



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Modelagem e Controle Híbrido Preditivo por Lógica *Fuzzy* de Processos de Polimerização

Autor: NÁDSON MURILO NASCIMENTO LIMA

Orientador: Prof. Dr. RUBENS MACIEL FILHO

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - São Paulo
Setembro de 2006

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

L628m Lima, Nádson Murilo Nascimento
Modelagem e controle híbrido preditivo por lógica *fuzzy*
de processos de polimerização / Nádson Murilo Nascimento
Lima.--Campinas, SP: [s.n.], 2006.

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

1. Controle preditivo. 2. Lógica difusa. 3. Identificação
de sistemas. 4. Polimerização. I. Maciel Filho, Rubens. II.
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

Título em Inglês: Modeling and predictive hybrid control by fuzzy logic for
polymerization processes

Palavras-chave em Inglês: Model based predictive control, Fuzzy dynamic
modeling, System identification, Copolymerization

Área de concentração: Desenvolvimento de processos Químicos

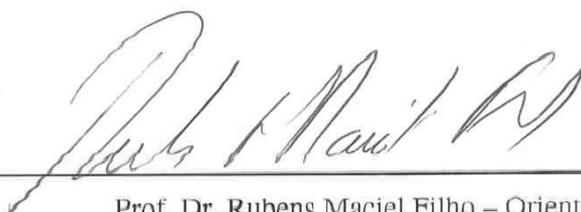
Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Reinaldo Giudici e Flávio Vasconcelos da Silva

Data da defesa: 22/09/2006

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Nádson Murilo Nascimento Lima e aprovada em 22 de setembro de 2006 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



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



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



Prof. Dr. Flávio Vasconcelos da Silva
Faculdade de Engenharia Química – UNICAMP

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



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 José 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 proporcionado os meios necessários para conclusão deste trabalho e pelas inúmeras demonstrações de incentivo, confiança, respeito e amizade. As suas importantes direções sobre a realização desta dissertação foram sempre fatores de grande motivação para a realização da mesma.

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

À “Princesa Josefina”, por todo o seu amor e pela maravilhosa pessoa que é. Obrigado por aparecer em minha vida em uma importante fase, por sua inestimável atenção, por todas as formas de apóio que tens me fornecido e por sua inesgotável paciência. Tem coisas na vida que esperam o momento certo para acontecer. Conosco não foi diferente.

A todos os amigos e colegas do LOPCA - pelas discussões e contribuições das mais variadas formas - em especial ao Eduardo Coselli “Ursão”, ao Elmer, ao Félix, à Lamia, à Maria Cristina, à Betânia, à Cristiane, ao Mário e à Elenise, à Delba, à Carol, ao Edvaldo, ao Júlio, ao Rodrigo e à Mylene, ao Leonardo, à Érika, à Edinara, ao Rafael e ao Newton.

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

Ao Cristiano e ao Elton, pelo suporte técnico concedido em inúmeras oportunidades.

À FAPESP, pelo suporte financeiro e pelas importantes sugestões concedidas por meio dos relatórios técnicos realizados através do processo nº 03/12360-0.

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.

“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 delimitação de estratégias de controle. No entanto, a obtenção de representações matemáticas precisas e, ao mesmo tempo, aplicáveis para 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 espaço e do tempo. 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.

Este trabalho enfoca o desenvolvimento de um controlador híbrido preditivo baseado em modelos nebulosos (*fuzzy*) tipo Takagi-Sugeno para processos de polimerização, os quais apresentam dinâmicas altamente complexas e de difícil modelagem matemática, dificultando assim a aplicação de metodologias convencionais de controle. Foram considerados dois casos de estudo para análise de desempenho do controlador proposto: o processo de copolimerização em solução do metacrilato de metila e 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 geração de dados dinâmicos e implementação do controlador. A partir de simulações computacionais, os modelos dinâmicos nebulosos funcionais foram construídos – os quais demonstraram excelentes capacidades para predição das saídas dos processos como uma função dos dados dinâmicos de entrada – sendo, posteriormente, inseridos na estrutura interna do controle preditivo DMC (*Dynamic Matrix Control*). A escolha do controlador DMC como base para o desenvolvimento da estrutura proposta deve-se ao fato de sua notória aplicabilidade industrial, aliada à simplicidade de projeto e execução, além de possibilitar a incorporação de restrições nas variáveis controladas e manipuladas. Por fim, foram comparados os desempenhos entre os controladores híbrido e DMC convencional para os problemas regulatório e servo, fornecendo resultados satisfatórios em ambas as situações. Isto demonstra o alto potencial do algoritmo proposto para o controle de sistemas não lineares.

Palavras-chave: Controle Preditivo Baseado em Modelo, Modelagem Nebulosa, Identificação de Sistemas, Copolimerização.

ABSTRACT

Controller synthesis represents an important slope of recent development in the field of academic and industry research. A well-projected controller may express the success in reference to the aim of production, and it also creates materials with desirable specification and it allows that the system operates under certain restrictions, considering aspects related to operability, safety and minimization of residue. Then, it's known that modeling stage is fundamental to delineation of controller strategies. However, the obtaining of precise and applicable mathematical representation to control most of relevant process in chemist engineering is an arduous task, because of the presence of nonlinear dynamic behavior and space-time variation. Therefore, it searches obtaining of simpler models, but gifted of essential representativity inherent to production system, because of this suitable control structure to each specific necessity projected.

This work focus on the development of predictive hybrid controller based on fuzzy models, type Takagi-Sugeno, to process of copolymerization, that present high complex dynamic and hard mathematical modeling, what is also difficult to apply conventional methodologies of control. Two study cases that present analyze of purpose controller were considered: the process of copolymerization in solution of methyl methacrylate and vinyl acetate, and industry copolymerization of ethene/1-butene with Ziegler-Natta catalyzation. The phenomenologic models of the two processes have already described in relevant literature, and they are considered as virtual plants to create dynamic data and controller implementation. Based on computer simulation, functional dynamic fuzzy models were made – they demonstrate excellent capacity to output prediction in process as a function of input dynamic data – and they are, subsequently, inserted in an internal structure of DMC (Dynamic Matrix Control) predictive control. The choice of DMC controller as the base to development of proposal structure is responsible to the fact of its well-known industry applicability, allied to simplicity of the project and execution, beyond it makes possible the incorporation of restrictions in controlled and manipulated variables. Finally, the performance between hybrid controller and conventional DMC to regulatory and servo problems were compared, and it supplies satisfactory results in both situation. It demonstrates high potential of propose algorithm to control nonlinear system.

Keywords: Model Based Predictive Control, Fuzzy Dynamic Modeling, Systems Identification, Copolymerization.

SUMÁRIO

| | |
|---|--------------|
| RESUMO..... | xiii |
| ABSTRACT. | xv |
| LISTA DE FIGURAS..... | xxiii |
| LISTA DE TABELAS..... | xxvii |
| NOMENCLATURA..... | xxix |
| | |
| CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO | 1 |
| I.1 INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA | 3 |
| I.2 OBJETIVO..... | 5 |
| I.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO | 6 |
| | |
| CAPÍTULO II – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA..... | 9 |
| II.1. INTRODUÇÃO | 11 |
| II.2. PROCESSOS DE POLIMERIZAÇÃO | 11 |
| II.3. CONTROLE AUTOMÁTICO DE PROCESSOS..... | 14 |
| II.4. SISTEMAS NEBULOSOS | 19 |
| II.5. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO | 22 |
| | |
| CAPÍTULO III – SISTEMAS NEBULOSOS | 25 |

| | |
|--|-----------|
| III.1. INTRODUÇÃO | 27 |
| III.2. CONCEITOS BÁSICOS | 28 |
| III.3. FUNÇÕES DE PERTINÊNCIA | 31 |
| III.3.1. Tipos..... | 31 |
| III.3.2. Características..... | 37 |
| III.4. OPERAÇÕES COM CONJUNTOS NEBULOSOS | 38 |
| III.4.1. União..... | 39 |
| III.4.2. Intersecção | 40 |
| III.4.3. Complemento..... | 41 |
| III.5. PROPRIEDADES DOS CONJUNTOS NEBULOSOS | 41 |
| III.6. PRODUTO CARTESIANO, RELAÇÕES NEBULOSAS, OPERADORES DE IMPLICAÇÃO E REGRAS DE INFERÊNCIA..... | 43 |
| III.6.1. Operações em Relações Nebulosas | 43 |
| III.6.2. Composições de Relações Nebulosas | 44 |
| III.6.3. Operadores de Implcação | 44 |
| III.6.4. Regras de Inferência | 45 |
| III.7. VARIÁVEIS LINGUÍSTICAS E TERMOS LINGUÍSTICOS | 46 |
| III.8. MODELOS NEBULOSOS | 47 |
| III.8.1. “Fuzzificação” | 47 |
| III.8.2. Procedimento de Inferência | 48 |
| III.8.3. “Defuzzificação” | 52 |
| III.9. CLASSIFICAÇÃO DOS MODELOS NEBULOSOS..... | 53 |
| III.10. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO..... | 54 |
| CAPÍTULO IV – IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS.... | 55 |
| IV.1. INTRODUÇÃO | 57 |
| IV.2. TÓPICOS EM MODELAGEM DE SISTEMAS | 57 |
| IV.3. ETAPAS PARA IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS | 58 |
| IV.4. CONSTRUÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS FUNCIONAIS | 60 |
| IV.4.1. Método do Agrupamento Subtrativo | 62 |
| IV.4.2. Método dos Mínimos Quadrados..... | 65 |
| IV.5. VALIDAÇÃO DOS MODELOS NEBULOSOS | 67 |

| | |
|--|-----------|
| IV.6. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO | 67 |
| CAPÍTULO V – CONTROLE PREDITIVO BASEADO EM MODELO..... | 69 |
| V.1. INTRODUÇÃO | 71 |
| V.2. CONTROLE POR MATRIZ DINÂMICA - DMC | 73 |
| V.2.1. Procedimento DMC | 74 |
| V.2.2. Algoritmo DMC para Sistemas SISO..... | 79 |
| V.3. CONTROLADOR HÍBRIDO <i>FUZZY</i> -PREDITIVO | 81 |
| V.4. SINTONIA DOS CONTROLADORES | 82 |
| V.5. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO | 82 |
| CAPÍTULO VI – ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO DO METACRILATO DE METILA E ACETATO DE VINILA..... | 83 |
| VI.1. INTRODUÇÃO | 85 |
| VI.2. DESCRIÇÃO DO PROCESSO | 85 |
| VI.3. MODELO FENOMENOLÓGICO | 88 |
| VI.3.1. Mecanismo Cinético | 88 |
| VI.3.2. Balanços de Massa e Energia | 92 |
| VI.3.3. Composição do Copolímero “Morto” | 95 |
| VI.3.4. Pesos Moleculares Médios Numérico e Ponderal | 95 |
| VI.3.4.1. Momentos da MWD do Copolímero “Morto” | 96 |
| VI.3.4.2. Momentos da MWD do Copolímero “Vivo” | 97 |
| VI.3.5. Balanço Molar do Separador e do Tanque de Armazenamento | 99 |
| VI.4. CONTROLE <i>FEEDFORWARD</i> DO RECICLO | 99 |
| VI.5. ANÁLISE DINÂMICA DO PROCESSO | 104 |
| VI.6. MODELAGEM DINÂMICA NEBULOSA..... | 107 |
| VI.7. RESULTADOS DE CONTROLE | 124 |
| VI.7.1. Controle Regulatório | 125 |
| VI.7.2. Controle Servo | 134 |
| VI.7.3. Influência do Fator de Supressão no Desempenho dos Controladores..... | 144 |
| VI.8. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO | 146 |

| | |
|---|------------|
| CAPÍTULO VII – ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO-1-BUTENO COM CATALISADOR ZIEGLER-NATTA | 147 |
| VII.1. INTRODUÇÃO | 149 |
| VII.2. DESCRIÇÃO DO PROCESSO..... | 149 |
| VII.3. MECANISMO CINÉTICO | 154 |
| VII.3.1. Formação do Sítio Ativo (Sítio de Iniciação) ou Ativação..... | 155 |
| VII.3.2. Envenenamento por Impureza | 155 |
| VII.3.3. Iniciação da Cadeia (Sítio de Propagação) | 155 |
| VII.3.4. Propagação da Cadeia..... | 156 |
| VII.3.5. Transferência | 156 |
| VII.3.6. Desativação Catalítica Espontânea | 157 |
| VII.3.7. Terminação | 158 |
| VII.4. MODELO DETERMINÍSTICO..... | 159 |
| VII.4.1. Modelo do CSTR | 159 |
| VII.4.2. Modelo do PFR | 162 |
| VII.4.3. Modelo do Misturador | 163 |
| VII.4.4. Propriedades Físicas | 165 |
| VII.4.5. Momentos da Distribuição..... | 166 |
| VII.4.6. Variáveis de Saída e Propriedades de Uso Final do Polímero..... | 167 |
| VII.5. ANÁLISE DINÂMICA DO PROCESSO..... | 172 |
| VII.6. MODELAGEM DINÂMICA NEBULOSA..... | 174 |
| VII.7. RESULTADOS DE CONTROLE..... | 184 |
| VII.7.1. Controle Regulatório..... | 185 |
| VII.7.2. Controle Servo | 189 |
| VII.7.3. Malha de Controle da Conversão..... | 194 |
| VII.8. CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO..... | 195 |
| | |
| CAPÍTULO VIII – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA O DESENVOLVIMENTO DE TRABALHOS FUTUROS | 197 |
| VIII.1. CONCLUSÕES | 199 |
| VIII.2. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS..... | 200 |
| | |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 203 |

APÊNDICE A – TAXAS DE REAÇÃO PARA A COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO 215

| | |
|---|-----|
| A.1. INTRODUÇÃO | 217 |
| A.2. TAXAS DE REAÇÃO..... | 217 |
| A.2.1. Espécie Ativa - EAn | 217 |
| A.2.2. Espécie Catalítica Desativada - CDn..... | 218 |
| A.2.3. Monômero Tipo 1 – M1 | 219 |
| A.2.4. Monômero Tipo 2 ou Co-monômero – M2 | 219 |
| A.2.5. Agente de Transferência de Cadeia – H2 | 219 |
| A.2.6. Co-catalisador - CC | 219 |
| A.2.7. Solvente - S..... | 219 |
| A.2.8. Catalisador Ativo - C_n^* | 219 |
| A.2.9. Polímero “Morto” | 220 |
| A.2.10. Polímero “Vivo” | 220 |
| A.3. CONSIDERAÇÕES FINAIS..... | 225 |

APÊNDICE B – ASPECTOS NUMÉRICOS PARA O MODELO MATEMÁTICO DO PROCESSO DE COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO 227

| | |
|---|-----|
| B.1. INTRODUÇÃO | 229 |
| B.2. SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS PARA O PFR | 229 |
| B.2.1. Balanço de Massa Global e “Balanço de Deslocamento” | 230 |
| B.2.2. Balanço de Massa por Componente | 230 |
| B.2.3. Balanço de Energia | 231 |
| B.2.4. Interpretação das Equações..... | 231 |
| B.3. SISTEMA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS PARA O CSTR ... | 232 |
| B.3.1. Balanço de Massa Global | 232 |
| B.3.2. Balanço de Massa por Componente | 232 |
| B.3.3. Balanço de Energia | 232 |
| B.4. DERIVADA DA DENSIDADE | 233 |
| B.4.1. Cálculo da Derivada da Densidade para o Sistema de EDOs do PFR..... | 234 |
| B.4.2. Cálculo da Derivada da Densidade para o Sistema de EDOs do CSTR..... | 235 |
| B.5. CONSIDERAÇÕES FINAIS..... | 236 |

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|-----|
| Figura III.1. Função característica do conjunto <i>crisp</i> “pessoa alta” | 29 |
| Figura III.2. Função trapezoidal característica do conjunto nebuloso “pessoa alta” | 30 |
| Figura III.3. Função triangular com $a = -1,5$, $m = 1,0$ e $b = 3,5$ | 32 |
| Figura III.4. Função Γ com $k = 2,0$ e $a = 1,0$ | 33 |
| Figura III.5. Função S com $a = -1,0$ e $b = 3,0$ | 34 |
| Figura III.6. Função em forma de sino com $a = 2,0$, $b = 2,0$ e $m = 2,0$ | 35 |
| Figura III.7. Função sigmoideal com $k = 1,0$ e $m = 2,0$ | 35 |
| Figura III.8. Função “ <i>exponential-like</i> ” com $k = 2,0$ e $m = 1,0$ | 36 |
| Figura III.9. Função Gaussiana com $c = 2,0$ e $\sigma = 2,0$ | 37 |
| Figura III.10. Diagrama esquemático de um modelo nebuloso | 47 |
| Figura V.1. Diagrama de bloco do controlador preditivo (ESPINOSA et al., 2005) | 72 |
| Figura V.2. Resposta ao degrau | 75 |
| Figura VI.1. Diagrama do processo de copolimerização do MMA/VAc (CONGALIDIS et al., 1989) | 86 |
| Figura VI.2. Ação do controle <i>feedforward</i> nas vazões do monômero <i>A</i> para perturbações na taxa de purga | 102 |
| Figura VI.3. Ação do controle <i>feedforward</i> nas vazões do monômero <i>B</i> para perturbações na taxa de purga | 103 |
| Figura VI.4. Ação do controle <i>feedforward</i> nas vazões do solvente para perturbações na taxa de purga | 103 |
| Figura VI.5. Resposta em “malha aberta” da taxa de produção de polímero (G_{pi}) para uma perturbação na concentração molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total | 104 |

| | |
|--|-----|
| Figura VI.6. Resposta em “malha aberta” da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) para uma perturbação na concentração molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total | 105 |
| Figura VI.7. Resposta em “malha aberta” do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para uma perturbação na concentração molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total | 105 |
| Figura VI.8. Resposta em “malha aberta” da temperatura do reator (T_r) para uma perturbação na concentração molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total..... | 106 |
| Figura VI.9. Comportamento dinâmico em “malha aberta” do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para perturbações de grau de +/- 2% sobre a temperatura da jaqueta (T_j) no instante inicial | 107 |
| Figura VI.10. Dados de identificação da temperatura da jaqueta T_j (variável de entrada) 109 | |
| Figura VI.11. Dados de identificação da taxa de produção de polímero G_{pi} (variável de saída) | 109 |
| Figura VI.12. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - G_{pi} | 112 |
| Figura VI.13. Dados de identificação da razão entre as vazões molares do metacrilato de metila e acetato de vinila G_{a3}/G_{b3} (variável de entrada) | 113 |
| Figura VI.14. Dados de identificação da fração molar do metacrilato de metila no copolímero Y_{ap} (variável de saída) | 113 |
| Figura VI.15. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - Y_{ap} | 116 |
| Figura VI.16. Dados de identificação do peso molecular ponderal médio M_{pw} (variável de saída) | 117 |
| Figura VI.17. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - M_{pw} ... | 120 |
| Figura VI.18. Dados de identificação da temperatura do reator T_r (variável de saída)..... | 121 |
| Figura VI.19. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - T_r | 124 |
| Figura VI.20. Resultados do controle regulatório para a taxa de produção de polímero (G_{pi}).. | 126 |
| Figura VI.21. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle regulatório da taxa de produção de polímero | 126 |
| Figura VI.22. Resultados do controle regulatório para a fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap})..... | 128 |
| Figura VI.23. Comportamento da variável manipulada G_{a3}/G_{b3} resultante do controle regulatório da fração molar do metacrilato de metila no copolímero | 129 |

| | |
|--|-----|
| Figura VI.24. Resultados do controle regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw})..... | 131 |
| Figura VI.25. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle regulatório do peso molecular ponderal médio | 131 |
| Figura VI.26. Resultados do controle regulatório para a temperatura do reator (T_r) | 133 |
| Figura VI.27. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle regulatório da temperatura do reator..... | 134 |
| Figura VI.28. Ação de controle para mudanças no <i>setpoint</i> da taxa de produção de polímero (G_{pi})..... | 136 |
| Figura VI.29. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle servo da taxa de produção de polímero | 136 |
| Figura VI.30. Ação de controle para mudanças no <i>setpoint</i> da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) | 138 |
| Figura VI.31. Comportamento da variável manipulada G_{a3}/G_{b3} resultante do controle servo da fração molar do metacrilato de metila no copolímero..... | 138 |
| Figura VI.32. Ação de controle para mudanças no <i>setpoint</i> do peso molecular ponderal médio (M_{pw})..... | 140 |
| Figura VI.33. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle servo do peso molecular ponderal médio | 141 |
| Figura VI.34. Ação de controle para mudanças no <i>setpoint</i> da temperatura do reator (T_r)..... | 143 |
| Figura VI.35. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle servo da temperatura do reator | 143 |
| Figura VI.36. Influência do fator de supressão f no peso molecular ponderal médio M_{pw} (variável controlada) | 145 |
| Figura VI.37. Influência do fator de supressão f na temperatura da jaqueta T_j (variável manipulada)..... | 145 |
| Figura VII.1. Configuração básica do processo de copolimerização do eteno/1-buteno (EMBIRUÇU et al., 2000) | 150 |
| Figura VII.2. Representação do processo de copolimerização do eteno/1-buteno (EMBIRUÇU, 1998) | 153 |
| Figura VII.3. Misturador de correntes (PONTES, 2005) | 164 |
| Figura VII.4. Resposta em “malha aberta” do peso molecular numérico médio (M_n) para uma perturbação de – 33,33 % na temperatura da alimentação principal..... | 173 |

| | |
|--|-----|
| Figura VII.5. Resposta em “malha aberta” da conversão (x) para uma perturbação de 0,26 % na concentração de catalisador, resultante da presença de impurezas | 173 |
| Figura VII.6. Comportamento dinâmico em “malha aberta” do peso molecular numérico médio (M_n) para perturbações degrau de +/- 40 % sobre a concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H_2}) no tempo 30 | 174 |
| Figura VII.7. Dados de identificação da concentração de hidrogênio na alimentação principal C_{H_2} (variável de entrada)..... | 176 |
| Figura VII.8. Dados de identificação do peso molecular numérico médio M_n (variável de saída) | 176 |
| Figura VII.9. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste – M_n | 180 |
| Figura VII.10. Dados de identificação da agitação do CSTR-NI Rot (variável de entrada)..... | 181 |
| Figura VII.11. Dados de identificação da conversão x (variável de saída) | 181 |
| Figura VII.12. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - x | 184 |
| Figura VII.13. Resultados do controle regulatório para o peso molecular numérico médio (M_n) | 186 |
| Figura VII.14. Comportamento da variável manipulada C_{H_2} resultante do controle regulatório do peso molecular numérico médio | 186 |
| Figura VII.15. Resultados do controle regulatório para a conversão (x)..... | 188 |
| Figura VII.16. Comportamento da variável manipulada Rot resultante do controle regulatório da conversão | 189 |
| Figura VII.17. Ação de controle para mudanças no <i>setpoint</i> do peso molecular numérico médio (M_n) | 191 |
| Figura VII.18. Comportamento da variável manipulada C_{H_2} resultante do controle servo do peso molecular numérico médio | 191 |
| Figura VII.19. Ação de controle para mudanças no <i>setpoint</i> da conversão (x)..... | 193 |
| Figura VII.20. Comportamento da variável manipulada Rot resultante do controle servo da conversão..... | 193 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|-----|
| Tabela VI.1. Condições operacionais para o reator de copolimerização do MMA/VAc.... | 87 |
| Tabela VI.2. Parâmetros cinéticos e termodinâmicos para o modelo fenomenológico do processo de copolimerização do MMA/VAc | 91 |
| Tabela VI.3. Condições iniciais do processo de copolimerização do MMA/VAc..... | 101 |
| Tabela VI.4. Parâmetros do modelo nebuloso para a taxa de produção de polímero (G_{pi})..... | 110 |
| Tabela VI.5. Parâmetros do modelo nebuloso para a fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) | 114 |
| Tabela VI.6. Parâmetros do modelo nebuloso para o peso molecular ponderal médio (M_{pw})..... | 118 |
| Tabela VI.7. Parâmetros do modelo nebuloso para a temperatura do reator (T_r)..... | 122 |
| Tabela VI.8. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório da taxa de polimerização (G_{pi})..... | 125 |
| Tabela VI.9. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}).. | 127 |
| Tabela VI.10. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório do peso molecular ponderal médio (M_{pw})..... | 130 |
| Tabela VI.11. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório da temperatura do reator (T_r)..... | 132 |
| Tabela VI.12. Parâmetros dos controladores para o controle servo da taxa de polimerização (G_{pi}) | 135 |
| Tabela VI.13. Parâmetros dos controladores para o controle servo da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) | 137 |
| Tabela VI.14. Parâmetros dos controladores para o controle servo do peso molecular ponderal médio (M_{pw})..... | 139 |
| Tabela VI.15. Parâmetros dos controladores para o controle servo da temperatura do reator (T_r)..... | 142 |

| | |
|---|-----|
| Tabela VII.1. Condições operacionais para o reator de copolimerização do eteno/1-buteno..... | 154 |
| Tabela VII.2. Espécies envolvidas no modelo cinético..... | 155 |
| Tabela VII.3. Parâmetros do modelo nebuloso para o peso molecular numérico médio (M_n)..... | 177 |
| Tabela VII.4. Parâmetros do modelo nebuloso para a conversão (x)..... | 182 |
| Tabela VII.5. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório do peso molecular numérico médio (M_n) | 185 |
| Tabela VII.6. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório da conversão (x)..... | 187 |
| Tabela VII.7. Parâmetros dos controladores para o controle servo do peso molecular numérico médio (M_n) | 190 |
| Tabela VII.8. Parâmetros dos controladores para o controle servo da conversão (x) | 192 |

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, 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 frequência (constante de Arrhenius), área da seção transversal, variável intermediária no cálculo da derivada da densidade da mistura;
- \underline{A} : Matriz dinâmica para o controlador DMC;
- AIBN : Azobisisobutironitrila;
- b : Coeficiente de resposta para o procedimento de geração do modelo de convolução, parâmetro da função conseqüente da base de regras do modelo nebuloso referente à variável controlada, constante empírica para o cálculo da viscosidade;
- B : Vazão mássica;
- B : Conjunto clássico, 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 distribuição de peso molecular;
- \underline{B} : 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 , componente específico, calor específico, catalisador, espécie catalítica;
- CAT : Catalisador;
- CC : Co-catalisador;
- CCD : Co-catalisador desativado;
- CD : Espécie catalítica desativada;
- C_{H_2} : Concentração de hidrogênio na alimentação principal;
- 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 mínimos quadrados, energia de ativação; |
| \underline{E} | : Vetor de desvios para o algoritmo DMC; |
| EA | : Espécie ativa; |
| f | : Função conseqüente da base de regras do modelo nebuloso, fator de supressão para os controladores DMC e híbrido, 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 | : Regra sintática, vazão mássica, taxa de produção; |
| H | : Entalpia; |
| H_2 | : Hidrogênio; |
| I | : 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, variável manipulada; |
| M | : Regra semântica, peso molecular, monômero, massa; |
| m -DNB | : m -dinitrobenzeno; |
| MMA | : Metacrilato de metila; |
| n | : Número de dados provenientes do processo para treinamento do modelo nebuloso, instante de amostragem; |
| N | : Dimensão de um determinado espaço, número de zonas do CSTR-NI; |
| NC | : Horizonte de controle para os controladores DMC e híbrido; |
| NP | : Horizonte de predição para os controladores DMC e híbrido; |
| NS | : Horizonte de convolução para o controlador DMC; |
| NSIT | : Número de sítios ativos; |
| nu | : Número de entradas do modelo nebuloso referentes à variável manipulada; |
| ny | : Número de entradas do modelo nebuloso referentes à variável controlada; |
| p | : Número de monômeros do tipo 1; |
| P | : 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; |
| Rot | : Rotação do agitador do CSTR-NI; |
| S | : Área superficial, solvente; |

| | |
|-------------|---|
| t | : Tempo; |
| t | : Tempo; |
| T | : Conjunto de valores lingüísticos, Temperatura, agente de transferência de cadeia; |
| u | : Entrada do modelo nebuloso referente à variável manipulada; |
| U | : Coeficiente global de transferência de calor, polímero; |
| V | : Critério de custo para o método dos mínimos quadrados, volume, variável intermediária no cálculo da distribuição de peso molecular; |
| VAc | : Acetato de vinila; |
| w | : 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; |
| y | : 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; |
| \bar{y} | : Saída predita pelo modelo nebuloso; |
| \tilde{y} | : Saída predita em variável desvio; |
| Y | : Universo de discurso, vetor de dados de saída do processo para o método dos mínimos quadrados, fração molar; |
| z | : Elemento do universo de discurso Z , coordenada axial, comprimento do reator PFR; |
| Z | : Universo de discurso, inibidor. |

Lista de Símbolos Gregos

| | |
|---------------------------|--|
| α | : Parâmetro do método do agrupamento subtrativo, parâmetro de trajetória para os controladores DMC e híbrido, variável intermediária no cálculo da distribuição de peso molecular, constante empírica para o cálculo do MI , constante empírica para o cálculo do SE , 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 MI , constante empírica para o cálculo do SE , constante empírica para o cálculo da densidade; |
| δ | : Constante empírica para o cálculo da densidade; |
| Δ | : Intervalo de variação; |
| ε | : Erro para o método dos mínimos quadrados, eficiência do iniciador, constante empírica para o cálculo da densidade; |
| $\bar{\varepsilon}$ | : Parâmetro do método do agrupamento subtrativo; |
| $\underline{\varepsilon}$ | : Parâmetro do método do agrupamento subtrativo; |
| Φ | : Matriz do vetor de dados para o método dos mínimos quadrados; |

| | |
|-----------|---|
| 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; |
| φ | : Variável intermediária no cálculo da derivada da densidade da mistura; |
| λ | : Função de pertinência para um conjunto clássico, concentração molar de monômero no polímero, momento do polímero “morto”; |
| μ | : Função de pertinência para um conjunto nebuloso, viscosidade, momento do polímero “vivo”; |
| v | : 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 mínimos quadrados, tempo de residência; |
| ρ | : Densidade, densidade do polímero sólido, massa específica; |
| σ | : Desvio padrão da função de pertinência Gaussiana; |
| τ | : Função temporal; |
| ξ | : Vetor de dados para o método dos mínimos quadrados, 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 | : Tipo do monômero; |
| 2 | : Tipo do monômero; |
| a | : Parâmetro α do método do agrupamento subtrativo, monômero A ; |
| A | : Conjunto nebuloso A ; |
| b | : Parâmetro β do método do agrupamento subtrativo, monômero B ; |
| B | : Conjunto clássico, conjunto nebuloso B ; |
| c | : Terminação por acoplamento, componente genérico; |
| C | : Catalisador, espécie catalítica; |
| CC | : Co-catalisador; |
| CD | : Espécie catalítica desativada; |
| CL | : Malha fechada; |
| d | : Terminação por desproporcionamento, desativação; |
| e | : Entrada do processo; |
| EA | : Espécie ativa; |
| f | : Instante final, alimentação do reator, ativação, transferência; |
| F | : Vazão lateral; |
| h | : Tanque de armazenamento, entrada do modelo nebuloso referente à variável controlada, hidrogênio; |
| H_2 | : Hidrogênio; |
| i | : Antecedente para cada regra do modelo nebuloso, variável de entrada, valor instantâneo, iniciador, iniciação, componente específico; |
| IC | : Impureza no catalisador ou na espécie ativa; |
| ICC | : Impureza no co-catalisador; |

| | |
|------------|--|
| <i>j</i> | : Regra do modelo nebuloso, jaqueta de resfriamento do reator, entrada do modelo nebuloso referente à variável manipulada, número de unidades do monômero 1; |
| <i>k</i> | : Regra do modelo nebuloso, <i>k</i> -ésimo dado, instante de tempo, componente específico, número de unidades do monômero 2; |
| <i>l</i> | : Ordem do momento do polímero “vivo” em relação ao monômero tipo 1; |
| <i>L</i> | : Número de antecedentes para cada regra do modelo nebuloso; |
| <i>m</i> | : Número de unidades do monômero <i>B</i> 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; |
| <i>M</i> | : Monômero; |
| <i>min</i> | : Valor mínimo; |
| <i>n</i> | : Número de conjuntos nebulosos, número de unidades do monômero <i>A</i> 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; |
| <i>o</i> | : Valor inicial; |
| <i>OL</i> | : Malha aberta; |
| <i>p</i> | : Polímero, propagação, número de monômeros do tipo 1, polímero “vivo” terminado pelo monômero tipo 1; |
| <i>q</i> | : Número de monômeros do tipo 2, polímero “vivo” terminado pelo monômero tipo 2; |
| <i>r</i> | : Reator, zona do reator CSTR-NI, elemento de fluido; |
| <i>R</i> | : Relação nebulosa; |
| <i>Rot</i> | : Rotação do agitador do CSTR-NI; |
| <i>s</i> | : Solvente, separador, saída do processo; |
| <i>t</i> | : Agente de transferência de cadeia, terminação; |
| <i>T</i> | : Temperatura; |
| <i>U</i> | : Polímero; |
| <i>w</i> | : Propriedade média ponderal do polímero; |
| <i>x</i> | : Transferência de cadeia; |
| <i>y</i> | : Variável de saída; |
| <i>z</i> | : Inibidor, inibição. |

Lista de Sobrescritos

| | |
|--------------|--|
| - | : Valor médio; |
| • | : Radical livre; |
| * | : Centro de grupo para o método do agrupamento subtrativo, catalisador ou espécie ativa; |
| ^ | : Valor ótimo; |
| <i>1</i> | : Tipo do monômero; |
| <i>2</i> | : Tipo do monômero; |
| <i>a</i> | : Monômero <i>A</i> ; |
| <i>atual</i> | : Valor presente; |
| <i>b</i> | : Monômero <i>B</i> ; |
| <i>CC</i> | : Co-catalisador; |
| <i>d</i> | : Valor desejado; |

| | |
|---------------|---|
| <i>f</i> | : Transferência; |
| <i>h</i> | : Hidrogênio; |
| <i>i</i> | : Regra do modelo nebuloso; |
| <i>k</i> | : Regra do modelo nebuloso; |
| <i>l</i> | : Ordem do momento do polímero “vivo” em relação ao monômero tipo 1; |
| <i>m</i> | : Ordem do momento do polímero “morto” em relação ao monômero tipo 1, ordem do momento do polímero “vivo” em relação ao monômero tipo 2; |
| <i>max</i> | : Limite superior; |
| <i>medida</i> | : Valor medido; |
| <i>min</i> | : Limite inferior; |
| <i>n</i> | : Número de dados provenientes do processo, ordem do momento do polímero “morto” em relação ao monômero tipo 2; |
| <i>new</i> | : Mudanças futuras; |
| <i>o</i> | : Ordem de reação, valor padrão; |
| <i>old</i> | : Mudanças passadas; |
| <i>p</i> | : Polímero; |
| <i>pred</i> | : Valor predito; |
| <i>r</i> | : Número de regras do modelo nebuloso; |
| <i>set</i> | : <i>Setpoint</i> ; |
| <i>T</i> | : Matriz transposta. |

Outros Símbolos

[] : Concentração.

Abreviaturas

| | |
|-----------|--|
| ATR-FT-IR | : <i>Attenuated Total Reflectance Fourier Transform Infrared</i> ; |
| CSTR | : <i>Continuous Stirred Tank Reactor</i> ; |
| DMC | : <i>Dynamic Matrix Control</i> ; |
| EDO | : Equação Diferencial Ordinária; |
| FH-PID | : <i>fuzzy-híbrida-PID-feedback</i> ; |
| GA | : <i>Genetic Algorithm</i> ; |
| GPC | : <i>Generalized Predictive Control</i> ; |
| IAE | : <i>Integral of the Absolute value of the Error</i> ; |
| IMC | : <i>Internal Model Control</i> ; |
| LGPC | : <i>Linear Generalized Predictive Control</i> ; |
| LSODE | : <i>Livermore Solver of Ordinary Differential Equations</i> ; |
| MAC | : <i>Model Algorithmic Control</i> ; |
| MBPC | : <i>Model Based Predictive Control</i> ; |
| <i>MI</i> | : <i>Melt Index</i> (Índice de Fluidéz); |
| MISO | : <i>Multiple-Input / Single-Output</i> ; |
| MPC | : <i>Model Predictive Control</i> ; |
| MWD | : <i>Molecular Weight Distribution</i> ; |
| NI | : Não Ideal; |
| NIR | : <i>Near-Infrared</i> ; |
| NLGPC | : <i>Non Linear Generalized Predictive Control</i> ; |
| NLMPC | : <i>Non Linear Model Predictive Control</i> ; |

| | |
|-----------|---|
| NMBPC | : <i>Nonlinear Model Based Predictive Control</i> ; |
| P | : Controlador Proporcional; |
| PFR | : <i>Plug Flow Reactor</i> ; |
| PI | : Controlador Proporcional-Integrativo; |
| PID | : Controlador Proporcional-Integrativo-Derivativo; |
| PSD | : <i>Particle Size Distribution</i> ; |
| RNA | : Rede Neural Artificial; |
| <i>SE</i> | : <i>Stress Exponent</i> (Expoente de Tensão); |
| SISO | : <i>Single-Input / Single-Output</i> ; |
| STC | : <i>Self Tuning Controller</i> . |

CAPÍTULO I
INTRODUÇÃO

I.1 INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

A geração de polímeros representa uma proporção bastante considerável da produção anual das indústrias químicas, sendo responsável pelo grande crescimento desse setor nos últimos anos. Através dos processos de polimerização, pode-se obter uma enorme diversidade de produtos de grande interesse industrial. Essas reações geram materiais de vários tipos com um vasto ramo de aplicações - desde plásticos, borrachas e móveis, até tintas e medicamentos - de forma que várias tecnologias de síntese são desenvolvidas com finalidades tecnológicas específicas; logo, cada polímero é produzido sob certas condições operacionais, que lhe atribuem, entre outras, propriedades físicas, mecânicas, elétricas, térmicas, óticas, reológicas e/ou de processamento, desejadas em futuras utilizações.

As propriedades de uso final de um polímero dependem de vários fatores, tais como distribuições de peso molecular e de comprimento de cadeia (FORTUNY, 2004). Embora a estrutura química de um determinado polímero seja a mesma, pesos moleculares e comprimentos de cadeia diferentes originam polímeros com características díspares. Assim, é de fundamental importância entender como esses e outros atributos influenciam nas propriedades finais do polímero, de modo a ser projetado um sistema de controle eficiente para os objetivos desejados. Uma maneira rápida e de baixo custo para obter essas informações é através da utilização de modelos matemáticos. É importante enfatizar que, ao se executar a modelagem de um processo, deve-se atentar para a distinção entre modelo e sistema, ou seja, o modelo desenvolvido deve ser uma representação adequada do processo, mas não o é necessariamente (MARLIN, 1995).

