k), u_{e221}(k-1)$			
	40,0	40,04 2			
2		$u_{e222}(k), u_{e222}(k-1)$			
	15,5	1	25,74		
		<i>y</i> _{e22} (<i>k</i> -1)			
	58,5	,59 25,29			
		$u_{e231}(k), u_{e231}(k-1)$			
	73,71 27,3		27,38		
3		$u_{e232}(k), u_{e232}(k-1)$			
5	25,6	5	25,74		
		<i>y</i> _{e23} (k-1)			
	73,4	73,49 25,29			
		$u_{e241}(k), u_{e241}(k-1)$			
	26,0	7	27,38		
4		$u_{e242}(k), u_{e242}(k-1)$			
	68,5	9	25,74		
		<i>y</i> _{e24} (<i>k</i> -1)			
	27,7	8	25,29		

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 306

		$u_{e251}(k), u_{e251}(k-1)$				
		12	,34	27,	38	
	~	$u_{e252}(k), u_{e252}(k-1)$				
	5	0,	49	25,	74	
		y _{e25} (k-1)				
		42	,82	25,	29	
		$u_{e261}(k), u_{e261}(k-1)$				
		70,29 27,38				
	<i>r</i>		$u_{e262}(k), u_{e262}(k)$	$u_{e262}(k-1)$		
	6	57	,39	25,	74	
			y _{e26} (<i>k-1</i>)		
		67	,07	25,	29	
			u _{e271} (k), i	u _{e271} (k-1)		
10,05 27,38			38			
	_		$u_{e272}(k), u_{e272}(k-1)$			
7		34,70 25,74				
		<i>y_{e27}(k-1)</i>				
32,72 25			25,	.29		
			$u_{e281}(k), u_{e281}(k)$	$u_{e281}(k-1)$		
		92	,83	27,	38	
	0		$u_{e^{282}}(k), u_{e^{282}}(k)$	$u_{e^{282}}(k-1)$		
	0	80	,81	25,	74	
			ye28(k-1)		
		84	,53	25,	29	
		Parte Co	onseqüente			
Regra i	$a_{e2ilk} x 10^2$	$a_{e2ilk-l}x10^2$	$a_{e2i2k}x10^2$	$a_{e2i2k-1}x10^2$	$b_{e2ik-1}x10^2$	
<i>i</i> = 1	22,37	1,92	- 13,63	- 6,30	91,17	
<i>i</i> = 2	11,79	26,68	- 2,05	- 27,43	58,42	
<i>i</i> = 3	15,70	12,77	- 10,88	1,37	33,36	
<i>i</i> = 4	11,99	8,14	- 3,03	- 5,39	83,64	
<i>i</i> = 5	17,63	- 10,76	- 19,96	12,08	102,46	
<i>i</i> = 6	2,86	13,72	11,30	- 15,45	60,85	
<i>i</i> = 7	1,74	39,80	0,11	- 24,45	49,99	
i = 8	15.18	3.26	- 13.22	12.15	48.32	

Tabela VII.10. Parâmetros do 2º modelo nebuloso funcional para o peso molecular numérico médio (M_n) .

Número de Regras = 9					
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo					
$r_a = 0,80$	$\eta = 0,60$	$\overline{\varepsilon} = 0,50$	$\underline{\varepsilon} = 0,15$		
	Parte Ante	ecedente			
Regra	<i>c_i</i> x 1	02	$\sigma_i \ge 10^2$		
		$u_{e211}(k), u_{e211}(k-1)$			
	44,4	44,40 18,61			
1		$u_{e212}(k), u_{e212}(k-1)$			
	40,8	4	15,97		
		<i>y</i> _{e21} (<i>k</i> -1)			
	53,6	2	16,88		
		$u_{e221}(k), u_{e221}(k-1)$			
	51,1	51,16 18,6			
2		$u_{e222}(k), u_{e222}(k-1)$			
	24,6	3	15,97		
		<i>y</i> _{e22} (<i>k</i> -1)			
	63,1	4	16,88		
		$u_{e231}(k), u_{e231}(k-1)$			
	35,2	7	18,61		
3		$u_{e232}(k), u_{e232}(k-1)$			
	12,6	12,61 15,97			
		<i>y_{e23}(k-1)</i>			
	52,7	52,77 16,88			
		$u_{e241}(k), u_{e241}(k-1)$			
	63,6	6	18,61		
4		$u_{e242}(k), u_{e242}(k-1)$			
	40,6	4	15,97		
		<u>y_{e24}(k-1)</u>			
	66,6	7	16,88		

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 308

		$u_{e251}(k), u_{e251}(k-1)$			
5	37,	15	18,	61	
		$u_{e252}(k), u_{e252}(k)$	$u_{e252}(k-1)$		
	51,	81	15,	97	
		y _{e25} (k-1)			
	43,	06	16,	88	
		$u_{e^{261}}(k), u_{e^{261}}(k-1)$			
	69,	43	18,	61	
		$u_{e262}(k), u_{e262}(k-1)$			
6	24,	16	15,	97	
		v _{e26} (k-1)			
	72,	25	16,	88	
		<i>u</i> _{e271} (k), 1	u _{e271} (k-1)		
	23,	49	18,	61	
	,	$u_{e272}(k), u_{e272}(k), u_{e272}(k)$	$u_{e272}(k-1)$		
7	32,	07	15,	97	
	,	y _{e27} (k-1)			
	45,	45,48 16,88			
		$u_{e281}(k), u_{e281}(k-1)$			
	79,	76	18,	61	
	,	$u_{e282}(k), u_{e282}(k-1)$			
8	60.	60.68 15.97		97	
	,	y _{e28} (k-1)			
	72.	72,63 16.88		88	
	$u_{e291}(k), u_{e291}(k-1)$				
	18.	18.84 18.61			
		$u_{2202}(k), u_{2202}(k-1)$			
9	60.	60.82 15.97			
		$u_{c20}(k-1)$			
	24	24.24			
Parte Consequiente					
Regra i $a_{e2i1k} x 10^{10}$	$a_{e^{2}ilk_{-}l}x10^{2}$	$a_{e^{2}i^{2}k}x10^{2}$	$a_{e^{2}i^{2}k} x 10^{2}$	$b_{e^{2}ik-1}x10^{2}$	

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 309

<i>i</i> = 1	19,51	7,28	- 13,30	- 5,44	72,96
<i>i</i> = 2	15,38	28,70	3,66	- 28,86	36,33
<i>i</i> = 3	12,61	- 4,93	- 14,00	7,71	93,46
<i>i</i> = 4	6,01	5,58	4,21	- 5,19	70,06
<i>i</i> = 5	10,75	4,99	0,26	- 7,16	80,15
<i>i</i> = 6	18,56	5,38	- 17,11	6,31	49,07
<i>i</i> = 7	9,99	25,80	0,97	- 22,19	55,74
<i>i</i> = 8	10,61	6,29	8,40	- 1,64	31,05
<i>i</i> = 9	12,80	1,21	- 5,92	- 0,02	72,60

Número de Regras = 8					
Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo					
$r_a = 0.95$	$\eta = 0,55$	$\overline{\varepsilon} = 0,50$	$\underline{\varepsilon} = 0.15$		
Parte Antecedente					
Regra	$c_i \ge 1$	02	<i>σi</i> x 10 ²		
		$u_{e211}(k), u_{e211}(k-1)$			
	47,2	1	11,94		
1		$u_{e212}(k), u_{e212}(k-1)$			
1	34,2	1	10,43		
		$y_{e21}(k-1)$			
	57,8	9	10,68		
		$u_{e221}(k), u_{e221}(k-1)$			
	55,3	4 11,94			
2		$u_{e222}(k), u_{e222}(k-1)$			
2	27,0	27,02 10,43			
		<i>y</i> _{e22} (<i>k</i> -1)			
	64,2	1	10,68		
		$u_{e231}(k), u_{e231}(k-1)$			
	44,2	1	11,94		
3		$u_{e232}(k), u_{e232}(k-1)$			
	42,5	5	10,43		
		y _{e23} (k-1)			
	53,2	10,68			
		$u_{e241}(k), u_{e241}(k-1)$			
	58,5	58,54 11,94			
		$u_{e^{242}}(k), u_{e^{242}}(k-1)$			
	36,4	36,40 10,43			
		y _{e24} (k-1)			
	63,8	0	10,68		

Tabela VII.11. Parâmetros do 3º modelo nebuloso funcional para o peso molecular numérico médio (M_n) .

CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA 311

		$u_{e251}(k), u_{e251}(k-1)$				
5		43,19 11,94				
		$u_{e252}(k), u_{e252}(k-1)$				
		20,98 10,43		43		
		<i>y</i> _{e25} (<i>k</i> -1)				
		57,53 10,68				
			$u_{e261}(k), u_{e261}(k-1)$			
		36,82 11,94				
		$u_{e262}(k), u_{e262}(k-1)$				
	0	31	,69	10,	43	
			ye26((k-1)		
		52,74 10,68			68	
		$u_{e271}(k), u_{e271}(k-1)$				
	53,75 11,94		94			
	7		$u_{e272}(k), u_{e272}(k)$	$u_{e272}(k-1)$		
/		39,91 10,43				
-		y _{e27} (k-1)				
		53,51 10,68		68		
		$u_{e^{281}}(k), u_{e^{281}}(k-1)$				
		67,24 11,94		94		
	8	$u_{e282}(k), u_{e282}(k-1)$				
	8		47,43		10,43	
			ye28((k-1)		
		68	,26	10,	68	
		Parte Co	onseqüente			
Regra i	$a_{e2ilk} x 10^2$	$a_{e2i1k-1}x10^2$	$a_{e2i2k}x10^2$	$a_{e2i2k-1}x10^2$	$b_{e2ik-1}x10^2$	
<i>i</i> = 1	14,78	14,86	- 8,09	- 13,05	66,51	
<i>i</i> = 2	10,04	19,23	12,31	- 20,41	38,44	
<i>i</i> = 3	11,59	1,53	- 10,99	2,79	89,26	
<i>i</i> = 4	10,17	- 5,73	- 6,59	15,63	66,85	
<i>i</i> = 5	16,66	- 15,22	- 19,13	16,06	102,87	
i = 6	14,10	30,02	5,70	- 26,78	30,49	
i = 7	19,30	1,32	9,12	- 20,26	50,69	
$\iota = 8$	- 1.15	14.21	12.01	- 18.37	1 /6.95	

A base de regras dos modelos nebulosos MISO funcionais, com estrutura exponencial para as variáveis de entrada, da variável de saída T_s , pode, então, ser descrita da seguinte forma:

SE
$$(u_{eih1}(k) \notin A_{eih1k})$$
 e $(u_{eih1}(k-1) \notin A_{eih1k-1})$ e $(y_{eih}(k-1) \notin B_{eihk-1})$

ENTÃO $y_{eih}(k+1) = a_{eih1k}.exp(u_{eih1}(k)) + a_{eih1k-1}.exp(u_{eih1}(k-1)) + b_{eihk-1}.y_{eih}(k-1)$

sendo u_{eihj} , y_{eih} , A_{eihjk} , B_{eihk-1} , a_{eihjk} , b_{eihk-1} definidos como no capítulo VI para o 1° caso de estudo. k é o instante de tempo considerado.

