UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO : ENGENHARIA DE SISTEMAS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

CONTROLE DE REATORES EXOTÉRMICOS BATELADA

Este exemplar corresponde à redação final da tese de Mestrado, defendida pelo Engº. João Carlos Leite César Filho, aprovada pela Comissão Julgadora em 23.10.92.

Profª. Drª. Mário de Jesus Mendes
(orientador)

Outubro, 1992

Campinas - SP - Brasil

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO : SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

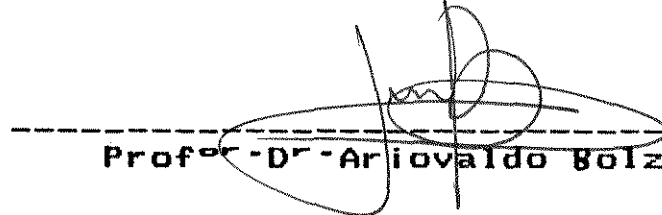
CONTROLE DE REATORES EXOTÉRMICOS BATELADA

Autor : João Carlos Leite César Filho

Tese submetida à Comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP, como parte dos requisitos necessários para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química.

Aprovada por:

Profº-Drº-Mário de Jesus Mendes
(orientador)



Profº-Drº-Ariovaldo Bolzan

Profº-Drº-João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira

Outubro, 1992

Campinas - SP - Brasil

A Raquel , com carinho,

pela compreensão e incentivos durante esta etapa

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que, direta ou indiretamente, contribuiram para e realização deste trabalho, em especial

Ao Prof. Dr. Mario de Jesus Mendes pela orientação e incentivos

À meus pais e aos amigos que me motivaram a continuar

À FEQ / UNICAMP

Ao CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - pelo auxílio financeiro que permitiu a conclusão deste trabalho

RESUMO

No presente trabalho é apresentado uma metodologia de Controle Digital Direto de reatores batelada multiproduto exotérmicos com trajetórias de Temperatura pré-definidas, para reações do tipo consecutivas e reversíveis.

A representação do processo via computador recorre a um algoritmo de integração numérica do modelo simplificado de um reator com camisa de vapor e serpentina de resfriamento, e das transformações químicas que nele ocorrem.

A técnica de controle desenvolvida, baseada numa combinação de malhas de Antecipação e Realimentação e na estimação "on-line" do calor de reação, é sustentada apenas em medidas de temperatura diretamente do processo. Pode-se verificar, pelos resultados de simulações em malha fechada, que esta estrutura é robusta e apresenta um excelente desempenho.

ABSTRACT

A method of Direct Digital Control for exothermic multiproduct batch reactor with predefined temperature tracking is presented in this work. The studies consider two types of characteristic reactions: consecutive and reversible.

The process computer simulation is obtained by numerical integration solution of a simplified reactor model and its chemical reactions. The mentioned reactor is fitted with a vapor jacket and a cooling coil.

The developed control technique, using a feedback-feedforward combination loop of the on-line reaction heat estimation, is based on direct temperature measurements of the real process. The closed loop simulation results show a robust and excellent performance of the proposed strategy.