Entretanto, o comportamento dinâmico dos processos poliméricos é extremamente complexo, sendo caracterizado por intensas não linearidades (ROFFEL, CHIN, 1991), dificultando consideravelmente a obtenção de representações determinísticas precisas, as quais são aplicadas diretamente em estratégias convencionais de controle e são provenientes dos balanços de massa, energia e quantidade de movimento. Vale ressaltar a grande dificuldade na utilização desses modelos em tempo real devido à complexidade de resolução, os quais são compostos por um conjunto de expressões onde estão presentes equações diferenciais ordinárias, algébricas e, em determinadas circunstâncias, equações diferenciais parciais. Assim, modelos mais simplificados são formulados, ocasionando, conseqüentemente, restrições em termos de representatividade, o que causa limitações

quanto à coerência das informações fornecidas, influenciando diretamente no sucesso das estratégias de controle.

A importância da utilização de uma boa configuração de controle vai além do desejo de obtenção de produtos dentro de certa especificação, mas também engloba questões de segurança, operabilidade, redução de custos e minimização da geração de resíduos e efluentes, de modo a evitar maiores danos ao meio ambiente. Desta forma, em virtude do avanço tecnológico crescente nos últimos anos e da necessidade de produção cada vez mais precisa e eficiente, é marcante o aumento no número de trabalhos que buscam representações mais exatas e estratégias de controle mais eficazes para tais sistemas. Uma atenção destacada está direcionada a aplicações de técnicas de inteligência artificial na modelagem de processos químicos, especialmente as que se referem à utilização de redes neurais artificiais (RNAs). Todavia, a utilização isolada das RNAs não possibilita ações de controle, mas somente a obtenção de modelos. Uma alternativa de grande potencial que se encontra em âmbito crescente é a utilização de modelos nebulosos (*fuzzy*), os quais são aplicados tanto no aspecto de modelagem, quanto de controle. Tais representações se adequam de maneira interessante ao comportamento dos processos de polimerização, por integrarem conceitos de incerteza e imprecisão e incluírem definições de lógica probabilística; 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 da lógica nebulosa na modelagem e no controle 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 do sistema analisado, mas somente um conjunto de dados entrada/saída.

Analisando mais especificamente aspectos relacionados ao controle de processos, 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. Destaca-se ainda que o controlador deva ser capaz de atender as necessidades de produção sem, contudo, violar restrições. Visando superar essas dificuldades, tem ocorrido, nos últimos anos, um crescimento considerável na aplicação de estratégias de controle avançado em processos de

polimerização devido às grandes complexidades presentes nesses sistemas, merecendo destaque especial a utilização das técnicas de controle preditivo baseadas em modelo, conhecidas como MBPC (*Model Based Predictive Control*), as quais utilizam um modelo dinâmico do processo como parte integrante do sistema de controle. De acordo com Dechechi (1996), a grande aceitação dos algoritmos MBPC para controle de processos químicos se deve a suas habilidades na manipulação e incorporação de restrições envolvendo variáveis de entrada e saída, além da transparência apresentada com relação ao ajuste das constantes de projeto. Dentre as técnicas de controle MBPC, a estratégia DMC (*Dynamic Matrix Control*) é a que se encontra mais difundida em aplicações industriais, pelo fato de sua relativa simplicidade de projeto e implementação, e a possibilidade de manipulação de restrições às variações das variáveis manipuladas.

Segundo Meleiro (2002), dentre os desenvolvimentos mais recentes em estruturas de controle avançado, destacam-se àqueles caracterizados pela forte ligação entre as áreas de modelagem - principalmente a lógica *fuzzy* e as RNAs - e o projeto de sistemas de controle baseados em modelo. Deste modo, a união dos conceitos da lógica nebulosa, na busca por modelos mais simples, mas ao mesmo tempo representativos, com a técnica de controle preditivo DMC, 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 OBJETIVO

Este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um controlador híbrido preditivo baseado em sistemas nebulosos - composto por modelo nebuloso e controle preditivo do tipo DMC - para processos de polimerização. São considerados para análise dois casos de estudo. Cada um dos processos apresenta um comportamento abstruso, dificultando, deste modo, o projeto de controladores baseados em modelos convencionais. Ambos possuem um modelo matemático determinístico 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; BARTASSON, 2005), sendo o segundo um processo industrial de copolimerização do eteno/1-buteno usando catalisador Ziegler-Natta solúvel (EMBIRUÇU, 1998; EMBIRUÇU et al., 2000; PONTES, 2005). O modelo determinístico

para o processo de produção do polietileno foi testado e validado com dados industriais reais.

Os modelos matemáticos fenomenológicos dos dois casos de estudo são utilizados como plantas para geração de dados de identificação dos modelos nebulosos e implementação das estratégias de controle a serem projetadas, e foram implementados em linguagem de programação FORTRAN 90. 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) - foi realizado um estudo dinâmico das variáveis dos processos, com conseqüente desenvolvimento dos modelos nebulosos. Estes foram integrados, posteriormente, ao controle preditivo do tipo DMC, onde atuam como preditores na configuração interna do controlador, obtendo-se então, os controladores híbridos. 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).

Os modelos nebulosos empregados na modelagem dos processos são do tipo Takagi-Sugeno, introduzidos por Takagi e Sugeno (1985). Estes possuem uma estrutura funcional, sendo capazes de modelar um sistema altamente não linear através da interpolação de funções matemáticas lineares ou não lineares. No presente trabalho, são utilizadas funções lineares como representativas de cada região em ambos os sistemas de acordo com a base de regras do modelo nebuloso; por conseguinte, como será observado, a combinação dessas funções conduz a representações não lineares dos processos.

I.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

São apresentados a seguir, de forma sucinta, os principais assuntos abordados neste trabalho.

O capítulo II mostra uma ampla revisão bibliográfica sobre os principais trabalhos na literatura, que abordam a análise de comportamento dos sistemas 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 no que se refere à estruturação do modelo dinâmico nebuloso, sendo discutidos os principais procedimentos presentes na metodologia de geração e descritos, de forma detalhada, os métodos numéricos aplicados na modelagem.

Apresentam-se, no capítulo V, os fundamentos teóricos da estratégia de controle preditivo baseada em modelo (MBPC). O algoritmo de controle DMC é inicialmente descrito, sendo posteriormente demonstrada a metodologia de obtenção do controlador híbrido *fuzzy*-preditivo proposto. Discute-se ainda o procedimento adotado para ajuste dos controladores considerados.

O capítulo VI apresenta o 1º 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 do controlador proposto via simulação computacional. Modelos dinâmicos nebulosos são obtidos para o sistema, considerando quatro malhas de controle, com conseqüente geração do controlador híbrido. A estratégia de controle DMC é então implementada no sistema para fins de análise comparativa de desempenho. Os resultados da aplicação dos dois controladores são posteriormente apresentados para os problemas regulatório e servo.

No capítulo VII, é apresentado o 2º caso de estudo considerado neste trabalho: o processo de copolimerização em solução do eteno/1-buteno com catalisador Ziegler-Natta. Como relatado anteriormente, o modelo determinístico do processo é inicialmente descrito, o qual é utilizado como planta para implementação das estruturas de controle referenciadas.

Modelos dinâmicos nebulosos são gerados para duas malhas de controle, e o controlador híbrido projetado é comparado ao DMC convencional. São apresentados então os resultados da aplicação dos controladores para condições de controle regulatório e servo.

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

CAPÍTULO II
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

II.1 INTRODUÇÃO

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

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 trabalhos envolvendo a aplicação de estratégias de controle em processos poliméricos é relatada. Além disso, também é analisada a utilização de controladores preditivos em processos, merecendo ênfase especial os trabalhos referentes ao uso do DMC. Por fim, a seção II.4 destaca alguns estudos relacionados a aplicação de sistemas nebulosos (*fuzzy*) 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 eteno/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 será utilizado como ponto de partida para o 2º caso de estudo apresentado nesta dissertação.

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 seqüência, 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. A variável controlada não deve ser muito sensível às variações da 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 a variável manipulada deve ser modificada para se alcançar o objetivo desejado.

Finalizando, deve-se realizar a sintonia do controlador, ou seja, selecionar os melhores valores para 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 para tais sistemas. A seguir, são mostrados alguns trabalhos relacionados à implementação de controladores em sistemas poliméricos.

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.

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 praticável o uso da nova técnica.

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.

Entretanto, os processos de polimerização possuem dinâmicas bastante complexas, com características fortemente não lineares e variantes no tempo. Esses fatores prejudicam enormemente o projeto de estratégias de controle para tais processos, de modo que a

aplicação de controladores clássicos (PID, PI, P) e convencionais se apresenta de forma muito limitada, já que tais estruturas proporcionam desempenho pouco efetivo como, por exemplo, quando aplicadas a processos multivariáveis 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 MBPC, também definidas como MPC (*Model Predictive Control*), 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 MBPC 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.

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.

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.

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 a aplicação da estratégia proposta e o controlador projetado teve seu desempenho comparado ao controlador preditivo generalizado linear (LGPC - *Linear Generalized Predictive Control*).

Dentre as técnicas de controle MBPC, a estratégia DMC é a que apresenta o maior número de aplicações a nível industrial.

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 exhibe 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.

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.

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.

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 e trata com conceitos da teoria da probabilidade e da lógica probabilística. Além disso, possui 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 *fuzzy* 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 é 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 frequência 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* para controlar a temperatura de um reator batelada de polimerização do metacrilato de metila. O acetato de etila foi utilizado como solvente, enquanto o peróxido de benzoíla é o iniciador da reação. No projeto do controlador *fuzzy*-PID, o conhecimento obtido do procedimento da curva de reação do processo é empregado para determinação das funções de pertinência da estrutura nebulosa, e um filtro digital foi aplicado com sucesso a fim de superar o comportamento oscilatório da temperatura. O controlador desenvolvido foi comparado ao PID convencional (forma velocidade), demonstrando ser mais apropriado 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 mostraram o bom desempenho da nova proposta.

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, dentre as quais, das estratégias de controle preditivo baseadas em modelo MBPC, mais especificamente, da estrutura de controle DMC. 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 de modelagem através de sistemas *fuzzy* 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 *fuzzy* - será objetivada ao longo deste trabalho.

CAPÍTULO III
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 ao 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 à 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 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, mais rápida, é permitida. O contexto (1) aplica-se diretamente aos processos de polimerização, os quais são analisados neste trabalho, reforçando ainda mais os objetivos previamente propostos.

Assim, este capítulo tem por finalidade apresentar os conceitos básicos da teoria dos sistemas nebulosos, os quais são imprescindíveis para o entendimento da seqüência deste 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 termina 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 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, $\lambda_B : X \rightarrow \{0,1\}$, representada matematicamente pela função III.1, onde λ representa a pertinência de um determinado elemento x de X para um conjunto *crisp*:

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

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 alta” para um conjunto *crisp* e nebuloso. Como pode ser visto, o conjunto *crisp* B não representa em sua totalidade a definição “pessoa alta”, pois um indivíduo com uma altura de 1,69 m ou 1,91 m 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 1,70 e 1,90 m é alta, acima de 2,00 m e abaixo de 1,60 m não é considerada alta, e nos intervalos [1,60;1,70] e [1,90;2,00] é parcialmente alta, com grau tanto maior quanto mais próxima de 1,70 e 1,90 m é sua altura.

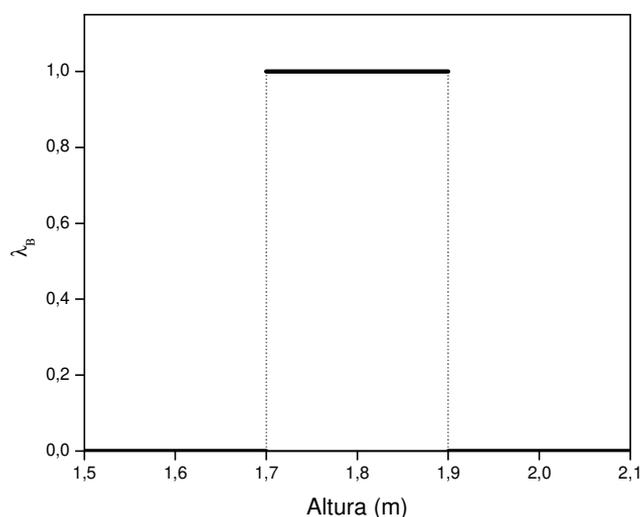


Figura III.1. Função característica do conjunto *crisp* “pessoa alta”.

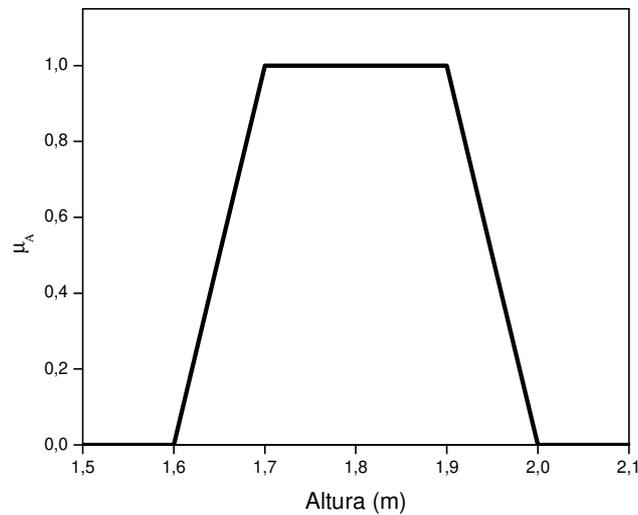


Figura III.2. Função trapezoidal característica do conjunto nebuloso “pessoa alta”.

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

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

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

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

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 no 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

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

Para X contínuo \rightarrow

$$|A| = \int_X \mu_A(x) \quad (\text{III.5})$$

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 (PEDRYCZ, GOMIDE, 1998; WANG, 1996):

1. *Função triangular:*

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq a \\ \frac{x - a}{m - a}, & \text{se } x \in [a, m] \\ \frac{b - x}{b - m}, & \text{se } x \in [m, b] \\ 0, & \text{se } x \geq b, \end{cases} \quad (\text{III.6})$$

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.

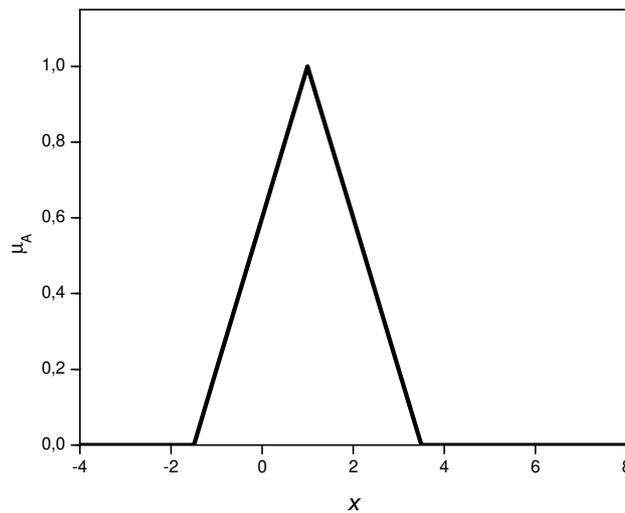


Figura III.3. Função triangular com $a = -1,5$, $m = 1,0$ e $b = 3,5$.

2. Função Γ :

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq a \\ 1 - e^{-k(x-a)^2}, & \text{se } x > a \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

ou

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq a \\ \frac{k(x-a)^2}{1+k(x-a)^2}, & \text{se } x > a, \end{cases} \quad (\text{III.8})$$

onde $k > 0$, sendo representada na figura III.4.

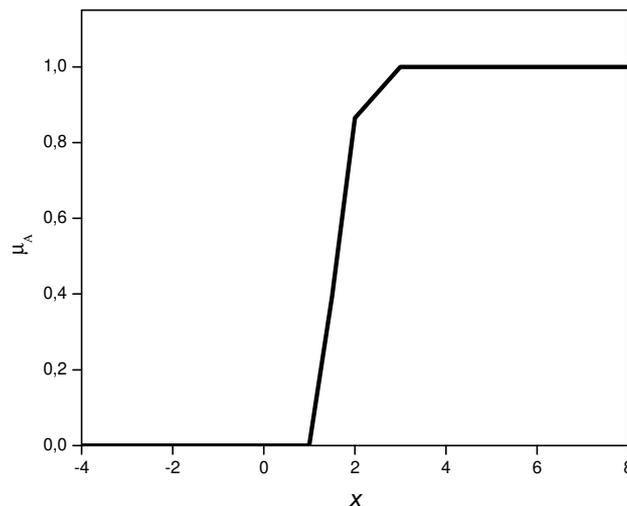


Figura III.4. Função Γ com $k = 2,0$ e $a = 1,0$.

3. Função S:

$$\mu_A(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq a \\ 2\left(\frac{x-a}{b-a}\right)^2, & \text{se } x \in [a, m] \\ 1 - 2\left(\frac{x-b}{b-a}\right)^2, & \text{se } x \in [m, b] \\ 1, & \text{se } x > b, \end{cases} \quad (\text{III.9})$$

conforme representada na figura III.5.

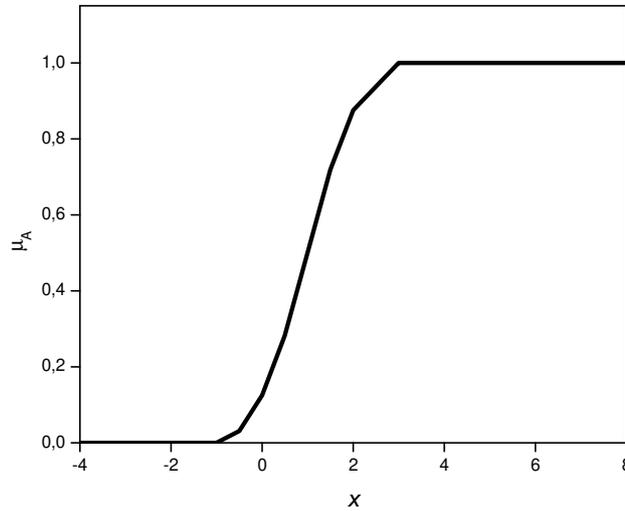


Figura III.5. Função S com $a = -1,0$ e $b = 3,0$.

4. Função trapezoidal:

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

sendo n também um valor modal. Esta função já foi apresentada na figura III.2, com $a = 1,6$, $m = 1,7$, $n = 1,9$ e $b = 2,0$.

5. Função em forma de sino:

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

Esta função é representada na figura III.6.

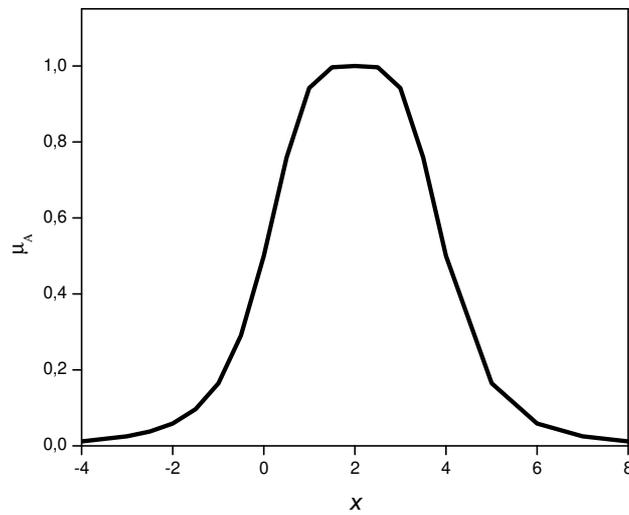


Figura III.6. Função em forma de sino com $a = 2,0$, $b = 2,0$ e $m = 2,0$.

6. Função sigmoidal:

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

Esta função é apresentada na figura III.7.

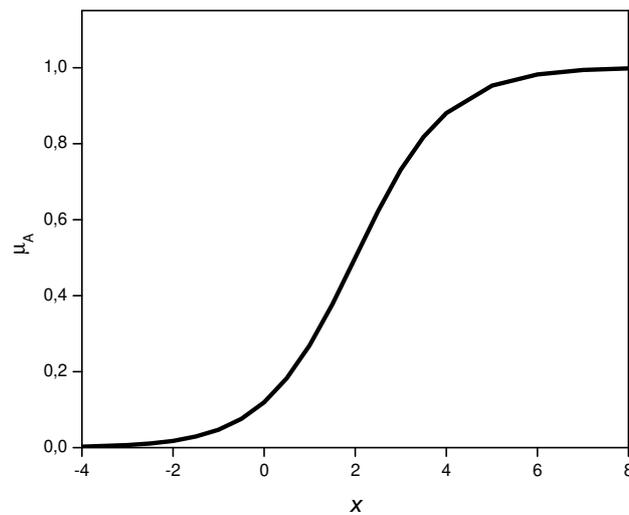


Figura III.7. Função sigmoidal com $k = 1,0$ e $m = 2,0$.

7. Função “exponential-like”:

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

ou

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

conforme mostrada na figura III.8.

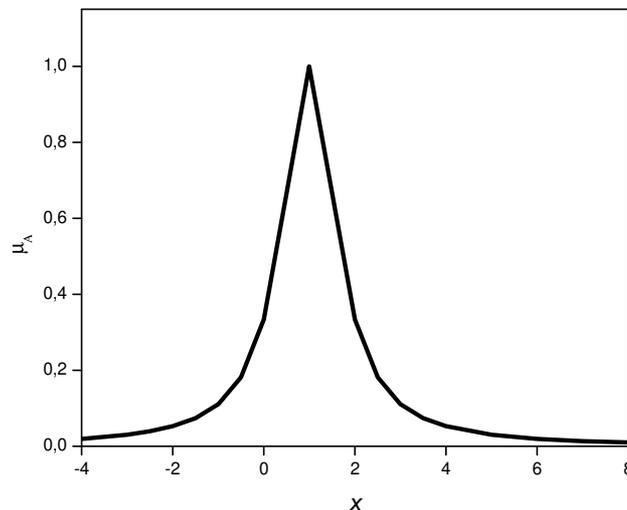


Figura III.8. Função “exponential-like” com $k = 2,0$ e $m = 1,0$.

8. Função Gaussiana:

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

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.

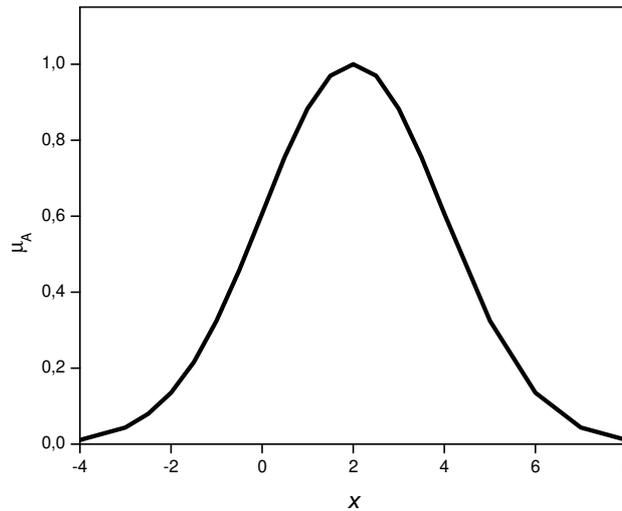


Figura III.9. Função Gaussiana com $c = 2,0$ e $\sigma = 2,0$.

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 com a região do universo caracterizada pela pertinência completa no 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 no 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:

$$\mu_A(kx_1 + (1 - k)x_2) \geq \min(\mu_A(x_1), \mu_A(x_2)) \quad (\text{III.16})$$

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 em 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:

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

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);
- $s(\mu_A(x), \mu_B(x)) \leq s(\mu_C(x), \mu_D(x))$
se $\mu_A(x) \leq \mu_C(x)$ e $\mu_B(x) \leq \mu_D(x)$ (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:

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

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:

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

3. Soma limitada:

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

4. *Soma drástica:*

$$s[\mu_A(x), \mu_B(x)] = \begin{cases} \mu_A(x), & \text{se } \mu_B(x) = 0 \\ \mu_B(x), & \text{se } \mu_A(x) = 0 \\ 1, & \text{senão} \end{cases} \quad (\text{III.21})$$

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:

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

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);
- $t(\mu_A(x), \mu_B(x)) \leq t(\mu_C(x), \mu_D(x))$
se $\mu_A(x) \leq \mu_C(x)$ e $\mu_B(x) \leq \mu_D(x)$ (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:*

$$t[\mu_A(x), \mu_B(x)] = \min[\mu_A(x), \mu_B(x)] \quad (\text{III.23})$$

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:*

$$t[\mu_A(x), \mu_B(x)] = \mu_A(x)\mu_B(x) \quad (\text{III.24})$$

3. *Produto limitado:*

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

4. *Produto drástico:*

$$t[\mu_A(x), \mu_B(x)] = \begin{cases} \mu_A(x), & \text{se } \mu_B(x) = 1 \\ \mu_B(x), & \text{se } \mu_A(x) = 1 \\ 0, & \text{senão} \end{cases} \quad (\text{III.26})$$

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:

$$c[\mu_A(x)] = \mu_{\bar{A}}(x) \quad (\text{III.27})$$

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

- $c(0) = 1$ e $c(1) = 0$;
- $c(\mu_A(x)) \geq c(\mu_B(x))$ se $\mu_A(x) < \mu_B(x)$ (comutatividade);

sendo B um conjunto nebuloso.

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

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

III.5 PROPRIEDADES DOS CONJUNTOS NEBULOSOS

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

1. *Comutatividade:*

$$\begin{aligned} A \cup B &= B \cup A \\ A \cap B &= B \cap A \end{aligned} \quad (\text{III.29})$$

2. *Associatividade:*

$$\begin{aligned} A \cup (B \cap C) &= (A \cup B) \cap (A \cup C) \\ A \cap (B \cup C) &= (A \cap B) \cup (A \cap C) \end{aligned} \quad (\text{III.30})$$

3. *Distributividade:*

$$\begin{aligned} A \cup (B \cap C) &= (A \cup B) \cap (A \cup C) \\ A \cap (B \cup C) &= (A \cap B) \cup (A \cap C) \end{aligned} \quad (\text{III.31})$$

4. *Idempotência:*

$$\begin{aligned} A \cup A &= A \\ A \cap A &= A \end{aligned} \quad (\text{III.32})$$

5. *Identidade:*

$$\begin{aligned} A \cup \emptyset &= A, & A \cap X &= A \\ A \cap \emptyset &= \emptyset, & A \cup X &= X \end{aligned} \quad (\text{III.33})$$

6. *Transitividade:*

$$\text{Se } A \subseteq B \text{ e } B \subseteq C, \text{ então } A \subseteq C \quad (\text{III.34})$$

7. *Involução:*

$$\overline{\overline{A}} = A \quad (\text{III.35})$$

8. *Leis de De Morgan:*

$$\begin{aligned} \overline{(A \cap B)} &= \overline{A} \cup \overline{B} \\ \overline{(A \cup B)} &= \overline{A} \cap \overline{B} \end{aligned} \quad (\text{III.36})$$

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

Seja A_1, \dots, A_n conjuntos nebulosos em X_1, \dots, X_n , respectivamente. O **produto cartesiano** de A_1, \dots, A_n é um conjunto nebuloso no espaço $X_1 \times \dots \times X_n$ definido pela função de pertinência:

$$\mu_{A_1 \times \dots \times A_n}(x) = \min_i \mu_{A_i}(x_i) / x = (x_1, \dots, x_n), x_i \in X_i \quad (\text{III.37})$$

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:

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

Sejam agora dois conjuntos nebulosos A e B definidos por:

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

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

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

$$\begin{aligned} \mu_R(x, y) &\leq \mu_A(x), \forall (x, y) \in X \times Y \\ \mu_R(x, y) &\leq \mu_B(y), \forall (x, y) \in X \times Y \end{aligned} \quad (\text{III.41})$$

III.6.1 Operações em Relações Nebulosas

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

1. *União:*

$$(R \cup W)(x, y) = R(x, y) s W(x, y) \quad (\text{III.42})$$

2. *Intersecção:*

$$(R \cap W)(x, y) = R(x, y) t W(x, y) \quad (\text{III.43})$$

3. *Complemento:*

$$\bar{R}(x, y) = 1 - R(x, y) \quad (\text{III.44})$$

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 $R_1(x,y)$, $(x,y) \in X \times Y$ e $R_2(y,z)$, $(y,z) \in Y \times Z$ duas relações nebulosas, são (ZIMMERMANN, 1996):

1. *Composição max-min:*

$$R_1 \circ R_2 = \left\{ \left[(x, z), \max_y \{ \min \{ \mu_{R_1}(x, y), \mu_{R_2}(y, z) \} \} \right] / x \in X, y \in Y, z \in Z \right\} \quad (\text{III.45})$$

onde o símbolo \circ indica uma operação de composição.

2. *Composição max-produto:*

$$R_1 \circ R_2(x, z) = \left\{ \left[(x, z), \max_y \{ \mu_{R_1}(x, y) \cdot \mu_{R_2}(y, z) \} \right] / x \in X, y \in Y, z \in Z \right\} \quad (\text{III.46})$$

3. *Composição max-média:*

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

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:

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

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

1. *Implicação de Kleene-Dienes:*

$$I[\mu_A(x), \mu_B(y)] = \max[\mu_B(y), 1 - \mu_A(x)] \quad (\text{III.49})$$

2. *Implicação de Mandani:*

$$I[\mu_A(x), \mu_B(y)] = \min[\mu_A(x), \mu_B(y)] \quad (\text{III.50})$$

3. *Implicação de Lukasiewicz:*

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

4. *Implicação de Larsen:*

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

5. *Implicação de Zadeh-Wilmott:*

$$I[\mu_A(x), \mu_B(y)] = \max\{\min[\mu_A(x), \mu_B(y)], 1 - \mu_A(x)\} \quad (\text{III.53})$$

6. *Implicação de Brower-Gödel:*

$$I[\mu_A(x), \mu_B(y)] = \begin{cases} 1, & \text{se } \mu_A(x) \leq \mu_B(y) \\ \mu_B(y), & \text{senão} \end{cases} \quad (\text{III.54})$$

III.6.4 Regras de Inferência

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

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

Premissa 1: x é A^*

Premissa 2: SE x é A ENTÃO y é B

Conseqüência: y é 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 é B^*

Premissa 2: SE x é A ENTÃO y é B

Conseqüência: x é A^* ,

onde se aplicam os mesmos conceitos apresentados anteriormente.

III.7 VARIÁVEIS LINGÜÍSTICAS E TERMOS LINGÜÍSTICOS

Uma **variável lingüística** é um elemento simbólico utilizado para descrever o conhecimento. Pode ser definida por uma quintupla $(x, T(x), X, G, M)$, 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, $T(x) = \{\text{muito baixa, baixa, média, moderadamente alta, alta}\}$ e $X: [20^\circ\text{C}, 200^\circ\text{C}]$. 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 as 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.

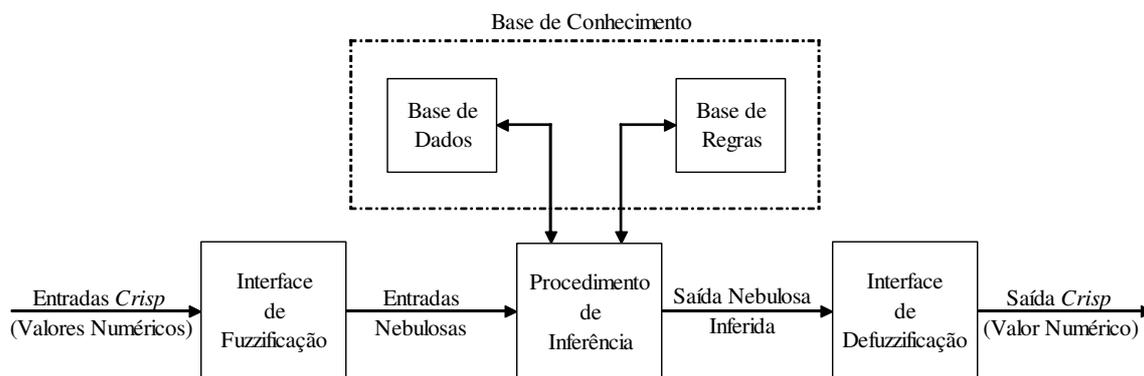


Figura III.10. Diagrama esquemático de um modelo nebuloso.

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:

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

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 y^i , onde $i = 1, 2, \dots, r$ sendo r o número de regras, como:

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

ou

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

a qual é definida pela função de pertinência:

$$\mu_y(y) = t[\mu_{y^1}(y), \mu_{y^2}(y), \dots, \mu_{y^r}(y)], \text{ para } y \in Y \quad (\text{III.58})$$

- 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:

$$y = y^1 \text{ ou } y^2 \text{ ou } \dots \text{ ou } y^r \quad (\text{III.59})$$

ou

$$y = y^1 \cup y^2 \cup \dots \cup y^r \quad (\text{III.60})$$

a qual é definida pela função de pertinência:

$$\mu_y(y) = s[\mu_{y^1}(y), \mu_{y^2}(y), \dots, \mu_{y^r}(y)], \text{ para } y \in Y \quad (\text{III.61})$$

Os métodos de agregação de regras mais utilizados na prática são apresentados a seguir, compreendendo os modelos de Mamdani, Larsen, Takagi-Sugeno e Tsukamoto (ROSS, 2004; SANDRI, CORREA, 1999). 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*, múltiplas entradas e uma saída) 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:

$$\mu_{B^k}(y) = \max_k [\min[\mu_{A_1^k}(x), \mu_{A_2^k}(x), \dots, \mu_{A_L^k}(x)]]], \quad (\text{III.62})$$

para $k = 1, 2, \dots, r$; 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:

$$\mu_{B^k}(y) = \max_k [\mu_{A_1^k}(x) \cdot \mu_{A_2^k}(x) \cdot \dots \cdot \mu_{A_L^k}(x)], \quad (\text{III.63})$$

para $k = 1, 2, \dots, r$; 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:

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

onde A_i^k é um conjunto nebuloso monotônico do antecedente i na regra k e L é o número de antecedentes para cada regra.

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:

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

onde $\mu_k(x)$ é a compatibilidade global da regra k calculada através de uma t -norma. Para os dois processos considerados neste trabalho, $\mu_k(x)$ será calculada utilizando a t -norma “produto algébrico”, definida pela equação III.24.

Segundo Ross (2004), o modelo de Takagi-Sugeno é um método bastante popular para modelagem de sistemas nebulosos devido a não necessidade da utilização da interface de “defuzzificação”. Assim, essa estrutura de modelo será aplicada na identificação dos modelos nebulosos para os dois casos de estudo analisados nesta dissertação.

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 e $\mu_k(x)$ como a compatibilidade da regra k , pode ser definida como:

$$y^k = \mu_{B_k}(\mu_k(x)) \quad (\text{III.66})$$

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 (ROSS, 2004; SANDRI, CORREA, 1999):

1. 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 da 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 a 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 é A) ENTÃO (y é B), onde x e y são variáveis lingüísticas. A e 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 $R: A \times B \rightarrow [0,1]$,

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 $R: A \times B \rightarrow \{0,1\}$. 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, demonstrando 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 funcionais, os quais serão utilizados posteriormente na geração do controlador híbrido proposto como objetivo deste trabalho (capítulo V).

CAPÍTULO IV
IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS NEBULOSOS
FUNCIONAIS

IV.1 INTRODUÇÃO

Para obtenção do controlador híbrido proposto como tema deste trabalho, o qual consiste na integração dos conceitos da lógica nebulosa e do controle preditivo DMC, é necessária, inicialmente, a geração dos modelos nebulosos funcionais (TAKAGI, SUGENO, 1985), cujos conceitos básicos já foram apresentados no capítulo III. Como será descrito no capítulo V, o modelo nebuloso será utilizado como modelo interno do controlador preditivo em substituição ao seu respectivo modelo de convolução (modelo de predição). De uma maneira geral, pode-se dizer que o modelo nebuloso tipo Takagi-Sugeno 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 dinâmicos nebulosos (seção IV.3). A seção IV.4 apresenta então os desenvolvimentos presentes na metodologia de construção de modelos dinâmicos tipo Takagi-Sugeno, sendo detalhados os métodos numéricos do “agrupamento subtrativo” e “mínimos quadrados”. A seção IV.5 finaliza o capítulo apresentando o tratamento adotado neste trabalho para análise dos resultados de validação dos modelos nebulosos.

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 neste trabalho.

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 alcançado 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 da “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 reações 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 sistemas dinâmicos, merecendo ênfase particular àquelas baseadas em sistemas nebulosos, sendo este o foco deste trabalho. Logo, a próxima seção apresenta as etapas necessárias para identificação (geração) de modelos dinâmicos tipo Takagi-Sugeno.

IV.3 ETAPAS PARA IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS

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.

Inicialmente, deve ser escolhida a estrutura do modelo nebuloso que estará presente na base de regras do sistema. Devem ser definidas as variáveis (entrada e saída) que serão utilizadas, bem como a forma de interligação entre elas. O número e os tipos das variáveis selecionadas devem estar de acordo com a necessidade do problema em questão (MATTEDI, 2003). Por exemplo, para aplicação do modelo nebuloso internamente a uma estratégia de controle preditivo DMC SISO (*Single-Input / Single-Output*), objetivo deste trabalho, deve-se buscar a determinação de um modelo da variável controlada (saída) em função da variável manipulada (entrada). 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 do modelo. 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.

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 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 conta aspectos relevantes de frequência e amplitude das mudanças nas mesmas.

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 frequência 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 frequência 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). Deve-se ressaltar também que a geração

dos dados de treinamento e teste é realizada em condições diferentes de frequência e amplitude de excitação das variáveis de entrada.

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 entrada/saída 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 frequência 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 dinâmicos nebulosos tipo Takagi-Sugeno serão desenvolvidos neste trabalho, cuja estrutura já foi previamente definida de forma genérica pela equação III.64. Esta expressão pode ser representada de modo mais detalhado para as r regras presentes na base de conhecimento do sistema nebuloso da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 &SE \ x_1 \ \acute{e} \ A_1^1 \ e \ x_2 \ \acute{e} \ A_2^1 \ e \ \dots \ e \ x_L \ \acute{e} \ A_L^1 \ \text{ENTÃO} \ y^1 = a_1^1 \cdot x_1 + a_2^1 \cdot x_2 + \dots + a_L^1 \cdot x_L \\
 &\vdots \\
 &SE \ x_1 \ \acute{e} \ A_1^j \ e \ x_2 \ \acute{e} \ A_2^j \ e \ \dots \ e \ x_L \ \acute{e} \ A_L^j \ \text{ENTÃO} \ y^j = a_1^j \cdot x_1 + a_2^j \cdot x_2 + \dots + a_L^j \cdot x_L \quad (\text{IV.1}) \\
 &\vdots \\
 &SE \ x_1 \ \acute{e} \ A_1^r \ e \ x_2 \ \acute{e} \ A_2^r \ e \ \dots \ e \ x_L \ \acute{e} \ A_L^r \ \text{ENTÃO} \ y^r = a_1^r \cdot x_1 + a_2^r \cdot x_2 + \dots + a_L^r \cdot x_L
 \end{aligned}$$

sendo A_i^k conjuntos nebulosos, representados neste trabalho por funções de pertinência Gaussianas (equação III.15), onde $i = 1, \dots, L$ e $k = 1, \dots, r$; e a_i^k parâmetros das funções conseqüentes do modelo.