Para os modelos nebulosos MISO funcionais, com estrutura exponencial para as variáveis de entrada, da variável de saída M_n , a base de regras pode ser exposta como:

SE $(u_{eih1}(k) \notin A_{eih1k}) \in (u_{eih1}(k-1) \notin A_{eih1k-1}) \in (u_{eih2}(k) \notin A_{eih2k}) \in (u_{eih2}(k-1) \notin A_{eih2k-1})$ e $(y_{eih}(k-1) \notin B_{eihk-1})$

 $ENTÃO y_{eih}(k+1) = a_{eih1k} exp(u_{eih1}(k)) + a_{eih1k-1} exp(u_{eih1}(k-1)) + a_{eih2k} exp(u_{eih2}(k)) + a_{eih2k-1} exp(u_{eih2}(k-1)) + b_{eihk-1} y_{eih}(k-1)$

sendo u_{eihj} , y_{eih} , A_{eihjk} , B_{eihk-1} , a_{eihjk} , b_{eihk-1} também definidos como no capítulo VI para o 1° caso de estudo. k é o instante de tempo considerado.

Os resultados de validação dos modelos nebulosos funcionais estão apresentados nas figuras VII.25-30. Considerando o intervalo de simulação de 570, o erros quadráticos médios (equação IV.21, no capítulo IV) obtidos para a temperatura na saída do sistema (T_s) e para o peso molecular numérico médio (M_n) são mostrados na tabela VII.12. De modo geral, conclui-se que os valores observados são bastante reduzidos tendo como referência a ordem de grandeza das saídas. Desta maneira, e a partir das análises gráficas, observa-se o grande potencial das estruturas propostas na predição das saídas do processo.



Figura VII.25. Validação do 1º modelo nebuloso com estrutura exponencial para a T_s .



Figura VII.26. Validação do 2º modelo nebuloso com estrutura exponencial para a T_s .



Figura VII.27. Validação do 3º modelo nebuloso com estrutura exponencial para a T_s .



Figura VII.28. Validação do 1º modelo nebuloso com estrutura exponencial para o M_n .



Figura VII.29. Validação do 2° modelo nebuloso com estrutura exponencial para o M_n .



Figura VII.30. Validação do 3º modelo nebuloso com estrutura exponencial para o M_n .

Tabela VII.12. Erros quadráticos médios dos modelos nebulosos com estrutura exponencial para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno.

Modelos					
	1°	2°		3°	
T_s (adm.)	M_n (adm.)	T_s (adm.)	M_n (adm.)	T_s (adm.)	M_n (adm.)
0,0020	0,0163	0,0013	0,0104	0,0009	0,0046

Como observado na tabela VII.12, os erros quadráticos médios decrescem com a diminuição das faixas operacionais dos modelos nebulosos.

VII.8 RESULTADOS DE CONTROLE

Apresentam-se, nesta seção, os resultados de simulação para os dois controladores híbridos preditivos não lineares multivariáveis, baseados em modelos nebulosos funcionais com estrutura exponencial para as variáveis de entrada, propostos. Inicialmente, os algoritmos para as duas configuração de controle desenvolvidos em linguagem de programação FORTRAN 90 e aplicados para o 1° caso de estudo, foram adaptados para o referido sistema e, posteriormente, acoplados ao *software* de simulação do processo em "malha aberta" descrito na seção VII.5. Os critérios *IAE* (equação V.15, no capítulo V), *ITAE* (equação V.16) e *ISE* (equação V.17) foram utilizados para o ajuste dos parâmetros dos controladores, juntamente com a análise gráfica, devido à presença de comportamentos oscilatórios, buscando-se o melhor conjunto de ações. Os controladores foram analisados para situações de mudanças no *setpoint*, com um intervalo de ação de 0,5. A tabela VII.13 mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores preditivos multivariáveis, bem como fornece informações sobre os índices de desempenho e os tempos computacionais (t_c). Foi utilizado um microcomputador com processador Intel Core 2 Duo T5300 (1,73 GHz) e 1 GB de memória RAM.

As figuras VII.31-32 apresentam uma análise gráfica do comportamento das variáveis controladas, sob as ações de controle servo, no intervalo de tempo de 170, enquanto as figuras VII.33-34 mostram os respectivos movimentos das variáveis manipuladas.

Parâmetros	E-NFMPC	E-ANFMPC			
NP	3	3			
NC	1	1			
$f(Y_{ef})$	0,900	1,800			
$f(C_{H2f})$	0,700	1,300			
$\alpha(T_s)$	0,001	0,001			
$\alpha(M_n)$	0,001	0,001			
$w\left(T_{s} ight)$	3,500	3,000			
$w(M_n)$	1,000	1,000			
$t_{c}(s)$	106	118			
	Temperatura de saída do sistem	a, T_s			
IAE (adm.)	1,4514	1,4099			
ITAE (adm.)	8,5538	7,8192			
ISE (adm.)	0,0424	0,0422			
Peso molecular numérico médio, M _n					
IAE (adm.)	1,4842 1,3264				
ITAE (adm.)	7,5480	7,2348			
ISE (adm.)	0,0588	0,0507			

Tabela VII.13. Parâmetros dos controladores preditivos multivariáveis para o problema

servo – Malha 2x2.



Figura VII.31. Resultados do controle servo para a temperatura de saída do sistema (T_s) .



Figura VII.32. Resultados do controle servo para o peso molecular numérico médio (M_n) .



Figura VII.33. Comportamento servo da fração mássica de eteno na alimentação principal

 (Y_{ef}) .



Figura VII.34. Comportamento servo da concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H2f}) .

Como observado na tabela VII.13 e nas figuras VII.31-34, as duas configurações de controle analisadas apresentam desempenhos satisfatórios. No entanto, mais especificamente, há uma ligeira superioridade do controlador E-ANFMPC no controle das duas variáveis de saída segundo os três critérios avaliados. Além disso, pela análise gráfica, observa-se que a estratégia E-ANFMPC promove o alcance do novo *setpoint* em menor tempo que a configuração E-NFMPC; contudo, apresenta comportamento levemente oscilatório, principalmente no controle do M_n . Como particularidades, vê-se, na tabela VII.13, que os valores do fator f são um pouco maiores para o controlador E-ANFMPC, indicando uma maior necessidade de amortecimento para tal estrutura.

VII.9 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Foram apresentados, neste capítulo, os resultados de simulação referentes à aplicação de duas diferentes estratégias de controle híbrido *fuzzy*-preditivo não linear multivariável para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno com catalisador Ziegler-Natta solúvel. Tal processo possui grande importância industrial pelo fato do polietileno ser uma das resinas poliméricas mais utilizadas em todo o mundo, a qual possui uma gama extensiva de aplicações. Além disso, o sistema possui um comportamento altamente não linear, o que reforça a busca por modernas configurações de controle, tais como as metodologias aqui descritas. Uma malha multivariável de controle foi considerada para a implementação dos desenvolvimentos propostos, sendo analisada para o problema servo. Os controladores híbridos preditivos não lineares foram gerados a partir do desenvolvimento de modelos nebulosos dinâmicos funcionais, com estrutura exponencial para as variáveis manipuladas, e tiveram os seus desempenhos comparados entre si. Os resultados de simulação demonstraram o alto potencial das abordagens propostas, apresentando-as como alternativas promissoras no que se refere ao projeto de controladores a partir de dados dinâmicos do processo.

<u>CAPÍTULO VIII</u> <u>CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA O</u> <u>DESENVOLVIMENTO DE TRABALHOS</u> <u>FUTUROS</u>

VIII.1 CONCLUSÕES

Ao final de cada capítulo apresentado nesta tese de doutorado, são descritas as principais conclusões sobre o conteúdo específico abordado. Apresentam-se, a seguir, as conclusões gerais intrínsecas aos desenvolvimentos abordados neste documento.

O principal objetivo deste trabalho foi desenvolver estratégias de controle avançado preditivo não linear multivariável (NMPC-MIMO), baseadas em modelos nebulosos não lineares, para processos de polimerização. Quatro configurações de controle foram propostas, onde duas delas apresentam uma abordagem adaptativa, visando suprimir características desconhecidas de cada processo durante o projeto dos controladores. Tais configurações foram geradas a partir da inserção de modelos nebulosos dinâmicos funcionais não lineares (tipo Takagi-Sugeno e com estrutura exponencial) internamente na estrutura do controle preditivo baseado em modelo (MPC). A metodologia MPC foi escolhida para tais desenvolvimentos em virtude desta estar bastante difundida no tocante a aplicações industriais em plantas químicas, além de possuir relativa simplicidade de implementação e possibilidade de incorporação de restrições em seu projeto.

Os modelos nebulosos apresentam alto potencial para a predição de processos não lineares, o que torna bastante atrativa a sua utilização em estratégias de controle baseado em modelo, as quais são definidas pelo uso de modelos dinâmicos como preditores na estrutura interna da configuração de controle.