ÍNDICE

pag

CAPITULO 1 - Objetivos 1

CAPITULO 2 - Revisão Bibliográfica

2.1 - Introdução 2

2.2 - Teoria Clássica Aplicada no Controle de Reatores Batelada..... 7

2.3 - Controle Avançado de Reatores Batela Exotérmicos

2.3.1 - Controle Combinado de realimentação e Antecipação..... 10

2.3.2 - Estrutura de Controle pela Técnica do Filtro Kalman..... 12

2.3.3 - Controle por Linearização Global..... 13

2.3.4 - Controle Adaptativo e Controle Auto Ajustável. 14

CAPITULO 3 - Modelagem do Reator Batelada Exotérmico

3.1 - Introdução..... 16

3.2 - Desenvolvimento Matemático do Modelo do Processo

3.2.1 - Modelo do Equipamento..... 17

3.2.2 - Modelo Cinético..... 23

3.2.3 - Modelo Calorimétrico..... 25

3.3 - Descrição dosProcessos Estudados..... 25

3.3.1 - Processo com Reações Consecutivas - Caso Estudo 1..... 26

3.3.2 - Processo com Reações Reversíveis - Caso Estudo 2..... 27

3.4 - Modelos Diferenciais Usados nas Simulações Numéricas..... 29

3.4.1 - Reações Exotérmicas Consecutivas em Reator tipo Batelada com Camisa e Serpentina - Caso Exemplo 1..... 29

3.4.2 - Reações Exotérmicas Reversíveis em Reator tipo Batelada com Camisa e Serpentina - Caso Exemplo 2..... 30

3.5 - Método Numérico para Integração das Equações do

Modelo..... 31

CAPÍTULO 4 - Controle Combinado Realimentação-Antecipação do Reator Batelada Exotérmico

4.1 - Introdução..... 35
4.2 - Definição da Estratégia de Controle..... 37
4.3 - Estrutura do Controlador de Temperatura..... 39
4.4 - Algoritmos de Controle..... 41
4.4.1 - Algoritmo de Dahlin..... 41
4.4.2 - Controlador para a Etapa de Aquecimento..... 42
4.4.3 - Algoritmo para a Etapa de Transição..... 49
4.4.4 - Controlador para a Etapa de Resfriamento (ou Regulatória)..... 52
4.5 - Considerações sobre os Limites de Operação..... 60
4.6 - Informações Adicionais..... 64

CAPÍTULO 5 - Implementação e Análise de Desempenho do Sistema de Controle

5.1 - Introdução..... 65
5.2 - Simulaçao do Controle do Processo com Reações Consecutivas - Algoritmo 1..... 65
5.2.1 - Parâmetros de Desempenho..... 68
5.2.2 - Análise da Estrutura de Controle por Simulação em Malha Fechada..... 69
5.3 - Modificações no Algortimo 1 para o Reator com Reações Consecutivas
5.3.1 - Algoritmo 2..... 70
5.3.2 - Algoritmo 3..... 73
5.3.3 - Algoritmo 4..... 77
5.3.4 - Algoritmo 5..... 82

5.4 - Sintonização dos Controladores..... 87
5.5 - Seleção do Melhor Algoritmo..... 91
5.6 - Sensibilidade do Sistema de Controle..... 93
5.7 - Simulação do Controle do Processo com Reações Reversíveis..... 95

CAPÍTULO 6 - Conclusões 98

NOMENCLATURA 102

BIBLIOGRAFIA 106

CAPITULO 1 - OBJETIVOS

A inexistência de um estado estacionário nominal confere ao controle de reatores batelada exotérmicos alguns desafios específicos. As políticas operacionais envolvidas em plantas multiproduto-multipropósito frequentemente apoiam-se em ensaios laboratoriais reduzidos, e requerem a implementação de estratégias de servo controle flexíveis, eficientes e que conduzam os sistemas reacionais ao longo de trajetórias otimamente pré-determinadas de Temperatura vs. tempo; em casos mais simples se é exigido técnicas de controle regulatório.

Diante destas motivações, este trabalho visa oferecer uma outra alternativa para o controle de reatores descontínuos . Um modelo matemático simples será desenvolvido para simular em computador o comportamento dinâmico em malha fechada do reator batelada exotérmico com camisa de vapor e serpentina de resfriamento. O método escolhido para o Controle Digital Direto baseia-se na estrutura combinada antecipação-realimentação.

Estes algoritmos de controle podem ser sintonizados separadamente e as expressões algébricas que os compoem estão sustentadas apenas em medidas "on-line" de temperatura. O algoritmo de Dahlin, usado em sua forma discretizada na malha de realimentação, atenderá às necessidades de compensação de tempo morto do processo. O termo não linear do calor de reação que aparece no balanço energético será tratado como uma perturbação inferencial e um algoritmo antecipativo compensará seu efeito sobre a variável de controle, a temperatura.