Já foi definido 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), inferência (particularmente através da t -

norma “produto algébrico” para as premissas, da s -norma “soma algébrica” e da implicação de “Larsen”, considerando os dois processos que serão analisados posteriormente nos capítulos VI e VII) e “defuzzificação” (através da média ponderada entre cada uma das funções conseqüentes das regras, definida pela equação III.65). Todos esses conceitos já foram apresentados no capítulo III de forma detalhada.

Entretanto, a dimensão do modelo - número de regras, número e parâmetros (centros e desvios padrões) 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 Gradiente: a qualidade do modelo nebuloso pode ser consideravelmente melhorada por modificações nos parâmetros de entrada. O método gradiente age nesse sentido, ajustando os parâmetros das premissas do modelo;
- Método dos Mínimos Quadrados: 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 mínimos quadrados 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 Mínimos Quadrados (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 extração das regras. O algoritmo demonstrando a metodologia da técnica é descrito a seguir:

Seja $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 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:

$$P_i = \sum_{j=1}^n e^{-\alpha \|x_i - x_j\|^2} \quad (\text{IV.2})$$

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

$\|\cdot\|$ 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.3, o processo de redução dos potenciais calculados anteriormente:

$$P_i = P_i - P_1^* e^{-\beta \|x_i - x_1^*\|^2} \quad (IV.3)$$

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:

$$r_b = \eta.r_a \quad (IV.4)$$

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.3, 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:

$$P_i = P_i - P_k^* e^{-\beta \|x_i - x_k^*\|^2} \quad (IV.5)$$

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

SENÃO

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

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

$\bar{\varepsilon}$ 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 $\bar{\varepsilon} = 0.5$ 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 padrões σ_i das funções de pertinência Gaussianas para uma determinada variável x_i são calculados pela equação:

$$\sigma_i = \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} \cdot (x_i^{\max} - x_i^{\min}) \quad (\text{IV.6})$$

onde x_i^{\max} e x_i^{\min} são os limites máximo e mínimo de x_i , respectivamente, sendo α definido pela equação IV.2.

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 Mínimos Quadrados

O algoritmo dos mínimos quadrados pode ser utilizado para 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 linear em relação aos parâmetros das funções conseqüentes obtido pelo método dos mínimos quadrados é definido como:

$$f(x/\theta) = \theta^T \xi(x) \quad (IV.7)$$

onde θ representa o vetor de parâmetros das funções conseqüentes do modelo nebuloso, demonstrado pela expressão IV.8, e $\xi(x)$ é definido pelo vetor IV.9:

$$\theta = [a_{01} \ a_{02} \ \dots \ a_{0r} \ a_{11} \ a_{12} \ \dots \ a_{1r} \ \dots \ a_{L1} \ a_{L2} \ a_{Lr}]^T \quad (IV.8)$$

$$\xi(x) = [\xi_1(x), \dots, \xi_r(x), x_1 \xi_1(x), \dots, x_1 \xi_r(x), \dots, x_L \xi_1(x), \dots, x_L \xi_r(x)]^T \quad (IV.9)$$

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 θ e $\xi_k(x)$. Os $\xi_k(x)$ são então definidos pelo vetor de regressão:

$$\xi_k(x) = \frac{\mu_k(x)}{\sum_{j=1}^r \mu_j(x)} \quad (IV.10)$$

onde $k = 1, \dots, r$. $\mu_k(x)$ é definida para uma determinada regra específica k como o produtório das funções de pertinência das variáveis de entrada do modelo, sendo expressa pela equação:

$$\mu_k(x) = \prod_{i=1}^L \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x_i - c_i^k}{\sigma_i^k} \right)^2 \right] \quad (IV.11)$$

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 $n \times 1$:

$$Y(n) = [y^1, y^2, \dots, y^n]^T \quad (IV.12)$$

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 $L.r \times n$:

$$\Phi(n) = [\xi(x^1) \quad \xi(x^2) \quad \dots \quad \xi(x^n)] \quad (IV.13)$$

na qual os vetores de dados $\xi(x^j)$ são determinados pela equação IV.9.

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

$$E(n) = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n]^T \quad (IV.14)$$

sendo os ε_j expressos como:

$$\varepsilon_j = y^j - \theta^T \xi(x^j) \quad (IV.15)$$

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

$$V(\theta) = \frac{1}{2} E^T E \quad (IV.16)$$

Deste modo, deseja-se obter valores para θ tal que minimizem a função $V(\theta)$ dada pela equação IV.16. 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 como:

$$\hat{\theta} = (\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T Y \quad (IV.17)$$

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

$$f\left(x/\hat{\theta}\right) = \left(\hat{\theta}\right)^T \xi(x) \quad (IV.18)$$

com $\hat{\theta}$ e $\xi(x)$ definidos pelas equações IV.17 e IV.9, respectivamente.

IV.5 VALIDAÇÃO DOS MODELOS NEBULOSOS

Construído o modelo a partir dos dados de treinamento, este deve ser validado através da aplicação dos dados de teste. Os erros entre a saída predita pelo modelo nebuloso na etapa de validação e a saída do processo são quantificados através de um erro quadrático médio, dado por Mattedi (2003):

$$erro = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^m (\overline{y_k} - y_k)^2}{m}} \quad (IV.19)$$

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 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Neste capítulo, foi apresentada uma descrição detalhada sobre os desenvolvimentos necessários para construção de modelos dinâmicos nebulosos 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 obtenção de modelos dinâmicos tipo Takagi-Sugeno 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 DMC para geração do controlador híbrido.

CAPÍTULO V
CONTROLE PREDITIVO BASEADO EM
MODELO

V.1 INTRODUÇÃO

O projeto de estratégias de controle para processos de polimerização é marcado pela presença de grandes inconvenientes decorrentes da complexidade de tais sistemas. Controladores clássicos, mais especificamente o PID, são ainda hoje freqüentemente utilizados na indústria devido à simplicidade de projeto e implementação, 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 rápida e eficiente nos processos, de forma que estas ações sejam de forma antecipativas, evitando assim que os sistemas sejam desviados 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. No início de seus desenvolvimentos, tais tecnologias estavam disponíveis somente em laboratórios acadêmicos e na indústria aeroespacial, expandindo-se depois para indústrias dos mais variados ramos, inclusive a química e a petroquímica (VANDOREN, 1998).

Uma das primeiras técnicas de controle avançado a ser utilizada comercialmente foi a do controle preditivo baseado em modelo (MBPC), a qual prediz o comportamento futuro do sistema utilizando um modelo dinâmico do processo internamente na sua estrutura. Esse 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 dinâmico em cada instante de amostragem, onde se busca minimizar uma função do erro entre a resposta predita do processo e a trajetória desejada (*setpoint*) através da utilização de um modelo explícito do processo que permita prever as saídas do sistema (variáveis controladas) a partir de determinadas entradas (variáveis manipuladas). Uma trajetória de entradas futuras (ações de controle) é então calculada, mas somente a primeira ação de controle é

implementada entre uma amostragem e outra. Essa estratégia é denominada de “horizonte móvel”, onde o horizonte, sobre o qual a saída do processo é predita, é deslocado em um instante de amostragem na direção do futuro, a cada instante de amostragem. Segundo Meleiro (2002), uma grande vantagem da estratégia MBPC é a sua 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 MBPC.

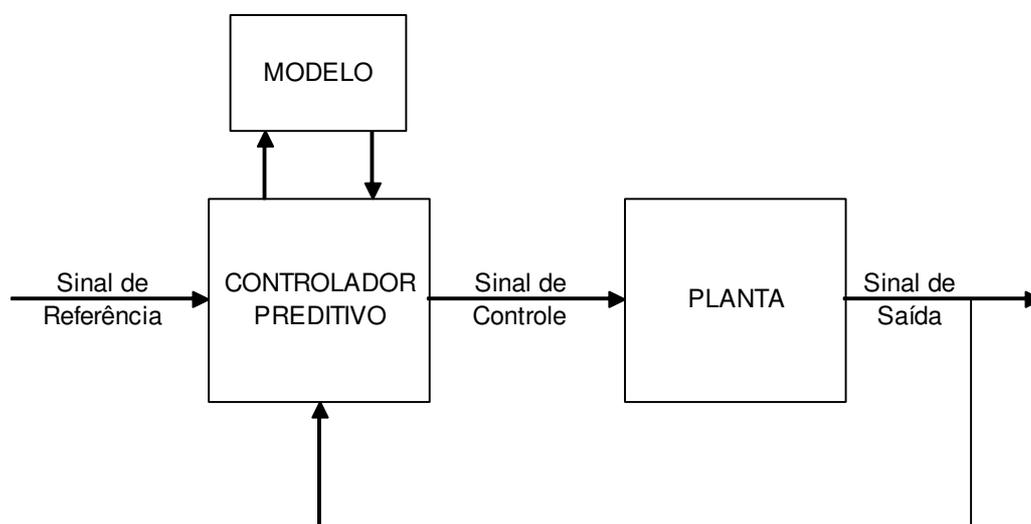


Figura V.1. Diagrama de bloco do controlador preditivo (ESPINOSA et al., 2005).

A identificação do modelo é um passo fundamental para a implementação da estrutura MBPC (SEBORG, 1999). Várias classes de modelos podem ser aplicadas, tais como determinísticos ou empíricos, lineares ou não lineares, merecendo atenção os modelos em forma de função de transferência, onde os respectivos controladores são denotados de GPC (*Generalized Predictive Control*). Entretanto, o controle GPC não é indicado para problemas multivariáveis com restrições, os quais compreendem boa parte dos processos químicos (MORARI, LEE, 1999). Há ainda os controladores preditivos definidos como NMBPC (*Nonlinear Model Based Predictive Control*), os quais utilizam modelos não lineares diretamente no algoritmo de cálculo do controlador.

Além das técnicas de controle MBPC citadas anteriormente, as estratégias DMC e MAC (*Model Algorithmic Control*) merecem serem referenciadas. Essas técnicas diferem das demais estruturas MBPC quanto ao modelo dinâmico interno do processo. Enquanto as outras metodologias consideram modelos matemáticos com parâmetros que devem ser ajustados ao comportamento do sistema, 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 (DECHECHI, 1996).

A estratégia DMC, particularmente, é um dos algoritmos de controle preditivo mais empregados na indústria química (QIN, BADGWELL, 1997). Tais controladores são baseados em modelos lineares e são bastante eficazes quando aplicados tanto a sistemas monovariáveis quanto a sistemas multivariáveis. Logo, em virtude do grande número de referências relatando o sucesso da aplicação da estrutura de controle DMC nos mais variados processos da indústria química, tal técnica é utilizada neste trabalho para obtenção do controlador híbrido proposto. A metodologia empregada no desenvolvimento do algoritmo DMC, assim como sua formulação básica, são apresentadas a seguir. Posteriormente, a estratégia estabelecida para o projeto do controlador híbrido é descrita.

V.2 CONTROLE POR MATRIZ DINÂMICA - DMC

O controle por matriz dinâmica foi desenvolvido por engenheiros da Cia. de Petróleo Shell (CUTLER, RAMAKER, 1979). Sua idéia básica é utilizar um modelo do processo de resposta ao degrau no domínio do tempo (modelo de convolução) para calcular as mudanças futuras na variável manipulada que minimizarão algum índice de desempenho.

Segundo Luyben (1990), a metodologia DMC baseia-se na aplicação de um algoritmo de estimativas por mínimos quadrados para determinar valores ótimos relativos a parâmetros de uma determinada equação que se ajustem a certo conjunto de dados. Nessa aproximação, deseja-se obter NP (horizonte de predição) respostas futuras da variável de saída que se aproximem de uma trajetória ótima. As respostas futuras ótimas são obtidas encontrando-se os melhores valores das NC (horizonte de controle) primeiras mudanças futuras nas variáveis manipuladas. De acordo com a concepção do algoritmo dos mínimos quadrados, este procedimento é válido para valores de NP maiores que NC. NP e NC são

parâmetros de controle de extrema importância que deverão ser sintonizados para cada sistema, juntamente com outros que serão definidos ao longo desta seção.

V.2.1 Procedimento DMC

O algoritmo DMC compreende a aplicação direta do modelo de convolução em paralelo com o processo. Esse modelo possui ação decisiva nas ações de controle tomadas, pois é utilizado como base para a geração da matriz dinâmica. Sua obtenção constitui a etapa inicial do projeto do controlador.

Seja então considerada uma resposta típica (y) de um dado sistema em malha aberta decorrente de uma perturbação degrau unitário na variável manipulada ($\Delta m_1 = 1$) no tempo $t = 0$ (figura V.2). Os valores da resposta podem ser descritos por pontos discretos no tempo (b_i 's) entre os intervalos de amostragem Δt . $NS\Delta t$ pode ser definido como o tempo de resposta do processo, ou seja, o tempo de reposta do sistema em malha aberta para atingir 90-95% do estado estacionário, onde NS é conhecido como “horizonte de convolução”, o qual representa o número de pontos contidos no tempo total de amostragem. O valor de NS é devido ao próprio horizonte de predição NP e também é um parâmetro de controle que deve ser ajustado. Assim, para $t = NS\Delta t$ tem-se $y = b_{NS}$. Se $\Delta m_1 \neq 1$, o valor de y para $t = NS\Delta t$ é $y = b_{NS}\Delta m_1$.

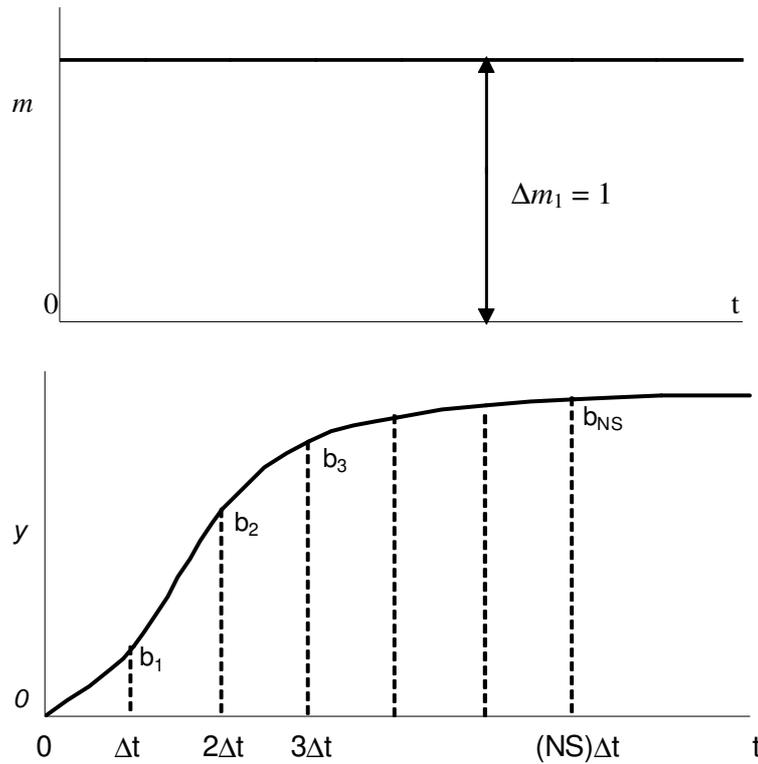


Figura V.2. Resposta ao degrau.

Definindo \tilde{y} como o valor predito da variável de saída em variável desvio, y como a saída atual, n como o instante de amostragem, m_n como o valor da variável manipulada no instante n e definindo $\Delta m_i = m_i - m_{i-1}$, o modelo de convolução pode ser expresso como (DECHECHI, 1996):

$$\tilde{y}_{n+1} = y_0 + \sum_{i=1}^{NS} b_i \Delta m_{n+1-i} \tag{V.1}$$

sendo os b_i 's definidos como coeficientes de resposta do modelo.

Definindo-se variáveis desvio ($y_0 = 0$):

$$\tilde{y}_{n+1} = \sum_{i=1}^{NS} b_i \Delta m_{n+1-i} \tag{V.2}$$

Observa-se pelas equações V.1 e V.2 que os valores preditos são funções apenas dos b_i 's multiplicados pela magnitude da mudança na entrada.

Supõe-se agora a ocorrência de duas variações degrau: Δm_1 ocorrendo em $t = 0$ e Δm_2 para $t = \Delta t$. Usando o princípio da superposição (a saída global é a soma dos efeitos das entradas individuais), pode-se calcular y para cada ponto discreto no tempo:

$$\begin{aligned}
 t = 0: \quad y_0 &= 0 \\
 t = \Delta t: \quad y_1 &= b_1 \Delta m_1 \\
 t = 2\Delta t: \quad y_2 &= b_2 \Delta m_1 + b_1 \Delta m_2 \\
 t = 3\Delta t; \quad y_3 &= b_3 \Delta m_1 + b_2 \Delta m_2
 \end{aligned} \tag{V.3}$$

Se mudanças ocorrem na entrada sobre quatro intervalos de tempo (Δm_1 em $t = 0$, Δm_2 em $t = \Delta t$, Δm_3 em $t = 2\Delta t$ e Δm_4 em $t = 3\Delta t$), a saída para os próximos seis passos deverá ser:

$$\begin{aligned}
 t = \Delta t: \quad y_1 &= b_1 \Delta m_1 \\
 t = 2\Delta t: \quad y_2 &= b_2 \Delta m_1 + b_1 \Delta m_2 \\
 t = 3\Delta t; \quad y_3 &= b_3 \Delta m_1 + b_2 \Delta m_2 + b_1 \Delta m_3 \\
 t = 4\Delta t; \quad y_4 &= b_4 \Delta m_1 + b_3 \Delta m_2 + b_2 \Delta m_3 + b_1 \Delta m_4 \\
 t = 5\Delta t; \quad y_5 &= b_5 \Delta m_1 + b_4 \Delta m_2 + b_3 \Delta m_3 + b_2 \Delta m_4 \\
 t = 6\Delta t; \quad y_6 &= b_6 \Delta m_1 + b_5 \Delta m_2 + b_4 \Delta m_3 + b_3 \Delta m_4
 \end{aligned} \tag{V.4}$$

As equações V.4 podem ser generalizadas para fornecer NP valores da saída para NC mudanças nas entradas usando a seguinte notação matricial:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \dots \\ y_{NP} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ b_2 & b_1 & 0 & \dots & 0 \\ b_3 & b_2 & b_1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{NP} & b_{NP-1} & b_{NP-2} & \dots & b_{NP+1-NC} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta m_1 \\ \Delta m_2 \\ \Delta m_3 \\ \dots \\ \Delta m_{NC} \end{bmatrix} \tag{V.5}$$

$$\underline{y} = \underline{B} \underline{\Delta m} \tag{V.6}$$

onde $\underline{\underline{B}}$ é a matriz definida em V.5 com dimensão NP x NC. Define-se então a matriz $\underline{\underline{A}}$ de dimensão NP x NC para facilitar as operações matemáticas matriciais:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1,NC} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & 0 \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{NP,1} & a_{NP,2} & \cdots & \cdots & a_{NP,NC} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta m_1 \\ \Delta m_2 \\ \Delta m_3 \\ \cdots \\ \Delta m_{NC} \end{bmatrix} \quad (V.7)$$

onde os elementos de $\underline{\underline{A}}$ são relacionados aos elementos de $\underline{\underline{B}}$ através da seguinte expressão (com $b_i = 0$ para $i \leq 0$):

$$a_{ik} = b_{i+1-k} \quad (V.8)$$

Assim, o i -ésimo valor da variável de saída pode ser escrito pelo modelo de convolução de duas formas equivalentes:

$$y_i = \sum_{k=1}^{NC} b_{i+1-k} \Delta m_k = \sum_{k=1}^{NC} a_{ik} \Delta m_k \quad (V.9)$$

A equação V.9 descreve como Δm_k afeta a i -ésima saída y_i usando os coeficientes de resposta ao degrau do modelo de convolução b_{i+1-k} . Observa-se que a soma dos índices entre Δm e b é sempre $i + 1$. O somatório dá os efeitos de todos os NC termos usando o princípio da superposição.

É fundamental entender que a variável de saída do processo continua a sofrer influências das variações passadas na variável manipulada mesmo depois de determinado tempo. Deste modo, o modelo deve distinguir entre mudanças na variável manipulada no passado e no futuro. Chamando essas mudanças passadas na variável de entrada de $(\Delta m)^{old}$, as respostas para essas serão definidas como respostas em “malha aberta” y_{OL} . Usando o modelo de convolução na forma dos coeficientes de resposta à perturbação do tipo degrau para predizer esta resposta em “malha aberta” $\tilde{y}_{OL,i}$, os valores preditos da saída para os i -ésimos intervalos futuros são dados pela equação:

$$\tilde{y}_{OL,i} = \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{i+1-k} (\Delta m_k)^{old} \quad (V.10)$$

No instante presente de amostragem ($i = 0$), pode-se medir a saída do processo y_0^{medida} . Se o modelo adotado for perfeito, e se nenhum distúrbio não considerado no modelo ocorrer, o valor predito no instante passado e o valor atual medido devem ser iguais. Entretanto, geralmente este não é o caso. Assim, a diferença entre os dois valores é usada para corrigir o modelo dinamicamente, proporcionando uma melhor predição no futuro. O valor predito no tempo atual de amostragem é $\tilde{y}_{OL,0}$, sendo expresso a partir da equação V.10 como:

$$\tilde{y}_{OL,0} = \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{1-k} (\Delta m_k)^{old} \quad (V.11)$$

A diferença entre o valor atual medido y_0^{medida} e o valor presente predito $\tilde{y}_{OL,0}$ é adicionada ao modelo ao i -ésimo período de amostragem para dar uma melhor predição da resposta em malha aberta.

$$\tilde{y}_{OL,i} = \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{i+1-k} (\Delta m_k)^{old} + y_0^{medida} - \tilde{y}_{OL,0} \quad (V.12)$$

$$\tilde{y}_{OL,i} = \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{i+1-k} (\Delta m_k)^{old} + y_0^{medida} - \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{1-k} (\Delta m_k)^{old} \quad (V.13)$$

Rearranjando:

$$\tilde{y}_{OL,i} = y_0^{medida} + \sum_{k=0}^{-NP+1} [b_{i+1-k} - b_{1-k}] (\Delta m_k)^{old} \quad (V.14)$$

A equação V.14 é o modelo de convolução que prediz as respostas em “malha aberta” devido às mudanças passadas na variável manipulada $(\Delta m_k)^{old}$, o qual será utilizado nos cálculos do algoritmo DMC.

Agora, deseja-se calcular os valores das respostas em “malha fechada”, ou seja, sob ação de controle. Esses consideram os efeitos das mudanças futuras na variável manipulada $(\Delta m_k)^{new}$, além dos efeitos futuros decorrentes de modificações passadas na própria variável manipulada através da resposta em “malha aberta”.

A resposta em “malha fechada” é definida como $y_{CL,i}$ para o valor do i -ésimo intervalo no futuro, sendo descrita pela equação V.15, a qual prediz o comportamento da saída quando NC mudanças na variável manipulada forem feitas no futuro.

$$y_{CL,i} = \tilde{y}_{OL,i} + \sum_{k=1}^{NC} a_{ik} (\Delta m_k)^{new} \quad (V.15)$$

V.2.2 Algoritmo DMC para Sistemas SISO

A metodologia de controle DMC baseia-se na minimização de uma função objetivo J , buscando-se encontrar os melhores valores futuros $(\Delta m_k)^{new}$ das mudanças na variável manipulada. Esta função J é definida como:

$$J = \sum_{i=1}^{NP} (y_i^d - y_{CL,i}^{pred})^2 + f^2 \sum_{i=1}^{NC} [(\Delta m_k)^{new}]^2 \quad (V.16)$$

Observa-se pela equação V.16 que a função J é constituída pela soma de dois termos:

1. O quadrado dos erros $(y_i^d - y_{CL,i}^{pred})$ somados sobre NP intervalos de tempo;
2. O quadrado das variações na variável manipulada somadas sobre NC intervalos de tempo, multiplicadas por um fator f^2 , sendo f definido como “fator de supressão” para os movimentos calculados da variável manipulada. A presença deste segundo termo na função objetivo visa prevenir modificações bruscas na variável manipulada. f é nulo para situações onde não há restrições, sendo este o seu limite inferior. Com o incremento no valor de f , cresce o amortecimento do sistema, de modo que aquele parâmetro deve ser ajustado durante o projeto do controlador.

O termo referente aos erros definido na forma $y_i^d - y_{CL,i}^{pred}$ não consta na estratégia original do DMC, a qual utiliza o valor do *setpoint* da variável de saída em lugar de y_i^d e a equação V.15 ao invés de $y_{CL,i}^{pred}$.

y_i^d é incorporado da estratégia MAC (TOLEDO, 1999), significando o valor de saída desejado ao longo de uma trajetória ótima, sendo definido por um filtro de primeira ordem:

$$y_i^d = \alpha \cdot y_{i-1} + (1 - \alpha) \cdot y^{set} \quad (\text{V.17})$$

onde y^{set} representa o *setpoint* da variável de saída. α é definido como um parâmetro de trajetória que determina o quão rápido o sistema atinge o *setpoint*, possuindo os limites: $0 \leq \alpha \leq 1$.

Os valores preditos $y_{CL,i}^{pred}$ na equação V.16 poderiam ser obtidos diretamente da equação V.15. No entanto, caso o modelo não corresponda fielmente ao processo (o que geralmente ocorre), a utilização 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):

$$y_{CL,i}^{pred} = y_{CL,i} + (y_{i-1} - y_{CL,i-1}) \quad (\text{V.18})$$

com $y_{CL,i}$ definido pela equação V.15. 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.

Portanto, são cinco os parâmetros que devem ser ajustados durante os procedimentos de projeto do controlador DMC: NP (horizonte de predição), NC (horizonte de controle), NS (horizonte de convolução), f (fator de supressão) e α (parâmetro de trajetória).

Para o caso particular de ausência de restrições referentes às variáveis do processo, obtém-se a seguinte lei de controle resultante da aplicação do método dos mínimos quadrados à equação V.16 (LUYBEN, 1990):

$$(\underline{\Delta m})^{new} = \left[\underline{A}^T \underline{A} + f^2 \underline{I} \right]^{-1} \underline{A}^T \underline{E} \quad (\text{V.19})$$

onde \underline{E} é um vetor do desvio predito da saída com respeito à trajetória desejada.

Somente o primeiro elemento do vetor $(\underline{\Delta m})^{new}$ é implementado no processo, determinando a ação de controle corrente no instante k como:

$$m_k = m_{k-1} + (\Delta m_{k,1})^{new} \quad (V.20)$$

Como consideração final, é importante salientar que a matriz dinâmica é calculada apenas uma vez, de forma *off-line*, e não em intervalos de tempo regulares.

V.3 CONTROLADOR HÍBRIDO FUZZY-PREDITIVO

O controlador híbrido proposto neste trabalho foi projetado a partir da estratégia de controle preditivo DMC, cuja metodologia já foi descrita de forma detalhada na seção anterior. O modelo de convolução da configuração original do DMC é substituído por um modelo dinâmico nebuloso funcional, cujo desenvolvimento foi apresentado no capítulo IV. O modelo nebuloso atua como preditor na estrutura do controle preditivo, buscando encontrar os melhores valores futuros $(\Delta m_k)^{new}$ das mudanças na variável manipulada.

A ação de controle se dá pela minimização de uma função objetivo similar à utilizada no algoritmo DMC (equação V.16). Neste caso, porém, o termo referente aos valores preditos $y_{CL,i}^{pred}$ é calculado tomando-se como base modelos nebulosos tipo Takagi-Sugeno. Assim, de uma maneira geral, pode-se concluir que o modelo dinâmico nebuloso faz as previsões da variável de saída em função dos sinais de entrada passados e presente e dos sinais de saída passados.

O algoritmo de controle híbrido pode ser sintetizado nos seguintes procedimentos:

- Inicializações dos parâmetros do controlador (NP, NC) e do otimizador (responsável pela determinação das ações de controle);
- Cálculo das previsões de saída $y_{CL,i}^{pred}$ baseando-se no modelo nebuloso;
- Incorporação da correção sobre a trajetória predita;
- Cálculo da função objetivo conforme a equação V.16;
- Cálculo da seqüência de entradas para minimizar a função objetivo do controlador.

V.4 SINTONIA DOS CONTROLADORES

Os parâmetros dos controladores DMC e híbrido são ajustados através da análise conjunta da “Integral do valor Absoluto dos Erros” (IAE – *Integral of the Absolute value of the Error*) com o comportamento dinâmico da variável manipulada durante a ação de controle, buscando-se a melhor combinação. A equação V.21 define o IAE, onde y^{set} representa o valor desejado (*setpoint*) da resposta do sistema e y^{atual} é o valor presente da resposta no tempo t , sendo t_0 e t_f os instantes inicial e final, respectivamente, do período de avaliação.

$$IAE = \int_{t_0}^{t_f} |y^{set}(t) - y^{atual}(t)| dt \quad (V.21)$$

A análise gráfica tornou-se necessária em decorrência da presença de comportamentos oscilatórios para os dois sistemas considerados neste trabalho como casos de estudo.

V.5 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

O objetivo deste capítulo foi apresentar os principais conceitos referentes à estratégia de controle preditivo baseada em modelo (MBPC). A metodologia DMC foi descrita de forma detalhada, sendo esta a abordagem empregada com maior frequência e sucesso nos processos industriais. Tal estratégia foi utilizada na obtenção do controlador híbrido, o qual utiliza um modelo dinâmico nebuloso funcional em substituição ao modelo de convolução (modelo de previsão linear). Desta forma, o novo controlador preditivo passa a ser composto por uma estrutura não linear, decorrente da interpolação entre as funções conseqüentes lineares da base de regras para cada sistema.

Os próximos capítulos (VI e VII) apresentam o desenvolvimento de modelos dinâmicos nebulosos tipo Takagi-Sugeno para dois processos de copolimerização, com conseqüente geração do controlador híbrido *fuzzy*-preditivo. Tais sistemas possuem dinâmicas complexas altamente não lineares, reforçando assim a importância da aplicação da estratégia proposta. O controlador híbrido é comparado posteriormente à configuração DMC convencional para os problemas regulatório e servo.

CAPÍTULO VI
ESTUDO DE CASO 1: COPOLIMERIZAÇÃO
DO METACRILATO DE METILA E ACETATO
DE VINILA

VI.1 INTRODUÇÃO

O primeiro processo considerado neste trabalho para 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; BARTASSON, 2005).

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 para geração de dados dinâmicos e implementação do sistema de controle proposto. Na seção VI.4, é descrita a implementação da estratégia de controle *feedforward* do reator de copolimerização para compensar os 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 subsequentes (obtenção dos modelos nebulosos e geração do controlador híbrido) 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. Na seqüência, modelos dinâmicos nebulosos funcionais são construídos para quatro variáveis de saída, sendo discutidos os desenvolvimentos presentes na etapa de identificação de dados, além dos passos de treinamento e validação dos modelos (seção VI.6). Por fim, na seção VI.7, apresentam-se os resultados de simulação para o controlador híbrido monovariável resultante da inserção dos modelos nebulosos internamente na estrutura DMC. Esse novo controlador preditivo tem seu desempenho comparado ao controle DMC convencional para os problemas regulatório e servo. Ainda é realizado um estudo sucinto da influência do fator de supressão no desempenho dos controladores.

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.

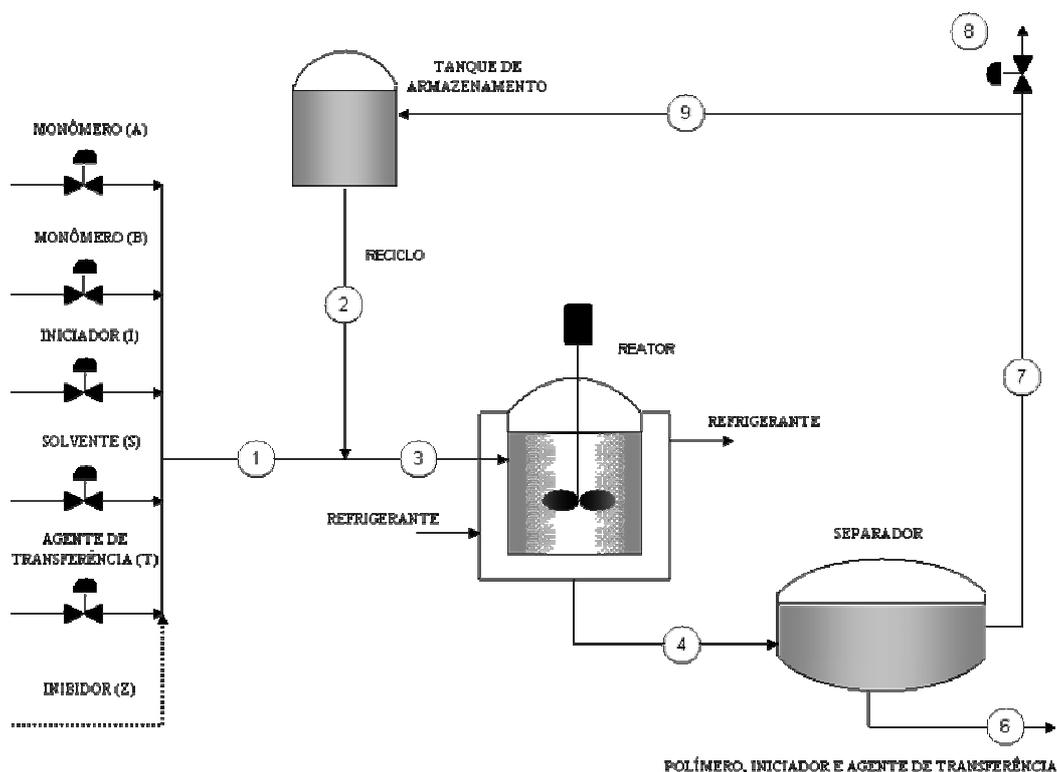


Figura VI.1. Diagrama do processo de copolimerização do MMA/VAc (CONGALIDIS et al., 1989).

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 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.

As condições de operação do estado estacionário consideradas por Congalidis et al. (1989), as quais serão utilizadas neste trabalho, 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.

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

| <i>Entradas</i> | <i>Valores</i> |
|--|------------------------------------|
| Taxa de alimentação do monômero A (MMA) | $G_{af} = 18 \text{ kg/h}$ |
| Taxa de alimentação do monômero B (VAc) | $G_{bf} = 90 \text{ kg/h}$ |
| Taxa de alimentação do iniciador (AIBN) | $G_{if} = 0,18 \text{ kg/h}$ |
| Taxa de alimentação do solvente (Benzeno) | $G_{sf} = 36 \text{ kg/h}$ |
| Taxa de alimentação do agente de transferência de cadeia (Acetaldeído) | $G_{tf} = 2,7 \text{ kg/h}$ |
| 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 | $T_{rf} = 353,15 \text{ K}$ |
| Taxa de purga | $\xi = 0,05$ |
| <i>Parâmetros do Reator</i> | |
| Volume do reator | $V_r = 1 \text{ m}^3$ |
| Área de transferência de calor do reator | $S_r = 4,6 \text{ m}^2$ |
| <i>Saídas</i> | |
| Taxa de produção de polímero | $G_{pi} = 23,3 \text{ kg/h}$ |
| Fração molar de A no copolímero | $Y_{ap} = 0,5591$ |
| Peso molecular ponderal médio | $M_{pw} = 34994,7 \text{ kg/kmol}$ |
| Temperatura do reator | $T_r = 353,02 \text{ K}$ |

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

VI.3 MODELO FENOMENOLÓGICO

O modelo fenomenológico para o processo é apresentado a seguir (CONGALIDIS et al., 1989; MANER, DOYLE III, 1997; BARTASSON, 2005). 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 para implantação da estrutura de controle proposta.

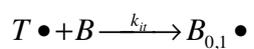
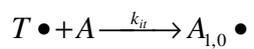
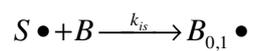
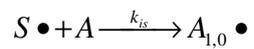
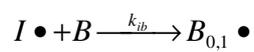
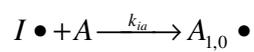
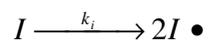
VI.3.1 Mecanismo Cinético

O seguinte mecanismo cinético de radical livre é postulado para a polimerização de monômeros A e B na presença de iniciador (I), solvente (S), agente de transferência de cadeia (T) e inibidor (Z). Neste mecanismo, $A_{n,m} \bullet$ e $B_{n,m} \bullet$ representam as cadeias de polímero em crescimento (polímero “vivo”) contendo n unidades do monômero A e m unidades 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:

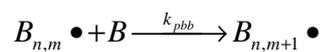
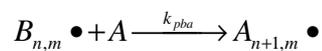
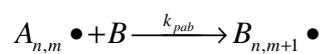
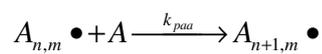
$$k_{cab} = \sqrt{k_{caa}k_{cbb}}$$

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

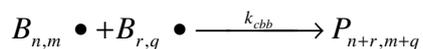
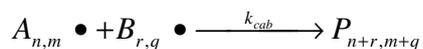
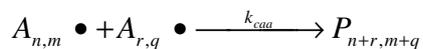
Iniciação:



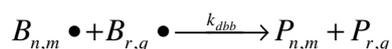
Propagação:



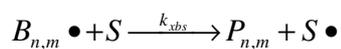
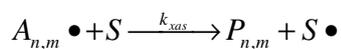
Terminação por acoplamento:



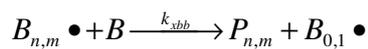
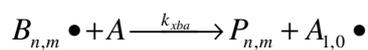
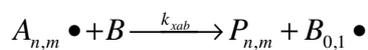
Terminação por desproporcionamento:



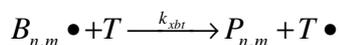
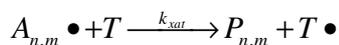
Transferência de cadeia para solvente:



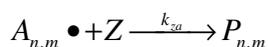
Transferência de cadeia para monômero:



Transferência de cadeia para o agente:



Inibição:



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

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

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

Os valores para o fator de frequência, 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.