Os processos de copolimerização, considerados para as análises, foram escolhidos pelas complexidades inerentes a tais sistemas, com presença de comportamentos não lineares e variantes no tempo, condições que os classificam como estudos de caso de grande interesse para a avaliação das novas técnicas de identificação e controle propostas. Além disso, o segundo caso de estudo refere-se à produção do polietileno, considerado uma das classes de polímeros sintéticos da maior importância no mundo atual, cujo mercado encontra-se em expansão considerável, fato que faz com que os resultados obtidos possam despertar algum interesse prático em um futuro próximo.

A modelagem nebulosa foi realizada a partir da obtenção de um conjunto de dados dinâmicos de identificação dos processos em estudo, sendo conduzida através da aplicação

CAPÍTULO VIII – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA O DESENVOLVIMENTO DE TRABALHOS FUTUROS 324

dos métodos numéricos do agrupamento subtrativo e quadrados mínimos. Os modelos desenvolvidos demonstraram excelentes capacidades para a predição das saídas dos processos analisados, apresentando as técnicas baseadas em sistemas nebulosos como bastante promissoras para aplicação em sistemas onde pouco, ou quase nenhum, conhecimento sobre o comportamento dinâmico do meio reacional é conhecido.

Os controladores híbridos *fuzzy*-preditivos projetados tiveram as suas atuações comparadas, para os problemas regulatório e servo, a duas estratégias de controle avançado bastante disseminadas na literatura, apresentando desempenhos grandemente satisfatórios em ambas as circunstâncias e possuindo comportamentos superiores na maioria das situações examinadas. Além disso, apresentam relativa simplicidade de construção e aplicação, tendo atuação eficiente e precisa. Entretanto, a grande vantagem dos controladores híbridos propostos reside no fato deles não necessitarem do modelo matemático fenomenológico do processo em seus projetos, sendo necessário apenas um conjunto de dados de entrada e saída do sistema, ou seja, não é preciso um conhecimento dinâmico interno do processo para o desenvolvimento dos controladores, fazendo com que essas novas alternativas no campo do controle avançado possuam grande flexibilidade para implementação nos mais variados sistemas, não importando o grau de complexidade que estes possuam.

VIII.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A partir das experiências obtidas com o desenvolvimento desta tese, sugerem-se os seguintes tópicos para abordagens futuras:

 Ajustar a qualidade de predição de cada modelo nebuloso a partir de modificações nos parâmetros da parte antecedente em sua base de regras. Isto pode ser alcançado, por exemplo, aplicando-se o método do gradiente (citado no capítulo IV) como parte integrante do procedimento de modelagem;

 Aumentar a capacidade de predição dos modelos nebulosos através do incremento no número de pontos utilizados para treinamento, bem como do decréscimo no valor do intervalo de amostragem considerado; 3. Avaliar a utilização de novos métodos de modelagem para a construção de modelos nebulosos dinâmicos;

4. Realizar um estudo sobre a influência do número de informações passadas aplicado na modelagem nebulosa;

5. Obter um maior número de modelos nebulosos dinâmicos para as estratégias adaptativas L-ANFMPC e E-ANFMPC, visando reduzir a faixa operacional de cada representação; esta ação melhorará a qualidade de predição das formulações, o que pode ocasionar ações de controle ainda mais efetivas;

6. Fazer a reavaliação ou recálculo da matriz dinâmica do controlador DMC em intervalos de tempo regulares;

7. Aplicar novos métodos computacionais de otimização para melhorar a sintonia dos parâmetros dos controladores desenvolvidos;

8. Realizar estudos aprofundados sobre a estabilidade das estruturas de controle híbrido propostas;

9. Desenvolver controladores híbridos baseados em novos modelos locais não lineares, considerando-se, por exemplo, a utilização de funções polinomiais de altas ordens como representações de cada uma das funções conseqüentes na base de regras do sistema nebuloso;

10. Desenvolver uma estratégia de controle que possibilite a incorporação mútua de ambas as abordagens fenomenológica e empírica, obtendo-se assim o melhor que cada uma delas possa oferecer;

11. Implementar os controladores híbridos *fuzzy*-preditivos não lineares multivariáveis delineados diretamente em uma planta polimérica real.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGUIRRE, L. A.; RODRIGUES, G. G.; JÁCOME, C. R. F. Identificação de sistemas nãolineares utilizando modelos NARMAX polinomiais – Uma revisão e novos resultados. SBA Controle & Automação, v. 9, n. 2, p. 90-106, 1998.
- AHN, S.; CHANG, S.; RHEE, H. Application of optimal temperature trajectory to batch PMMA polymerization reactor. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 69, p. 59-68, 1998.
- ALTINTEN, A.; ERDOGAN, S.; HAPOGLU, H.; ALPBAZ, M. Control of a polymerization reactor by fuzzy control method with genetic algorithm. *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, p. 1031-1040, 2003.
- AMARAL, W. C. Identificação recursiva de sistemas multivariáveis. Campinas: Departamento de Engenharia Elétrica, Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual de Campinas, 1980. 124 f. Tese (Doutorado).
- ANTUNES, A.; PEREIRA, J.; FILETI, A. Fuzzy control of a PMMA batch reactor: development and experimental testing. *Computers and Chemical Engineering*, v. 30, p. 268-276, 2005.
- ASSIS, A. J. Identificação e controle de processos não lineares utilizando redes neurais artificiais. Campinas: Departamento de Processos Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2001. 195 p. Tese (Doutorado).
- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR-6023; referências bibliográficas. Rio de Janeiro, 1989. 19p.
- ASUA, J. M. Control of emulsion polymerization reactors using a hierarchical fuzzy logic/model-based controller. *Polymer Reaction Engineering*, v. 9, n. 1, p. 37-67, 2001.
- BABUSKA, R.; VERBRUGGEN, H. B. An overview of fuzzy modeling for control. *Control Engineering Practice*, v. 4, n. 11, p. 1593-1606, 1996.
- BRISTOL, E. H. On a new measure of interactions for multivariable process control. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 11, p. 133-134, 1966.

- CARVALHO, A. B.; GLOOR, P. E.; HAMIELEC, A. E. A kinetic mathematical model for heterogeneous Ziegler-Natta copolymerization. *Polymer*, v. 30, p. 280-296, 1989.
- CAVALCANTI JÚNIOR, F. L. *Controle preditivo utilizando um modelo nebuloso*. Campinas: Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Universidade Estadual de Campinas, 2000. 71 f. Dissertação (Mestrado).
- CHAE, D. C.; CHIN, I.; LEE, K. S.; RHO, H.; RHEE, H.; LEE, J. H. Integrated quality and tracking control of a batch PMMA reactor using a QBMPC technique. *Computer and Chemical Engineering*, v. 24, p. 953-958, 2000.
- CHIU, S. A cluster estimation method with extension to fuzzy model identification. *IEEE*, p. 1240-1245, 1994.
- CHIU, S. Method and software for extracting fuzzy classification rules by subtractive clustering. *IEEE*, p. 461-465, 1996.
- CONGALIDIS, J. P.; RICHARDS, J. R.; RAY, W. H. Feedforward and feedback control of a solution copolymerization reactor. *AIChE Journal*, v. 35, n. 6, p. 891-907, 1989.
- COZEWITH, C. Transient response of continuous-flow stirred-tank polymerization reactors. *AIChE Journal*, v. 34, n. 2, p. 272-282, 1988.
- CUTLER, C. R.; RAMAKER, B. L. Dynamic matrix control A computer control algorithm. In AIChE 86th NATIONAL MEETING, Houston Texas USA, 1979.
- DAOUTIDIS, P.; SOROUSH, M.; KRAVARIS, C. Feedforward feedback-control of multivariable nonlinear processes. *AIChE Journal*, v. 36, n. 10, p. 1471-1484, 1990.
- DECHECHI, E. C. Controle "DMC" de um processo de fermentação alcoólica contínua em escala industrial. Campinas: Departamento de Processos Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1996. 126 f. Dissertação (Mestrado).
- DESHPANDE, P. B. *Multivariable process control*. North Carolina: Instrument Society of America, 1989.
- DOUGHERTY, D.; COOPER, D. A practical multiple model adaptive strategy for multivariable model predictive control. *Control Engineering Practice*, v. 11, p. 649-664, 2003.

- DUBOIS, D.; PRADE, H. Fuzzy sets and systems: theory and applications. New York: Academic Press, 1980, 393 p.
- DUBOIS, D.; PRADE, H. A review of fuzzy set aggregation connectives. *Information Sciences*, v. 36, p. 85-121, 1985.
- EMBIRUÇU, M. Modelagem, estimação e controle em reatores industriais de polimerização de eteno em solução usando catálise Ziegler-Natta solúvel. Rio de Janeiro: Programa de Engenharia Química, Coordenação dos Programas de Pós-Graduação de Engenharia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1998. 450 p. Tese (Doutorado).
- EMBIRUÇU, M. *Fundamentos de controle*. Salvador: Laboratório de Processos e Tecnologia, Escola Politécnica, Universidade Federal da Bahia, 2000. 93 f. Apostila de Curso.
- EMBIRUÇU, M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Continuous soluble Ziegler-Natta ethylene polymerizations in reactor trains. I. Mathematical modeling. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 77, p. 1574-1590, 2000.
- ESPINOSA, J.; VANDEWALLE, J.; WERTZ, V. Fuzzy logic, identification and predictive control. London: Springer-Verlag, 2005, 263 p.
- FONTOURA, J. M. R.; SANTOS, A. F.; SILVA, F. M.; LENZI, M. K.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Monitoring and control of styrene solution polymerization using NIR spectroscopy. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 90, n. 5, p. 1273-1289, 2003.
- GAHLEITNER, M.; WOLFSCHWENGER, J.; BACHNER, C.; BERNREITNER, K.; NEIβl, W. Crystallinity and mechanical properties of PP-homopolymers as influenced by molecular structure and nucleation. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 61, n. 4, p. 649-657, 1996.
- GOBIN, F.; ZULLO, L. C.; CALVET, J. P. Model-predictive control of an open-loop unstable train of polymerization reactors. *Computers and Chemical Engineering*, v. 18, p. 525-528, 1994.