A sintonização ótima dos controladores será realizada mediante o critério de minimização de IAE, parâmetro este intimamente relacionado com o desempenho do servocontrole. Para avaliar a robustez da estrutura de controle serão consideradas as operações do reator com diferentes concentrações de reagentes e vários tempos de amostragem. Como forma de verificar a aplicabilidade desta estratégia no controle de reatores multiproduto, simular-se-á em malha fechada dois processos distintos : O primeiro com reações consecutivas e o outro com reações reversíveis.

CAPITULO 2 - REVISAO BIBLIOGRÁFICA

2.1 - INTRODUÇÃO

As vantagens operacionais, flexibilidade e adaptabilidade, delegam aos processos descontínuos uma atenção especial, naquilo que concerne, em geral, à produção de especialidades químicas (química fina), polímeros e bioprodutos. Estes processos são caracterizados não somente pela produção de produtos em escala reduzida e maior valor adicionado, mas tambem por lidarem com sistemas de reações com mecanismos cinéticos complexos ou mal conhecidas. Assim, mesmo embora exista uma necessidade industrial em se desenvolver metodos de representação estequiométrica adequados a estes sistemas reacionais complexos, e difícil derivar modelos cinéticos confiáveis. As causas diretas são as proprias limitações de precisão e resolução destes modelos, e a inviabilidade econômica que acompanha os procedimentos experimentais envolvidos. Estas razões conferem desafios específicos aos processos batelada e abrem um amplo campo de estudos e aplicações na Engenharia Química.

Diante dos problemas operacionais induzidos pelo estado dinâmico dos processos descontínuos industriais e das características das operações de plantas de batelada (multiproduto--multiproposito), implantar uma política de controle de produção e de processo exige critérios cautelosos de análises técnico-econômicas. Por outro lado, existem significantes benefícios a serem alcançados com o controle ótimo de quase todos estes processos. A experiência com instalações industriais mostrou alguns destes benefícios de maior interesse [1]:

- Aumento da produtividade como resultado da redução dos ciclos de produção e melhoria dos rendimentos.
- Melhoria e invariabilidade da qualidade entre ciclos sucessivos.
- Redução dos custos de produção pelo uso eficiente de material e energia, alcançados tanto pela otimização das "utilidades" de planta, quanto pela redução das perdas daquelas bateladas fora de

especificação.

- Maior segurança das instalações e do pessoal envolvido no processo.

As três primeiras áreas de benefícios, em associação com a disponibilidade crescente de "hardware" a custos acessíveis para a aplicação no controle de processos (computadores e dispositivos), têm justificado a execução de projetos de automação no controle de instalações descontínuas. Segundo experienciou Metha [1], se tem, na maioria das situações, um retorno de investimento do capital a curto prazo.

Sob o ponto de vista da Engenharia Química, o controle de processos batelada pode ser dividido em duas categorias [2]:

I - Problemas da otimização de rendimento

II- Problemas do controle de qualidade

Os problemas do tipo (I) assumem importância em áreas tecnológicas onde o custo de produção é uma fração significante no preço de venda do produto final (gêneros petroquímicos e alguns fármacos). Esta categoria combina o problema do controle com a otimização da produção (rendimento,seletividade) e pode ser formulada como Problemas de Valor Final :

$$\text{Dado} \qquad \dot{x} = f(x,u) \;,\; 0 \le t \le tf \qquad (2.1)$$
$$y = \phi\,[x(tf)] \;.$$

achar a lei de controle para que:

(i) y seja máximo ou

(ii) y≥ um valor desejado.

onde x são variáveis de estado e u variáveis manipuladas.

Uma característica especial deste tipo de problema está na independência da variável controlada, y, com o tempo de operação: y pode assumir "qualquer" valor em um dado instante, t.