Tabela VI.2. Parâmetros cinéticos e termodinâmicos para o modelo fenomenológico do processo de copolimerização do MMA/VAc.

| Parâmetros Cinéticos |
|--|
| ε (eficiência do iniciador) = 1 |
| $A_i = 4,5 \cdot 10^{14}$ 1/s |
| $A_{caa} = 4,209 \cdot 10^{11}$ m ³ /kmol.s |
| $A_{cbb} = 1,61 \cdot 10^9$ m ³ /kmol.s |
| $A_{daa} = 0,0$ |
| $A_{dab} = 0,0$ |
| $A_{paa} = 3,207 \cdot 10^6$ m ³ /kmol.s |
| $A_{pab} = 1,233 \cdot 10^5$ m ³ /kmol.s |
| $A_{pba} = 2,103 \cdot 10^8$ m ³ /kmol.s |
| $A_{pbb} = 6,308 \cdot 10^6$ m ³ /kmol.s |
| $A_{xaa} = 32,08$ m ³ /kmol.s |

| |
|--|
| $A_{xab} = 1,234 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $A_{xas} = 86,6 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $A_{xat} = 2085,0 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $A_{xba} = 5,257 \cdot 10^4 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $A_{xbb} = 1577,0 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $A_{xbs} = 1514,0 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $A_{xbt} = 4,163 \cdot 10^5 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $A_{za} = 2,2 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $A_{zb} = 1,13 \cdot 10^5 \text{ m}^3/\text{kmol.s}$ $E_i = 1,255 \cdot 10^5 \text{ kJ/kmol}$ $E_{caa} = 2,69 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{cbb} = 4,00 \cdot 10^3 \text{ kJ/kmol}$ $E_{daa} = 0,0$ $E_{dab} = 0,0$ $E_{paa} = 2,42 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{pab} = 2,42 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{pba} = 1,80 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{pbb} = 1,80 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{xaa} = 2,42 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{xab} = 2,42 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{xas} = 2,42 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{xat} = 2,42 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{xba} = 1,80 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{xbb} = 1,80 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{xbs} = 1,80 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{xbt} = 1,80 \cdot 10^4 \text{ kJ/kmol}$ $E_{za} = 0,0$ $E_{zb} = 0,0$ |
| Parâmetros Termodinâmicos |
| <p style="text-align: center;"><i>Entalpia de Reação</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - $\Delta H_{paa} = 54,0 \cdot 10^3 \text{ kJ/kmol}$ - $\Delta H_{pba} = 54,0 \cdot 10^3 \text{ kJ/kmol}$ - $\Delta H_{pab} = 86,0 \cdot 10^3 \text{ kJ/kmol}$ - $\Delta H_{pbb} = 86,0 \cdot 10^3 \text{ kJ/kmol}$ <p style="text-align: center;"><i>Densidade da Massa Reacional</i></p> $\rho_r = 8,79 \cdot 10^2 \text{ kg/m}^3$ <p style="text-align: center;"><i>Calor Específico da Massa Reacional</i></p> $C_r = 2,01 \text{ kJ/kg.K}$ <p style="text-align: center;"><i>Coefficiente de Transferência de Calor do Reator</i></p> $U_r = 6,0 \cdot 10^{-2} \text{ kJ/m}^2 \cdot \text{s.K}$ |

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:

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{C_{kf} - C_k}{\theta_r} - R_k \quad (\text{VI.2})$$

com a seguinte condição inicial:

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

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.

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

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

$$C_{kf} = \frac{F_{kf}}{Q_f} \quad (\text{VI.4})$$

$$\theta_r = \frac{V_r}{Q_r} \quad (\text{VI.5})$$

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

$$\begin{aligned} \frac{dT_r}{dt} = & \frac{T_{rf} - T_r}{\theta_r} + \frac{(-\Delta H_{paa})k_{paa}C_aC_{a\bullet} + (-\Delta H_{pba})k_{pba}C_aC_{b\bullet}}{\rho_r c_r} \\ & + \frac{(-\Delta H_{pab})k_{pab}C_bC_{a\bullet} + (-\Delta H_{pbb})k_{pbb}C_bC_{b\bullet}}{\rho_r c_r} - \frac{U_r S_r (T_r - T_j)}{V_r \rho_r c_r} \end{aligned} \quad (\text{VI.6})$$

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:

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

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

$$R_i = k_i C_i \quad (\text{VI.9})$$

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

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

$$R_z = (k_{za} C_{a\bullet} + k_{zb} C_{b\bullet})C_z \quad (\text{VI.12})$$

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

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

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*:

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

$$C_{b\bullet} = \beta C_{a\bullet} \quad (\text{VI.15})$$

com as variáveis intermediárias definidas como:

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

$$l_1 = k_{caa} + k_{daa} + 2\beta(k_{cab} + k_{dab}) + \beta^2(k_{cbb} + k_{dbb}) \quad (\text{VI.17})$$

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

$$l_3 = -2k_i C_i \varepsilon \quad (\text{VI.19})$$

VI.3.3 Composição do Copolímero “Morto”

As concentrações molares dos dois monômeros no polímero “morto” (λ_a e λ_b) são calculadas pelos seguintes balanços molares:

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

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

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:

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

VI.3.4 Pesos Moleculares Médios Numérico e Ponderal

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 $k = 0, 1, \dots, \infty$:

$$\psi_k^p = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_a + mM_b)^k P_{n,m} \quad (\text{VI.23})$$

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 $k = 0, 1, \dots, \infty$:

$$\psi_k^{a\bullet} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_a + mM_b)^k A_{n,m} \bullet \quad (\text{VI.24})$$

$$\psi_k^{b\bullet} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (nM_a + mM_b)^k B_{n,m} \bullet \quad (\text{VI.25})$$

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

$$M_{pn} = \frac{\psi_1^p}{\psi_0^p} \quad (\text{VI.26})$$

$$M_{pw} = \frac{\psi_2^p}{\psi_1^p} \quad (\text{VI.27})$$

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):

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_0^p}{dt} = & \frac{\psi_{0f}^p - \psi_0^p}{\theta_r} + \frac{1}{2}k_{caa}(\psi_0^{a\bullet})^2 + k_{cab}\psi_0^{a\bullet}\psi_0^{b\bullet} + \frac{1}{2}k_{cbb}(\psi_0^{b\bullet})^2 \\ & + L_1\psi_0^{a\bullet} + L_2\psi_0^{b\bullet} \end{aligned} \quad (\text{VI.28})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_1^p}{dt} = & \frac{\psi_{1f}^p - \psi_1^p}{\theta_r} + k_{caa}\psi_0^{a\bullet}\psi_1^{a\bullet} + k_{cab}(\psi_0^{a\bullet}\psi_1^{b\bullet} + \psi_0^{b\bullet}\psi_1^{a\bullet}) \\ & + k_{cbb}\psi_0^{b\bullet}\psi_1^{b\bullet} + L_1\psi_1^{a\bullet} + L_2\psi_1^{b\bullet} \end{aligned} \quad (\text{VI.29})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_2^p}{dt} = & \frac{\psi_{2f}^p - \psi_2^p}{\theta_r} + k_{caa}\{(\psi_1^{a\bullet})^2 + \psi_0^{a\bullet}\psi_2^{a\bullet}\} \\ & + k_{cab}(2\psi_1^{a\bullet}\psi_1^{b\bullet} + \psi_2^{b\bullet}\psi_0^{a\bullet} + \psi_2^{a\bullet}\psi_0^{b\bullet}) + k_{cbb}\{(\psi_1^{b\bullet})^2 + \psi_0^{b\bullet}\psi_2^{b\bullet}\} \\ & + L_1\psi_2^{a\bullet} + L_2\psi_2^{b\bullet} \end{aligned} \quad (\text{VI.30})$$

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:

$$L_1 = k_{xas}C_s + k_{xaa}C_a + k_{xab}C_b + k_{xat}C_t + k_{za}C_z + k_{daa}C_{a\bullet} + k_{dab}C_{b\bullet} \quad (\text{VI.31})$$

$$L_2 = k_{xbs}C_s + k_{xbb}C_b + k_{xba}C_a + k_{xbt}C_t + k_{zb}C_z + k_{dbb}C_{b\bullet} + k_{dab}C_{a\bullet} \quad (\text{VI.32})$$

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:

$$\psi_0^{a\bullet} = \frac{B_3}{B_1} \quad (\text{VI.33})$$

$$\psi_1^{a\bullet} = \frac{\alpha_1\alpha_2V_1(M_b + M_a) + \alpha_1c_1M_a}{B_1} - \frac{B_2B_3}{B_1^2} \quad (\text{VI.34})$$

$$\begin{aligned} \psi_2^{a\bullet} = & \frac{-B_3\{(\alpha_1 + \alpha_2)M_aM_b + B_2(M_a + M_b - 1)\}}{B_1^2} \\ & + \frac{\alpha_1\alpha_2V_1(M_a + M_b - 1)(M_a + M_b)}{B_1} + \frac{\alpha_1c_1M_a(M_a - 1)}{B_1} + \frac{2B_2^2B_3}{B_1^3} \\ & + \psi_1^{a\bullet} - \frac{2B_2\{\alpha_1\alpha_2V_1(M_a + M_b) + \alpha_1c_1M_a\}}{B_1^2} \end{aligned} \quad (\text{VI.35})$$

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

$$\psi_1^{b\bullet} = \frac{\alpha_1\alpha_2V_2(M_b + M_a) + \alpha_2c_4M_b}{B_1} - \frac{B_2B_4}{B_1^2} \quad (\text{VI.37})$$

$$\begin{aligned} \psi_2^{b\bullet} = & \frac{-B_4\{(\alpha_1 + \alpha_2)M_aM_b + B_2(M_a + M_b - 1)\}}{B_1^2} \\ & + \frac{\alpha_1\alpha_2V_2(M_a + M_b - 1)(M_a + M_b)}{B_1} + \frac{\alpha_2c_4M_b(M_b - 1)}{B_1} \\ & + \frac{2B_2^2B_4}{B_1^3} + \psi_1^{b\bullet} - \frac{2B_2\{\alpha_1\alpha_2V_2(M_a + M_b) + \alpha_2c_4M_b\}}{B_1^2} \end{aligned} \quad (\text{VI.38})$$

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

$$\alpha_1 = \frac{k_{paa}C_a}{\{(k_{caa} + k_{daa})C_{a\bullet} + (k_{cab} + k_{dab})C_{b\bullet} + (k_{paa} + k_{xaa})C_a + (k_{pab} + k_{xab})C_b + k_{xat}C_t + k_{xas}C_s + k_{za}C_z\}} \quad (\text{VI.39})$$

$$\alpha_2 = \frac{k_{pbb}C_b}{\{(k_{cbb} + k_{dbb})C_{b\bullet} + (k_{cab} + k_{dab})C_{a\bullet} + (k_{pbb} + k_{xbb})C_b + (k_{pba} + k_{xba})C_a + k_{xbt}C_t + k_{xbs}C_s + k_{zb}C_z\}} \quad (\text{VI.40})$$

$$c_1 = \frac{2k_i \varepsilon C_i + C_s (k_{xas} C_{a\bullet} + k_{xbs} C_{b\bullet})}{k_{paa} (C_a + C_b)} + \frac{C_t (k_{xat} C_{a\bullet} + k_{xbt} C_{b\bullet})}{k_{paa} (C_a + C_b)} + \frac{k_{xaa} C_{a\bullet} + k_{xba} C_{b\bullet}}{k_{paa}} \quad (\text{VI.41})$$

$$c_4 = \frac{2k_i \varepsilon C_i + C_s (k_{xas} C_{a\bullet} + k_{xbs} C_{b\bullet})}{k_{pbb} (C_a + C_b)} + \frac{C_t (k_{xat} C_{a\bullet} + k_{xbt} C_{b\bullet})}{k_{pbb} (C_a + C_b)} + \frac{k_{xbb} C_{b\bullet} + k_{xab} C_{a\bullet}}{k_{pbb}} \quad (\text{VI.42})$$

$$r_1 = \frac{k_{paa}}{k_{pab}} \quad (\text{VI.43})$$

$$r_2 = \frac{k_{pbb}}{k_{pba}} \quad (\text{VI.44})$$

$$\gamma = \frac{k_{pba}}{k_{pab}} \quad (\text{VI.45})$$

$$c_2 = c_4 r_2 \gamma \quad (\text{VI.46})$$

$$c_3 = \frac{c_1 r_1}{\gamma} \quad (\text{VI.47})$$

$$x = \frac{1}{r_1 r_2} \quad (\text{VI.48})$$

$$V_1 = c_2 x - c_1 \quad (\text{VI.49})$$

$$V_2 = c_3 x - c_4 \quad (\text{VI.50})$$

$$B_1 = 1 - (\alpha_1 + \alpha_2) + \alpha_1\alpha_2(1-x) \quad (\text{VI.51})$$

$$B_2 = (M_a + M_b)(1-x)\alpha_1\alpha_2 - \alpha_1M_a - \alpha_2M_b \quad (\text{VI.52})$$

$$B_3 = \alpha_1c_1 + \alpha_1\alpha_2V_1 \quad (\text{VI.53})$$

$$B_4 = \alpha_2c_4 + \alpha_1\alpha_2V_2 \quad (\text{VI.54})$$

VI.3.5 Balanço Molar 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:

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

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

Tanque de armazenamento:

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

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* ao 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:

$$F_{a3} = F_{a1} + y_{a2}F_2 \quad (\text{VI.57})$$

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}):

$$F_{a1} = F_{a3} - y_{a2}F_2 \quad (\text{VI.58})$$

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:

$$F_{b1} = F_{b3} - y_{b2}F_2 \quad (\text{VI.59})$$

$$F_{s1} = F_{s3} - y_{s2}F_2 \quad (\text{VI.60})$$

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 análise do controle *feedforward* e, posteriormente, obtenção dos modelos nebulosos e implementação do controlador híbrido, 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. O programa utiliza a rotina IVPAG (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 suas condições operacionais de entrada, são apresentadas na tabela VI.3 (MANER, DOYLE III, 1997):

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

| <i>Variável</i> | <i>Valor Inicial</i> |
|-------------------------------|---|
| C_{a0} | $2,4500 \cdot 10^{-1} \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{b0} | $5,6010 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{i0} | $1,8163 \cdot 10^{-3} \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{s0} | $2,7580 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{r0} | $3,6524 \cdot 10^{-1} \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{z0} | $0,0 \text{ kmol/m}^3$ |
| T_{r0} | $353,0161 \text{ K}$ |
| λ_{a0} | $8,3092 \cdot 10^{-1} \text{ kmol/m}^3$ |
| λ_{b0} | $6,5524 \cdot 10^{-1} \text{ kmol/m}^3$ |
| ψ_{00}^p | $6,6571 \cdot 10^{-3} \text{ kmol/m}^3$ |
| ψ_{10}^p | $1,4133 \cdot 10^2 \text{ kg/m}^3$ |
| ψ_{20}^p | $4,9458 \cdot 10^6 \text{ kg}^2/\text{kmol} \cdot \text{m}^3$ |
| C_{as0} | $2,4500 \cdot 10^{-1} \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{bs0} | $5,6010 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{is0} | $1,8163 \cdot 10^{-3} \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{ss0} | $2,7580 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{ts0} | $3,6524 \cdot 10^{-1} \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{zs0} | $0,0 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{ah0} | $2,9821 \cdot 10^{-1} \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{bh0} | $6,8176 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{ih0} | $0,0 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{sh0} | $3,3571 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{th0} | $0,0 \text{ kmol/m}^3$ |
| C_{zh0} | $0,0 \text{ kmol/m}^3$ |
| λ_{af} | $0,0 \text{ kmol/m}^3$ |
| λ_{bf} | $0,0 \text{ kmol/m}^3$ |
| ψ_{0f}^p | $0,0 \text{ kmol/m}^3$ |
| ψ_{1f}^p | $0,0 \text{ kg/m}^3$ |
| ψ_{2f}^p | $0,0 \text{ kg}^2/\text{kmol} \cdot \text{m}^3$ |
| $R_{ibs} = F_{ils} / F_{b3s}$ | $1,0485 \cdot 10^{-3}$ |
| M_a | $100,12 \text{ kg/kmol}$ |
| M_b | $86,09 \text{ kg/kmol}$ |
| M_i | $164,21 \text{ kg/kmol}$ |

| | |
|-------|----------------|
| M_s | 78,11 kg/kmol |
| M_t | 44,05 kg/kmol |
| M_z | 168,11 kg/kmol |

Assim, o desempenho do controle *feedforward* foi examinado através da análise da resposta das variáveis, resultante 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 e B, e pelo solvente.

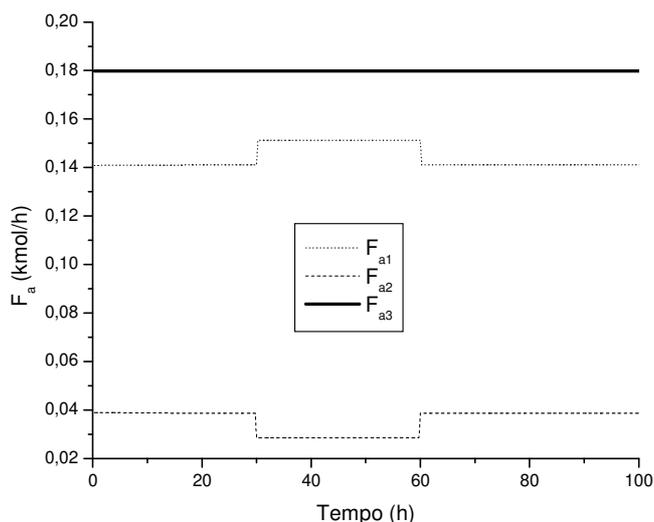


Figura VI.2. Ação do controle *feedforward* nas vazões do monômero A para perturbações na taxa de purga.

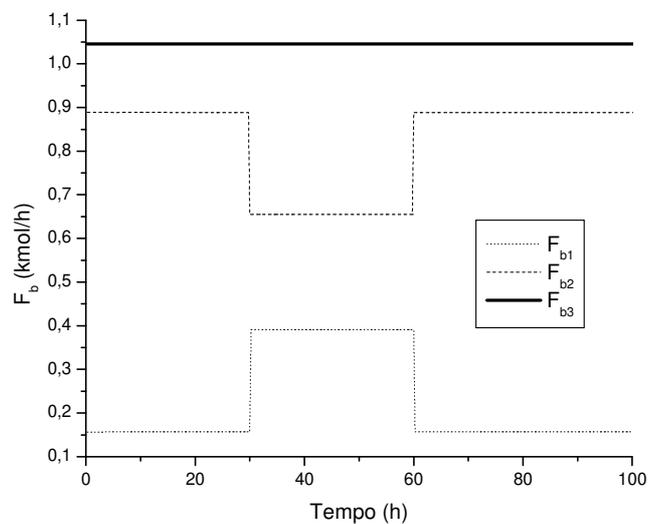


Figura VI.3. Ação do controle *feedforward* nas vazões do monômero *B* para perturbações na taxa de purga.

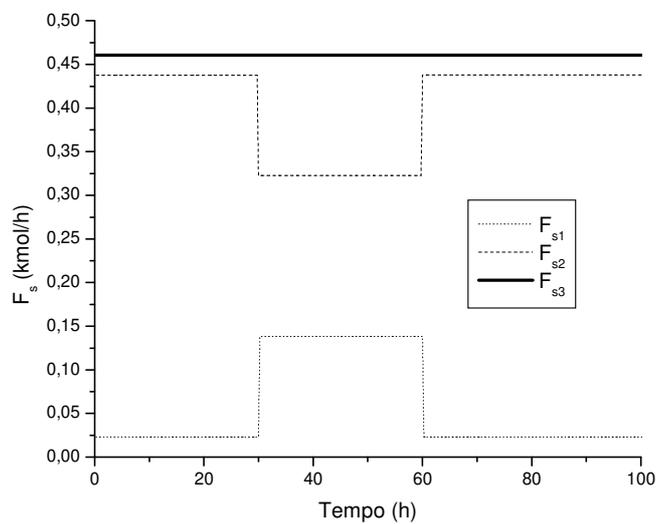


Figura VI.4. Ação do controle *feedforward* nas vazões do solvente para perturbações na taxa de purga.

Deste modo, nos desenvolvimentos descritos a seguir, o controle *feedforward* do reciclo se encontra implementado ao processo. O reator é então analisado isoladamente, onde este é definido estar em “malha aberta” para essa condição.

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 na vazão molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total no instante inicial. 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 para as quatro variáveis de saída, considerando essa perturbação, será realizado na seção VI.7, onde os controladores híbrido e DMC terão os seus desempenhos comparados entre si.

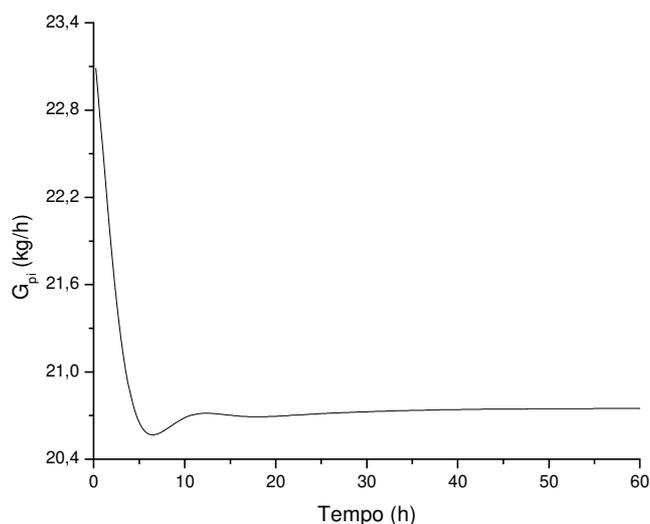


Figura VI.5. Resposta em “malha aberta” da taxa de produção de polímero (G_{pi}) para uma perturbação na concentração molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total.

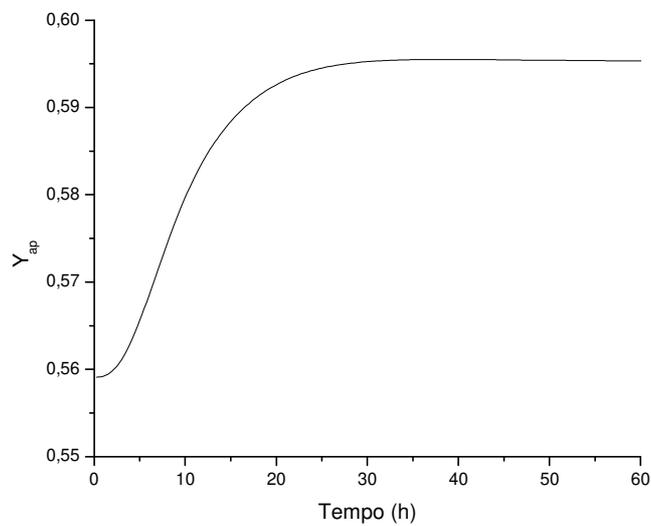


Figura VI.6. Resposta em “malha aberta” da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) para uma perturbação na concentração molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total.

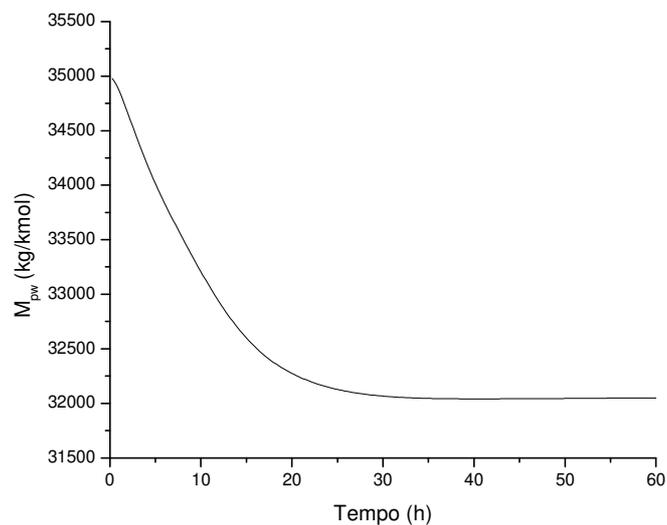


Figura VI.7. Resposta em “malha aberta” do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para uma perturbação na concentração molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total.

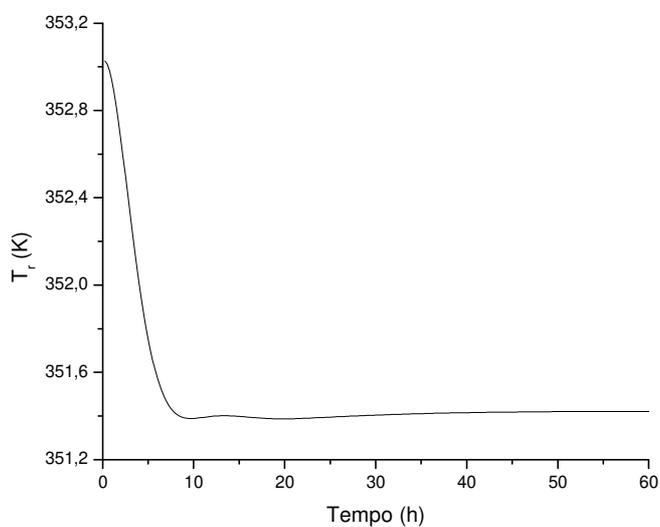


Figura VI.8. Resposta em “malha aberta” da temperatura do reator (T_r) para uma perturbação na concentração molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total.

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. Observa-se claramente na figura VI.9 um comportamento tanto não linear quanto invertido para esta malha de variáveis.

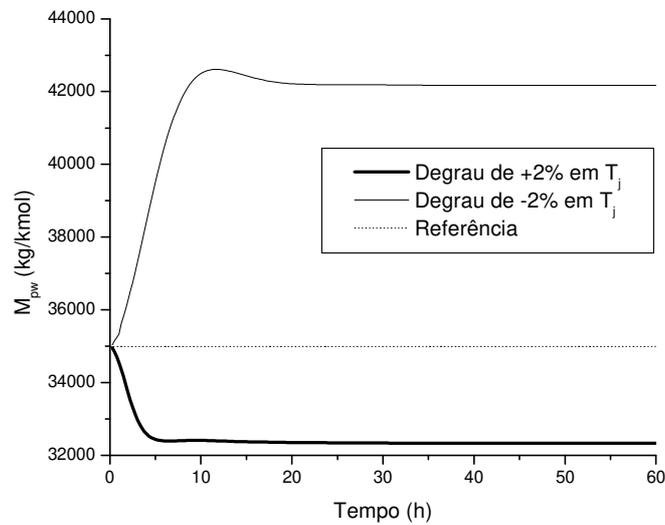


Figura VI.9. Comportamento dinâmico em “malha aberta” do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para perturbações degrau de +/- 2% sobre a temperatura da jaqueta (T_j) no instante inicial.

VI.6 MODELAGEM DINÂMICA NEBULOSA

Nesta seção, serão obtidos os modelos dinâmicos nebulosos funcionais para as quatro variáveis de saída do processo. Para isto, um algoritmo para modelagem dinâmica nebulosa considerando sistemas SISO foi desenvolvido usando os métodos do agrupamento subtrativo e mínimos quadrados descritos no capítulo IV, sendo este posteriormente inserido ao programa de simulação do processo em “malha aberta” (seção VI.4). Como já discutido, os modelos serão utilizados internamente na estrutura do controle preditivo para análise dos problemas regulatório e servo (seção VI.7).

As quatro malhas de controle estudadas são definidas como a seguir:

- Malha 1: a taxa de produção de polímero (G_{pi}) é a variável de saída (controlada) e a temperatura da jaqueta (T_j) é a variável de entrada (manipulada);
- Malha 2: a fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) é a variável de saída (controlada) e a razão entre as vazões molares do metacrilato

de metila e acetato de vinila na alimentação do reator (G_{a3}/G_{b3}) é a variável de entrada (manipulada);

- Malha 3: o peso molecular ponderal médio (M_{pw}) é a variável de saída (controlada), possuindo a temperatura da jaqueta (T_j) como variável de entrada (manipulada);
- Malha 4: possui a temperatura do reator (T_r) como variável de saída (controlada) e a temperatura da jaqueta (T_j) como variável de entrada (manipulada).

Como já definido, os modelos dinâmicos nebulosos construídos neste trabalho serão do tipo Takagi-Sugeno (capítulos III e IV). Assim, a próxima etapa no processo de modelagem refere-se à geração dos dados de identificação do sistema através de variações aleatórias no valor da variável de entrada. Os dados de treinamento (determinação dos parâmetros do modelo) e teste (validação) devem diferir entre si de forma que seja garantida a flexibilidade do modelo para condições diferentes de operação, dentro, é claro, dos limites estabelecidos como premissas do sistema. De posse dessas informações, o método do agrupamento subtrativo é aplicado para determinação do número de regras r e dos parâmetros das funções de pertinência Gaussianas (centro e desvio padrão) da parte antecedente do modelo nebuloso, enquanto o algoritmo dos mínimos quadrados é utilizado no cálculo dos parâmetros das funções conseqüentes da base de regras do sistema, conforme definido no capítulo IV. Os valores obtidos para esses parâmetros em cada malha, os quais serão apresentados na seqüência, proporcionam ao modelo uma melhor capacidade de representatividade em relação aos dados de identificação. São consideradas três entradas para o modelo em cada uma das malhas, sendo duas referentes à variável manipulada (um valor presente e um valor passado) e uma referente ao valor passado da variável controlada. Uma taxa de amostragem igual a 0,25 horas foi utilizada para um intervalo de simulação de 400 horas.

Malha 1

A figura VI.10 apresenta os dados de treinamento e teste para a temperatura da jaqueta (T_j), enquanto a figura VI.11 mostra o comportamento da taxa de polimerização (G_{pi}) para esses valores.

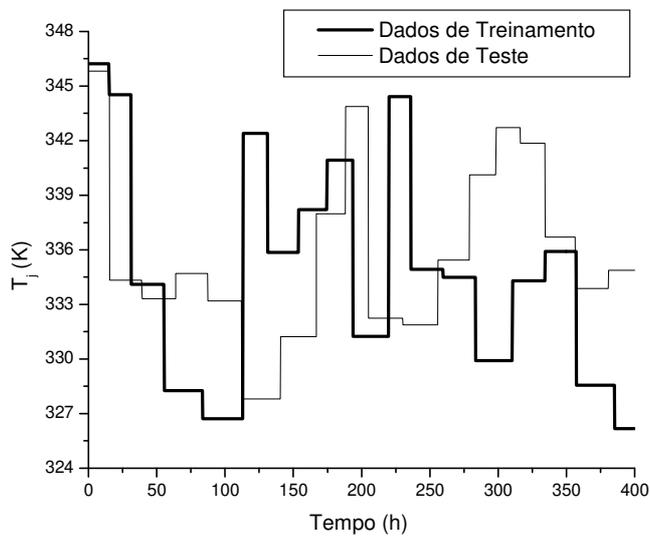


Figura VI.10. Dados de identificação da temperatura da jaqueta T_j (variável de entrada).

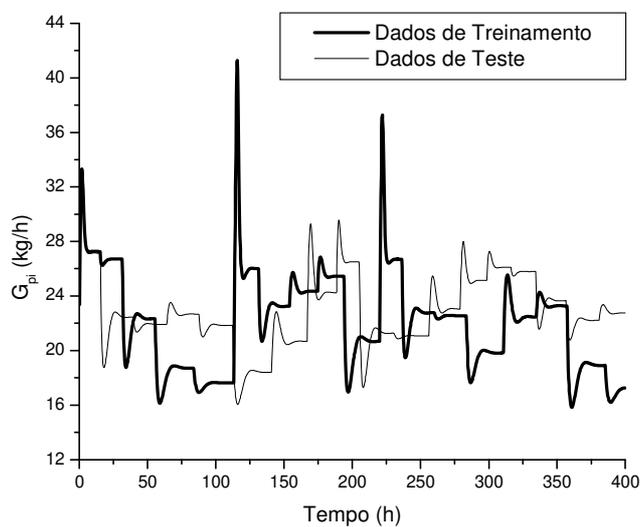


Figura VI.11. Dados de identificação da taxa de produção de polímero G_{pi} (variável de saída).

A tabela VI.4 mostra os resultados de simulação para os parâmetros do modelo nebuloso funcional.

Tabela VI.4. Parâmetros do modelo nebuloso para a taxa de produção de polímero (G_{pi}).

| Número de Regras = 2 | | | |
|---|-----------------------|----------------------------|----------------------------------|
| Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo | | | |
| $r_a = 0,50$ | $\eta = 2,85$ | $\bar{\varepsilon} = 0,50$ | $\underline{\varepsilon} = 0,15$ |
| Parte Antecedente | | | |
| Regra | Centro | | Desvio Padrão |
| 1 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $1,08 \cdot 10^{-1}$ | | $1,71 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $2,31 \cdot 10^{-1}$ | | $1,55 \cdot 10^{-1}$ |
| 2 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $10,00 \cdot 10^{-1}$ | | $1,71 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $6,96 \cdot 10^{-1}$ | | $1,55 \cdot 10^{-1}$ |
| Parte Conseqüente | | | |
| Regra i | a_1^i | a_2^i | b_1^i |
| $i = 1$ | $8,19 \cdot 10^{-2}$ | $-6,60 \cdot 10^{-2}$ | $9,82 \cdot 10^{-1}$ |
| $i = 2$ | $2,13 \cdot 10^{-1}$ | $-1,84 \cdot 10^{-1}$ | $9,62 \cdot 10^{-1}$ |

A base de regras do modelo funcional pode então ser descrita da seguinte forma:

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^1) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^1) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^1) \mathbf{ENTÃO} \ y^1(k+1) = a_1^1 \cdot u(k) + a_2^1 \cdot u(k-1) + b_1^1 \cdot y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^2) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^2) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^2) \mathbf{ENTÃO} \ y^2(k+1) = a_1^2 \cdot u(k) + a_2^2 \cdot u(k-1) + b_1^2 \cdot y(k-1)$$

onde A_j^i e B_h^i são funções de pertinência Gaussianas ($i = 1, \dots, r; j = 1, \dots, nu$ e $h = 1, \dots, ny$, sendo nu e ny o número de entradas do modelo referentes às variáveis manipulada e controlada, respectivamente); k é o instante considerado; u são entradas do modelo referentes à T_j ; y representa a entrada referente à G_{pi} ; y^i é a saída para cada regra do modelo e a_j^i e b_h^i são parâmetros das funções conseqüentes do modelo referentes às variáveis T_j e G_{pi} , respectivamente.

Os resultados de validação do modelo nebuloso, utilizando o conjuntos de dados de teste, estão apresentados na figura VI.12. Considerando o intervalo de simulação de 400 horas, o erro quadrático médio (equação IV.19) obtido é igual a 0,218 kg/h, sendo este bastante reduzido tendo como referência a ordem de grandeza da saída. Desta maneira, e a partir da análise gráfica, observa-se o grande potencial da estrutura proposta na predição da saída do processo.

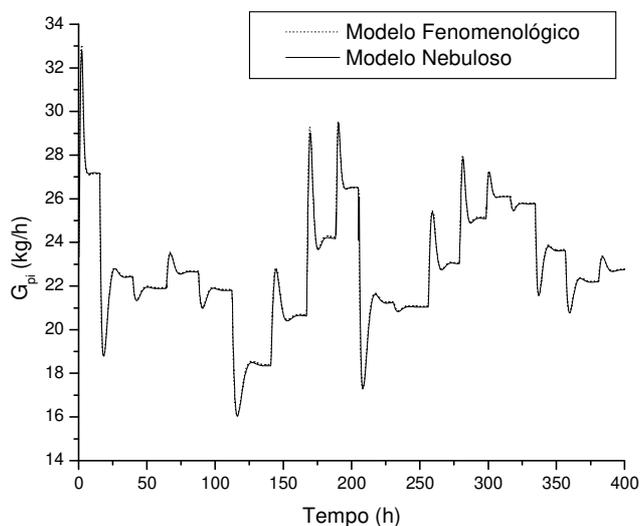


Figura VI.12. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - G_{pi} .

Malha 2

Na figura VI.13, estão apresentados os dados de treinamento e teste para a razão entre as vazões molares dos monômeros A (metacrilato de metila) e B (acetato de vinila) na alimentação do reator (G_{a3}/G_{b3}), enquanto a figura VI.14 mostra o comportamento da fração molar do monômero A no copolímero (Y_{ap}) para esses valores.

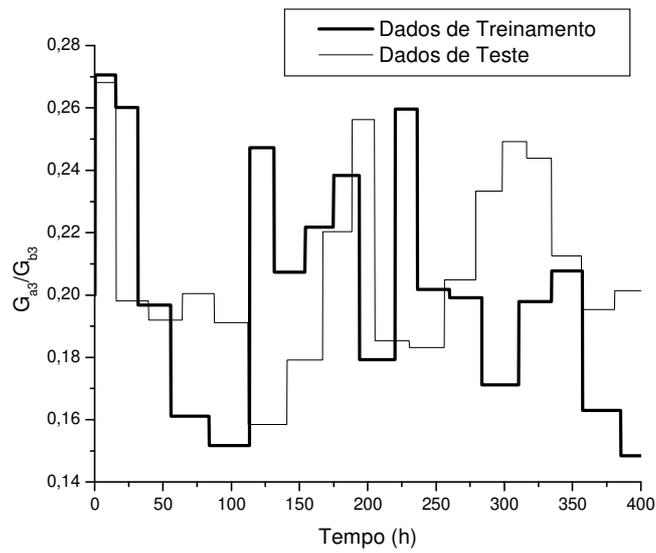


Figura VI.13. Dados de identificação da razão entre as vazões molares do metacrilato de metila e acetato de vinila G_{a3}/G_{b3} (variável de entrada).

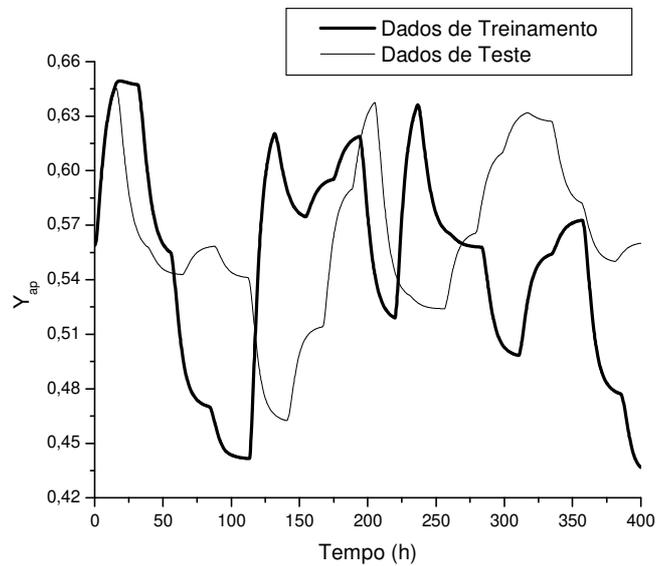


Figura VI.14. Dados de identificação da fração molar do metacrilato de metila no copolímero Y_{ap} (variável de saída).