- GUPTA, R. R.; GUPTA, S. K. Multiobjective optimization of an industrial nylon-6 semibatch reactor system using genetic algorithm. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 73, p. 729-739, 1999.
- HAGIMORI, S.; KURODA, C.; ISHIDA, M. Fuzzy control for continuous bulkpolymerization process for polystyrene. *Kagaku Kogaku Ronbunshu*, v. 17, n. 1, p. 127-134, 1991.
- HAMER, J. W.; AKRAMOV, T. A.; RAY, W. H. The dynamic behavior of continuous polymerization reactors: II. Nonisothermal solution homopolymerization and copolymerization in a CSTR. *Chemical Engineering Science*, v. 36, n. 12, p. 1897-1914, 1981.
- HANAI, T.; OHKI, T.; HONDA, H.; KOBAYASHI, T. Analysis of initial conditions for polymerization reaction using fuzzy neural network and genetic algorithm. *Computers* and Chemical Engineering, v. 27, p. 1011-1019, 2003.
- HELLENDOORN, H.; DRIANKOV, D. Fuzzy model identification: selected approaches. Berlin: Springer-Verlag, 1997, 319 p.
- HENSON, M. A.; SEBORG, D. E. *Nonlinear process control*. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1997, 432 p.
- HWANG, W. H.; CHEY, J. I.; RHEE, H. K. Modeling and control of continuous stirred tank reactor for thermal copolymerization. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 67, n. 5, p. 921-931, 1998.
- KAPPLER, B.; TUCHBREITER, A.; FALLER, D.; LIEBETRAUT, P.; HORBELT, W.; TIMMER, J.; HONERKAMP, J.; MÜLHAUPT, R. Real-time monitoring of ethene/1-hexene copolymerizations: determination of catalyst activity, copolymer composition and copolymerization parameters. *Polymer*, v. 44, p. 6179-6186, 2003.
- KHANIKI, R.; MENHAJ, M. B.; ELIASI, H. Generalized predictive control of batch polymerization reactor. World Academy of Science, Engineering and Technology, v. 36, p. 72-77, 2007.
- KIM, K. J.; CHOI, K. Y. Continuous olefin copolymerization with soluble Ziegler-Natta catalysts. *AIChE Journal*, v. 37, n. 8, p. 1255-1260, 1991.

- KLIR, G.; YUAN, B. *Fuzzy sets and fuzzy logic: theory and applications*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1995, 574 p.
- KLIR, G.; YUAN, B. Fuzzy sets, fuzzy logic, and fuzzy systems. Selected papers by Lotfi A.
 Zadeh, advances in fuzzy systems Applications and theory. Singapore: World Scientific, 1996, 826 p. v. 6.
- LEE, C. C. Fuzzy logic in control systems: fuzzy logic controller part I. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, v. 20, n. 2, p. 404-418, 1990.
- LENZI, M. K.; LIMA, E. L.; PINTO, J. K. Modelagem da polimerização simultânea de estireno em suspensão e emulsão. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, v. 14, n. 2, p. 112-121, 2004.
- LIMA, N. M. N. Modelagem e controle híbrido preditivo por lógica fuzzy de processos de polimerização. Campinas: Departamento de Processos Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2006. 236 p. Dissertação (Mestrado).
- LIMA, N. M. N.; MACIEL FILHO, R.; EMBIRUÇU, M.; WOLF MACIEL, M. R. A cognitive approach to develop dynamic models: application to polymerization systems. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 106, p. 981-992, 2007.
- LIMA, N. M. N.; MANENTI, F.; MACIEL FILHO, R.; EMBIRUÇU, M.; WOLF MACIEL, M. R. Fuzzy model-based predictive hybrid control of polymerization processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 48, p. 8542-8550, 2009.
- LIMA, N. M. N.; ZUÑIGA LIÑAN, L.; MACIEL FILHO, R.; EMBIRUÇU, M.; WOLF MACIEL, M. R.; GRÁCIO, F. Modeling and predictive control using fuzzy logic: application for a polymerization system. *AIChE Journal*, v. 56, n. 4, p. 965-978, 2010a.
- LIMA, N. M. N.; ZUÑIGA LIÑAN, L.; MANENTI, F.; MACIEL FILHO, R.; WOLF MACIEL, M. R.; EMBIRUÇU, M.; MEDINA, L. C. Fuzzy cognitive approach of a molecular distillation process. *Chemical Engineering Research and Design*, DOI 10.1016/j.cherd.2010.08.010, 2010b.

- LUYBEN, W. L. *Process modeling, simulation and control for chemical engineers.* 2. ed. New York: McGraw-Hill, 1990, 725 p.
- MACHADO, R. A. F.; BOLZAN, A. Control of batch suspension polymerization reactor. *Chemical Engineering Journal*, v. 70, p. 1-8, 1998.
- MANER, B. R.; DOYLE III, F. J. Polymerization reactor control using autoregressive-plus volterra-based MPC. *AIChE Journal*, v. 43, n. 7, p. 1763-1784, 1997.
- MARLIN, T. E. Process control: designing processes and control systems for dynamic performance. New York: McGraw-Hill, 1995, 954 p.
- MATTEDI, A. Síntese de um controlador híbrido fuzzy-preditivo: aplicação para processos de polimerização. Campinas: Departamento de Processos Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2003. 132 p. Tese (Doutorado).
- MELEIRO, L. A. C. Projeto e aplicação de controladores baseados em modelos lineares, neurais e nebulosos. Campinas: Departamento de Processos Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2002. 304 p. Tese (Doutorado).
- MEZIOU, A. M.; DESHPANDE, P. B.; COZEWITH, C.; SILVERMAN, N. I.; MORRISON, W. G. Dynamic matrix control of an ethylene-propylene-diene polymerization reactor. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 35, n. 1, p. 164-168, 1996.
- MOLLOV, S.; BABUSKA, R.; VERBRUGGEN, H. B. Analysis of interactions in MIMO Takagi-Sugeno fuzzy models. *IEEE*, p. 769-773, 2001.
- MORARI, M.; LEE, J. H. Model predictive control: past, present and future. *Computers* and Chemical Engineering, v. 23, p. 667-682, 1999.
- NI, H.; DEBELAK, K.; HUNKELER, D. Temperature control of highly exothermic batch polymerization reactors. *Journal of Applied Polymer Science*, v. 63, n. 6, p. 761-772, 1997.
- OTHMAN, N. S.; FÉVOTTE, G.; MCKENNA, T. F. Biobjective control of emulsion polymerizations: control of the polymer composition and the concentration of

monomer in the polymer particles. *Chemical Engineering Journal*, v. 98, p. 69-79, 2004.

- ÖZKAN, G.; HAPOGLU, H.; ALPBAZ, M. Non-linear generalized predictive control of a jacketed well mixed tank as applied to a batch process A polymerization reaction. *Applied Thermal Engineering*, v. 26, p. 720-726, 2006.
- PAN, Y.; LEE, J. H. Recursive data-based prediction and control of product quality for a PMMA batch process. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 3215-3221, 2003.
- PARK, M.; RHEE, H. Property evaluation and control in a semibatch MMA/MA solution copolymerization reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 603-611, 2003.
- PASSINO, K. M.; YURKOVICH, S. *Fuzzy control*. Menlo Park: Addison Wesley Longman, 1998, 502 p.
- PEDRYCZ, W.; GOMIDE, F. An introduction to fuzzy sets: analysis and design. Cambridge: MIT Press, 1998, 475 p.
- PEDRYCZ, W.; GOMIDE, F. Fuzzy systems engineering: toward human-centric computing. New Jersey: John Wiley and Sons, 2007, 526 p.
- PETERSON, T.; HERNANDEZ, E.; ARKUN, Y. H. A nonlinear DMC algorithm and its application to a semibatch polymerization reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 47, n. 4, p. 737-753, 1992.
- PONTES, K. V. Simulação, modelagem e análise de reator de polimerização de eteno em solução usando catalisador Ziegler-Natta. Campinas: Departamento de Processos Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2005. 305 p. Dissertação (Mestrado).
- PUCCIARELLI, A. J. Modelagem de séries temporais discretas utilizando modelo nebuloso Takagi-Sugeno. Campinas: Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Universidade Estadual de Campinas, 2005. 116 p. Dissertação (Mestrado).
- QIN, S. J.; BADGWELL, T. A. An overview of industrial model predictive control technology. In: KANTOR, J. C.; GARCIA, C. E.; CARNAHAN, B. *Chemical process control*. AIChE SYMPOSIUM SERIES, 1997. v. 93, p. 232-256.
- RAY, W. H. Molecular weight distributions in copolymer systems. I. Living copolymers. *Macromolecules*, v. 4, p. 162-165, 1971a.
- RAY, W. H.; DOUGLAS, T. L.; GODSALVE, E. W. Molecular weight distributions in copolymer systems. II. Free radical copolymerization. *Macromolecules*, v. 4, p. 166-174, 1971b.
- RAY, W. H. On the mathematical modeling of polymerization reactors. J. Macrom. Sci. -Revs. Macrom. Chem. C., v. 8, p. 1-56, 1972.
- ROFFEL, B.; CHIN, P. A. Fuzzy control of a polymerization reactor. *Hydrocarbon Processing*, v. 70, n. 6, p. 47-49, 1991.
- ROSS, T. J. *Fuzzy logic with engineering applications*. 2. ed. Chichester: John Wiley and Sons, 2004, 628 p.
- SALA, A.; GUERRA, T. M.; BABUSKA, R. Perspectives of fuzzy systems and control. *Fuzzy Sets and Systems*, v. 156, p. 432-444, 2005.
- SANDRI, S.; CORREA, C. Lógica nebulosa. V Escola de Redes Neurais ITA, p. 73-90, 1999.
- SCHMIDT, A. D.; RAY, W. H. The dynamic behavior of continuous polymerization reactors - I: Isothermal solution polymerization in a CSTR. *Chemical Engineering Science*, v. 36, p. 1401-1410, 1981.
- SCHMIDT, A. D.; CLINCH, A. B.; RAY, W. H. The dynamic behavior of continuous polymerization reactors - III: An experimental study of multiple steady states in solution polymerization. *Chemical Engineering Science*, v. 39, n. 3, p. 419-432, 1984.
- SCOTT, P. J.; PENLIDIS, A.; REMPEL, G. L. Ethylene-vinyl acetate semibatch emulsion copolymerization – Use of factorial – Experiments for improved process understanding. *Journal of Polymer Science Part A – Polymer Chemistry*, v. 31, n. 9, p. 2205-2230, 1993.
- SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A. Process dynamics and control. New York: John Wiley and Sons, 1989, 734 p.
- SEBORG, D. E. A Perspective on Advanced Strategies for Process Control (Revisited). In:
 _____. Advances in Control. New York: Springer-Verlag, 1999. p. 103-134.