A classe dos Problemas do Controle de Qualidade (II) é especialmente importante em tecnologias de Química fina (Novos fármacos, produtos especiais), onde o custo de produção é relativamente pequeno sobre o custo final do produto, e a qualidade em jogo depende rigidamente das condições de operação do processo. Nestas situações, o risco de se inutilizar uma batelada inteira por produto "fora de especificação" envolve quantias elevadas em razão da escala reduzida de produtos de alto custo. Assim, estes Problemas podem ser frequentemente formulados como Controle de Precisão ou Problema de Ajuste:

$$\text{dado} \qquad \begin{aligned} \dot{x} &= f(x,u) \quad . \\ y &= h(x) \quad . \end{aligned} \qquad (2.2)$$

achar a lei de controle tal que $y(t)$ persiga uma dada trajetória imposta, y_{sp}.

Segundo afirma **Kravaris** [2], é possível reformular um Problema de Valor Final (I) como um Problema de Ajuste (II), reduzindo-o a outro problema que defina a lei de controle que force o sistema a se ajustar ao perfil ótimo $x(t)$. Especificamente falando de reator batelada com reação exotérmica, a desvantagem desta reformulação de conceitos vem da possível influência dos erros de modelagem do equipamento e do sistema cinético em questão, sobre a qualidade do controle.

Luyben [3] estuda o controle ótimo da temperatura de reatores batelada e define alguns procedimentos na determinação das trajetórias "ótimas", T_{sp}, para reações consecutivas e reversíveis. Como limitações deste trabalho de otimização, aparece a simplicidade dos modelos cinéticos usados nas simulações e da lei de controle implantada nos moldes da Teoria Clássica.

Nos trabalhos publicados por Lewin [4] e Schuler [5] apareceram outras alternativas de controle ótimo com modelos de ordem reduzida.

Em situações práticas, onde há a complexidade do sistema cinético e da dinâmica dos equipamentos em questão, resolver o problema de controle ótimo sob restrições de qualidade exige ao menos o conhecimento de um modelo cinético aproximado que atenda eficientemente às exigências da política de controle.

Trabalhos recentes mostram a tendência cada vez maior do uso de computadores para a estimação "on-line" de parâmetros e para a aproximação de processos a modelos de ordem reduzida. Bonvin [6,7] desenvolveu uma técnica de estimação "on-line" de propriedades de processo variantes no tempo e ajustou a dinâmica cinética desconhecida de um sistema de reações químicas por um modelo simplificado de parâmetros estimados diretamente do processo. A ferramenta matemática usada em seus estudos baseou-se na teoria de Filtragem Kalman, a qual tem recebido atualmente grande atenção na análise e controle de reatores batelada.

Na Indústria Química, por outro lado, usualmente se recorre à investigação experimental em ensaios de laboratório (estudos de bancada) a fim de se determinar por tentativa e erro as passagens sub-ótimas que conduzam o sistema reacional a um nível desejado de qualidade e rendimento. Tendo em mãos o percurso "ótimo" da variável controlada, geralmente a temperatura [10], se é obrigado desenvolver a estratégia de controle que atenda às exigências deste ajuste (T_{op}).

A sequência de procedimentos práticos descritos acima faz parte da política operacional presente nas instalações industriais envolvendo reatores multiproduto-multipropósito [10].

Em situações menos comuns, onde se disponha de um modelo que represente confiavelmente a resposta do reator às mudanças nas variáveis em ampla faixa de operação, pode-se valer do princípio de otimização sugerido por Rippin [10]. Neste trabalho é mostrado a metodologia de cálculo envolvida na busca dos perfis ótimos de temperatura, que minimizem uma dada função objetivo em detrimento a restrições advindas das característica desejadas ao produto final (p.e. seletividade).