Os resultados de simulação para os parâmetros do modelo nebuloso são apresentados na tabela VI.5.

Tabela VI.5. Parâmetros do modelo nebuloso para a fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}).

| Número de Regras = 4 | | | |
|---|-----------------------|----------------------------|----------------------------------|
| Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo | | | |
| $r_a = 0,50$ | $\eta = 1,00$ | $\bar{\varepsilon} = 0,50$ | $\underline{\varepsilon} = 0,15$ |
| Parte Antecedente | | | |
| Regra | Centro | Desvio Padrão | |
| 1 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $1,08 \cdot 10^{-1}$ | $1,71 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $1,85 \cdot 10^{-1}$ | $1,78 \cdot 10^{-1}$ | |
| 2 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $9,15 \cdot 10^{-1}$ | $1,71 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $1,04$ | $1,78 \cdot 10^{-1}$ | |
| 3 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $3,99 \cdot 10^{-1}$ | $1,71 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $6,87 \cdot 10^{-1}$ | $1,78 \cdot 10^{-1}$ | |
| 4 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $10,00 \cdot 10^{-1}$ | $1,71 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $6,42 \cdot 10^{-1}$ | $1,78 \cdot 10^{-1}$ | |

| Parte Conseqüente | | | |
|-------------------|-----------------|----------------|----------------|
| Regra i | a_1^i | a_2^i | b_1^i |
| $i = 1$ | $-1,11.10^{-2}$ | $4,08.10^{-2}$ | $9,74.10^{-1}$ |
| $i = 2$ | $2,38.10^{-5}$ | $1,24.10^{-2}$ | $9,88.10^{-1}$ |
| $i = 3$ | $-2,38.10^{-3}$ | $2,18.10^{-2}$ | $9,83.10^{-1}$ |
| $i = 4$ | $-1,84.10^{-2}$ | $5,61.10^{-3}$ | 1,04 |

A base de regras do modelo pode ser descrita como:

$$\text{SE } (u(k) \text{ é } A_1^1) \text{ e } (u(k-1) \text{ é } A_2^1) \text{ e } (y(k-1) \text{ é } B_1^1) \text{ ENTÃO } y^1(k+1) = a_1^1.u(k) + a_2^1.u(k-1) + b_1^1.y(k-1)$$

$$\text{SE } (u(k) \text{ é } A_1^2) \text{ e } (u(k-1) \text{ é } A_2^2) \text{ e } (y(k-1) \text{ é } B_1^2) \text{ ENTÃO } y^2(k+1) = a_1^2.u(k) + a_2^2.u(k-1) + b_1^2.y(k-1)$$

$$\text{SE } (u(k) \text{ é } A_1^3) \text{ e } (u(k-1) \text{ é } A_2^3) \text{ e } (y(k-1) \text{ é } B_1^3) \text{ ENTÃO } y^3(k+1) = a_1^3.u(k) + a_2^3.u(k-1) + b_1^3.y(k-1)$$

$$\text{SE } (u(k) \text{ é } A_1^4) \text{ e } (u(k-1) \text{ é } A_2^4) \text{ e } (y(k-1) \text{ é } B_1^4) \text{ ENTÃO } y^4(k+1) = a_1^4.u(k) + a_2^4.u(k-1) + b_1^4.y(k-1)$$

sendo A_j^i , B_h^i , nu e ny definidos como anteriormente para a malha 1; k é o instante considerado; u são entradas do modelo referentes à G_{a3}/G_{b3} ; y representa a entrada referente à Y_{ap} ; y^i é a saída para cada regra do modelo e a_j^i e b_h^i são parâmetros das funções conseqüentes do modelo referentes às variáveis G_{a3}/G_{b3} e Y_{ap} , respectivamente.

Os resultados de validação do modelo nebuloso, a partir do conjunto de dados de teste, estão apresentados na figura VI.15. Considerando o intervalo de simulação de 400 horas, obteve-se um erro quadrático médio de $4,247.10^{-4}$, sendo este de dimensão reduzida tendo como referência a ordem de grandeza da saída. Deste modo, e a partir da análise gráfica, observa-se que a estrutura de modelo proposta apresenta um enorme potencial para predição da saída do processo.

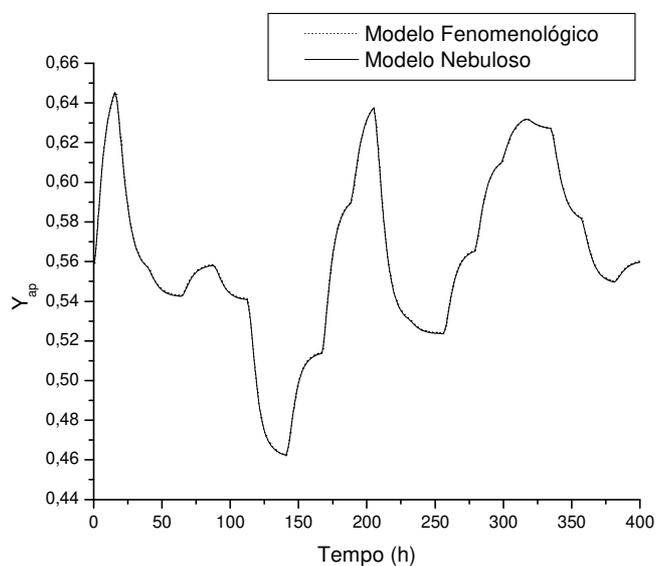


Figura VI.15. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - Y_{ap} .

Malha 3

Os dados de treinamento e teste para a temperatura da jaqueta são os mesmos apresentados na figura VI.10. A figura VI.16 a seguir mostra o comportamento do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para esses valores.

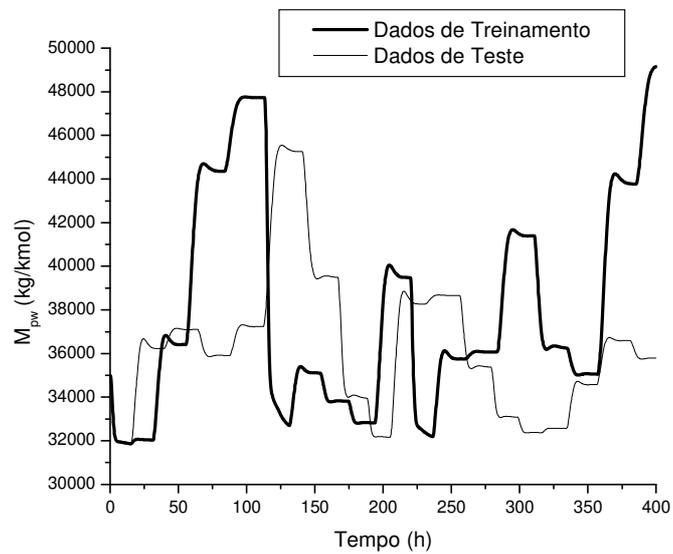


Figura VI.16. Dados de identificação do peso molecular ponderal médio M_{pw} (variável de saída).

Os resultados de simulação para os parâmetros do modelo nebuloso são apresentados na tabela VI.6.

Tabela VI.6. Parâmetros do modelo nebuloso para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}).

| Número de Regras = 3 | | | |
|---|----------------------|----------------------------|----------------------------------|
| Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo | | | |
| $r_a = 0,50$ | $\eta = 1,00$ | $\bar{\varepsilon} = 0,50$ | $\underline{\varepsilon} = 0,15$ |
| Parte Antecedente | | | |
| Regra | Centro | | Desvio Padrão |
| 1 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $1,08 \cdot 10^{-1}$ | | $1,71 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $7,35 \cdot 10^{-1}$ | | $1,60 \cdot 10^{-1}$ |
| 2 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $9,15 \cdot 10^{-1}$ | | $1,71 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $1,52 \cdot 10^{-2}$ | | $1,60 \cdot 10^{-1}$ |
| 3 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $3,99 \cdot 10^{-1}$ | | $1,71 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $2,46 \cdot 10^{-1}$ | | $1,60 \cdot 10^{-1}$ |
| Parte Conseqüente | | | |
| Regra i | a_1^i | a_2^i | b_1^i |
| $i = 1$ | $5,18 \cdot 10^{-2}$ | $-1,83 \cdot 10^{-2}$ | 1,00 |
| $i = 2$ | $1,90 \cdot 10^{-2}$ | $-1,82 \cdot 10^{-2}$ | $8,96 \cdot 10^{-1}$ |
| $i = 3$ | $2,53 \cdot 10^{-4}$ | $1,03 \cdot 10^{-2}$ | $9,94 \cdot 10^{-1}$ |

A base de regras do modelo pode então ser descrita como:

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^1) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^1) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^1) \mathbf{ENTÃO} \quad y^1(k+1) = a_1^1 \cdot u(k) + a_2^1 \cdot u(k-1) + b_1^1 \cdot y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^2) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^2) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^2) \mathbf{ENTÃO} \quad y^2(k+1) = a_1^2 \cdot u(k) + a_2^2 \cdot u(k-1) + b_1^2 \cdot y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^3) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^3) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^3) \mathbf{ENTÃO} \quad y^3(k+1) = a_1^3 \cdot u(k) + a_2^3 \cdot u(k-1) + b_1^3 \cdot y(k-1)$$

sendo A_j^i , B_h^i , nu e ny definidos como anteriormente para a malha 1; k é o instante considerado; u são entradas do modelo referentes à T_j ; y representa a entrada referente à M_{pw} ; y^i é a saída para cada regra do modelo e a_j^i e b_h^i são parâmetros das funções conseqüentes do modelo referentes às variáveis T_j e M_{pw} , respectivamente.

Para esta malha, é importante destacar a ocorrência de dificuldades na aplicação do método dos mínimos quadrados, causadas pelo mau condicionamento da matriz de obtenção dos parâmetros das funções conseqüentes das regras no processo de inversão. Os problemas foram causados pelo uso de valores inadequados na frequência de excitação da temperatura da jaqueta (variável de entrada), e foram solucionados por modificação nesses dados, levando em consideração limitações nos valores máximos de frequência de modo a garantir a modelagem dos valores estacionários conforme já discutido no capítulo IV.

Os resultados de validação do modelo nebuloso, a partir do conjunto de dados de teste, estão apresentados na figura VI.17. Considerando o intervalo de simulação de 400 horas, obteve-se um erro quadrático médio de 90,169 kg/kmol, sendo este de ordem reduzida tendo como referência a ordem de grandeza da saída. Desta maneira, e a partir da análise gráfica, observa-se que a estrutura de modelo proposta possui grande capacidade para predição da saída do processo.

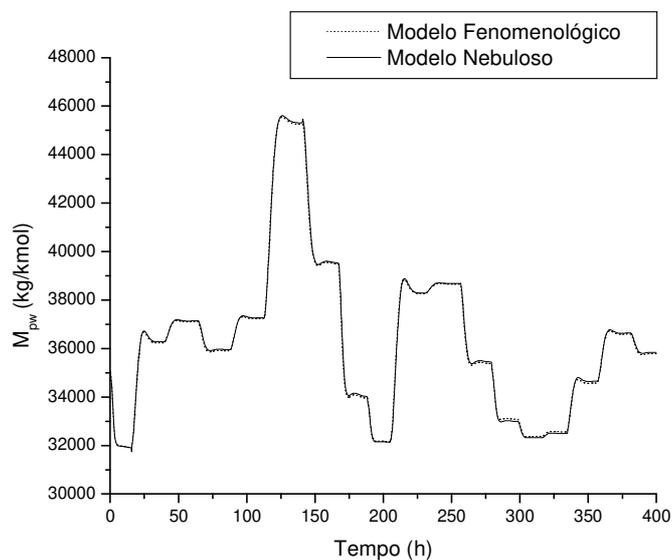


Figura VI.17. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - M_{pw} .

Malha 4

Os dados de treinamento e teste para a temperatura da jaqueta são os mesmos apresentados na figura VI.10. A figura VI.18 a seguir mostra o comportamento da temperatura do reator (T_r) para esses valores.

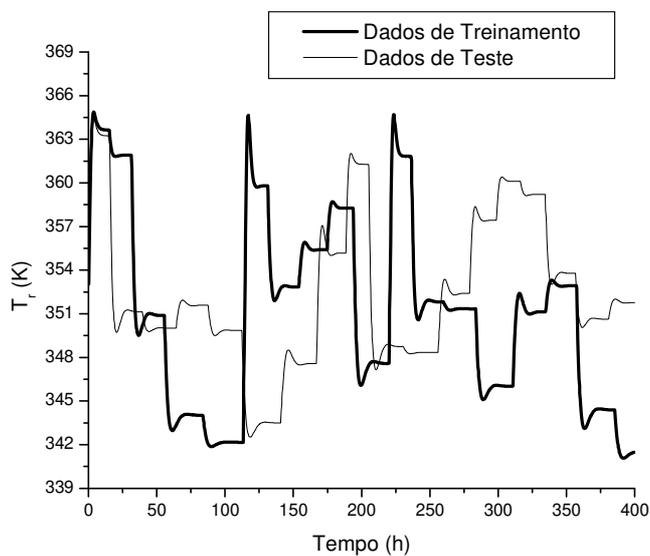


Figura VI.18. Dados de identificação da temperatura do reator T_r (variável de saída).

Os resultados de simulação para os parâmetros do modelo nebuloso são apresentados na tabela VI.7.

Tabela VI.7. Parâmetros do modelo nebuloso para a temperatura do reator (T_r).

| Número de Regras = 3 | | | |
|---|-----------------------|----------------------------|----------------------------------|
| Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo | | | |
| $r_a = 0,50$ | $\eta = 1,00$ | $\bar{\varepsilon} = 0,50$ | $\underline{\varepsilon} = 0,15$ |
| Parte Antecedente | | | |
| Regra | Centro | | Desvio Padrão |
| 1 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $1,08 \cdot 10^{-1}$ | | $1,71 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $1,73 \cdot 10^{-1}$ | | $1,56 \cdot 10^{-1}$ |
| 2 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $9,15 \cdot 10^{-1}$ | | $1,71 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $9,10 \cdot 10^{-1}$ | | $1,56 \cdot 10^{-1}$ |
| 3 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $3,99 \cdot 10^{-1}$ | | $1,71 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $4,56 \cdot 10^{-1}$ | | $1,56 \cdot 10^{-1}$ |
| Parte Conseqüente | | | |
| Regra i | a_1^i | a_2^i | b_1^i |
| $i = 1$ | $-6,72 \cdot 10^{-2}$ | $1,72 \cdot 10^{-1}$ | $9,36 \cdot 10^{-1}$ |
| $i = 2$ | $9,42 \cdot 10^{-2}$ | $8,45 \cdot 10^{-2}$ | $8,15 \cdot 10^{-1}$ |
| $i = 3$ | $1,15 \cdot 10^{-1}$ | $7,78 \cdot 10^{-2}$ | $8,26 \cdot 10^{-1}$ |

A base de regras do modelo pode ser descrita da seguinte forma:

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^1) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^1) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^1) \mathbf{ENTÃO} \ y^1(k+1) = a_1^1.u(k) + a_2^1.u(k-1) + b_1^1.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^2) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^2) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^2) \mathbf{ENTÃO} \ y^2(k+1) = a_1^2.u(k) + a_2^2.u(k-1) + b_1^2.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^3) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^3) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^3) \mathbf{ENTÃO} \ y^3(k+1) = a_1^3.u(k) + a_2^3.u(k-1) + b_1^3.y(k-1)$$

sendo A_j^i , B_h^i , nu e ny definidos como anteriormente para a malha 1; k é o instante considerado; u são entradas do modelo referentes à T_j ; y representa a entrada referente à T_r ; y^i é a saída para cada regra do modelo e a_j^i e b_h^i são parâmetros das funções conseqüentes do modelo referentes às variáveis T_j e T_r , respectivamente.

Os resultados de validação do modelo nebuloso, a partir do conjunto de dados de teste, estão apresentados na figura VI.19. Considerando o intervalo de simulação de 400 horas, obteve-se um erro quadrático médio de 0,128 K, sendo este muito reduzido tendo como referência a ordem de grandeza da saída. Desta maneira, e a partir da análise gráfica, observa-se que o modelo proposto possui grande potencial de predição da saída do processo.

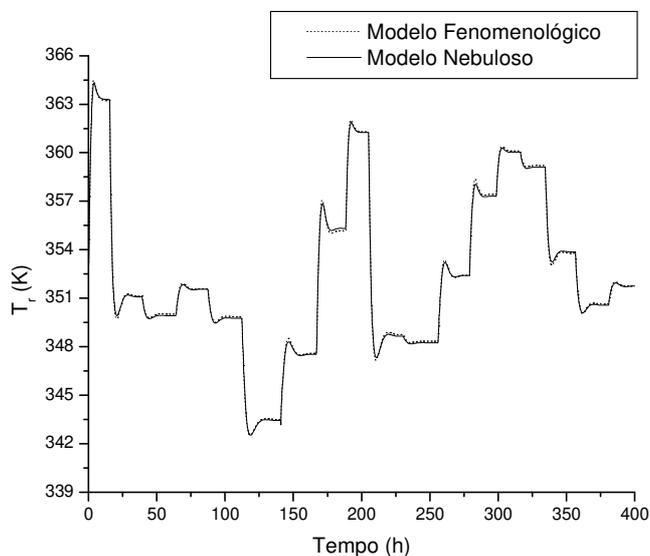


Figura VI.19. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - T_r .

VI.7 RESULTADOS DE CONTROLE

Nesta seção, são apresentados os resultados de simulação para os controladores preditivos monovariáveis híbrido e DMC. Inicialmente, um algoritmo de controle por matriz dinâmica para sistemas SISO foi desenvolvido em linguagem de programação FORTRAN 90. Posteriormente, a estrutura de controle híbrida foi gerada a partir dos modelos nebulosos funcionais descritos na seção VI.6, os quais foram inseridos na estrutura interna do controle DMC em substituição ao seu respectivo modelo de convolução, conforme descrito no capítulo V. Ambas as configurações de controle foram acopladas ao *software* de simulação do processo em “malha aberta” descrito na seção VI.4. O critério da Integral do valor Absoluto dos Erros – IAE (equação V.21) é utilizado para ajuste dos parâmetros dos controladores, juntamente com a análise do comportamento dinâmico da variável manipulada durante a ação de controle, buscando-se o melhor conjunto de ações.

As estratégias híbrida e DMC foram aplicadas para as quatro malhas de controle anteriormente definidas e são comparadas entre si para os problemas regulatório e servo. Ao final desta seção, é apresentada ainda uma análise da influência do fator de supressão no desempenho dos controladores.

VI.7.1 Controle Regulatório

Para análise do problema regulatório, foi considerada uma perturbação na vazão molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total no instante inicial. Esta é uma possível perturbação para o processo de acordo com Congalidis et al. (1989) e Maner e Doyle III (1997). A seguir, são apresentados os resultados de controle regulatório para as quatro malhas.

Malha 1

A tabela VI.8 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle regulatório da taxa de polimerização, assim como o valor do IAE.

Tabela VI.8. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório da taxa de polimerização (G_{pi}).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|---------------|----------------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 48 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 2 | 2 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 0,001 | 0,024 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,002 | 0,550 |
| Intervalo de ação do controlador | 0,25 h | 0,25 h |
| IAE (kg/h) | 6,9458 | 12,7861 |

A figura VI.20 apresenta uma análise gráfica do comportamento da taxa de produção de polímero (G_{pi}) sob ação de controle no tempo de 60 horas, enquanto a figura VI.21 mostra o comportamento da temperatura da jaqueta do reator T_j (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle. Foi considerado um *setpoint* de 23,3 kg/h para a variável controlada conforme definido na tabela VI.1.

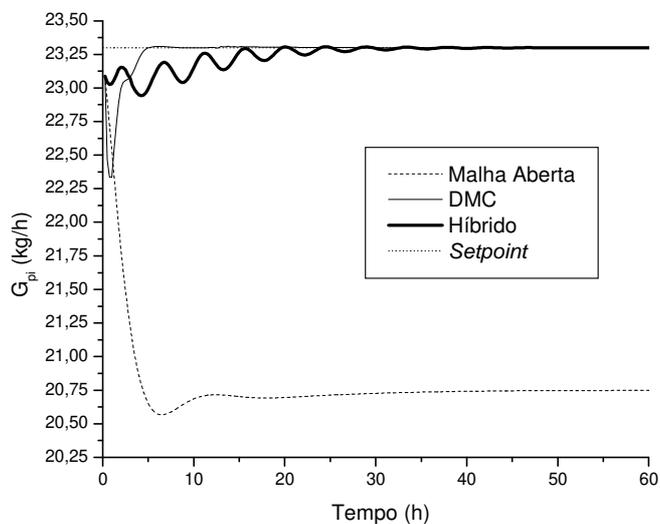


Figura VI.20. Resultados do controle regulatório para a taxa de produção de polímero (G_{pi}).

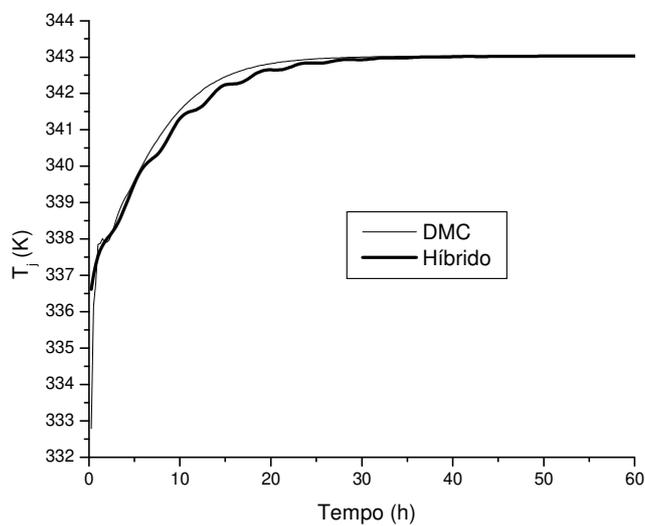


Figura VI.21. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle regulatório da taxa de produção de polímero.

Na tabela VI.8, observa-se que os valores para NP e NC são idênticos para ambos os controladores. O valor de α para o controle híbrido é maior que para o DMC. Isto também é verdadeiro para o f , indicando que o controlador híbrido necessita de um amortecimento maior. Também a tabela VI.8 apresenta que o IAE para o controlador híbrido é maior que para o DMC. No entanto, a figura VI.20 mostra que o controlador DMC promove um desvio máximo maior que àquele proveniente da ação híbrida, apesar de apresentar um intervalo de resposta menor. Além disso, o controle híbrido provoca um comportamento inicial levemente oscilatório na variável controlada até estabilizar no valor definido pelo *setpoint*.

Analisando agora a figura VI.21, é observado um comportamento similar da variável manipulada para as duas estratégias de controle consideradas.

Malha 2

A tabela VI.9 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle regulatório da fração molar do metacrilato de metila no copolímero, assim como o valor do IAE.

Tabela VI.9. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|--------|---------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 111 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 5 | 5 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 2 |
| Fator de supressão (f) | 0,0031 | 0,0230 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,001 | 0,954 |
| Intervalo de ação do controlador | 0,25 h | 0,25 h |
| IAE | 0,1208 | 0,0406 |

A figura VI.22 apresenta uma análise gráfica do comportamento da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) sob ação de controle no tempo de 60 horas, enquanto a figura VI.23 mostra o comportamento da razão entre as vazões molares do metacrilato de metila e acetato de vinila na alimentação do reator G_{a3}/G_{b3} (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle. Foi considerado um *setpoint* de 0,5591 para a variável controlada conforme definido na tabela VI.1.

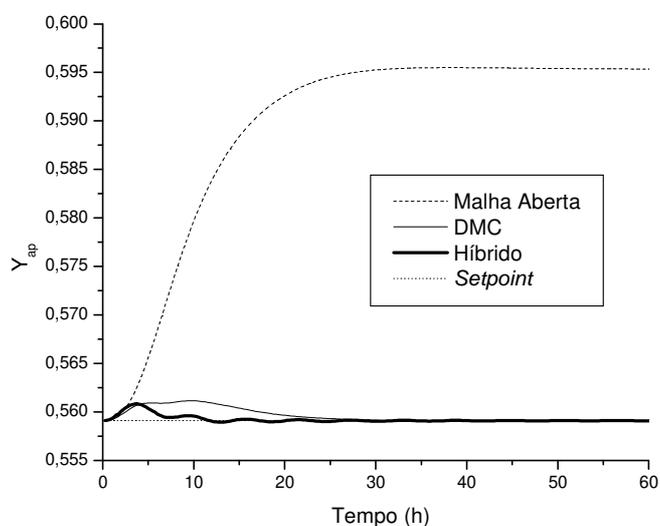


Figura VI.22. Resultados do controle regulatório para a fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}).

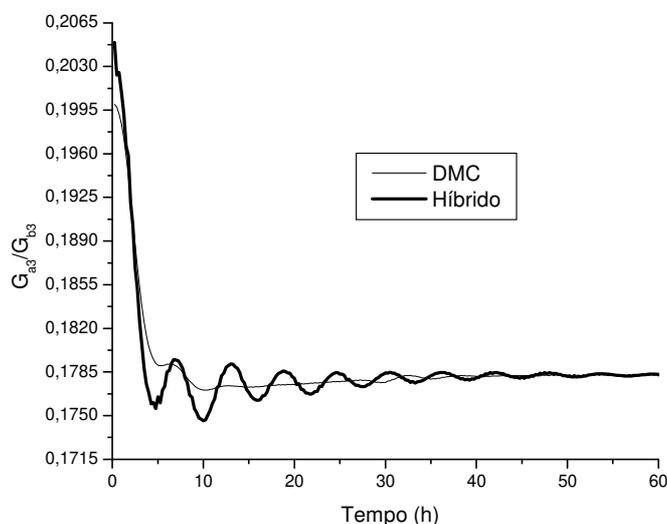


Figura VI.23. Comportamento da variável manipulada G_{a3}/G_{b3} resultante do controle regulatório da fração molar do metacrilato de metila no copolímero.

Na tabela VI.9, observa-se que os valores para NP são idênticos para os dois controladores. No entanto, há diferenças quanto ao horizonte de controle. O valor de α para o controle híbrido é bem maior que para o DMC, sendo praticamente os limites superior e inferior do parâmetro considerado, respectivamente. O controlador híbrido também apresenta um fator de supressão maior que o DMC, indicando a necessidade de um maior amortecimento. A tabela VI.9 também exibe um menor valor do IAE do controlador híbrido que para o DMC. Além disso, a figura VI.22 mostra que o controlador híbrido promove um tempo de resposta menor da variável controlada que àquele proveniente da ação DMC.

Analisando agora a figura VI.23, é observado um comportamento oscilatório inicial da variável manipulada decorrente da ação híbrida, estabilizando no tempo de aproximadamente 40 horas.

Malha 3

A tabela VI.10 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle regulatório do peso molecular ponderal médio, assim como o valor do IAE.

Tabela VI.10 Parâmetros dos controladores para o controle regulatório do peso molecular ponderal médio (M_{pw}).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|----------|----------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | -1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 26 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 9 | 9 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 1,50 | 0,07 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,01 | 0,98 |
| Intervalo de ação do controlador | 0,25 h | 0,25 h |
| IAE (kg/kmol) | 23803,45 | 36359,00 |

A figura VI.24 apresenta uma análise gráfica do comportamento do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) sob ação de controle no tempo de 100 horas, enquanto a figura VI.25 mostra o comportamento da temperatura da jaqueta do reator T_j (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle. Foi considerado um *setpoint* de 34994,7 kg/kmol para a variável controlada conforme definido na tabela VI.1.

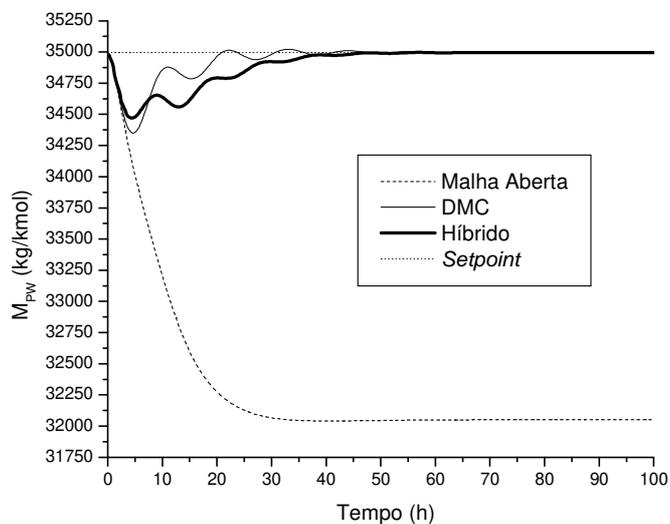


Figura VI.24. Resultados do controle regulatório para o peso molecular ponderal médio (M_{pw}).

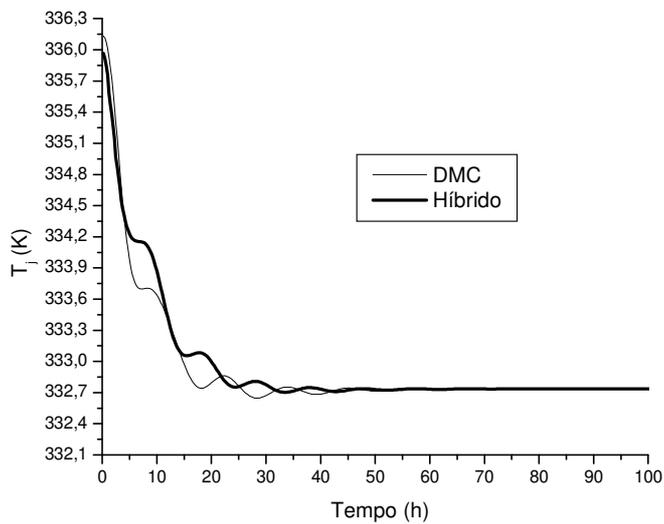


Figura VI.25. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle regulatório do peso molecular ponderal médio.

Na tabela VI.10, observa-se que os valores para NP e NC são idênticos para os controladores analisados. O valor de α para o controle híbrido é bem maior que para o DMC, sendo praticamente os limites superior e inferior do parâmetro considerado, respectivamente. O controlador DMC apresenta um fator de supressão bem maior que o híbrido, indicando a maior necessidade de amortecimento daquela estrutura para esta malha. A tabela VI.10 também mostra que o IAE para o controlador híbrido é maior que para o DMC. No entanto, a figura VI.24 mostra que o controlador DMC promove um desvio máximo maior que àquele proveniente da ação híbrida, apesar de apresentar um intervalo de resposta menor. Além disso, o controle DMC provoca um comportamento inicial oscilatório na variável controlada levemente maior que o promovido pelo controle híbrido.

Analisando agora a figura VI.25, é observado um comportamento similar da variável manipulada para as duas estratégias de controle consideradas.

Malha 4

A tabela VI.11 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle regulatório da temperatura do reator, assim como o valor do IAE.

Tabela VI.11 Parâmetros dos controladores para o controle regulatório da temperatura do reator (T_r).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|--------|---------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 4 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 2 | 2 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 0,001 | 0,169 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,0001 | 0,0010 |
| Intervalo de ação do controlador | 0,25 h | 0,25 h |
| IAE (K) | 1,7438 | 0,7599 |

A figura VI.26 apresenta uma análise gráfica do comportamento da temperatura do reator (T_r) sob ação de controle no tempo de 30 horas, enquanto a figura VI.27 mostra o comportamento da temperatura da jaqueta do reator T_j (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle. Foi considerado um *setpoint* de 353,02 K para a variável controlada conforme definido na tabela VI.1.

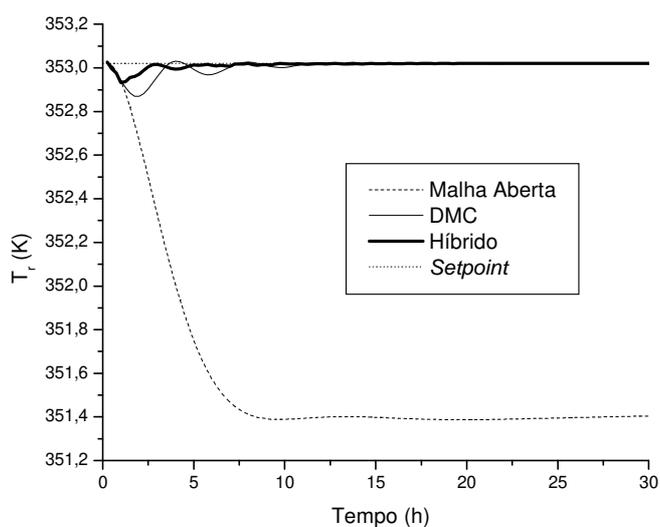


Figura VI.26. Resultados do controle regulatório para a temperatura do reator (T_r).

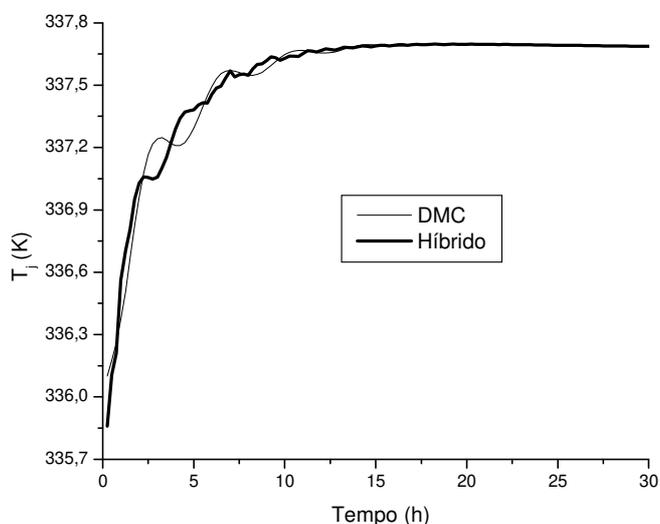


Figura VI.27. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle regulatório da temperatura do reator.

Na tabela VI.11, observa-se que os valores para NP e NC são idênticos para ambos os controladores. O valor de α para o controle híbrido é maior que para o DMC. Isto é verdadeiro também para o f , indicando que o controlador híbrido necessita de um maior amortecimento. A tabela VI.11 também mostra que o IAE para o controlador híbrido é bem menor que para o DMC. Além disso, a figura VI.26 mostra que o controlador híbrido promove um tempo de resposta e um desvio máximo menores da variável controlada que àquele proveniente da ação DMC.

Analisando agora a figura VI.27, é observado um comportamento similar da variável manipulada para as duas estratégias de controle consideradas.

VI.7.2 Controle Servo

Os controladores também foram analisados para situações de mudanças no *setpoint*. A seguir, são apresentados os resultados de controle para as quatro malhas.

Malha 1

A tabela VI.12 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle servo da taxa de polimerização, assim como o valor do IAE.

Tabela VI.12. Parâmetros dos controladores para o controle servo da taxa de polimerização (G_{pi}).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|----------------|-----------------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 48 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 2 | 2 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 1,50 | 0,33 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,002 | 0,550 |
| Intervalo de ação do controlador | 0,25 h | 0,25 h |
| IAE (kg/h) | 99,2446 | 159,6993 |

A figura VI.28 apresenta uma análise gráfica do comportamento da taxa de produção de polímero (G_{pi}) sob ação de controle no intervalo de 400 horas, enquanto a figura VI.29 mostra o comportamento da temperatura da jaqueta do reator T_j (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle.

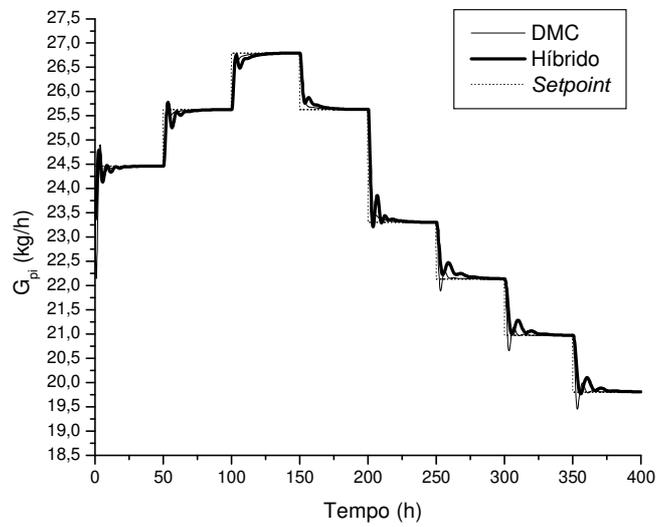


Figura VI.28. Ação de controle para mudanças no *setpoint* da taxa de produção de polímero (G_{pi}).

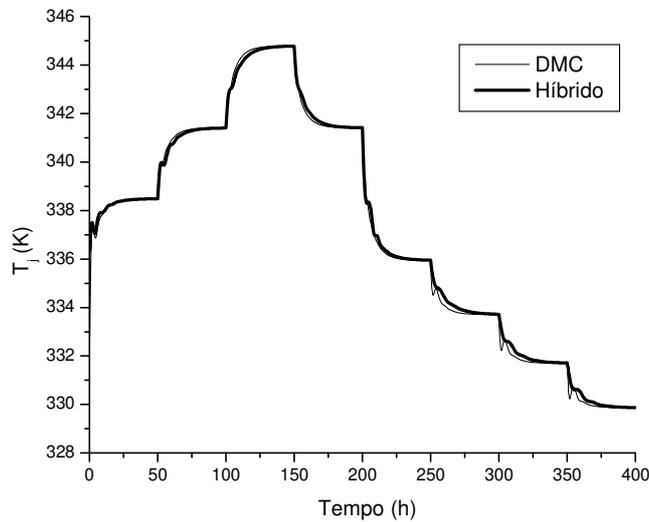


Figura VI.29. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle servo da taxa de produção de polímero.

Na tabela VI.12, observa-se que os valores para NP e NC são idênticos para ambos os controladores. O valor de α para o controle híbrido é maior que para o DMC. O contrário ocorre para o f , indicando que o controlador DMC necessita de um amortecimento maior. Também a tabela VI.12 apresenta que o IAE para o controlador híbrido é maior que para o DMC. No entanto, a figura VI.28 mostra que a variável controlada apresenta comportamento semelhante para os dois controladores.

Analisando agora a figura VI.29, são observados comportamentos praticamente idênticos da variável manipulada para as duas estratégias de controle consideradas.