- SILVA, J. E. L. Simulação e controle preditivo linear (com modelo de convolução) e nãolinear (com modelo baseado em redes neurais artificiais) de colunas recheadas de absorção com reação química. Campinas: Departamento de Engenharia de Sistemas Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1997. 169 f. Dissertação (Mestrado).
- SILVA, D.; OLIVEIRA, N. Optimization and nonlinear model predictive control of batch polymerization systems. *Computers and Chemical Engineering*, v. 26, p. 649-658, 2002.
- SÖDERSTRÖM, T.; STOICA, P. *System identification*. New York: Prentice Hall, 1989, 612 p.
- SOLGI, R.; VOSOUGH, R.; RAFIZADEH, M. Generalization of Takagi-Sugeno fuzzy controller and its application to control of MMA batch polymerization reactor. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, v. 45, n. 2, p. 243-249, 2006.
- SRINIWAS, G. R.; ARKUN, Y.; SCHORK, F. J. Estimation and control of an α-olefin polymerization reactor. *Journal of Process Control*, v. 5, n. 5, p. 303-313, 1995.
- TAKAGI, T.; SUGENO, M. Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, v. 15, n. 1, p. 116-133, 1985.
- TANSCHEIT, R. *Sistemas fuzzy*. Disponível em: <<u>http://www.ica.ele.puc-</u> rio.br/cursos/download/ICA-Sistemas%20Fuzzy.pdf>. Acesso em: 04 abril 2006.
- TOLEDO, E. C. V. Modelagem, simulação e controle de reatores catalíticos de leito fixo.
 Campinas: Departamento de Processos Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1999. 337 p. Tese (Doutorado).
- TSOUKAS, A.; TIRRELL, M.; STEPHANOPOULOS, G. Multiobjective dynamic optimization of semibatch copolymerization reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 37, n. 12, p. 1785-1795, 1982.
- UPRETI, S. R.; SUNDARAM, B. S.; LOHI, A. Optimal control determination of MMA polymerization in non-isothermal batch reactor using bifunctional initiator. *European Polymer Journal*, v. 41, p. 2893-2908, 2005.

- VAIJA, P.; TURUNEN, I.; JARVELAINEN, M. Fuzzy strategy for failure detection and safety control of complex processes. *Microelectronics and Reliability*, v. 25, n. 2, p. 369-381, 1985.
- VANDOREN, V. J. Advanced control software goes beyond PID. *Control Engineering*, v. 45, n. 1, p. 73-78, 1998.
- VEGA, M. P.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Modeling and control of tubular solution polymerization reactors. *Computers and Chemical Engineering*, v. 21, p. 1049-1054, 1997.
- WANG, L.-X. A course in fuzzy systems and control. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1996, 424 p.
- WANG, Z. L.; PLA, F.; CORRIOU, J. P. Nonlinear adaptive control of batch styrene polymerization. *Chemical Engineering Science*, v. 50, n. 13, p. 2081-2091, 1995.
- XIE, T. Y.; McAULEY, K. B.; HSU, J.C. C.; BACON, D. W. Modeling molecular-weight development of gas-phase α-olefin copolymerization. *AIChE Journal*, v. 41, n. 5, p. 1251-1265, 1995.
- YAGER, R. R.; FILEV, D. P. Essentials of fuzzy modeling and control. New York: John Wiley and Sons, 1994, 388 p.
- YAGER, R. R.; ZADEH, L. A. An introduction to fuzzy logic application in intelligent systems. Boston: Kluwer Academic, 1992, 356 p.
- YÜCE, S.; HASALTUN, A.; ERDOGAN, S.; ALPBAZ, M. Temperature control of a batch polymerization reactor. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 77, n. A5, p. 413-420, 1999.
- ZACCA, J. J.; RAY, W. H. Modeling of the liquid-phase polymerization of olefins in loop reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 48, n. 22, p. 3743-3765, 1993.
- ZADEH, L. A. Fuzzy sets. Information and Control, v. 8, n. 3, p. 338-353, 1965.
- ZADEH, L. A. Fuzzy algorithms. Information and Control, v. 12, n. 1-6, p. 94-102, 1968.
- ZADEH, L. A. A Fuzzy-set-theoretic interpretation of linguistic hedges. *Journal of Cybernetics*, v. 2, n. 3, p. 4-34, 1972.

- ZADEH, L. A. Outline of a new approach to the analysis of complex systems and decision processes. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, v. 3, n. 1, p. 28-44, 1973.
- ZADEH, L. A. PRUF A meaning representation language for natural languages. *International Journal of Man-Machine Studies*, v. 10, n. 4, p. 395-460, 1978.
- ZADEH, L. A. A Theory of Approximate Reasoning. In: HAYES, J.; MICHIE, D.; MIKULICH, L. *Machine Intelligence*. New York: Halstead Press, 1979. p. 149-194.
- ZEAITER, J.; ROMAGNOLI, J. A.; BARTON, G. W.; GOMES, V. G.; HAWKETT, B. S.; GILBERT, R. G. Operation of semi-batch emulsion polymerization reactors: modelling, validation and effect of operating conditions. *Chemical Engineering Science*, v. 57, p. 2955-2969, 2002.
- ZIMMERMANN, H.-J. Fuzzy set theory and its applications. 3. ed. Boston: Kluwer Academic, 1996, 435 p.

<u>APÊNDICE A</u> <u>TAXAS DE REAÇÃO PARA A</u> <u>COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO</u>

A.1 INTRODUÇÃO

Como observado no capítulo VII, termos referentes às taxas de reação estão presentes nas equações dos balanços de massa por componente e energia. Assim, este apêndice apresenta as expressões das taxas de reação para cada espécie existente no meio reacional relativas ao processo de copolimerização do eteno/1-buteno (PONTES, 2005). Cada uma das constantes cinéticas presentes nas equações é calculada pela equação de Arrhenius:

$$k = Ae^{(-E/RT_r)} \tag{A.1}$$

sendo A o fator de freqüência, E a energia de ativação e R a constante universal dos gases.

A.2 TAXAS DE REAÇÃO

A.2.1 Espécie Ativa - EA_n

Inicialmente, devem ser definidos os momentos da distribuição de peso molecular para o polímero "vivo", tais como:

$$\mu P_{l,m,n} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p^{l} \cdot q^{m} \cdot \left[P_{p,q,n} \right] \quad l,m = 0,1,2,\dots$$
(A.2)

$$\mu Q_{l,m,n} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p^{l} \cdot q^{m} \cdot \left[Q_{p,q,n} \right] \quad l,m = 0,1,2,\dots$$
(A.3)

onde $\mu P_{l,m,n}$ e $\mu Q_{l,m,n}$ são os momentos dos polímeros "vivos" dos tipos $P \in Q$, respectivamente, $p \in q$ indicam a quantidade de cada mero (a soma p+q é o comprimento da cadeia do polímero), $l \in m$ representam as ordens dos momentos e n é o tipo de espécie catalítica ativa.

A partir da definição dos momentos, e considerando que a espécie ativa compreende o catalisador ativo e o polímero "vivo", obtém-se:

$$\begin{aligned} r_{EA_{n}} &= -k_{d,n} \cdot [C_{n}^{*}] - \\ &- \mu P_{0,0,n} \cdot \begin{pmatrix} k_{th1,n} \cdot [H_{2}]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_{1}] + \\ &+ k_{tm1,2,n} \cdot [M_{2}] + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{t1,n} \end{pmatrix} - \\ &- \mu Q_{0,0,n} \cdot \begin{pmatrix} k_{th2,n} \cdot [H_{2}]^{oth2} + k_{tm2,1,n} \cdot [M_{1}] + \\ &+ k_{tm2,2,n} \cdot [M_{2}] + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{t2,n} \end{pmatrix} \end{aligned}$$
(A.4)

Se a reação de formação do sítio ativo não for instantânea, a expressão para a taxa torna-se:

$$r_{EA_{n}} = -k_{d,n} \cdot [C_{n}^{*}] + k_{f} \cdot [C_{n}] \cdot [CC] - k_{IC^{*}} \cdot [I_{C^{*}}] \cdot [C_{n}^{*}] - - \mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{th1,n} \cdot [H_{2}]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_{1}] + + k_{tm1,2,n} \cdot [M_{2}] + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{t1,n} \right) - - \mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{th2,n} \cdot [H_{2}]^{oth2} + k_{tm2,1,n} \cdot [M_{1}] + + k_{tm2,2,n} \cdot [M_{2}] + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{t2,n} \right)$$
(A.5)

A.2.2 Espécie Catalítiva Desativada - CD_n

$$\begin{aligned} r_{CD_n} &= k_{d,n} \cdot [C_n^*] + \\ \mu P_{0,0,n} \cdot (k_{ih1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{im1,1,n} \cdot [M_1] + k_{im1,2,n} \cdot [M_2] + k_{iCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{t1,n}) + \\ \mu Q_{0,0,n} \cdot (k_{ih2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{im2,1,n} \cdot [M_1] + k_{im2,2,n} \cdot [M_2] + k_{iCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{t2,n}) \end{aligned}$$
(A.6)
$$\boxed{r_{CD_n} = -r_{EA_n}}$$
(A.7)

Se a reação de formação do sítio ativo não for instantânea, a expressão para a taxa torna-se:

$$r_{CD_{n}} = k_{d,n} \cdot [C_{n}^{*}] + k_{IC^{*},n} \cdot [I_{C^{*}}] \cdot [C_{n}^{*}] + \mu P_{0,0,n} \cdot (k_{th1,n} \cdot [H_{2}]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_{1}] + k_{tm1,2,n} \cdot [M_{2}] + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{t1,n}) + \mu Q_{0,0,n} \cdot (k_{th2,n} \cdot [H_{2}]^{oth2} + k_{tm2,1,n} \cdot [M_{1}] + k_{tm2,2,n} \cdot [M_{2}] + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{t2,n})$$
(A.8)

de modo que:

$$r_{CD_n} \neq -r_{EA_n} \tag{A.9}$$

A.2.3 Monômero Tipo 1 - M₁

$$r_{M_{1}} = [M_{1}] \cdot \sum_{n=1}^{NST} \left(-k_{i1,n} \cdot [C_{n}^{*}] - k_{p1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} - k_{fm1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{fm2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \right)$$
(A.10)

A.2.4 Monômero Tipo 2 ou Co-monômero - M₂

$$r_{M2} = [M_2] \cdot \sum_{n=1}^{NSIT} \left(-k_{i2,n} \cdot [C_n^*] - k_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} - k_{p1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{fm2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} - k_{fm1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{fm1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{fm1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \right)$$
(A.11)

A.2.5 Agente de Transferência de Cadeia - H₂

$$r_{H_2} = \sum_{n=1}^{NSIT} \left(-k_{fh1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \cdot [H_2]^{ofh1} - k_{fh2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \cdot [H_2]^{ofh2} - k_{fh1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \cdot [H_2]^{ofh1} - k_{fh2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \cdot [H_2]^{ofh2} \right)$$
(A.12)

A.2.6 Co-catalisador - CC

$$r_{CC} = \sum_{n=1}^{NSIT} \left(-k_{fCC1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \cdot [CC]^{ofCC1} - k_{fCC2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \cdot [CC]^{ofCC2} \right)$$
(A.13)

A.2.7 Solvente - S

$$r_s = 0 \tag{A.14}$$

A.2.8 Catalisador Ativo - C_n^*

$$\begin{aligned} r_{C_{n}^{*}} &= \mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{fh1,n} \cdot \left[H_{2} \right]^{ofh1} + k_{f1,n} + k_{fCC1,n} \cdot \left[CC \right]^{ofCC1} \right) + \\ & \mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{fh2,n} \cdot \left[H_{2} \right]^{ofh2} + k_{f2,n} + k_{fCC2,n} \cdot \left[CC \right]^{ofCC2} \right) + \\ & \left(-k_{i1,n} \cdot \left[M_{1} \right] - k_{i2,n} \cdot \left[M_{2} \right] - k_{d,n} \right) \cdot \left[C_{n}^{*} \right] \end{aligned}$$
(A.15)

APÊNDICE A – TAXAS DE REAÇÃO PARA A COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO 346

Se a reação de formação do sítio ativo não for instantânea, a expressão para a taxa torna-se:

$$\begin{aligned} r_{C_{n}^{*}} &= \mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{fh1,n} \cdot \left[H_{2} \right]^{ofh1} + k_{f1,n} + k_{fCC1,n} \cdot \left[CC \right]^{ofCC1} \right) + \\ & \mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{fh2,n} \cdot \left[H_{2} \right]^{ofh2} + k_{f2,n} + k_{fCC2,n} \cdot \left[CC \right]^{ofCC2} \right) + \\ & \left(-k_{i1,n} \cdot \left[M_{1} \right] - k_{i2,n} \cdot \left[M_{2} \right] - k_{d,n} \right) \cdot \left[C_{n}^{*} \right] \\ & + k_{f^{*}} \cdot \left[C_{n} \right] \cdot \left[CC \right] - k_{IC^{*}} \cdot \left[I_{C^{*}} \right] \cdot \left[C_{n}^{*} \right] \end{aligned}$$
(A.16)

A.2.9 Polímero "Morto"

$$r_{\lambda_{l,m}} = \sum_{n=1}^{NSIT} \left(\mu P_{l,m,n} \cdot r_{\lambda^{n,P}} + \mu Q_{l,m,n} \cdot r_{\lambda^{n,Q}} \right)$$
(A.17)

onde:

$$r_{\mathcal{X}^{n,P}} = \begin{pmatrix} k_{fh1,n} \cdot [H_2]^{ofh1} + k_{fn1,1,n} \cdot [M_1] + k_{fn1,2,n} \cdot [M_2] + k_{f1,n} + \\ + k_{fCC1,n} \cdot [CC]^{ofCC1} + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + \\ k_{th1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_1] + k_{tm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{t1,n} \end{pmatrix}$$
(A.18)
$$(k_{th1,n} \cdot [H_2]^{ofh2} + k_{tnn1,1,n} \cdot [M_1] + k_{tnn1,2,n} \cdot [M_2] + k_{t1,n} +)$$

$$r_{\lambda^{n,Q}} = \begin{pmatrix} k_{fh2,n} \cdot [H_2]^{o_{fh2}} + k_{fm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{fm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{f2,n} + \\ + k_{fCC2,n} \cdot [CC]^{ofCC2} + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + \\ + k_{th2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{tm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{tm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{t2,n} \end{pmatrix}$$
(A.19)

A.2.10 Polímero "Vivo"

Considerando a hipótese do estado "quase-estacionário", obtém-se para a taxa do momento do polímero "vivo" tipo *P* de ordem 0 em relação ao monômero 1:

$$r_{\mu P_{0,m,n}} = 0$$
 (A.20)

Deste modo, a seguinte expressão para o momento de ordem 0 do polímero "vivo" tipo *P* em relação ao monômero 1 pode ser obtida:

$$\mu P_{0,m,n} = \frac{k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,m,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n}}{f_{cP,n}}$$
(A.21)

onde:

$$f_{m2,1,n} = k_{fm2,1,n} \cdot [M_1]$$
(A.22)

$$f_{p2,1,n} = k_{p2,1,n} \cdot [M_1]$$
(A.23)

$$f_{m1,1,n} = k_{fm1,1,n} \cdot [M_1]$$
(A.24)

$$\begin{split} f_{cP,n} &= k_{p1,2,n} \cdot [M_2] + k_{fh1,n} \cdot [H_2]^{ofh1} + k_{fn1,1,n} \cdot [M_1] + k_{fm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{f1,n} \\ &+ k_{fCC1,n} \cdot [CC]^{ofCC1} + k_{th1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_1] + k_{tm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{t1,n} + \\ &+ k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} \end{split}$$
 (A.25)

Analogamente, para a taxa do momento de ordem 0 em relação ao monômero 2 do polímero "vivo" tipo Q, e assumindo-se a hipótese do estado "quase-estacionário", obtémse:

$$r_{\mu \mathcal{Q}_{l,0,n}} = 0 \tag{A.26}$$

Portanto, a seguinte expressão para o momento de ordem 0 do polímero "vivo" tipo Q em relação ao monômero 2 pode ser obtida:

$$\mu Q_{l,0,n} = \frac{k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{l,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n}}{f_{cQ,n}}$$
(A.27)

onde:

$$f_{m1,2,n} = k_{fm1,2,n} \cdot [M_2]$$
(A.28)

$$f_{p1,2,n} = k_{p1,2,n} \cdot [M_2]$$
(A.29)

$$f_{m2,2,n} = k_{fm2,2,n} \cdot [M_2]$$
(A.30)

$$\begin{aligned} f_{cQ,n} &= k_{p2,1,n} \cdot [M_1] + k_{fh2,n} \cdot [H_2]^{ofh2} + k_{fm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{fm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{f2,n} + \\ & k_{fCC2,n} \cdot [CC]^{ofCC2} + k_{th2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{tm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{tm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{t2,n} + \\ & k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} \end{aligned}$$

$$(A.31)$$

APÊNDICE A – TAXAS DE REAÇÃO PARA A COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO 348

Para os momentos de ordem 0,0 obtém-se:

$$\mu P_{0,0,n} = \frac{\left(f_{cQ,n} - f_{m2,2,n}\right) \cdot k_{i1,n} \cdot \left[C_{n}^{*}\right] \cdot \left[M_{1}\right] + f_{2,1,n} \cdot k_{i2,n} \cdot \left[C_{n}^{*}\right] \cdot \left[M_{2}\right]}{\left(f_{cP,n} - f_{m1,1,n}\right) \cdot \left(f_{cQ,n} - f_{m2,2,n}\right) - f_{2,1,n} \cdot f_{1,2,n}}$$
(A.32)

$$\mu Q_{0,0,n} = \frac{(f_{cP,n} - f_{m1,1,n}) \cdot k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{1,2,n} \cdot k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1]}{(f_{cQ,n} - f_{m2,2,n}) \cdot (f_{cP,n} - f_{m1,1,n}) - f_{1,2,n} \cdot f_{2,1,n}}$$
(A.33)

onde:

$$f_{2,1,n} = f_{m2,1,n} + f_{p2,1,n}$$
(A.34)

$$f_{1,2,n} = f_{m1,2,n} + f_{p1,2,n}$$
(A.35)

Considerando agora os momentos de ordem 1 em relação ao monômero 1, tem-se:

$$\mu P_{1,0,n} = \begin{pmatrix} k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{p1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \rangle \cdot f_{cQ,n} + f_{p2,1,n} \cdot (k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \rangle \\ f_{cP,n} \cdot f_{cQ,n} - f_{p2,1,n} \cdot f_{p1,2,n} \\ \mu Q_{1,0,n} = \frac{k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{1,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n}}{f_{cQ,n}} \\ (A.37)$$

onde:

$$f_{p_{1,1,n}} = k_{p_{1,1,n}} \cdot [M_1]$$
(A.38)

Para os momentos de ordem 1 em relação ao monômero 2:

$$\mu Q_{0,1,n} = \begin{pmatrix} f_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + \\ + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \end{pmatrix} \cdot f_{cP,n} + \\ + f_{p1,2,n} \cdot (k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n}) \\ \hline f_{cP,n} \cdot f_{cQ,n} - f_{p1,2,n} \cdot f_{p2,1,n}$$
(A.39)

$$\mu P_{0,1.n} = \frac{k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0.n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,1.n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0.n}}{f_{cP,n}}$$
(A.40)

onde:

$$f_{p2,2,n} = k_{p2,2,n} \cdot [M_2]$$
(A.41)