Malha 2

A tabela VI.13 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle servo da fração molar do metacrilato de metila no copolímero, assim como o valor do IAE.

Tabela VI.13. Parâmetros dos controladores para o controle servo da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|---------|---------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 111 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 5 | 5 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 2 |
| Fator de supressão (f) | 2,5 | 0,3 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,001 | 0,954 |
| Intervalo de ação do controlador | 0,25 h | 0,25 h |
| IAE | 11,9760 | 10,9537 |

A figura VI.30 apresenta uma análise gráfica do comportamento da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}) sob ação de controle no intervalo de 400 horas, enquanto a figura VI.31 mostra o comportamento da razão entre as vazões molares do metacrilato de metila e acetato de vinila na alimentação do reator G_{a3}/G_{b3} (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle.

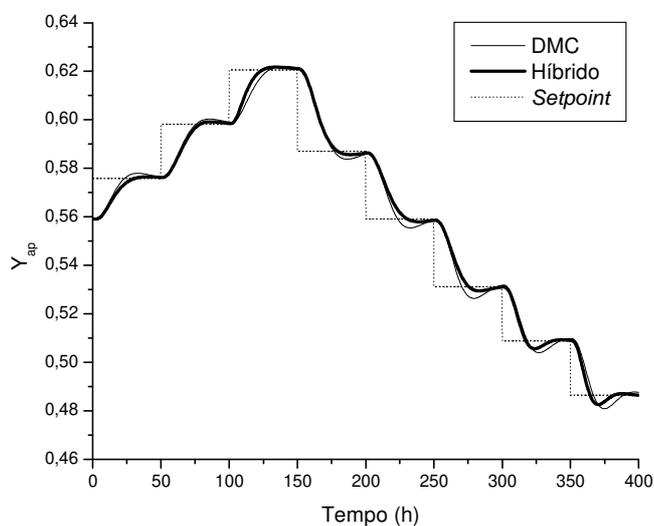


Figura VI.30. Ação de controle para mudanças no *setpoint* da fração molar do metacrilato de metila no copolímero (Y_{ap}).

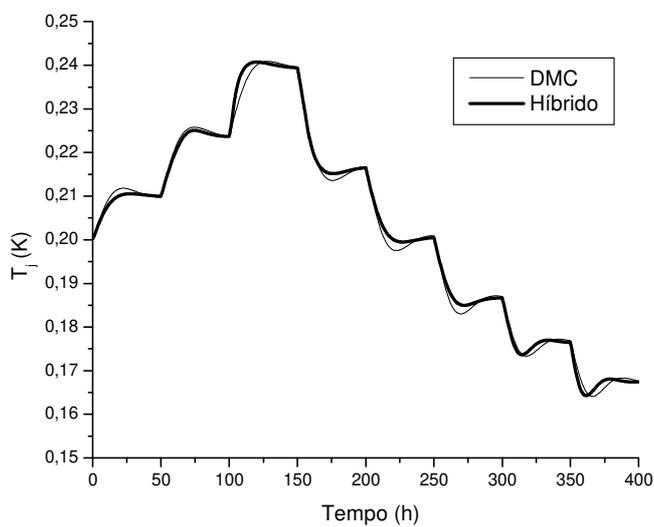


Figura VI.31. Comportamento da variável manipulada G_{a3}/G_{b3} resultante do controle servo da fração molar do metacrilato de metila no copolímero.

Na tabela VI.13, observa-se que os valores para NP são idênticos para os dois controladores. No entanto, estes diferem quanto ao horizonte de controle. O valor de α para o controle híbrido é bem maior que para o DMC, sendo praticamente os limites superior e inferior do parâmetro considerado, respectivamente. O controlador DMC apresenta um fator de supressão muito maior que o referente ao controlador híbrido, significando uma necessidade de amortecimento bem maior para aquele. A tabela VI.13 também mostra um menor valor do IAE do controlador híbrido que para o DMC. Além disso, a figura VI.30 mostra que o controlador híbrido promove uma resposta com desvios menores do valor desejado que àquela proveniente da ação DMC.

Analisando agora a figura VI.31, são observados comportamentos muito semelhantes da variável manipulada para as duas estratégias de controle consideradas, com menores desvios para a ação provocada pelo controlador híbrido.

Malha 3

A tabela VI.14 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle servo do peso molecular ponderal médio, assim como o valor do IAE.

Tabela VI.14 Parâmetros dos controladores para o controle servo do peso molecular ponderal médio (M_{pw}).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|------------------|------------------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | -1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 26 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 9 | 9 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 4,000 | 0,075 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,01 | 0,98 |
| Intervalo de ação do controlador | 0,25 h | 0,25 h |
| IAE (kg/kmol) | 209179,70 | 315583,35 |

A figura VI.32 apresenta uma análise gráfica do comportamento do peso molecular ponderal médio (M_{pw}) sob ação de controle no intervalo de 400 horas, enquanto a figura VI.33 mostra o comportamento da temperatura da jaqueta do reator T_j (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle.

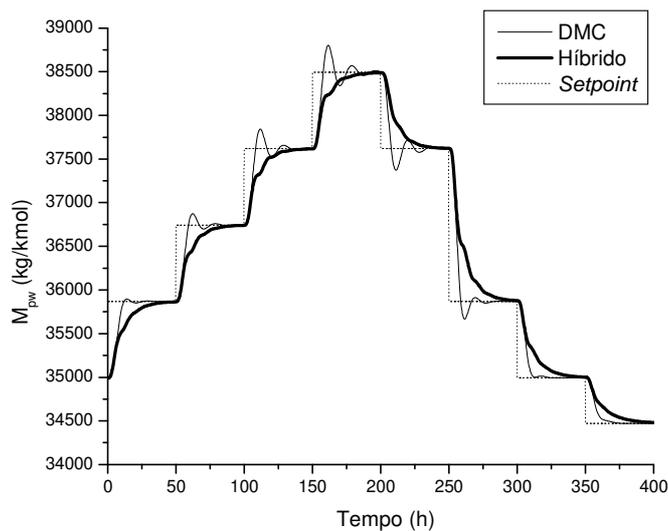


Figura VI.32. Ação de controle para mudanças no *setpoint* do peso molecular ponderal médio (M_{pw}).

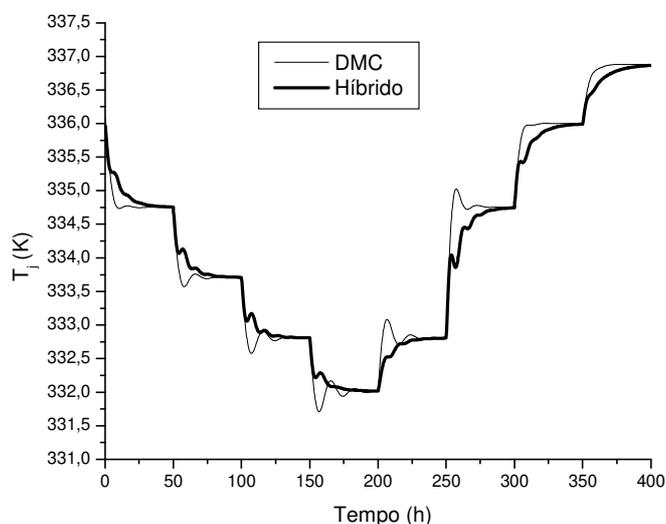


Figura VI.33. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle servo do peso molecular ponderal médio.

Na tabela VI.14, observa-se que os valores para NP e NC são idênticos para os controladores analisados. O valor de α para o controle híbrido é bem maior que para o DMC, sendo praticamente os limites superior e inferior do parâmetro considerado, respectivamente. O controlador DMC apresenta um fator de supressão bem maior que o híbrido, indicando a maior necessidade de amortecimento daquela estrutura para esta malha, o que também ocorre para o problema regulatório. A tabela VI.14 mostra também que o IAE para o controlador híbrido é maior que para o DMC. No entanto, a figura VI.32 mostra que o controlador DMC provoca oscilações iniciais na variável controlada até estabilizar no *setpoint*, apesar de apresentar um tempo de resposta menor. Já para o controlador híbrido, o comportamento da variável controlada é mais suave, sem a presença de movimentos oscilatórios. Essas mesmas análises são válidas para o comportamento da variável manipulada, conforme apresentado na figura VI.33.

Malha 4

A tabela VI.15 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle servo da temperatura do reator, assim como o valor do IAE.

Tabela VI.15 Parâmetros dos controladores para o controle servo da temperatura do reator (T_r).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|--------|---------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 4 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 2 | 2 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 2,0 | 1,1 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,0001 | 0,0010 |
| Intervalo de ação do controlador | 0,25 h | 0,25 h |
| IAE (K) | 365,42 | 380,92 |

A figura VI.34 apresenta uma análise gráfica do comportamento da temperatura do reator (T_r) sob ação de controle no intervalo de 400 horas, enquanto a figura VI.35 mostra o comportamento da temperatura da jaqueta do reator T_j (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle.

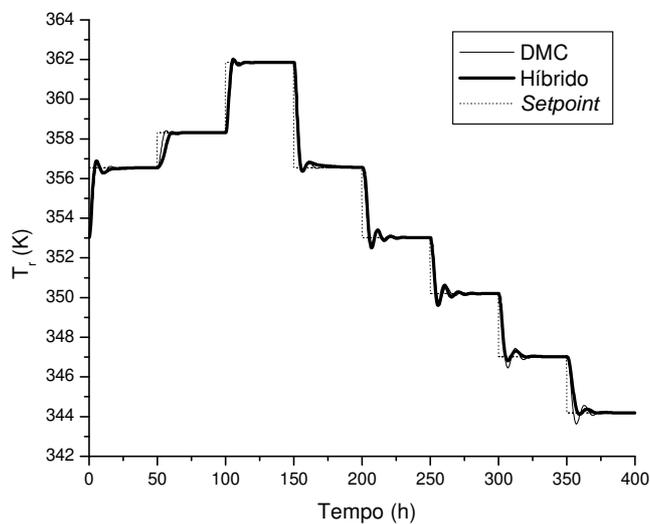


Figura VI.34. Ação de controle para mudanças no *setpoint* da temperatura do reator (T_r).

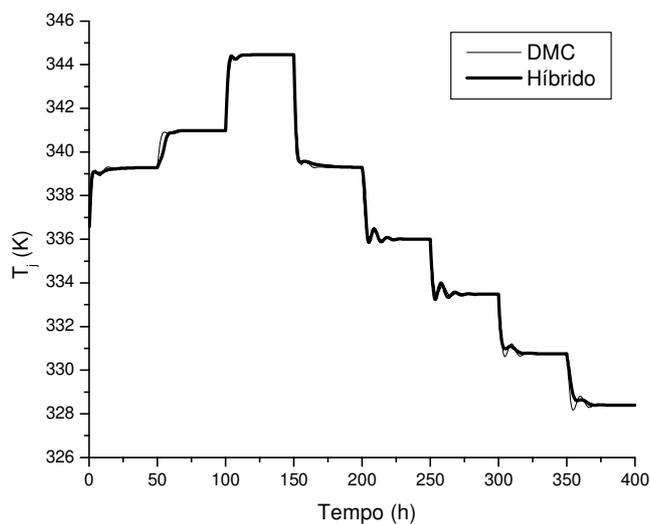


Figura VI.35. Comportamento da variável manipulada T_j resultante do controle servo da temperatura do reator.

Na tabela VI.15, observa-se que os valores para NP e NC são idênticos para ambos os controladores. Os valores do parâmetro de trajetória α são baixos para as duas estratégias, sendo levemente maior para o controlador híbrido. Já o fator de supressão f é maior para o controle DMC, indicando uma maior necessidade de amortecimento da variável controlada para esta estrutura. A tabela VI.15 também mostra que o IAE para os controladores híbrido e DMC são praticamente iguais, apresentando resultados satisfatórios em ambos os casos, o que é confirmado a partir da análise da figura VI.34.

Analisando agora a figura VI.35, é observado um comportamento praticamente idêntico da variável manipulada para as duas estratégias de controle consideradas.

VI.7.3 Influência do Fator de Supressão no Desempenho dos Controladores

Como já descrito, os resultados de controle apresentados anteriormente são provenientes do ajuste dos parâmetros dos controladores através da análise conjunta do IAE com o comportamento da variável manipulada durante a ação de controle, buscando-se uma condição que satisfizesse as duas exigências. Entretanto, é importante enfatizar que melhores resultados de controle referentes à resposta da variável controlada podem ser obtidos, mas a custo de maiores oscilações na variável manipulada. Por outro lado, os comportamentos das variáveis manipuladas podem ser ainda mais suavizados, porém tendo como conseqüências ações de controle mais lentas, causando assim maiores erros na variável controlada em relação a seu valor desejado. Tais comportamentos são influenciados mais necessariamente pelo fator de supressão f , de modo que as figuras VI.36 e VI.37 a seguir demonstram essas afirmações apresentando, como um exemplo ilustrativo, o efeito do valor de f no peso molecular ponderal médio (M_{pw}) para o controle regulatório, sendo considerada uma perturbação na vazão molar de inibidor de 4 partes por 1000 da vazão molar total no instante inicial. A aplicação do controlador híbrido é analisada, com os seguintes valores para os demais parâmetros: NP = 9, NC = 1 e $\alpha = 0,98$. Foi considerado um intervalo de ação do controlador de 0,25 horas.

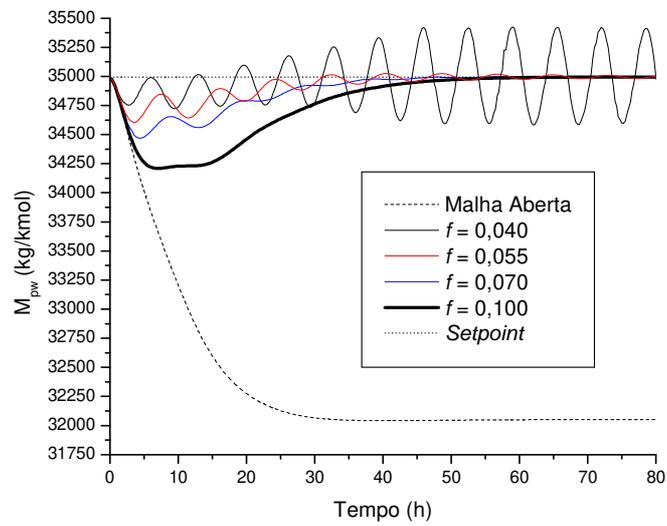


Figura VI.36. Influência do fator de supressão f no peso molecular ponderal médio M_{pw} (variável controlada).

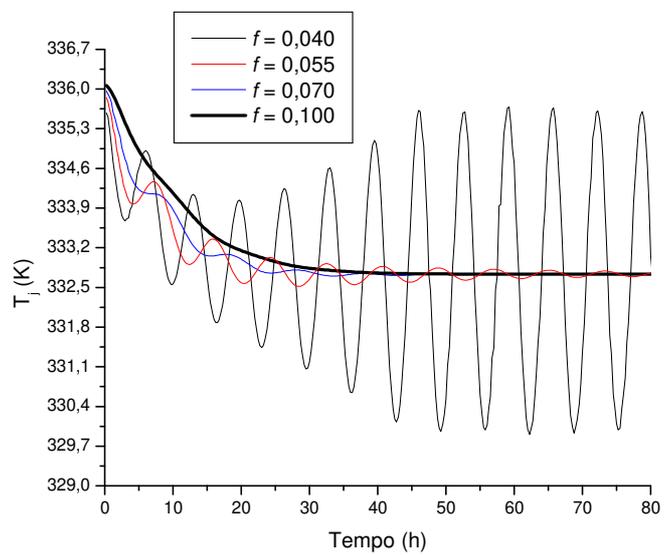


Figura VI.37. Influência do fator de supressão f na temperatura da jaqueta T_j (variável manipulada).

Como observado nas figuras VI.36 e VI.37, com o incremento do valor do fator de supressão f , aumenta-se o amortecimento do sistema, ou seja, cresce a suavidade no comportamento da variável manipulada, o que traz como conseqüências ações de controle mais lentas e contínuas, com maiores desvios do valor desejado. Por outro lado, o decréscimo no valor de f promove o crescimento das oscilações do sistema, aumentando a velocidade de resposta e diminuindo o desvio do *setpoint* até certo ponto, onde a partir deste a malha de controle perde estabilidade. A condição para $f = 0,04$ representa uma situação de instabilização.

VI.8 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Este capítulo apresentou os resultados de simulação referentes à aplicação de uma estratégia de controle híbrida *fuzzy*-preditiva 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, tal como a metodologia aqui descrita. Quatro malhas de controle foram consideradas para implementação da nova proposta, sendo todas as quatro analisadas para os problemas regulatório e servo. Os controladores híbridos foram gerados a partir do desenvolvimento de modelos dinâmicos nebulosos tipo Takagi-Sugeno, e tiveram os seus desempenhos comparados ao controle preditivo DMC convencional. Os resultados de simulação demonstraram o grande potencial da abordagem desenvolvida no campo do controle avançado, apresentando-a como uma nova alternativa de projeto de controladores baseando-se em dados dinâmicos do processo.

CAPÍTULO VII
ESTUDO DE CASO 2: COPOLIMERIZAÇÃO
DO ETENO/1-BUTENO COM CATALISADOR
ZIEGLER-NATTA

VII.1 INTRODUÇÃO

O segundo caso de estudo considerado neste trabalho para implementação dos desenvolvimentos propostos corresponde à reação industrial de copolimerização do eteno/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).

Inicialmente, na seção VII.2, é realizada uma descrição detalhada do processo. 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 determinístico 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 para geração de dados dinâmicos e implementação do sistema de controle proposto. 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. Posteriormente, na seção VII.6, modelos dinâmicos nebulosos tipo Takagi-Sugeno são construídos para duas variáveis de saída, sendo discutidos os desenvolvimentos referentes à identificação de dados, além das etapas de treinamento e validação dos modelos. Finalmente, a seção VII.7 apresenta os resultados de simulação para o controlador híbrido preditivo monovariável resultante da inserção dos modelos nebulosos na estrutura interna do controle DMC. Aquele novo controlador preditivo tem seu desempenho comparado ao DMC convencional para os problemas regulatório e 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

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.

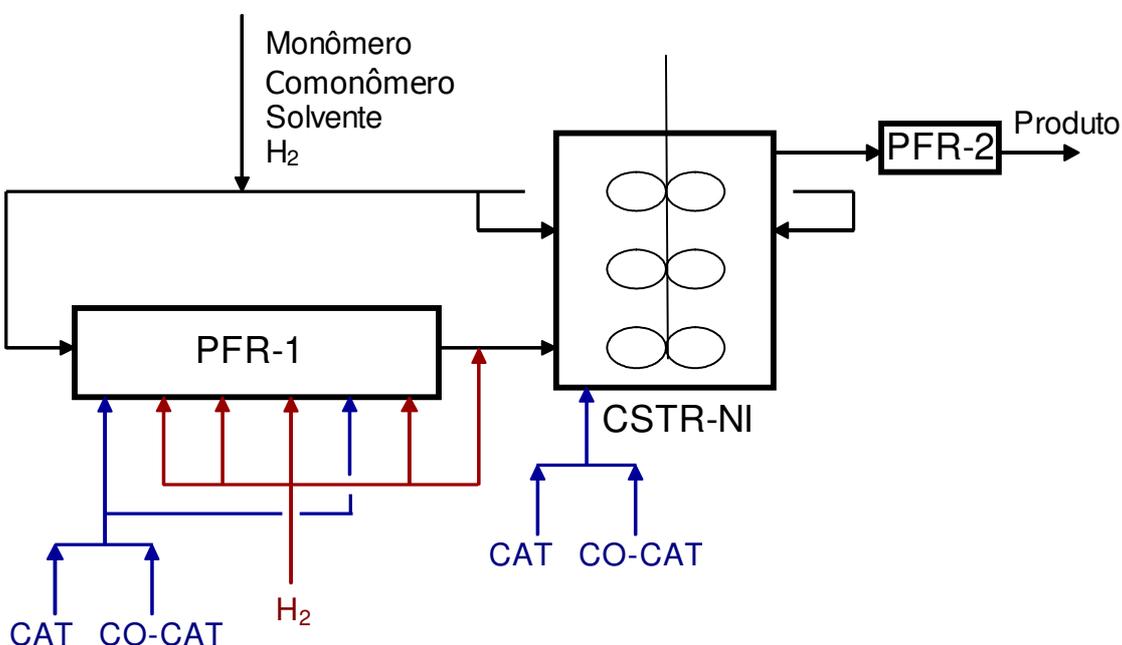


Figura VII.1. Configuração básica do processo de copolimerização do eteno/1-buteno (EMBIURUÇU et al., 2000).

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 (H_2) 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 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 neste trabalho para desenvolvimento dos modelos dinâmicos nebulosos e implementação da estratégia de controle híbrida *fuzzy*-preditiva proposta. 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.

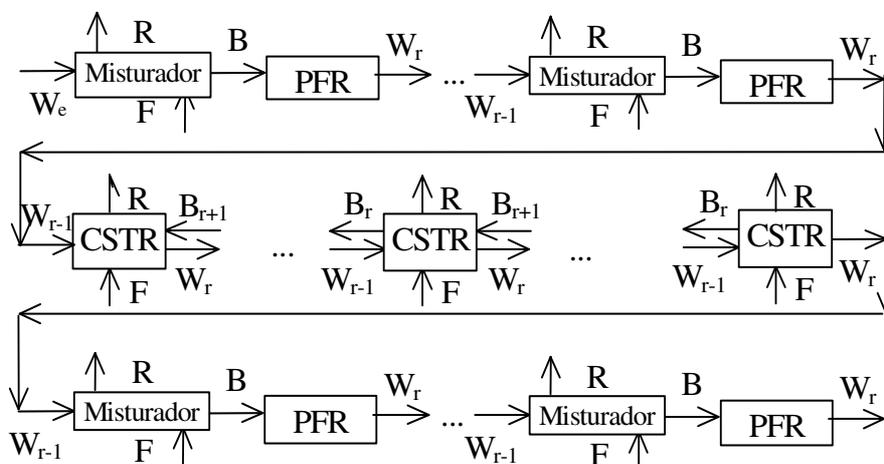


Figura VII.2. Representação do processo de copolimerização do eteno/1-buteno (EMBIRUÇU, 1998).

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/1-buteno.

| <i>Entradas</i> | <i>Valores (Adimensionais)</i> |
|---|--------------------------------|
| Pressão de entrada | 1,25 |
| Rotação do agitador do CSTR-NI | 0,80 |
| <i>Alimentação Principal</i> | |
| Vazão | 9,306 |
| % em massa de eteno | 2,48 |
| Razão mássica 1-buteno/eteno | 1,8 |
| Concentração de hidrogênio | 1,250 |
| Temperatura | 0,17 |
| <i>Alimentação da Zona 1 (base) do CSTR-NI</i> | |
| Vazão | 0,001 |
| Concentração de catalisador | 1,42 |
| Razão co-catalisador/catalisador | 1,36 |
| Temperatura | 1,50 |
| <i>Alimentação da zona 4 do CSTR-NI</i> | |
| Vazão | 1,034 |
| % em massa de eteno | 0,28 |
| Razão mássica 1-buteno/eteno | 0,2 |
| Concentração de hidrogênio | 0 |
| Temperatura | 0,33 |
| <i>Saídas</i> | |
| Conversão | $x = 19,2576$ |
| Taxa de produção de polímero | $W_U = 2,196$ |
| Temperatura | $T_s = 1,68$ |
| Peso molecular numérico médio | $M_n = 2,5746$ |
| Peso molecular ponderal médio | $M_w = 6,5012$ |
| Polidispersão | $PD = 0,8400$ |
| MI – <i>Melt Index</i> (índice de fluidez) | $MI = 1,045$ |
| SE – <i>Streets Exponent</i> | $SE = 0,851$ |
| Densidade do polímero sólido | $\rho = 0,966$ |

VII.3 MECANISMO CINÉTICO

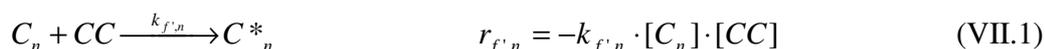
O modelo cinético adotado para o processo é apresentado a seguir (PONTES, 2005). Este tem como base os mecanismos desenvolvidos por Carvalho et al. (1989), Embiruçu et al. (2000), Cozewith (1988), Kim e Choi (1991) e Xie et al. (1995),

contemplando todas as possíveis reações desses modelos e a multiplicidade de sítios ativos. As espécies envolvidas no mecanismo são apresentadas na tabela VII.2.

Tabela VII.2. Espécies envolvidas no modelo cinético.

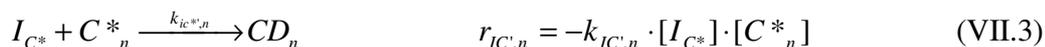
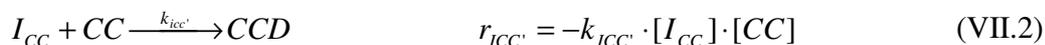
| <i>Símbolo</i> | <i>Descrição</i> |
|----------------|--|
| C | Catalisador |
| CC | Co-catalisador |
| C^* | Espécie catalítica ativa |
| I_C | Impurezas que atacam todo o catalisador |
| I_{C^*} | Impurezas que atacam a espécie ativa |
| I_{CC} | Impurezas que atacam o co-catalisador |
| CCD | Co-catalisador 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 |
| $U_{j,k}$ | Polímero “morto” de j unidades do mero 1 e k unidades do mero 2 |

VII.3.1 Formação do Sítio Ativo (Sítio de Iniciação) ou Ativação



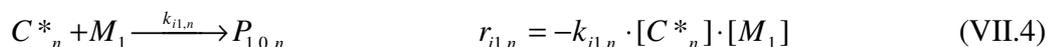
onde C_n e C_n^* são o catalisador e a espécie catalítica ativa tipos n , respectivamente.

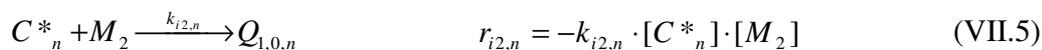
VII.3.2 Envenenamento por Impureza



onde CD_n é a espécie ativa desativada do tipo n .

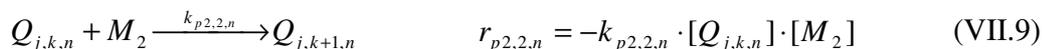
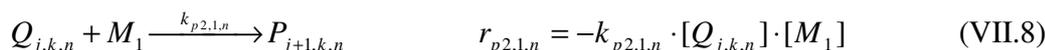
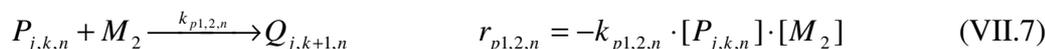
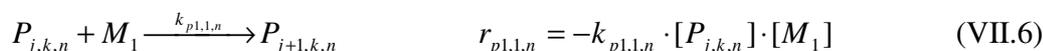
VII.3.3 Iniciação da Cadeia (Sítio de Propagação)





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.

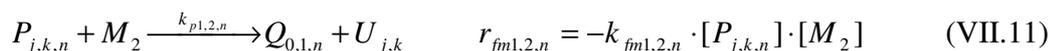


VII.3.5 Transferência

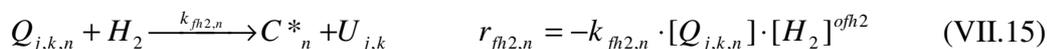
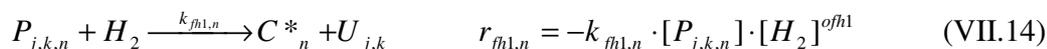
Cadeias de polímero “morto” são formadas nestas reações. O sítio ativo pode então passar novamente por reações de propagação ou de iniciação para produzir sítios de propagação.

- *Transferência para o monômero*

Neste tipo de reação de transferência, $U_{j,k}$ termina com uma dupla ligação.



- *Transferência para hidrogênio*



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).

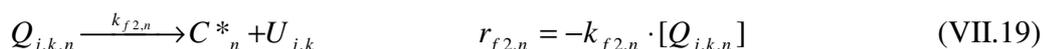
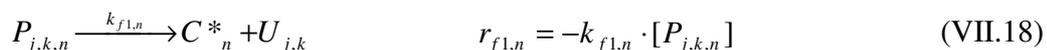
- *Transferência para o organometálico (alquil-alumínio)*

Esta reação ocorre com o organometálico que sobra da reação de formação do catalisador.

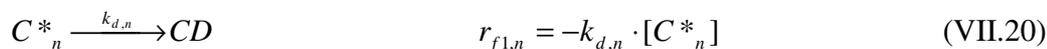


onde *ofCC1* e *ofCC2* são as ordens de reação em relação ao organometálico, sendo iguais a 0,5. Este valor é o mesmo adotado por Kim e Choi (1991) e Embiruçu (1998).

- *Transferência espontânea*



VII.3.6 Desativação Catalítica Espontânea

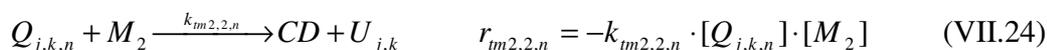
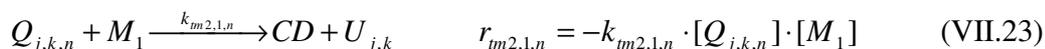
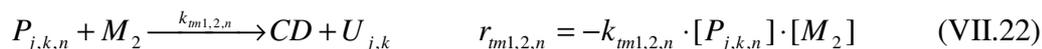
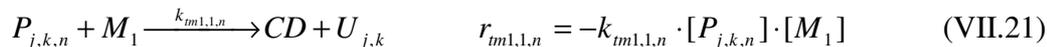


A desativação não ocorre para todos os sítios ativos, em virtude do tempo de residência no reator ser muito pequeno. Logo, é sugerida uma diferença de estabilidade para os diferentes tipos de sítios, sendo que, para alguns deles, k_d é nula.

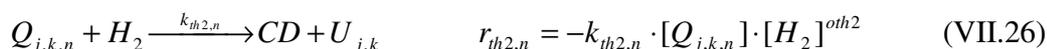
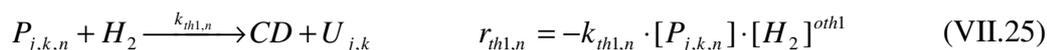
VII.3.7 Terminação

Cadeias de polímero “morto” e sítios desativados são formados nestas reações.

- *Terminação com os monômeros*



- *Terminação com hidrogênio*



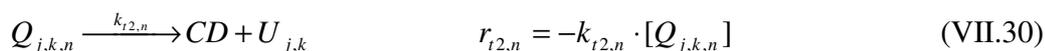
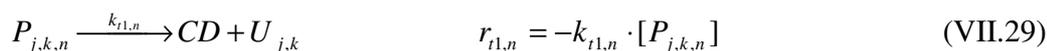
onde *oth1* e *oth2* são as ordens de reação em relação ao hidrogênio, sendo iguais a 0,5. Este valor é o mesmo adotado por Embiruçu (1998).

- *Terminação com organometálico (alquil-alumínio)*



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*



VII.4 MODELO DETERMINÍSTICO

Apresenta-se a seguir o modelo matemático determinístico para o processo de copolimerização do eteno/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 para implementação da estrutura de controle proposta.

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:

$$W_r = W_{r-1} + F_r + B_{r+1} - R_r - B_r - V_r \cdot \frac{d\rho_r}{dt} \quad (\text{VII.31})$$

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:

$$r = 1 \Rightarrow B_r = 0$$

$$r = N \Rightarrow B_{r+1} = 0, \text{ sendo } N \text{ o número de zonas.}$$

- *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:

$$\boxed{\text{Grau de mistura} = \text{Dispersão Inerente} + \text{Efeito do agitador} + \text{Efeito da Vazão Lateral}} \quad (\text{VII.32})$$

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):

$$B_r = \frac{\rho_r \cdot V_r}{\mu_r} \cdot \left(D_{0,r} + D_{Rot,r} \cdot Rot + D_{F,r} \cdot \frac{F_r}{\sum_{r=1}^{Nr} F_r + W_1} \right) \quad (\text{VII.33})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 1 \Rightarrow B_r = 0$$

$$r = N \Rightarrow B_{r+1} = 0$$

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:

$$\frac{d[C]_r}{dt} = \frac{W_{r-1} \cdot [C]_{r-1}}{V_r \cdot \rho_{r-1}} + \frac{F_r \cdot [C]_{Fr}}{V_r \cdot \rho_{Fr}} + \frac{B_{r+1} \cdot [C]_{r+1}}{V_r \cdot \rho_{r+1}} - \frac{(R_r + B_r + W_r) \cdot [C]_r}{V_r \cdot \rho_r} + r_{c,r} \quad (\text{VII.34})$$

$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_n, CD, M_1, M_2, H_2, CC, S, C_n^*$$

com as condições de contorno:

$$r = 1 \Rightarrow B_r = 0$$

$$r = N \Rightarrow B_{r+1} = 0$$

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 e λ 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:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{e=1}^{ne} W_e \int_r^e C_{p_e} dT}{V \cdot \rho \cdot C_p} - \frac{V \cdot r_p \cdot \left(\Delta \bar{H}_p^o + 2 \cdot PM_{M_1} \cdot \int_0^r (\hat{C}_{p_p} - \hat{C}_{p_{M_1}}) dT + 2 \cdot PM_{M_2} \cdot \int_0^r (\hat{C}_{p_Q} - \hat{C}_{p_{M_2}}) dT \right)}{V \cdot \rho \cdot C_p} \quad (\text{VII.35})$$

sendo:

$$e = F_r, W_{r-1} B_{r+1}$$

$$r = 1 \Rightarrow B_r = 0 \quad r = N \Rightarrow B_{r+1} = 0$$

onde W_e são vazões mássicas de entrada na zona, V é o volume da zona, ρ a densidade do meio, C_p é o calor específico da mistura reacional, C_{p_e} é o calor específico da vazão de entrada, C_{p_P} , C_{p_Q} , $C_{p_{M1}}$ e $C_{p_{M2}}$ 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 $\Delta \bar{H}_p^o$ 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*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial W}{\partial z} \quad (\text{VII.36})$$

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*

$$\frac{\partial [C]}{\partial t} + \frac{\partial v \cdot [C]}{\partial z} = r_c \quad (\text{VII.37})$$

$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_n, CD, M_1, M_2, H_2, CC, S, C_n^*$$

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 C_p da mistura. Deste modo, obtém-se:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{r_p \cdot \Delta H_p^\circ}{\rho \cdot C_p} \quad (\text{VII.38})$$

onde T é a temperatura, C_p é o calor específico do meio reacional e r_p e $\Delta \bar{H}_p^\circ$ 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.

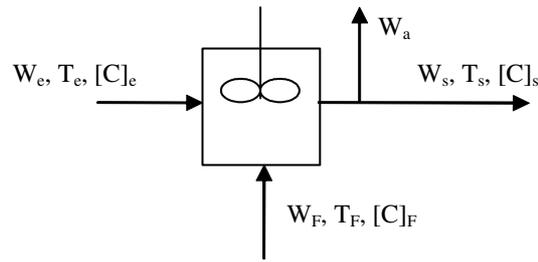


Figura VII.3. Misturador de correntes (PONTES, 2005).

- *Balço de massa global*

$$W_s = W_e + W_F - W_a \quad (\text{VII.39})$$

- *Balço de massa por componente*

$$[C]_s = \frac{\frac{W_e \cdot [C]_e}{\rho_e} + \frac{W_F \cdot [C]_F}{\rho_F} - \frac{W_a \cdot [C]_a}{\rho_a}}{WQ_s} \quad (\text{VII.40})$$

$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_n, CD, M_1, M_2, H_2, CC, S, C_n^*$$

onde WQ_s representa a vazão volumétrica de saída.

- *Balço 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.

$$\frac{dT}{dt} = 0 = \frac{\sum_{e=1}^{ne} W_e \int_s^e C p_e dT}{V \cdot \rho \cdot C_p} \quad (\text{VII.41})$$

$e = W_e, W_F$

Assumindo-se que o C_p é constante em relação à temperatura, sendo igual para as misturas das duas entradas, o balanço de energia pode ser simplificado, obtendo-se:

$$T_s = \frac{W_e \cdot T_e + W_F \cdot T_F}{W_e + W_F} \quad (\text{VII.42})$$

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:

$$\rho_r = \frac{[M_1]_r \cdot PM_{m1}}{\rho_{m1,r}} (\rho_{m1,r} - \rho_{U,r}) + \frac{[M_2]_r \cdot PM_{m2}}{\rho_{m2,r}} (\rho_{m2,r} - \rho_{U,r}) + \frac{[S]_r \cdot PM_s}{\rho_{s,r}} (\rho_{s,r} - \rho_{U,r}) + \rho_{U,r} \quad (\text{VII.43})$$

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:

$$\rho_{i,r} = f_i(T_r) \quad (\text{VII.44})$$

- *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:

$$C_p = \sum_{i=1}^{nc} w_i C_{p_i} \quad (\text{VII.45})$$

Analogamente à densidade:

$$C_p = \frac{[M_1] \cdot PM_{m1}}{\rho_{m1}} (C_{p_{m1}} - C_{p_U}) + \frac{[M_2] \cdot PM_{m2}}{\rho_{m2}} (C_{p_{m2}} - C_{p_U}) + \frac{[S] \cdot PM_s}{\rho_s} (C_{p_s} - C_{p_U}) + C_{p_U} \quad (\text{VII.46})$$

onde os calores específicos dos componentes puros são dados por:

$$C_{p_{i,r}} = f_i(T_r) \quad (\text{VII.47})$$

- *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):

$$\mu = a \cdot MI^b \quad (\text{VII.50})$$

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:

$$\lambda_{m,n} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p^m \cdot q^n \cdot [U_{p,q}] \quad m, n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{VII.51})$$

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:

$$\lambda_{0,0} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} [U_{p,q}] \quad (\text{VII.52})$$

$$\lambda_{1,0} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p \cdot [U_{p,q}] \quad (\text{VII.53})$$

$$\lambda_{0,1} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} q \cdot [U_{p,q}] \quad (\text{VII.54})$$

$$\lambda_{1,1} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p \cdot q \cdot [U_{p,q}] \quad (\text{VII.55})$$

$$\lambda_{2,0} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p^2 \cdot [U_{p,q}] \quad (\text{VII.56})$$

$$\lambda_{0,2} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} q^2 \cdot [U_{p,q}] \quad (\text{VII.57})$$

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:

$$x = 100 \cdot \frac{\lambda_{1,0} + \lambda_{0,1}}{[M_1] + [M_2] + \lambda_{1,0} + \lambda_{0,1}} \quad (\text{VII.58})$$

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:

$$PP_{m1} = 100 \cdot \frac{[M_1] \cdot PM_{m1}}{\rho} \quad (\text{VII.59})$$

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:

$$PP_U = 100 \cdot \frac{PM_{m1} \cdot \lambda_{1,0} + PM_{m2} \cdot \lambda_{0,1}}{\rho} \quad (\text{VII.60})$$

Uma forma alternativa pode ser dada em função do peso molecular numérico médio, como:

$$PP_U = 100 \cdot \frac{\lambda_{0,0} \cdot \overline{PM}_n}{\rho} \quad (\text{VII.61})$$

onde \overline{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:

$$W_U = W \cdot \frac{PP_U}{100} \quad (\text{VII.62})$$

- *Peso molecular numérico médio*

O peso molecular numérico médio é definido como a seguir (VERROS, 2003):

$$M_n = \frac{PM_{m1} \cdot \lambda_{1,0} + PM_{m2} \cdot \lambda_{0,1}}{\lambda_{0,0}} \quad (\text{VII.63})$$

- *Peso molecular ponderal médio*

Segundo Verros (2003), o peso molecular ponderal médio pode ser expresso como:

$$M_w = \frac{PM_{m1} \cdot (\lambda_{2,0} + \lambda_{1,1}) + PM_{m2} \cdot (\lambda_{0,2} + \lambda_{1,1})}{\lambda_{1,0} + \lambda_{0,1}} \quad (\text{VII.64})$$

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:

$$PD = \frac{M_w}{M_n} \quad (\text{VII.65})$$

- *MI*

Uma propriedade frequentemente 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 escoar 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):

$$MI = \alpha \cdot (M_w)^\beta \quad (\text{VII.66})$$

onde α e β são coeficientes a serem estimados. Pontes (2005) obteve os seguintes valores para tais parâmetros referentes ao processo em estudo: $\alpha = 1,0254\text{E}+019$ e $\beta = - 3,7096$.