Para os momentos de ordem 2 em relação ao monômero 1:

$$\mu Q_{2,0,n} = \begin{pmatrix} \mu_{2,0,n} = \\ \begin{pmatrix} k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + 2 \cdot f_{p1,1,n} \cdot \mu_{p1,0,n} + \\ + f_{p1,1,n} \cdot \mu_{p0,0,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu_{p0,0,n} + \\ + f_{m2,1,n} \cdot \mu_{Q0,0,n} + 2 \cdot f_{p2,1,n} \cdot \mu_{Q1,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu_{Q0,0,n} \end{pmatrix} \cdot f_{cQ,n} + \\ = \frac{+ (k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu_{p0,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu_{Q0,0,n}] \cdot f_{p2,1,n}}{f_{cP,n} \cdot f_{cQ,n} - f_{p2,1,n} \cdot f_{p1,2,n}}$$

$$\mu Q_{2,0,n} = \frac{k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu_{p0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu_{p2,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu_{Q0,0,n}}{f_{cQ,n}}$$

$$(A.43)$$

Considerando os momentos de ordem 2 em relação ao monômero 2:

$$\begin{split}
\mu Q_{0,2,n} &= \\
\begin{pmatrix}
k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + 2 \cdot f_{p_{2,2,n}} \cdot \mu Q_{0,1,n} + \\
+ f_{p_{2,2,n}} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{m_{2,2,n}} \cdot \mu Q_{0,0,n} + \\
+ f_{m_{1,2,n}} \cdot \mu P_{0,0,n} + 2 \cdot f_{p_{1,2,n}} \cdot \mu P_{0,1,n} + f_{p_{1,2,n}} \cdot \mu P_{0,0,n}
\end{split} \cdot f_{cP,n} + \\
&= \frac{+ (k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m_{2,1,n}} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{m_{1,1,n}} \cdot \mu P_{0,0,n}) \cdot f_{p_{1,2,n}}}{f_{cQ,n} \cdot f_{cP,n} - f_{p_{1,2,n}} \cdot f_{p_{2,1,n}}} \\
\mu P_{0,2,n} &= \frac{k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m_{2,1,n}} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p_{2,1,n}} \cdot \mu Q_{0,2,n} + f_{m_{1,1,n}} \cdot \mu P_{0,0,n}}{f_{cP,n}}
\end{split}$$
(A.45)

Para os momentos de ordem 1 em relação ao monômero 1 e ao monômero 2, tem-

se:

APÊNDICE A – TAXAS DE REAÇÃO PARA A COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO 350

$$\mu P_{1,1,n} = \frac{\begin{pmatrix} k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,1,n} \\ + f_{p1,1,n} \cdot \mu P_{0,1,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \end{pmatrix} \cdot f_{cQ,n} + }{f_{cQ,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{1,0,n} + }{f_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{1,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n}}$$
(A.46)

$$\mu Q_{1,1,n} = \frac{\begin{pmatrix} k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + \\ + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{1,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{1,1,n} + \\ + f_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{1,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \end{pmatrix}}{f_{cQ,n}}$$
(A.47)

Como observado, as equações anteriores dependem da concentração de catalisador ativo C_n^* , a qual é definida como:

$$\left[C_{n}^{*}\right] = \left[EA_{n}\right] - \mu P_{0,0,n} - \mu Q_{0,0,n}$$
(A.48)

Assim, tem-se que a concentração de catalisador ativo depende dos momentos de ordem 0,0 e vice-versa. Por conseguinte, devem-se reescrever as equações para esses momentos, como a seguir:

$$\mu \mathcal{P}_{0,0,n} = \frac{\begin{pmatrix} k_{i1,n} \cdot [EA_n] \cdot [M_1] \cdot (f_{cQ,n} - f_{m2,2,n} + k_{i2,n} \cdot [M_2]) + \\ (f_{2,1,n} - k_{i1,n} \cdot [M_1]) \cdot k_{i2,n} \cdot [EA_n] \cdot [M_2] \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} (f_{cP,n} - f_{m1,1,n} + k_{i1,n} \cdot [M_1]) \cdot (f_{cQ,n} - f_{m2,2,n} + k_{i2,n} \cdot [M_2]) - \\ - (f_{2,1,n} - k_{i1,n} \cdot [M_1]) \cdot (f_{1,2,n} - k_{i2,n} \cdot [M_2]) \end{pmatrix}}$$

$$(A.49)$$

$$\mu \mathcal{Q}_{0,0,n} = \frac{\begin{pmatrix} k_{i2,n} \cdot [EA_n] \cdot [M_2] \cdot (f_{cP,n} - f_{m1,1,n} + k_{i1,n} \cdot [M_1]) + \\ (f_{1,2,n} - k_{i2,n} \cdot [M_2]) \cdot k_{i1,n} \cdot [EA_n] \cdot [M_1] \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} (f_{cQ,n} - f_{m2,2,n} + k_{i2,n} \cdot [M_2]) \cdot (f_{cP,n} - f_{m1,1,n} + k_{i1,n} \cdot [M_1]) - \\ - (f_{1,2,n} - k_{i2,n} \cdot [M_2]) \cdot (f_{cP,n} - f_{m1,1,n} + k_{i1,n} \cdot [M_1]) - \\ - (f_{1,2,n} - k_{i2,n} \cdot [M_2]) \cdot (f_{2,1,n} - k_{i1,n} \cdot [M_1]) \end{pmatrix}}$$

$$(A.50)$$

A.3 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este apêndice apresentou as expressões das taxas de reação para cada componente presente na mistura reacional do processo de copolimerização do eteno/1-buteno, além de descrever as equações para os momentos da distribuição de peso molecular do polímero "vivo".

<u>APÊNDICE B</u> <u>ASPECTOS NUMÉRICOS PARA O MODELO</u> <u>MATEMÁTICO DO PROCESSO DE</u> <u>COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO</u>

B.1 INTRODUÇÃO

O capítulo VII apresentou o modelo matemático fenomenológico para o processo de copolimerização do eteno/1-buteno. Como observado, o modelo do PFR é composto por um sistema de equações diferenciais parciais, o qual necessita ser transformado em um conjunto de equações diferenciais ordinárias, de modo a ser possível sua resolução através da sub-rotina LSODE. O método das características foi aplicado para tal fim, sendo apresentadas na seção B.2 as equações resultantes da utilização da referida técnica. A seguir, na seção B.3, é reescrito o sistema de EDOs para o CSTR. Posteriormente, a seção B.4 mostra as expressões utilizadas para o cálculo da derivada da densidade da mistura, já que tais termos estão presentes no conjunto de equações diferenciais do PFR e do CSTR.

B.2 SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS PARA O PFR

As equações diferenciais parciais para o reator tubular são discretizadas ao longo do sentido do fluxo através da aplicação do método das características. Esta técnica baseiase na consideração de similaridade cinética entre o PFR (sem mistura axial e com mistura radial perfeita) e um reator batelada, onde cada elemento de fluido na mistura reacional pode ser visto como passando através do PFR sem interagir com os elementos anteriores e posteriores a ele.

As expressões dos balanços de massa e energia para o PFR definidas no capítulo VII podem ser novamente descritas:

• Balanço de massa global

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial W}{\partial z} \tag{B.1}$$

• Balanço de massa por componente

$$\frac{\partial [C]}{\partial t} + \frac{\partial v \cdot [C]}{\partial z} = r_c \tag{B.2}$$

onde:

$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_n, CD, M_1, M_2, H_2, CC, S, C*_n$$

• Balanço de energia

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{r_p \cdot \Delta H_p^o}{\rho \cdot Cp}$$
(B.3)

Deste modo, o método das características é então aplicado para as três equações anteriores, de forma que estas possam ser reescritas para cada elemento de fluido como a seguir (PONTES, 2005).

B.2.1 Balanço de Massa Global e "Balanço de Deslocamento"

Para o balanço de massa global em batelada, tem-se:

$$\frac{dM_r}{dt} = 0 \Longrightarrow \rho_r \cdot V_r = M_r = cte \tag{B.4}$$

onde o subscrito r representa um elemento de fluido.

Como o elemento de fluido está em movimento, é necessário considerar sua velocidade, obtendo-se então:

$$\frac{dz_r}{dt} = \frac{W_r}{\rho_r \cdot A} = \frac{WQ_r}{A}$$
(B.5)

onde W_r é a vazão mássica, WQ_r é a vazão volumétrica, ρ é a massa específica, A é a área da seção transversal (igual para todos os elementos de fluido) e z é o comprimento do reator.

B.2.2 Balanço de Massa por Componente

$$\frac{d[C]_r}{dt} = r_{c,r} + \frac{[C]_r}{\rho_r} \cdot \frac{d\rho_r}{dt}$$
(B.6)

onde $[C]_r$ é a concentração da espécie *C* em mol por volume, $r_{c,r}$ é a taxa em mol por volume por tempo e o subscrito *r* simboliza o elemento de fluido.

B.2.3 Balanço de Energia

Como as entradas são nulas para um reator batelada, tem-se:

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{r_{p,r} \cdot \left(\Delta \overline{H}_p^o + 2 \cdot PM_{m_1} \cdot \int_o^r (\hat{C}p_p - \hat{C}p_{m_1}) dT + 2 \cdot PM_{m_2} \cdot \int_o^r (\hat{C}p_Q - \hat{C}p_{m_2}) dT \right)}{\rho_r \cdot Cp_r}$$
(B.7)

B.2.4 Interpretação das Equações

É importante destacar que o tempo ao qual se referem as equações B.5 a B.7 não é o tempo real, mas sim o tempo de deslocamento do fluido no reator. Essas equações devem ser resolvidas de um tempo τ_0 (z = 0, início do reator) a τ_f (z = L, final do reator). Assim, o conjunto de equações diferenciais ordinárias a ser resolvido para o PFR é descrito abaixo:

$$\frac{dz_r}{d\tau} = \frac{W_r}{\rho_r \cdot A} = \frac{WQ_r}{A}$$
(B.8)

$$\frac{d[C]_r}{d\tau} = r_{c,r} + \frac{[C]_r}{\rho_r} \cdot \frac{d\rho_r}{d\tau}$$
(B.9)

$$\frac{dT_r}{d\tau} = \frac{r_{p,r} \cdot \left(\Delta \overline{H}_p^o + 2 \cdot PM_{M_1} \cdot \int_o^r (\hat{C}p_p \cdot \hat{C}p_{M_1}) dT + + 2 \cdot PM_{M_2} \cdot \int_o^r (\hat{C}p_Q \cdot \hat{C}p_{M_2}) dT + \right)}{\rho_r \cdot Cp_r}$$
(B.10)

Tem-se que em t = t₀ as condições iniciais são conhecidas (valores da corrente de entrada). Define-se então um incremento de tempo para a integração das equações B.8 a B.10 até o tempo final (tempo inicial + incremento). Como resposta da integração, ter-se-á o valor da posição (z). A integração prossegue até o final do reator, quando z > L, de modo a se obter as concentrações e temperatura em z = L (após interpolação entre os comprimentos imediatamente anterior e imediatamente posterior ao comprimento L). Essas condições corresponderão à entrada do próximo PFR no trem.