- *SE*

Outra propriedade usada industrialmente neste processo para caracterizar a resina polimérica final é o SE, definida como:

$$SE = \frac{\log\left(\frac{MI[3p]}{MI[p]}\right)}{\log 3} \quad (\text{VII.67})$$

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:

$$SE = \frac{1}{\frac{1}{SE_M} + \frac{\left(\frac{1}{SE_m} - \frac{1}{SE_M}\right) \cdot \exp(\beta \cdot PD)}{\exp \beta}} \quad (\text{VII.68})$$

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 α e γ parâmetros a serem estimados (PONTES, 2005):

$$SE = \frac{1}{\alpha + \gamma \cdot \exp(\beta \cdot PD)} \quad (\text{VII.69})$$

- *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):

$$\rho = \alpha + \beta \cdot \log(MI) + \gamma \cdot SE + \delta \cdot [CM]_e^\varepsilon \quad (\text{VII.70})$$

onde α , β , γ , δ e ε 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), sendo utilizado para análise do comportamento dinâmico do processo e, posteriormente, para obtenção dos modelos nebulosos e implementação do controlador híbrido *fuzzy*-preditivo. 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 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 duas variáveis de saída do sistema são apresentados a seguir. A figura VII.4 mostra o comportamento do peso molecular numérico médio para uma perturbação de - 33,33 % na temperatura da alimentação principal. Na figura VII.5, é observado o comportamento da conversão para um distúrbio de 0,26 % na concentração de catalisador, resultante da presença de impurezas. As perturbações ocorrem no tempo 30, mas, como observado, o sistema começa a responder no tempo de aproximadamente 32. O atraso é decorrente da própria dinâmica do processo. Um estudo do controle regulatório para as duas variáveis de saída, considerando as respectivas perturbações, será realizado na seção VII.7, onde os controladores híbrido e DMC terão os seus desempenhos comparados entre si.

A pequena perturbação imposta às impurezas do catalisador teve como objetivo justamente resultar em uma pequena variação da conversão. Isto porque a malha de controle da conversão, a qual será discutida posteriormente, utilizará a agitação do CSTR-NI como variável manipulada. Esta entrada tem pouca influência sobre a variável de saída considerada, de modo que um maior valor para o distúrbio resultará na necessidade de maiores mudanças na agitação até certo ponto onde o controle torna-se inviável. Como

será descrito, a análise de tal malha é justamente para demonstrar as dificuldades encontradas decorrentes da manipulação de tal variável.

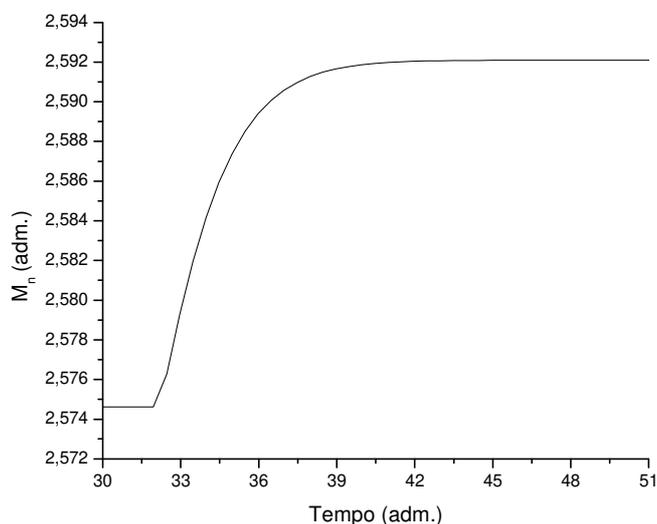


Figura VII.4. Resposta em “malha aberta” do peso molecular numérico médio (M_n) para uma perturbação de $-33,33\%$ na temperatura da alimentação principal.

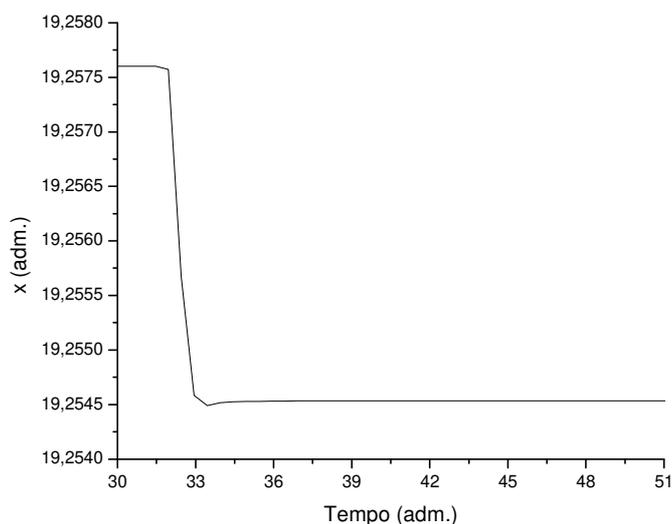


Figura VII.5. Resposta em “malha aberta” da conversão (x) para uma perturbação de $0,26\%$ na concentração de catalisador, resultante da presença de impurezas.

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 +/- 40 % na concentração de hidrogênio (agente de transferência de cadeia) na alimentação principal. Observa-se na figura VII.6 um comportamento tanto não linear quanto invertido para esta malha de variáveis.

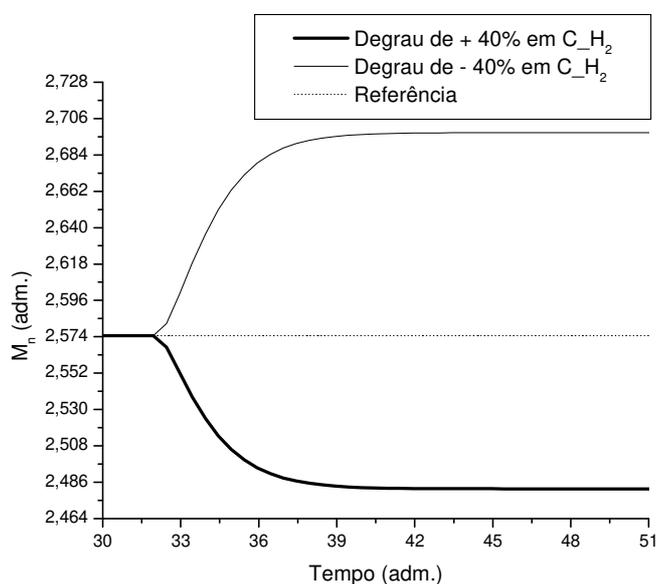


Figura VII.6. Comportamento dinâmico em “malha aberta” do peso molecular numérico médio (M_n) para perturbações degrau de +/- 40 % sobre a concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H_2}) no tempo 30.

VII.6 MODELAGEM DINÂMICA NEBULOSA

Esta seção descreve a obtenção dos modelos dinâmicos nebulosos funcionais para duas variáveis de saída do sistema, os quais foram gerados a partir da implementação no programa de simulação do processo em “malha aberta” do algoritmo para modelagem dinâmica nebulosa, cujo desenvolvimento foi descrito no capítulo VI. O *software* em “malha aberta” foi utilizado como planta virtual para obtenção dos dados dinâmicos

necessários na metodologia de identificação nebulosa. Os modelos obtidos serão posteriormente aplicados na estrutura interna do controle preditivo para análise dos problemas regulatório e servo (seção VII.7).

As duas malhas de controle estudadas são definidas como a seguir:

- Malha 1: o peso molecular numérico médio (M_n) é a variável de saída (controlada) e a concentração de hidrogênio (agente de transferência de cadeia) na alimentação principal (C_{H_2}) é a variável de entrada (manipulada);
- Malha 2: a conversão (x) é a variável de saída (controlada) e a agitação do CSTR-NI (Rot) é a variável de entrada (manipulada).

Modelos dinâmicos nebulosos tipo Takagi-Sugeno são considerados para as estruturas de modelo das duas malhas descritas, os quais foram discutidos nos capítulos III e IV. Assim, a próxima etapa no processo de modelagem refere-se à geração dos dados de identificação do sistema através de variações aleatórias no valor da variável de entrada. Os dados de treinamento (determinação dos parâmetros do modelo) e teste (validação) devem diferir entre si de forma que seja garantida a flexibilidade do modelo para condições diferentes de operação, dentro, é claro, dos limites estabelecidos como premissas do sistema. De posse dessas informações, os métodos do agrupamento subtrativo e dos mínimos quadrados foram aplicados para determinação dos parâmetros do modelo nebuloso, conforme definido no capítulo IV. Os valores obtidos para esses parâmetros em cada malha, os quais serão apresentados na seqüência, proporcionam ao modelo uma melhor capacidade de representatividade em relação aos dados de identificação. São utilizadas três entradas para o modelo em cada uma das malhas, sendo duas referentes à variável manipulada (um valor presente e um valor passado) e uma referente ao valor passado da variável controlada. Foi considerada uma taxa de amostragem igual a 0,5 para um intervalo de tempo de simulação de 120.

Malha 1

A figura VII.7 apresenta os dados de treinamento e teste para a concentração de hidrogênio na alimentação principal (C_{H_2}), enquanto a figura VII.8 mostra o comportamento do peso molecular numérico médio (M_n) para esses valores.

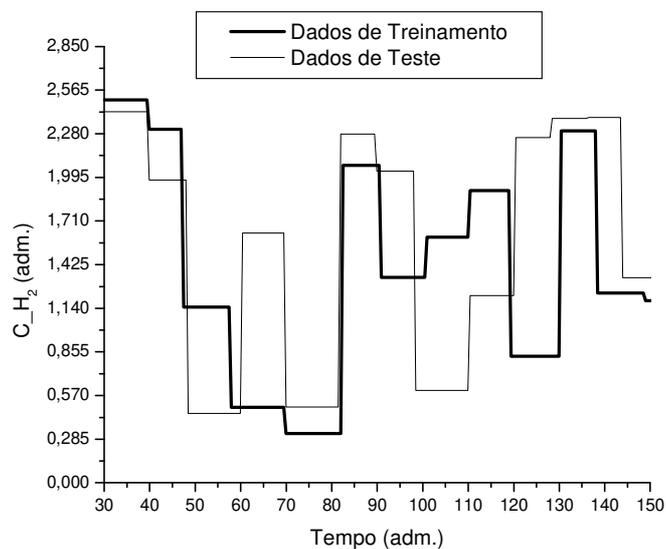


Figura VII.7. Dados de identificação da concentração de hidrogênio na alimentação principal C_{H_2} (variável de entrada).

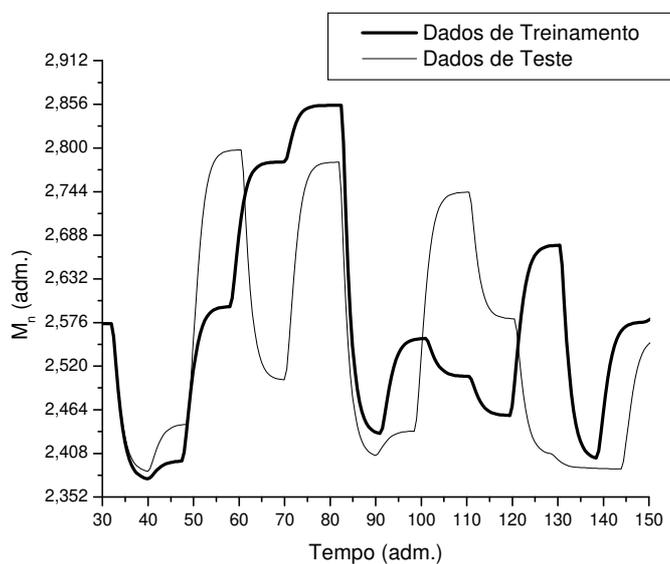


Figura VII.8. Dados de identificação do peso molecular numérico médio M_n (variável de saída).

A tabela VII.3 mostra os resultados de simulação para os parâmetros do modelo nebuloso funcional.

Tabela VII.3. Parâmetros do modelo nebuloso para o peso molecular numérico médio (M_n).

| Número de Regras = 8 | | | |
|---|----------------------|----------------------------|----------------------------------|
| Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo | | | |
| $r_a = 0,60$ | $\eta = 0,50$ | $\bar{\varepsilon} = 0,50$ | $\underline{\varepsilon} = 0,15$ |
| Parte Antecedente | | | |
| Regra | Centro | Desvio Padrão | |
| 1 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $4,85 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $3,23 \cdot 10^{-1}$ | $1,96 \cdot 10^{-1}$ | |
| 2 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $7,37 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $1,95 \cdot 10^{-1}$ | $1,96 \cdot 10^{-1}$ | |
| 3 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $9,10 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $9,68 \cdot 10^{-2}$ | $1,96 \cdot 10^{-1}$ | |
| 4 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $2,56 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $4,50 \cdot 10^{-1}$ | $1,96 \cdot 10^{-1}$ | |

| | | | |
|-----------------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| 5 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $1,08 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $7,80 \cdot 10^{-1}$ | $1,96 \cdot 10^{-1}$ | |
| 6 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $6,02 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $2,58 \cdot 10^{-1}$ | $1,96 \cdot 10^{-1}$ | |
| 7 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $3,99 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $1,73 \cdot 10^{-1}$ | $1,96 \cdot 10^{-1}$ | |
| 8 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $3,99 \cdot 10^{-1}$ | $2,05 \cdot 10^{-1}$ | |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $4,30 \cdot 10^{-1}$ | $1,96 \cdot 10^{-1}$ | |
| Parte Conseqüente | | | |
| Regra i | a_1^i | a_2^i | b_1^i |
| $i = 1$ | $-5,42 \cdot 10^{-1}$ | $6,46 \cdot 10^{-2}$ | $-2,27 \cdot 10^{-1}$ |
| $i = 2$ | $-2,98 \cdot 10^{-2}$ | $7,29 \cdot 10^{-2}$ | $4,41 \cdot 10^{-1}$ |
| $i = 3$ | $-7,72 \cdot 10^{-3}$ | $-4,06 \cdot 10^{-3}$ | $8,40 \cdot 10^{-1}$ |
| $i = 4$ | $1,38 \cdot 10^{-2}$ | $2,11 \cdot 10^{-1}$ | 1,50 |
| $i = 5$ | $-1,25 \cdot 10^{-1}$ | $-1,57 \cdot 10^{-1}$ | 1,01 |
| $i = 6$ | $3,25 \cdot 10^{-1}$ | $-1,01 \cdot 10^{-1}$ | 1,26 |

| | | | |
|---------|-----------------|-----------------|-----------------|
| $i = 7$ | $-5,72.10^{-3}$ | $-5,53.10^{-2}$ | 1,27 |
| $i = 8$ | 1,63 | $7,82.10^{-1}$ | $-6,66.10^{-1}$ |

A base de regras do modelo nebuloso funcional pode então ser descrita da seguinte forma:

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^1) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^1) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^1) \mathbf{ENTÃO} \ y^1(k+1) = a_1^1.u(k) + a_2^1.u(k-1) + b_1^1.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^2) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^2) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^2) \mathbf{ENTÃO} \ y^2(k+1) = a_1^2.u(k) + a_2^2.u(k-1) + b_1^2.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^3) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^3) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^3) \mathbf{ENTÃO} \ y^3(k+1) = a_1^3.u(k) + a_2^3.u(k-1) + b_1^3.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^4) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^4) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^4) \mathbf{ENTÃO} \ y^4(k+1) = a_1^4.u(k) + a_2^4.u(k-1) + b_1^4.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^5) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^5) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^5) \mathbf{ENTÃO} \ y^5(k+1) = a_1^5.u(k) + a_2^5.u(k-1) + b_1^5.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^6) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^6) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^6) \mathbf{ENTÃO} \ y^6(k+1) = a_1^6.u(k) + a_2^6.u(k-1) + b_1^6.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^7) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^7) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^7) \mathbf{ENTÃO} \ y^7(k+1) = a_1^7.u(k) + a_2^7.u(k-1) + b_1^7.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^8) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^8) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^8) \mathbf{ENTÃO} \ y^8(k+1) = a_1^8.u(k) + a_2^8.u(k-1) + b_1^8.y(k-1)$$

onde A_j^i e B_h^i são funções de pertinência Gaussianas ($i = 1, \dots, r; j = 1, \dots, nu$ e $h = 1, \dots, ny$, sendo nu e ny o número de entradas do modelo referentes às variáveis manipulada e controlada, respectivamente); k é o instante considerado; u são entradas do modelo referentes à $C-H_2$; y representa a entrada referente à M_n ; y^i é a saída para cada regra do

modelo e a_j^i e b_h^i são parâmetros das funções conseqüentes do modelo referentes às variáveis C_{H_2} e M_n , respectivamente.

A figura VII.9 apresenta os resultados de validação do modelo nebuloso utilizando o conjuntos de dados de teste. Considerando o intervalo de tempo de simulação de 120, o erro quadrático médio (equação IV.19) obtido é igual a $4,705.10^{-3}$, sendo este de dimensão reduzida tendo como referência a ordem de grandeza da saída. Desta maneira, e a partir da análise gráfica, observa-se o alto potencial da estrutura proposta na predição da saída do processo.

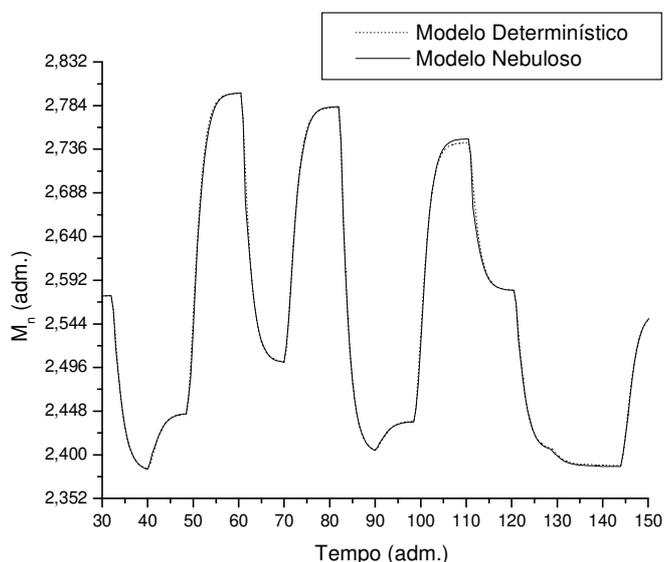


Figura VII.9. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste – M_n .

Malha 2

Na figura VII.10, estão apresentados os dados de treinamento e teste para a agitação do CSTR-NI (*Rot*), enquanto a figura VII.11 mostra o comportamento da conversão (x) para esses valores.

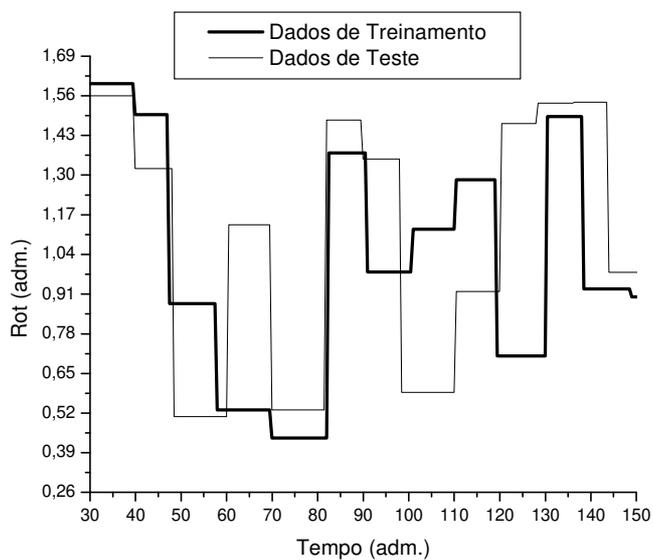


Figura VII.10. Dados de identificação da agitação do CSTR-NI Rot (variável de entrada).

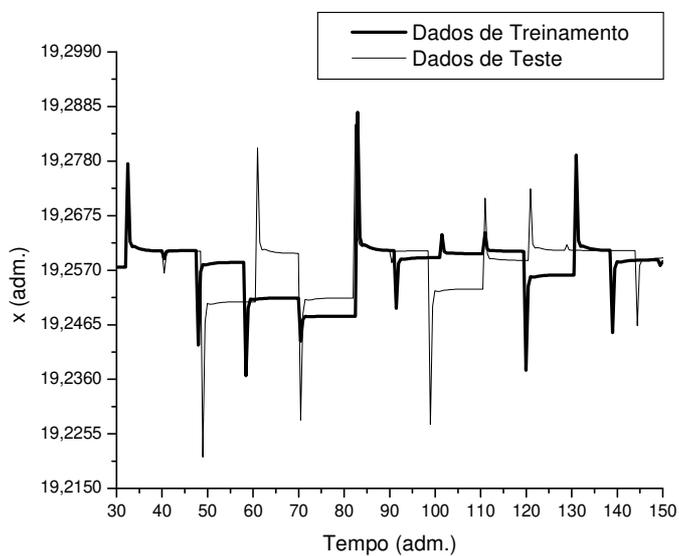


Figura VII.11. Dados de identificação da conversão x (variável de saída).

Os resultados de simulação para os parâmetros do modelo nebuloso são apresentados na tabela VII.4.

Tabela VII.4. Parâmetros do modelo nebuloso para a conversão (x).

| Número de Regras = 3 | | | |
|---|---------------------------|----------------------------|----------------------------------|
| Parâmetros do Método do Agrupamento Subtrativo | | | |
| $r_a = 2,30$ | $\eta = 0,50$ | $\bar{\varepsilon} = 0,50$ | $\underline{\varepsilon} = 0,15$ |
| Parte Antecedente | | | |
| Regra | Centro | | Desvio Padrão |
| 1 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $4,85 \cdot 10^{-1}$ | | $7,87 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $2,64 \cdot 10^{-1}$ | | $4,20 \cdot 10^{-2}$ |
| 2 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $10,00 \cdot 10^{-1}$ | | $7,87 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $2,68 \cdot 10^{-1}$ | | $4,20 \cdot 10^{-2}$ |
| 3 | $u(k), u(k-1)$ | | |
| | $3,20 \cdot 10^{-2}$ | | $7,87 \cdot 10^{-1}$ |
| | $y(k-1)$ | | |
| | $2,48 \cdot 10^{-1}$ | | $4,20 \cdot 10^{-2}$ |
| Parte Conseqüente | | | |
| Regra i | a_1^i | a_2^i | b_1^i |
| $i = 1$ | $1,75 \cdot 10^{-1}$ | $3,52 \cdot 10^{-2}$ | $2,39 \cdot 10^{-1}$ |

| | | | |
|---------|-----------------|----------------|----------------|
| $i = 2$ | $-1,65.10^{-2}$ | $6,27.10^{-2}$ | $5,55.10^{-1}$ |
| $i = 3$ | $1,60.10^{-1}$ | $1,99.10^{-2}$ | 1,58 |

A base de regras do modelo pode ser descrita como:

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^1) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^1) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^1) \mathbf{ENTÃO} \tilde{y}^1(k+1) = a_1^1.u(k) + a_2^1.u(k-1) + b_1^1.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^2) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^2) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^2) \mathbf{ENTÃO} \tilde{y}^2(k+1) = a_1^2.u(k) + a_2^2.u(k-1) + b_1^2.y(k-1)$$

$$\mathbf{SE} (u(k) \text{ é } A_1^3) \mathbf{e} (u(k-1) \text{ é } A_2^3) \mathbf{e} (y(k-1) \text{ é } B_1^3) \mathbf{ENTÃO} \tilde{y}^3(k+1) = a_1^3.u(k) + a_2^3.u(k-1) + b_1^3.y(k-1)$$

sendo A_j^i , B_h^i , nu e ny definidos como anteriormente para a malha 1; k é o instante considerado; u são entradas do modelo referentes à *Rot*; y representa a entrada referente à x ; y^i é a saída para cada regra do modelo e a_j^i e b_h^i são parâmetros das funções conseqüentes do modelo referentes às variáveis *Rot* e x , respectivamente.

Os resultados de validação do modelo nebuloso, a partir do conjunto de dados de teste, estão apresentados na figura VII.12. Considerando o intervalo de tempo de simulação de 120, obteve-se um erro quadrático médio de $1,1094.10^{-3}$, sendo este bastante reduzido tendo como referência a ordem de grandeza da saída. Desta maneira, e a partir da análise gráfica, observa-se que a estrutura de modelo proposta apresenta uma enorme capacidade para predição da saída do processo.

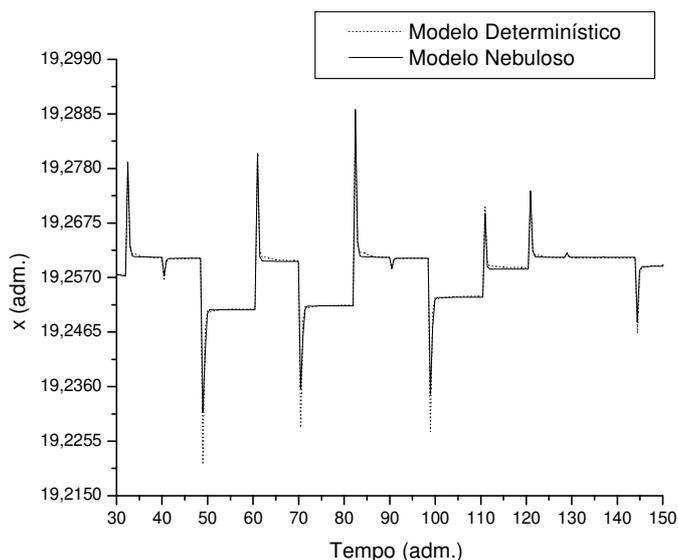


Figura VII.12. Validação do modelo nebuloso para o conjunto de dados de teste - x .

VII.7 RESULTADOS DE CONTROLE

Apresentam-se, nesta seção, os resultados de simulação para os controladores preditivos monovariáveis híbrido e DMC.

Primeiramente, os algoritmos de controle DMC e híbrido desenvolvidos em linguagem de programação FORTRAN 90 foram acoplados ao *software* de simulação do processo em “malha aberta”, o qual foi anteriormente descrito na seção VII.5. Os controladores tiveram então seus desempenhos analisados, sendo posteriormente sintonizados através da análise conjunta da Integral do valor Absoluto dos Erros - IAE (equação V.21) com o comportamento da variável manipulada durante a ação de controle, buscando-se o melhor conjunto de ações. As estratégias híbrida e DMC foram aplicadas para as duas malhas de controle anteriormente definidas, sendo comparadas entre si para os problemas regulatório e servo.

VII.7.1 Controle Regulatório

São apresentados a seguir os resultados de controle referentes à supressão de perturbações externas para as duas malhas.

Malha 1

Uma perturbação de – 33,33 % na temperatura da alimentação principal do sistema no tempo 30 foi considerada para análise do problema regulatório. A tabela VII.5 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle regulatório do peso molecular numérico médio, assim como o valor do IAE.

Tabela VII.5. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório do peso molecular numérico médio (M_n).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|--------|---------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 25 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 4 | 7 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 1,0 | 1,0 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,5 | 0,5 |
| Intervalo de ação do controlador (adm.) | 0,5 | 0,5 |
| IAE (adm.) | 0,0411 | 0,0079 |

A figura VII.13 apresenta uma análise gráfica do comportamento do peso molecular numérico médio (M_n) sob ação de controle no intervalo de tempo de 20, enquanto a figura VII.14 mostra o comportamento da concentração de hidrogênio na alimentação principal C_{H_2} (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle. Foi considerado um *setpoint* de 2,5746 para a variável controlada conforme definido na tabela VII.1.

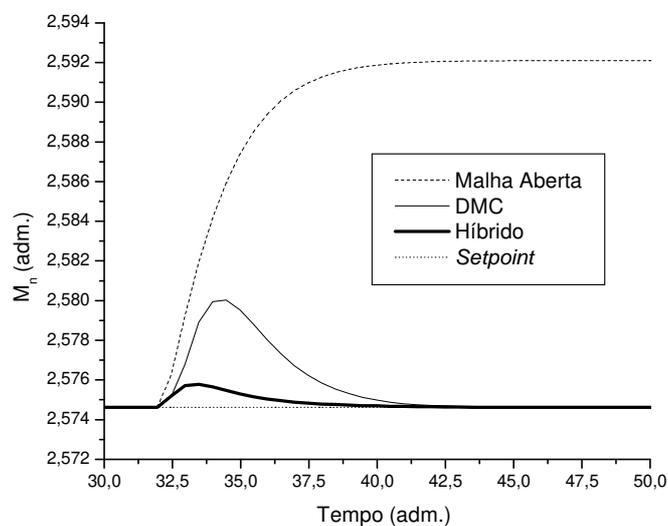


Figura VII.13. Resultados do controle regulatório para o peso molecular numérico médio (M_n).

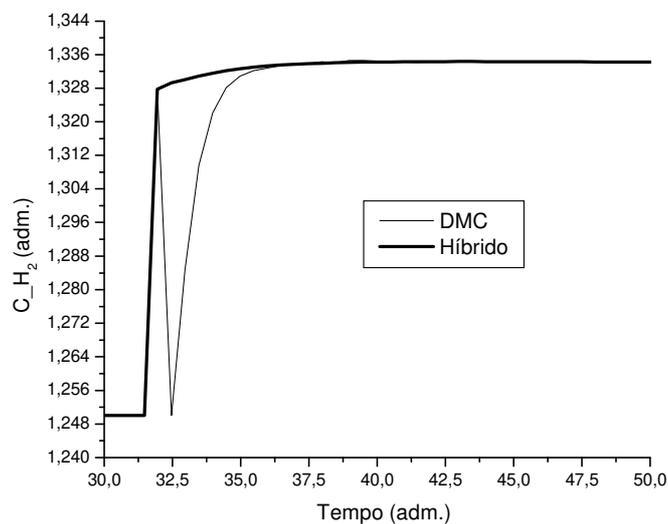


Figura VII.14. Comportamento da variável manipulada C_{H_2} resultante do controle regulatório do peso molecular numérico médio.

Observa-se a partir da tabela VII.5 que os valores para NC , f e α são idênticos para ambos os controladores. Entretanto, há diferenças quanto ao horizonte de predição, sendo este maior para o controlador híbrido que para o DMC. A tabela VII.5 também mostra que o IAE para o controlador híbrido é aproximadamente 5 vezes menor que seu valor referente ao controle DMC, demonstrando a grande superioridade da estratégia de controle híbrida proposta. Esta afirmação é consolidada através da análise das figuras VII.13 e VII.14: a figura VII.13 apresenta que o controlador DMC promove um desvio máximo muito maior que àquele resultante da ação híbrida, além de possuir um tempo de resposta maior; na figura VII.14, observa-se que o controle DMC provoca variações iniciais bruscas na variável manipulada com mudança de sentido, enquanto a atuação do controlador híbrido faz com que a concentração de hidrogênio na alimentação principal aumente na direção do ponto de estabilidade, possuindo inicialmente um comportamento rápido e diminuindo posteriormente sua velocidade até estabilizar em cerca de 1,334.

Malha 2

Para análise do problema regulatório, foi considerado um distúrbio de 0,26 % na concentração de catalisador alimentando o sistema (resultante da presença de impurezas) no tempo 30. A tabela VII.6 a seguir mostra os valores dos parâmetros provenientes do procedimento de ajuste dos controladores para o controle regulatório da conversão, assim como o valor do IAE.

Tabela VII.6. Parâmetros dos controladores para o controle regulatório da conversão (x).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|--------|---------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 10 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 20 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 5 | 4 |
| Horizonte de controle (NC) | 2 | 2 |
| Fator de supressão (f) | 1,0 | 1,0 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,5 | 0,5 |
| Intervalo de ação do controlador (adm.) | 0,5 | 0,5 |
| IAE (adm.) | 0,0273 | 0,0305 |

A figura VII.15 apresenta uma análise gráfica do comportamento da conversão (x) sob ação de controle no intervalo de tempo de 60, enquanto a figura VII.16 mostra o comportamento da agitação do CSTR-NI *Rot* (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle. Foi considerado um *setpoint* de 19,2576 para a variável controlada conforme definido na tabela VII.1.

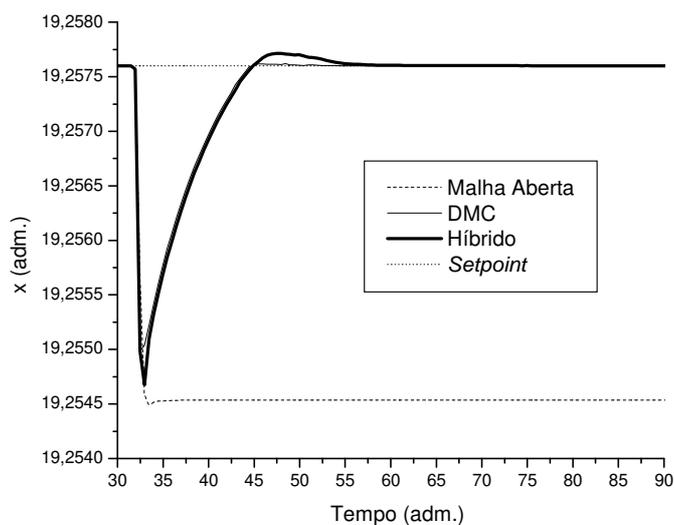


Figura VII.15. Resultados do controle regulatório para a conversão (x).

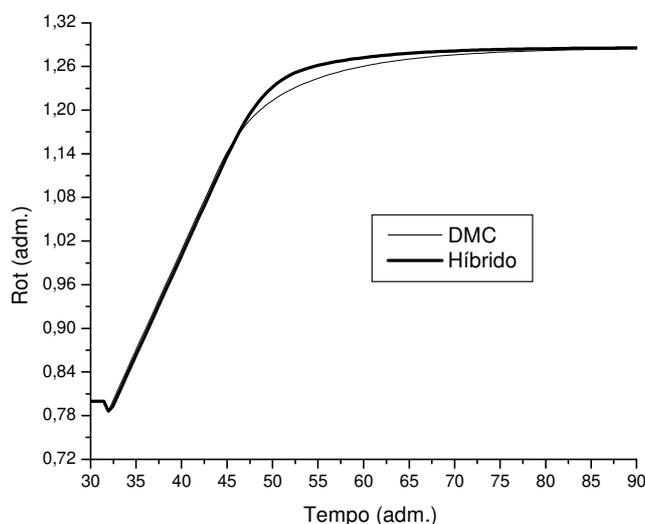


Figura VII.16. Comportamento da variável manipulada *Rot* resultante do controle regulatório da conversão.

Na tabela VII.6 observa-se que os valores para NC , f e α são idênticos para os dois controladores. No entanto, existem diferenças quanto ao horizonte de predição, sendo este maior para o controlador DMC que para o híbrido. A tabela VII.6 mostra também valores próximos para o IAE de ambos os controladores, possuindo este índice de desempenho um valor levemente menor para o controle DMC. Essas afirmações são também observadas a partir da análise da figura VII.15, onde vê-se comportamentos da conversão muito semelhantes para as ações das duas estruturas de controle consideradas.

Analisando agora a figura VII.16, é observado um comportamento similar da variável manipulada para as duas estratégias consideradas.

VII.7.2 Controle Servo

Apresentam-se a seguir os resultados de controle para as duas malhas referentes a situações de mudanças no *setpoint*.

Malha 1

A tabela VII.7 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle servo do peso molecular numérico médio, assim como o valor do IAE.

Tabela VII.7. Parâmetros dos controladores para o controle servo do peso molecular numérico médio (M_n).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|--------|---------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 1 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 25 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 9 | 7 |
| Horizonte de controle (NC) | 1 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 1,0 | 1,0 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,5 | 0,5 |
| Intervalo de ação do controlador (adm.) | 0,5 | 0,5 |
| IAE (adm.) | 6,6724 | 7,6813 |

A figura VII.17 apresenta uma análise gráfica do comportamento do peso molecular numérico médio (M_n) sob ação de controle no intervalo de tempo 120, enquanto a figura VII.18 mostra o comportamento da concentração de hidrogênio na alimentação principal C_{H_2} (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle.

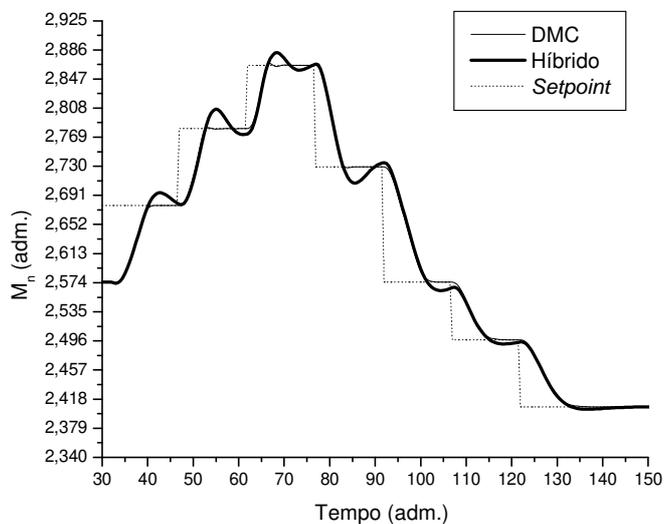


Figura VII.17. Ação de controle para mudanças no *setpoint* do peso molecular numérico médio (M_n).

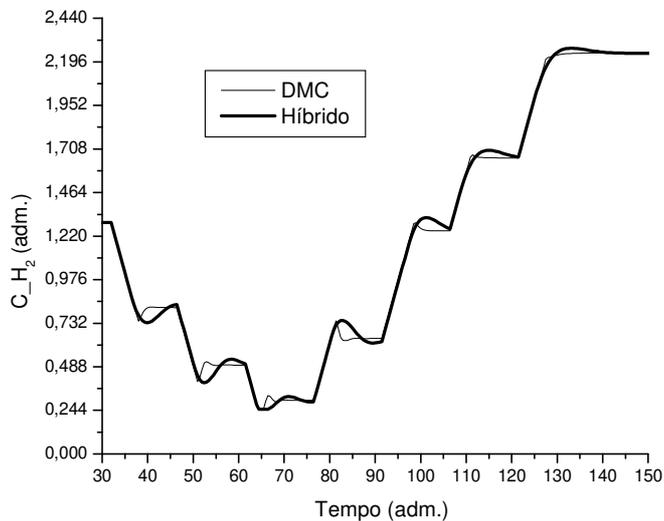


Figura VII.18. Comportamento da variável manipulada C_{H_2} resultante do controle servo do peso molecular numérico médio.

Observa-se, a partir da tabela VII.7, que os valores para NC, f e α são idênticos para ambos os controladores. Todavia, o ajuste do controlador DMC gera um maior valor para seu horizonte de predição em relação ao obtido para o controle híbrido. A tabela VII.7 também mostra que o IAE para o controlador híbrido é maior que para o DMC. No entanto, analisando a figura VII.17, vê-se que a variável controlada comporta-se de maneira semelhante para os dois controladores em questão, sendo que a ação do controlador híbrido promove pequenas oscilações iniciais na variável controlada em torno do respectivo *setpoint*.

Analisando agora a figura VII.18, são observados comportamentos similares da variável manipulada para as duas estratégias de controle consideradas, com menores desvios para a ação provocada pelo controlador DMC.

Malha 2

A tabela VII.8 a seguir mostra os valores dos parâmetros resultantes da sintonia dos controladores para o controle servo da conversão, assim como o valor do IAE.

Tabela VII.8. Parâmetros dos controladores para o controle servo da conversão (x).

| Parâmetros | DMC | Híbrido |
|---|--------|---------|
| Degrau para determinação da matriz dinâmica | 10 % | - |
| Horizonte de convolução (NS) | 20 | - |
| Horizonte de predição (NP) | 3 | 9 |
| Horizonte de controle (NC) | 2 | 1 |
| Fator de supressão (f) | 1,0 | 1,0 |
| Parâmetro de trajetória (α) | 0,5 | 0,5 |
| Intervalo de ação do controlador (adm.) | 0,5 | 0,5 |
| IAE (adm.) | 0,0701 | 0,0786 |

A figura VII.19 apresenta uma análise gráfica do comportamento da conversão (x) sob ação de controle no intervalo de tempo de 120, enquanto a figura VII.20 mostra o comportamento da agitação do CSTR-NI *Rot* (variável manipulada) durante o decorrer da ação de controle.

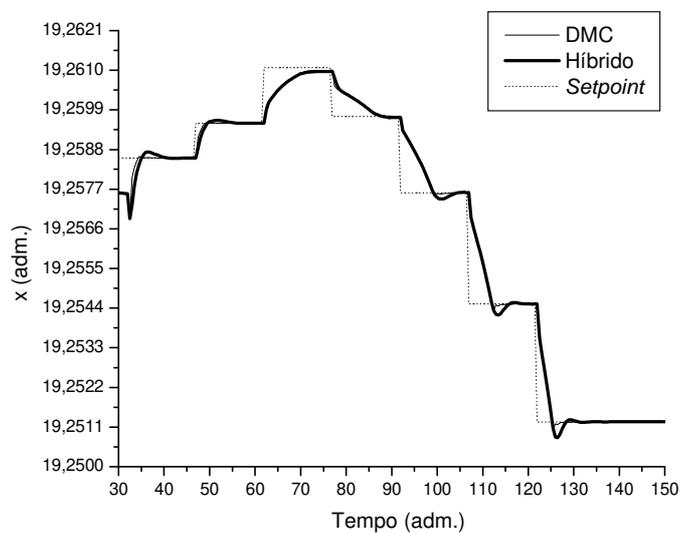


Figura VII.19. Ação de controle para mudanças no *setpoint* da conversão (x).

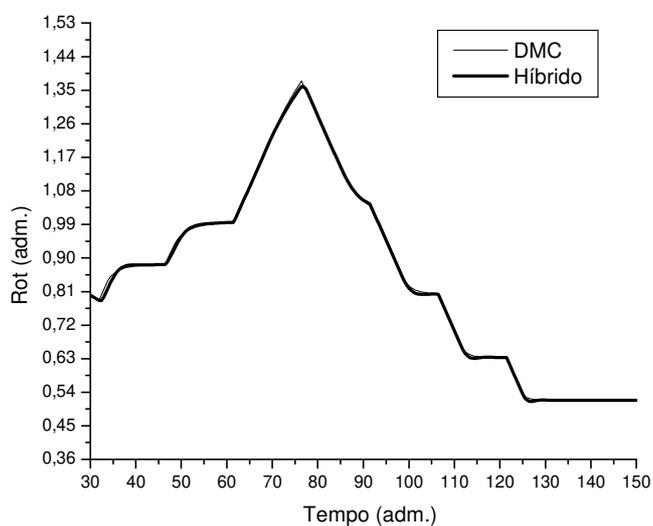


Figura VII.20. Comportamento da variável manipulada Rot resultante do controle servo da conversão.

Na tabela VII.8, observam-se diferenças quanto aos valores para NP e NC referentes aos controladores híbrido e DMC: o primeiro necessita de um maior horizonte de predição, enquanto o segundo precisa de um maior horizonte de controle. Também observa-se que f e α são idênticos para ambos os controladores, sendo os valores do IAE similares para as duas estratégias de controle analisadas.

Analisando as figuras VII.19 e VII.20, observa-se que os controladores híbrido e DMC promovem comportamentos muito próximos para as variáveis controlada e manipulada, sendo estes bastante satisfatórios.

VII.7.3 *Malha de Controle da Conversão*

Escassos trabalhos encontram-se descritos na literatura referentes à aplicação da rotação de agitação em um reator como variável manipulada em um processo de copolimerização. Assim, a malha de controle da conversão em função da agitação do CSTR-NI foi analisada neste estudo de modo a apresentar os empecilhos decorrentes de tal implementação.

Inicialmente, testes de simulação foram realizados com o objetivo de análise da influência da entrada considerada nas variáveis de saída do sistema. Todas apresentaram sensibilidades praticamente irrisórias, sendo que a conversão, apesar do pouco efeito, foi a variável que sofreu os maiores desvios. Desta forma, tal variável foi tomada para controle, sendo observado seu comportamento para os problemas regulatório e servo resultantes da implementação de duas configurações distintas. Como já descrito, considerou-se, para o controle regulatório, uma perturbação de apenas 0,26 % na concentração de catalisador na alimentação do sistema (resultante da presença de impurezas), devido às limitações de sensibilidade discutidas anteriormente. Tal explicação também se aplica às pequenas faixas de mudanças de *setpoint* observadas durante o controle servo. Estas considerações devem-se ao fato de que, quanto mais a conversão desvia-se do *setpoint* inicial, maiores intervalos de mudanças na rotação de agitação do CSTR-NI serão necessários para que sejam alcançados os objetivos de controle, chegando-se assim a um determinado estágio onde o controle tornar-se-á inconveniente e/ou inviável. Por exemplo, analisando as figuras VII.15 e VII.16, observa-se que o distúrbio citado acima provoca uma variação de apenas 0,0031 na conversão; mas, mesmo com esse mínimo desvio, os controladores analisados necessitam atuar sobre a variável manipulada de modo a promover uma variação de

aproximadamente 0,48, valor este bastante alto tendo como referência o estado estacionário de 0,80, conforme apresentado na tabela VII.1.

Por conseguinte, a análise da referida malha visa apresentar as dificuldades que porventura aparecerão em virtude de sua implementação no processo de copolimerização considerado, mostrando, portanto, que tal aplicação não é conveniente do ponto de vista prático.

VII.8 CONSIDERAÇÕES FINAIS SOBRE O CAPÍTULO

Foram apresentados neste capítulo os resultados de simulação referentes à aplicação de uma estratégia de controle *fuzzy*-preditiva 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. Duas malhas de controle foram consideradas para implementação da estrutura proposta, sendo ambas analisadas para os problemas regulatório e servo. Os controladores híbridos foram gerados a partir do desenvolvimento de modelos dinâmicos nebulosos funcionais. Estes controladores tiveram seus desempenhos posteriormente comparados aos resultantes da aplicação do controle preditivo DMC convencional. Os resultados de controle demonstraram o alto potencial da abordagem desenvolvida, apresentando-a como uma alternativa promissora no que se refere ao projeto de controladores a partir de dados dinâmicos do processo.

CAPÍTULO VIII
CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA O
DESENVOLVIMENTO DE TRABALHOS
FUTUROS

VIII.1 CONCLUSÕES

Ao final de cada capítulo apresentado nesta dissertação de mestrado, 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 o projeto de uma estratégia de controle preditivo (MBPC) baseada em sistemas nebulosos para processos de polimerização. Esta foi gerada a partir da inserção de modelos dinâmicos nebulosos tipo Takagi-Sugeno internamente na estrutura do controle preditivo por matriz dinâmica (DMC). O controle DMC foi escolhido para tal aplicação em virtude deste estar bastante difundido no tocante a aplicações industriais em plantas químicas, além de possuir simplicidade de implementação e possibilidade de incorporação de restrições em seu projeto.

Os modelos nebulosos apresentam alto potencial para predição de processos não lineares, o que torna bastante atrativa a sua utilização em estratégias de controle baseadas 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 análise foram escolhidos pelas complexidades inerentes a tais sistemas, com presença de comportamentos não lineares e variantes no tempo, condição que os classifica como estudos de caso de grande interesse para teste 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 dos métodos numéricos do agrupamento subtrativo e mínimos quadrados. Os modelos desenvolvidos demonstraram excelentes capacidades para predição das saídas dos processos analisados, apresentado 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.

O controlador híbrido *fuzzy*-preditivo projetado teve sua atuação comparada ao controle DMC convencional para os problemas regulatório e servo, apresentando desempenhos grandemente satisfatórios em ambas as circunstâncias, possuindo, em determinados casos, comportamento superior ao DMC. Além disso, apresenta simplicidade de construção e aplicação, tendo atuação ágil e rápida. Entretanto, a grande vantagem do controlador híbrido proposto reside no fato dele não necessitar do modelo matemático do processo em seu projeto, 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 do controlador, fazendo com que essa nova alternativa no campo do controle avançado possua 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 deste trabalho, sugere-se os seguintes tópicos para abordagens futuras:

1. Ajustar a qualidade do 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 gradiente como parte integrante do procedimento de modelagem;
2. 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 construção de modelos nebulosos dinâmicos;
4. Fazer a reavaliação ou recálculo da matriz dinâmica do controlador DMC em intervalos de tempo regulares;
5. Aplicar métodos de otimização computacionais para melhor sintonia dos parâmetros dos controladores híbrido e DMC;
6. Realizar estudos aprofundados sobre a estabilidade da estrutura de controle híbrida proposta;

7. Desenvolver controladores híbridos baseados em modelos locais não lineares, considerando-se, por exemplo, a utilização de funções exponenciais e polinomiais de altas ordens como representações de cada uma das funções conseqüentes na base de regras do sistema nebuloso;

8. Estender o controlador híbrido *fuzzy*-preditivo para malhas multivariáveis;

9. 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;

10. Projetar controladores adaptativos lineares e não lineares baseados na estrutura de controle híbrida proposta.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGUIRRE, L. A.; RODRIGUES, G. G.; JÁCOME, C. R. F. Identificação de sistemas não-lineares utilizando modelos NARMAX polinomiais – Uma revisão e novos resultados. *SBA Controle & Automação*, v. 9, n. 2, p. 90-106, 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.
- BARTASSON, M. C. *Modelagem e simulação de um processo de copolimerização pelo uso de lógica nebulosa e modelo determinístico*. Campinas: Departamento de Processos Químicos, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2005. Dissertação (Mestrado).
- 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).
- 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).
- 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.
- FORTUNY, M.; NELE, M.; MELO, P. A.; PINTO, J. C. Distribuição de peso molecular em poliolefinas: contribuição ao estudo da bimodalidade e da desconvolução. *Polímeros: Ciência e Tecnologia*, v. 14, n. 3, p. 194-200, 2004.
- GAHLEITNER, M.; WOLFSCHWENGER, J.; BACHNER, C.; BERNREITNER, K.; NEIßL, 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.
- HAGIMORI, S.; KURODA, C.; ISHIDA, M. Fuzzy control for continuous bulk-polymerization 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.
- HELLENDORRN, 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.
- 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.
- 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.
- 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.

- 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.
- 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. 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 não-linear (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.
- TANSCHKEIT, R. *Sistemas fuzzy*. Disponível em: <<http://www.ica.ele.puc-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.
- 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.

APÊNDICE A
TAXAS DE REAÇÃO PARA A
COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO

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:

$$k = Ae^{(-E/RT_r)} \quad (\text{A.1})$$

sendo A o fator de frequência, 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:

$$\mu P_{l,m,n} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p^l \cdot q^m \cdot [P_{p,q,n}] \quad l, m = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.2})$$

$$\mu Q_{l,m,n} = \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} p^l \cdot q^m \cdot [Q_{p,q,n}] \quad l, m = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.3})$$

onde $\mu P_{l,m,n}$ e $\mu Q_{l,m,n}$ são os momentos dos polímeros “vivos” dos tipos P e Q , respectivamente, p e q indicam a quantidade de cada mero (a soma $p+q$ é o comprimento da cadeia do polímero), l e 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:

$$\begin{aligned}
 r_{EA_n} = & -k_{d,n} \cdot [C_n^*] - \\
 & -\mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{th1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_1] + \right. \\
 & \left. + k_{tm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{t1,n} \right) - \\
 & -\mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{th2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{tm2,1,n} \cdot [M_1] + \right. \\
 & \left. + k_{tm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{t2,n} \right)
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

Se a reação de formação do sítio ativo não for instantânea, a expressão para a taxa torna-se:

$$\begin{aligned}
 r_{EA_n} = & -k_{d,n} \cdot [C_n^*] + k_f \cdot [C_n] \cdot [CC] - k_{IC^*} \cdot [I_{C^*}] \cdot [C_n^*] - \\
 & -\mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{th1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_1] + \right. \\
 & \left. + k_{tm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{t1,n} \right) - \\
 & -\mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{th2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{tm2,1,n} \cdot [M_1] + \right. \\
 & \left. + k_{tm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{t2,n} \right)
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

A.2.2 Espécie Catalítica Desativada - CD_n

$$\begin{aligned}
 r_{CD_n} = & k_{d,n} \cdot [C_n^*] + \\
 & \mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{th1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_1] + k_{tm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{t1,n} \right) + \\
 & \mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{th2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{tm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{tm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{t2,n} \right)
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

$$r_{CD_n} = -r_{EA_n} \tag{A.7}$$

Se a reação de formação do sítio ativo não for instantânea, a expressão para a taxa torna-se:

$$\begin{aligned}
 r_{CD_n} = & k_{d,n} \cdot [C_n^*] + k_{IC^*,n} \cdot [I_{C^*}] \cdot [C_n^*] + \\
 & \mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{th1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_1] + k_{tm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{t1,n} \right) + \\
 & \mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{th2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{tm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{tm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{t2,n} \right)
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

de modo que:

$$r_{CD_n} \neq -r_{EA_n} \tag{A.9}$$

A.2.3 Monômero Tipo 1 - M_1

$$r_{M_1} = [M_1] \cdot \sum_{n=1}^{NSIT} \left(-k_{i1,n} \cdot [C_n^*] - k_{p1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} - k_{fm1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{fm2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} - k_{tm1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{tm2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \right) \quad (A.10)$$

A.2.4 Monômero Tipo 2 ou Co-monômero - M_2

$$r_{M_2} = [M_2] \cdot \sum_{n=1}^{NSIT} \left(-k_{i2,n} \cdot [C_n^*] - k_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} - k_{p1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{fm2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} - k_{fm1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} - k_{tm2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} - k_{tm1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \right) \quad (A.11)$$

A.2.5 Agente de Transferência de Cadeia - H_2

$$r_{H_2} = \sum_{n=1}^{NSIT} \left(-k_{fh1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \cdot [H_2]^{ofh1} - k_{fh2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \cdot [H_2]^{ofh2} - k_{th1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \cdot [H_2]^{oth1} - k_{th2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \cdot [H_2]^{oth2} \right) \quad (A.12)$$

A.2.6 Co-catalisador - CC

$$r_{CC} = \sum_{n=1}^{NSIT} \left(-k_{fCC1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \cdot [CC]^{ofCC1} - k_{fCC2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \cdot [CC]^{ofCC2} \right) \quad (A.13)$$

A.2.7 Solvente - S

$$r_S = 0 \quad (A.14)$$

A.2.8 Catalisador Ativo - C_n^*

$$r_{C_n^*} = \mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{fh1,n} \cdot [H_2]^{ofh1} + k_{f1,n} + k_{fCC1,n} \cdot [CC]^{ofCC1} \right) + \mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{fh2,n} \cdot [H_2]^{ofh2} + k_{f2,n} + k_{fCC2,n} \cdot [CC]^{ofCC2} \right) + \left(-k_{i1,n} \cdot [M_1] - k_{i2,n} \cdot [M_2] - k_{d,n} \right) \cdot [C_n^*] \quad (A.15)$$

Se a reação de formação do sítio ativo não for instantânea, a expressão para a taxa torna-se:

$$r_{C_n^*} = \mu P_{0,0,n} \cdot \left(k_{fh1,n} \cdot [H_2]^{ofh1} + k_{f1,n} + k_{fCC1,n} \cdot [CC]^{ofCC1} \right) + \mu Q_{0,0,n} \cdot \left(k_{fh2,n} \cdot [H_2]^{ofh2} + k_{f2,n} + k_{fCC2,n} \cdot [CC]^{ofCC2} \right) + \left(-k_{i1,n} \cdot [M_1] - k_{i2,n} \cdot [M_2] - k_{d,n} \right) \cdot [C_n^*] + k_f \cdot [C_n] \cdot [CC] - k_{IC} \cdot [I_{C^*}] \cdot [C_n^*] \quad (A.16)$$

A.2.9 Polímero “Morto”

$$r_{\lambda_{i,m}} = \sum_{n=1}^{NSIT} \left(\mu P_{i,m,n} \cdot r_{\lambda^{n,P}} + \mu Q_{i,m,n} \cdot r_{\lambda^{n,Q}} \right) \quad (A.17)$$

onde:

$$r_{\lambda^{n,P}} = \left(k_{fh1,n} \cdot [H_2]^{ofh1} + k_{fm1,1,n} \cdot [M_1] + k_{fm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{f1,n} + k_{fCC1,n} \cdot [CC]^{ofCC1} + k_{iCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} + k_{th1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_1] + k_{tm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{t1,n} \right) \quad (A.18)$$

$$r_{\lambda^{n,Q}} = \left(k_{fh2,n} \cdot [H_2]^{ofh2} + k_{fm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{fm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{f2,n} + k_{fCC2,n} \cdot [CC]^{ofCC2} + k_{iCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} + k_{th2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{tm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{tm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{t2,n} \right) \quad (A.19)$$

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:

$$r_{\mu P_{0,m,n}} = 0 \quad (A.20)$$

Deste modo, a seguinte expressão para o momento de ordem 0 do polímero “vivo” tipo P em relação ao monômero 1 pode ser obtida:

$$\mu P_{0,m,n} = \frac{k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,m,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n}}{f_{cP,n}} \quad (A.21)$$

onde:

$$f_{m2,1,n} = k_{fm2,1,n} \cdot [M_1] \quad (A.22)$$

$$f_{p2,1,n} = k_{p2,1,n} \cdot [M_1] \quad (A.23)$$

$$f_{m1,1,n} = k_{fm1,1,n} \cdot [M_1] \quad (A.24)$$

$$f_{cP,n} = k_{p1,2,n} \cdot [M_2] + k_{fh1,n} \cdot [H_2]^{ofh1} + k_{fm1,1,n} \cdot [M_1] + k_{fm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{f1,n} + k_{fCC1,n} \cdot [CC]^{ofCC1} + k_{th1,n} \cdot [H_2]^{oth1} + k_{tm1,1,n} \cdot [M_1] + k_{tm1,2,n} \cdot [M_2] + k_{t1,n} + k_{tCC1,n} \cdot [CC]^{otCC1} \quad (A.25)$$

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”, obtém-se:

$$r_{\mu Q_{l,0,n}} = 0 \quad (A.26)$$

Portanto, a seguinte expressão para o momento de ordem 0 do polímero “vivo” tipo Q em relação ao monômero 2 pode ser obtida:

$$\mu Q_{l,0,n} = \frac{k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{l,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n}}{f_{cQ,n}} \quad (A.27)$$

onde:

$$f_{m1,2,n} = k_{fm1,2,n} \cdot [M_2] \quad (A.28)$$

$$f_{p1,2,n} = k_{p1,2,n} \cdot [M_2] \quad (A.29)$$

$$f_{m2,2,n} = k_{fm2,2,n} \cdot [M_2] \quad (A.30)$$

$$f_{cQ,n} = k_{p2,1,n} \cdot [M_1] + k_{fh2,n} \cdot [H_2]^{ofh2} + k_{fm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{fm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{f2,n} + k_{fCC2,n} \cdot [CC]^{ofCC2} + k_{th2,n} \cdot [H_2]^{oth2} + k_{tm2,2,n} \cdot [M_2] + k_{tm2,1,n} \cdot [M_1] + k_{t2,n} + k_{tCC2,n} \cdot [CC]^{otCC2} \quad (A.31)$$

Para os momentos de ordem 0,0 obtém-se:

$$\mu P_{0,0,n} = \frac{(f_{cQ,n} - f_{m2,2,n}) \cdot k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{2,1,n} \cdot k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2]}{(f_{cP,n} - f_{m1,1,n}) \cdot (f_{cQ,n} - f_{m2,2,n}) - f_{2,1,n} \cdot f_{1,2,n}} \quad (A.32)$$

$$\mu Q_{0,0,n} = \frac{(f_{cP,n} - f_{m1,1,n}) \cdot k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{1,2,n} \cdot k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1]}{(f_{cQ,n} - f_{m2,2,n}) \cdot (f_{cP,n} - f_{m1,1,n}) - f_{1,2,n} \cdot f_{2,1,n}} \quad (A.33)$$

onde:

$$f_{2,1,n} = f_{m2,1,n} + f_{p2,1,n} \quad (A.34)$$

$$f_{1,2,n} = f_{m1,2,n} + f_{p1,2,n} \quad (A.35)$$

Considerando agora os momentos de ordem 1 em relação ao monômero 1, tem-se:

$$\mu P_{1,0,n} = \frac{(k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{p1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n}) \cdot f_{cQ,n} + f_{p2,1,n} \cdot (k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n})}{f_{cP,n} \cdot f_{cQ,n} - f_{p2,1,n} \cdot f_{p1,2,n}} \quad (A.36)$$

$$\mu Q_{1,0,n} = \frac{k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{1,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n}}{f_{cQ,n}} \quad (A.37)$$

onde:

$$f_{p1,1,n} = k_{p1,1,n} \cdot [M_1] \quad (A.38)$$

Para os momentos de ordem 1 em relação ao monômero 2:

$$\mu Q_{0,1,n} = \frac{(f_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n}) \cdot f_{cP,n} + f_{p1,2,n} \cdot (k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n})}{f_{cP,n} \cdot f_{cQ,n} - f_{p1,2,n} \cdot f_{p2,1,n}} \quad (A.39)$$

$$\mu P_{0,1,n} = \frac{k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,1,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n}}{f_{cP,n}} \quad (A.40)$$

onde:

$$f_{p2,2,n} = k_{p2,2,n} \cdot [M_2] \quad (A.41)$$

Para os momentos de ordem 2 em relação ao monômero 1:

$$\begin{aligned} \mu P_{2,0,n} = & \left(k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + 2 \cdot f_{p1,1,n} \cdot \mu P_{1,0,n} + \right. \\ & \left. + f_{p1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + \right. \\ & \left. + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + 2 \cdot f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{1,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \right) \cdot f_{cQ,n} + \\ = & \frac{\left(k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \right) \cdot f_{p2,1,n}}{f_{cP,n} \cdot f_{cQ,n} - f_{p2,1,n} \cdot f_{p1,2,n}} \end{aligned} \quad (A.42)$$

$$\mu Q_{2,0,n} = \frac{k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{2,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n}}{f_{cQ,n}} \quad (A.43)$$

Considerando os momentos de ordem 2 em relação ao monômero 2:

$$\begin{aligned} \mu Q_{0,2,n} = & \left(k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + 2 \cdot f_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{0,1,n} + \right. \\ & \left. + f_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + \right. \\ & \left. + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + 2 \cdot f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{0,1,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \right) \cdot f_{cP,n} + \\ = & \frac{\left(k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \right) \cdot f_{p1,2,n}}{f_{cQ,n} \cdot f_{cP,n} - f_{p1,2,n} \cdot f_{p2,1,n}} \end{aligned} \quad (A.44)$$

$$\mu P_{0,2,n} = \frac{k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,2,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n}}{f_{cP,n}} \quad (A.45)$$

Para os momentos de ordem 1 em relação ao monômero 1 e ao monômero 2, tem-se:

$$\mu P_{1,1,n} = \frac{\left(k_{i1,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_1] + f_{m2,1,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} + f_{p2,1,n} \cdot \mu Q_{0,1,n} \right) \cdot f_{cQ,n} + \left(f_{p1,1,n} \cdot \mu P_{0,1,n} + f_{m1,1,n} \cdot \mu P_{0,0,n} \right)}{\left(k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{1,0,n} \right) \cdot f_{p2,1,n} + \left(f_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{1,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \right)} \quad (A.46)$$

$$\mu Q_{1,1,n} = \frac{\left(k_{i2,n} \cdot [C_n^*] \cdot [M_2] + f_{m1,2,n} \cdot \mu P_{0,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{1,0,n} + f_{p1,2,n} \cdot \mu P_{1,1,n} + f_{p2,2,n} \cdot \mu Q_{1,0,n} + f_{m2,2,n} \cdot \mu Q_{0,0,n} \right)}{f_{cQ,n}} \quad (A.47)$$

Como observado, as equações anteriores dependem da concentração de catalisador ativo C_n^* , a qual é definida como:

$$[C_n^*] = [EA_n] - \mu P_{0,0,n} - \mu Q_{0,0,n} \quad (A.48)$$

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:

$$\mu P_{0,0,n} = \frac{\left(k_{i1,n} \cdot [EA_n] \cdot [M_1] \cdot (f_{cQ,n} - f_{m2,2,n} + k_{i2,n} \cdot [M_2]) + (f_{2,1,n} - k_{i1,n} \cdot [M_1]) \cdot k_{i2,n} \cdot [EA_n] \cdot [M_2] \right)}{\left((f_{cP,n} - f_{m1,1,n} + k_{i1,n} \cdot [M_1]) \cdot (f_{cQ,n} - f_{m2,2,n} + k_{i2,n} \cdot [M_2]) - (f_{2,1,n} - k_{i1,n} \cdot [M_1]) \cdot (f_{1,2,n} - k_{i2,n} \cdot [M_2]) \right)} \quad (A.49)$$

$$\mu Q_{0,0,n} = \frac{\left(k_{i2,n} \cdot [EA_n] \cdot [M_2] \cdot (f_{cP,n} - f_{m1,1,n} + k_{i1,n} \cdot [M_1]) + (f_{1,2,n} - k_{i2,n} \cdot [M_2]) \cdot k_{i1,n} \cdot [EA_n] \cdot [M_1] \right)}{\left((f_{cQ,n} - f_{m2,2,n} + k_{i2,n} \cdot [M_2]) \cdot (f_{cP,n} - f_{m1,1,n} + k_{i1,n} \cdot [M_1]) - (f_{1,2,n} - k_{i2,n} \cdot [M_2]) \cdot (f_{2,1,n} - k_{i1,n} \cdot [M_1]) \right)} \quad (A.50)$$

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”.

APÊNDICE B
ASPECTOS NUMÉRICOS PARA O MODELO
MATEMÁTICO DO PROCESSO DE
COPOLIMERIZAÇÃO DO ETENO/1-BUTENO

B.1 INTRODUÇÃO

O capítulo VII apresentou o modelo matemático determinístico 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 baseia-se 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*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial W}{\partial z} \quad (\text{B.1})$$

- *Balanço de massa por componente*

$$\frac{\partial [C]}{\partial t} + \frac{\partial v \cdot [C]}{\partial z} = r_c \quad (\text{B.2})$$

onde:

$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_n, CD, M_1, M_2, H_2, CC, S, C_n^*$$

- *Balço de energia*

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{r_p \cdot \Delta H_p^o}{\rho \cdot Cp} \quad (B.3)$$

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 Balço de Massa Global e “Balço de Deslocamento”

Para o balço de massa global em batelada, tem-se:

$$\frac{dM_r}{dt} = 0 \Rightarrow \rho_r \cdot V_r = M_r = cte \quad (B.4)$$

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:

$$\frac{dz_r}{dt} = \frac{W_r}{\rho_r \cdot A} = \frac{WQ_r}{A} \quad (B.5)$$

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 Balço de Massa por Componente

$$\frac{d[C]_r}{dt} = r_{c,r} + \frac{[C]_r}{\rho_r} \cdot \frac{d\rho_r}{dt} \quad (B.6)$$

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:

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{r_{p,r} \cdot \left(\Delta \bar{H}_p^o + 2 \cdot PM_{m_1} \cdot \int_0^r (\hat{C}_{p_P} - \hat{C}_{p_{m_1}}) dT + \right.}{\rho_r \cdot Cp_r} \left. + 2 \cdot PM_{m_2} \cdot \int_0^r (\hat{C}_{p_Q} - \hat{C}_{p_{m_2}}) dT \right) \quad (B.7)$$

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:

$$\frac{dz_r}{d\tau} = \frac{W_r}{\rho_r \cdot A} = \frac{WQ_r}{A} \quad (B.8)$$

$$\frac{d[C]_r}{d\tau} = r_{c,r} + \frac{[C]_r}{\rho_r} \cdot \frac{d\rho_r}{d\tau} \quad (B.9)$$

$$\frac{dT_r}{d\tau} = \frac{r_{p,r} \cdot \left(\Delta \bar{H}_p^o + 2 \cdot PM_{M_1} \cdot \int_0^r (\hat{C}_{p_P} - \hat{C}_{p_{M_1}}) dT + \right.}{\rho_r \cdot Cp_r} \left. + 2 \cdot PM_{M_2} \cdot \int_0^r (\hat{C}_{p_Q} - \hat{C}_{p_{M_2}}) dT \right) \quad (B.10)$$

Tem-se que em $t = t_0$ 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 rerepresentá-lo neste ponto.

B.3.1 Balanço de Massa Global

$$W_r = W_{r-1} + F_r + B_{r+1} - R_r - B_r - V_r \cdot \frac{d\rho_r}{dt} \quad (\text{B.11})$$

com as seguintes condições de contorno:

$$r = 1 \Rightarrow B_r = 0$$

$$r = N \Rightarrow B_{r+1} = 0.$$

B.3.2 Balanço de Massa por Componente

$$\frac{d[C]_r}{dt} = \frac{W_{r-1} \cdot [C]_{r-1}}{V_r \cdot \rho_{r-1}} + \frac{F_r \cdot [C]_{Fr}}{V_r \cdot \rho_{Fr}} + \frac{B_{r+1} \cdot [C]_{r+1}}{V_r \cdot \rho_{r+1}} - \frac{(R_r + B_r + W_r) \cdot [C]_r}{V_r \cdot \rho_r} + r_{c,r} \quad (\text{B.12})$$

$$C = \lambda_{00}, \lambda_{10}, \lambda_{01}, \lambda_{11}, \lambda_{02}, \lambda_{20}, EA_n, CD, M_1, M_2, H_2, CC, S, C_n^*$$

com as condições:

$$r = 1 \Rightarrow B_r = 0$$

$$r = N \Rightarrow B_{r+1} = 0$$

B.3.3 Balanço de Energia

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{e=1}^{ne} W_e \int_r C_{p_e} dT}{V \cdot \rho \cdot C_p} - \frac{V \cdot r_p \cdot \left(\Delta \bar{H}_p^o + 2 \cdot PM_{M_1} \cdot \int_0^r (\hat{C}_{p_p} - \hat{C}_{p_{M_1}}) dT + 2 \cdot PM_{M_2} \cdot \int_0^r (\hat{C}_{p_Q} - \hat{C}_{p_{M_2}}) dT \right)}{V \cdot \rho \cdot C_p} \quad (\text{B.13})$$

sendo:

$$e = F_r, W_{r-1} B_{r+1}$$

$$r = 1 \Rightarrow B_r = 0 \quad r = N \Rightarrow B_{r+1} = 0$$

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.

$$\rho_r = \frac{[M_1]_r \cdot PM_{m1}}{\rho_{m1,r}} (\rho_{m1,r} - \rho_{U,r}) + \frac{[M_2]_r \cdot PM_{m2}}{\rho_{m2,r}} (\rho_{m2,r} - \rho_{U,r}) + \frac{[S]_r \cdot PM_s}{\rho_{s,r}} (\rho_{s,r} - \rho_{U,r}) + \rho_{U,r} \quad (B.14)$$

$$\rho_{i,r} = f_i(T_r) \quad (B.15)$$

Assim, calculando a derivada da equação B.14 em relação ao tempo, obtém-se (PONTES, 2005):

$$\frac{d\rho_r}{dt} = A_{m1} \cdot \frac{d[M_1]_r}{dt} + A_{m2} \cdot \frac{d[M_2]_r}{dt} + A_s \cdot \frac{d[S]_r}{dt} + A_T \cdot \frac{dT_r}{dt} \quad (B.16)$$

onde:

$$A_{m1} = PM_{m1} \cdot \frac{(\rho_{m1,r} - \rho_{U,r})}{\rho_{m1,r}} \quad (B.17)$$

$$A_{m2} = PM_{m2} \cdot \frac{(\rho_{m2,r} - \rho_{U,r})}{\rho_{m2,r}} \quad (B.18)$$

$$A_s = PM_s \cdot \frac{(\rho_{s,r} - \rho_{U,r})}{\rho_{s,r}} \quad (B.19)$$

$$A_T = \left(\begin{aligned} & PM_{m1} \cdot [M_1]_r \cdot \frac{\left(\rho_{U,r} \cdot \frac{df_{m1,r}(T_r)}{dT_r} - \rho_{m1,r} \cdot \frac{df_{U,r}(T_r)}{dT_r} \right)}{\rho_{m1,r}^2} + \\ & + PM_{m2} \cdot [M_2]_r \cdot \frac{\left(\rho_{U,r} \cdot \frac{df_{m2,r}(T_r)}{dT_r} - \rho_{m2,r} \cdot \frac{df_{U,r}(T_r)}{dT_r} \right)}{\rho_{m2,r}^2} + \\ & + PM_s \cdot [S]_r \cdot \frac{\left(\rho_{U,r} \cdot \frac{df_{s,r}(T_r)}{dT_r} - \rho_{s,r} \cdot \frac{df_{U,r}(T_r)}{dT_r} \right)}{\rho_{s,r}^2} + \frac{df_{U,r}(T_r)}{dT_r} \end{aligned} \right) \quad (B.20)$$

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:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{A_{m1} \cdot F_{m1} + A_{m2} \cdot F_{m2} + A_s \cdot F_s + A_T \cdot F_T}{\rho - A_{m1} \cdot [M_1] - A_{m2} \cdot [M_2] - A_s \cdot [S]} \quad (B.21)$$

onde:

$$F_{m1} = \rho \cdot r_{m1} \quad (B.22)$$

$$F_{m2} = \rho \cdot r_{m2} \quad (B.23)$$

$$F_s = \rho \cdot r_s \quad (B.24)$$

$$F_T = \rho \cdot \frac{r_e}{C_p} \quad (B.25)$$

sendo:

$$r_e = r_p \cdot \left(\Delta \bar{H}_p^o + 2 \cdot PM_{M_1} \cdot \int_o^r (\hat{C}_{p_P} - \hat{C}_{p_{M_1}}) dT + 2 \cdot PM_{M_2} \cdot \int_o^r (\hat{C}_{p_Q} - \hat{C}_{p_{M_2}}) dT \right) \quad (B.26)$$

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:

$$\frac{d\rho_r}{dt} = \frac{A_{m1} \cdot F_{m1} + A_{m2} \cdot F_{m2} + A_s \cdot F_s + A_T \cdot F_T}{\rho_r - A_{m1} \cdot [M_1]_r - A_{m2} \cdot [M_2]_r - A_s \cdot [S]_r} \quad (\text{B.27})$$

onde:

$$F_{m1} = \rho_r \cdot \varphi[M_1]_r - \frac{\varphi W_r \cdot [M_1]_r}{V_r} \quad (\text{B.28})$$

$$F_{m2} = \rho_r \cdot \varphi[M_2]_r - \frac{\varphi W_r \cdot [M_2]_r}{V_r} \quad (\text{B.29})$$

$$F_s = \rho_r \cdot \varphi[S]_r - \frac{\varphi W_r \cdot [S]_r}{V_r} \quad (\text{B.30})$$

$$F_T = \rho_r \cdot \frac{dT_r}{dt} \quad (\text{B.31})$$

sendo:

$$\varphi[C]_r = \frac{W_{r-1} \cdot [C]_{r-1}}{V_r \cdot \rho_{r-1}} + \frac{F_r \cdot [C]_{Fr}}{V_r \cdot \rho_{Fr}} + \frac{B_{r+1} \cdot [C]_{r+1}}{V_r \cdot \rho_{r+1}} - \frac{(R_r + B_r) \cdot [C]_r}{V_r \cdot \rho_r} + r_{c,r} \quad (\text{B.32})$$

$$\varphi W_r = W_{r-1} + F_r + B_{r+1} - R_r - B_r \quad (\text{B.33})$$

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 analíticos para o 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 determinístico do processo desenvolvido no capítulo VII, sendo posteriormente integradas através da sub-rotina LSODE em linguagem FORTRAN 90/95.