B.3 SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS PARA O CSTR

O conjunto de equações diferenciais ordinárias para o CSTR do processo de copolimerização do eteno/1-buteno foi descrito no capítulo VII, sendo importante reapresentá-lo neste ponto.

B.3.1 Balanço de Massa Global

$$W_{r} = W_{r-1} + F_{r} + B_{r+1} - R_{r} - B_{r} - V_{r} \cdot \frac{d\rho_{r}}{dt}$$
(B.11)

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 1 \Longrightarrow B_r = 0$$
$$r = N \Longrightarrow B_{r+1} = 0.$$

B.3.2 Balanço de Massa por Componente

$$\frac{d[C]_{r}}{dt} = \frac{W_{r-1} \cdot [C]_{r-1}}{V_{r} \cdot \rho_{r-1}} + \frac{F_{r} \cdot [C]_{Fr}}{V_{r} \cdot \rho_{Fr}} + \frac{B_{r+1} \cdot [C]_{r+1}}{V_{r} \cdot \rho_{r+1}} - \frac{(R_{r} + B_{r} + W_{r}) \cdot [C]_{r}}{V_{r} \cdot \rho_{r}} + r_{c,r} \quad (B.12)$$
$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_{n}, CD, M_{1}, M_{2}, H_{2}, CC, S, C*_{n}$$

com as condições:

$$r = 1 \Longrightarrow B_r = 0$$
$$r = N \Longrightarrow B_{r+1} =$$

0

B.3.3 Balanço de Energia

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{e=1}^{ne} W_e \int_r^e Cp_e dT}{V \cdot \rho \cdot Cp} - \frac{V \cdot r_p \cdot \left(\Delta \overline{H}_p^o + 2 \cdot PM_{M_1} \cdot \int_o^r (\hat{C}p_p \cdot \hat{C}p_{M_1}) dT + 2 \cdot PM_{M_2} \cdot \int_o^r (\hat{C}p_Q \cdot \hat{C}p_{M_2}) dT\right)}{V \cdot \rho \cdot Cp}$$
(B.13)

sendo:

$$e = F_r, W_{r-1}B_{r+1}$$

$$r = 1 \Longrightarrow B_r = 0 \qquad r = N \Longrightarrow B_{r+1} = 0$$

B.4 DERIVADA DA DENSIDADE

A partir da análise dos sistemas de equações diferenciais ordinárias do PFR e do CSTR, observa-se a presença do termo correspondente à derivada da densidade da mistura. No capítulo VII, foram definidas as expressões para o cálculo da densidade, as quais são aqui reescritas.

$$\rho_{r} = \frac{[M_{1}]_{r} \cdot PM_{m1}}{\rho_{m1,r}} (\rho_{m1,r} - \rho_{U,r}) + \frac{[M_{2}]_{r} \cdot PM_{m2}}{\rho_{m2,r}} (\rho_{m2,r} - \rho_{U,r}) + \frac{[S]_{r} \cdot PM_{s}}{\rho_{s,r}} (\rho_{s,r} - \rho_{U,r}) + \rho_{U,r}$$
(B.14)

 $\rho_{i,r} = f_i(T_r) \tag{B.15}$

Assim, calculando a derivada da equação B.14 em relação ao tempo, obtém-se (PONTES, 2005):

$$\frac{d\rho_r}{dt} = A_{m1} \cdot \frac{d[M_1]_r}{dt} + A_{m2} \cdot \frac{d[M_2]_r}{dt} + A_s \cdot \frac{d[S]_r}{dt} + A_r \cdot \frac{dT_r}{dt}$$
(B.16)

onde:

$$A_{m1} = PM_{m1} \cdot \frac{\left(\rho_{m1,r} - \rho_{U,r}\right)}{\rho_{m1,r}}$$
(B.17)

$$A_{m2} = PM_{m2} \cdot \frac{\left(\rho_{m2,r} - \rho_{U,r}\right)}{\rho_{m2,r}}$$
(B.18)

$$A_{s} = PM_{s} \cdot \frac{\left(\rho_{s,r} - \rho_{U,r}\right)}{\rho_{s,r}}$$
(B.19)

$$A_{T} = \begin{pmatrix} PM_{m1} \cdot [M_{1}]_{r} \cdot \frac{\left(\rho_{U,r} \cdot \frac{df_{m1,r}(T_{r})}{dT_{r}} - \rho_{m1,r} \cdot \frac{df_{U,r}(T_{r})}{dT_{r}}\right)}{\rho_{m1,r}^{2}} + \\ + PM_{m2} \cdot [M_{2}]_{r} \cdot \frac{\left(\rho_{U,r} \cdot \frac{df_{m2,r}(T_{r})}{dT_{r}} - \rho_{m2,r} \cdot \frac{df_{U,r}(T_{r})}{dT_{r}}\right)}{\rho_{m2,r}^{2}} + \\ + PM_{s} \cdot [S]_{r} \cdot \frac{\left(\rho_{U,r} \cdot \frac{df_{s,r}(T_{r})}{dT_{r}} - \rho_{s,r} \cdot \frac{df_{U,r}(T_{r})}{dT_{r}}\right)}{\rho_{s,r}^{2}} + \frac{df_{U,r}(T_{r})}{dT_{r}} \end{pmatrix}$$
(B.20)

B.4.1 Cálculo da Derivada da Densidade para o Sistema de EDOs do PFR

Combinando-se as equações B.16, B.9 e B.10, obtém-se para o PFR:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{A_{m1} \cdot F_{m1} + A_{m2} \cdot F_{m2} + A_s \cdot F_s + A_T \cdot F_T}{\rho - A_{m1} \cdot [M_1] - A_{m2} \cdot [M_2] - A_s \cdot [S]}$$
(B.21)

onde:

$$F_{m1} = \rho \cdot r_{m1} \tag{B.22}$$

$$F_{m2} = \rho \cdot r_{m2} \tag{B.23}$$

$$F_s = \rho \cdot r_s \tag{B.24}$$

$$F_T = \rho \cdot \frac{r_e}{Cp} \tag{B.25}$$

sendo:

$$r_{e} = r_{p} \cdot \left(\Delta \overline{H}_{p}^{o} + 2 \cdot PM_{M_{1}} \cdot \int_{o}^{r} (\hat{C}p_{p} \cdot \hat{C}p_{M_{1}}) dT + 2 \cdot PM_{M_{2}} \cdot \int_{o}^{r} (\hat{C}p_{Q} \cdot \hat{C}p_{M_{2}}) dT \right)$$
(B.26)

B.4.2 Cálculo da Derivada da Densidade para o Sistema de EDOs do CSTR

Do mesmo modo que no PFR e a partir da combinação das equações B.16, B.11, B.12 e B.13, é obtida a seguinte expressão para calcular a derivada da densidade para o CSTR:

$$\frac{d\rho_r}{dt} = \frac{A_{m1} \cdot F_{m1} + A_{m2} \cdot F_{m2} + A_s \cdot F_s + A_T \cdot F_T}{\rho_r - A_{m1} \cdot [M_1]_r - A_{m2} \cdot [M_2]_r - A_s \cdot [S]_r}$$
(B.27)

onde:

$$F_{m1} = \rho_r \cdot \varphi[M_1]_r - \frac{\varphi W_r \cdot [M_1]_r}{V_r}$$
(B.28)

$$F_{m2} = \rho_r \cdot \varphi[M_2]_r - \frac{\varphi W_r \cdot [M_2]_r}{V_r}$$
(B.29)

$$F_s = \rho_r \cdot \varphi[S]_r - \frac{\varphi W_r \cdot [S]_r}{V_r}$$
(B.30)

$$F_T = \rho_r \cdot \frac{dT_r}{dt} \tag{B.31}$$

sendo:

$$\varphi[C]_{r} = \frac{W_{r-1} \cdot [C]_{r-1}}{V_{r} \cdot \rho_{r-1}} + \frac{F_{r} \cdot [C]_{Fr}}{V_{r} \cdot \rho_{Fr}} + \frac{B_{r+1} \cdot [C]_{r+1}}{V_{r} \cdot \rho_{r+1}} - \frac{(R_{r} + B_{r}) \cdot [C]_{r}}{V_{r} \cdot \rho_{r}} + r_{c,r}$$
(B.32)

$$\varphi W_r = W_{r-1} + F_r + B_{r+1} - R_r - B_r \tag{B.33}$$

Observa-se que a expressão para a derivada da densidade do CSTR (equação B.27) é análoga à do PFR (equação B.21), mas com definições diferentes para F_{m1} , F_{m2} , F_s e F_T .

B.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este apêndice apresentou o sistema de equações diferenciais ordinárias para os PFRs do processo de copolimerização do eteno/1-buteno, o qual foi derivado a partir da aplicação do método das características ao conjunto de equações diferenciais parciais deste reator, descrito no capítulo VII. Também foram mostrados resultados análiticos para o

APÊNDICE B – ASPECTOS NUMÉRICOS PARA O MODELO MATEMÁTICO DO PROCESSO DE COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO 362

cálculo da derivada da densidade para ambos os reatores PFR e CSTR, já que tais termos estão presentes no sistema de equações diferenciais dos referidos. As equações diferenciais ordinárias obtidas foram então inseridas no modelo matemático fenomenológico do processo desenvolvido no capítulo VII, sendo posteriormente integradas através da sub-rotina LSODE em linguagem FORTRAN 90/95.