Pela análise da maior parte dos trabalhos publicados na literatura, observa-se que o controle servo-regulatório de reatores batelada respeita normalmente três etapas típicas de processo: (i) Uma etapa de partida, onde os componentes reacionais são aquecidos da temperatura ambiente até a temperatura nominal de reação. (ii) Uma fase de reação onde o "set-point" da temperatura é ajustado. Este ajuste pode ser constante ou variável no tempo. (iii) Uma fase de parada, onde a mistura é resfriada para a temperatura ambiente.

Alguns artigos estudam o problema do controle regulatório de reatores batelada recorrendo à adaptação da Teoria Clássica de Controle a processos descontínuos. Outros trabalhos mais recentes abordam o problema com estruturas e leis de controle mais sofisticadas e implementam conceitos da Teoria de Controle Avançado em malhas de Controle Digital Direto (CDD). Aparecem, ainda, aqueles trabalhos que combinam estes dois tipos de teorias.

Como forma de facilitar a análise e comparação de alguns destes sistemas de controle, é conveniente dividir a Revisão Bibliográfica que se sucede, em duas partes: Na primeira se dará ênfase à Teoria Clássica de controle analógico. As estruturas mais recentes da Teoria de Controle Avançado na automação industrial, ficarão a cargo da segunda porção.

Para organizar este desenvolvimento, respeitar-se-á a sequência abaixo onde figuram grande parte dos tipos de esquemas aplicados no controle de temperatura de reatores batelada exotérmicos:

- TEORIA CLÁSSICA (Analógico)
  - REALIMENTAÇÃO (MALHA ÚNICA)
  - CONTROLE CASCATA
- CONTROLE AVANÇADO (CDD)
  - REALIMENTAÇÃO/ANTECIPAÇÃO
  - FILTRO KALMAN (CONTROLE ADAPTATIVO)
  - CONTROLE POR LINEARIZAÇÃO GLOBAL
  - ADAPTATIVO E AUTO SINTONIZÁVEL

2.2 - TEORIA CLÁSSICA APLICADA NO CONTROLE DE REATORES BATELADA

Os problemas associados ao controle de reatores descontínuos com reações exotérmicas têm merecido a atenção de diversos autores. Marroquin e Luyben [3], conforme já foi dito, estudaram o problema do controle ótimo de tais processos, evidenciando as limitações deste método, e mostrando que, mesmo para casos relativamente simples, o modelo dinâmico do reator é de ordem elevada (7ª-10ª ordem). Os mesmos autores apresentaram e analisaram diversas alternativas para o resfriamento destes sistemas, e compararam o desempenho de controladores lineares clássicos (P e PI) com o de controladores não-lineares tipo cascata [12].

O controle destes processos com as três fases de operação mencionadas anteriormente é um problema particularmente difícil quando estudado pela teoria clássica de controle [8,13]. A ausência de um estado estacionário nominal, e a ocorrência do comportamento não linear induzido pela parcela exotérmica do calor das reações envolvidas, não permitem sintonizar os controladores analógicos pelos métodos usados em processos contínuos (p.e.Ziegler-Nichols) [11,13].

Lipták estudou a fundo a aplicabilidade prática de estratégias de controle de reatores químicos sob o âmbito da Teoria Clássica [8]. Nesse trabalho, observou as dificuldades associadas à sintonização de controladores lineares padrão no controle regulatório dos reatores batelada exotérmicos, e sugeriu alguns valores típico dos parâmetros de sintonia, K_c, τ_I e τ_d, para as instalações industriais com malhas de realimentação.

Neste artigo o autor apresenta uma discussão geral da instrumentação que pode ser usada para aumentar o desempenho e a segurança destes reatores descontínuos, no campo de técnicas avançadas de controle e geralmente sustentadas pelo controle tipo cascata.

Como forma de evitar a saturação do módulo integral ("reset

windup") destes controladores durante a fase de aquecimento, Lipták sugere a implementação de um dispositivo denominado "batch unit" e, para a eliminação das sobrelevações caracterizadas pelo acesso à etapa de reação, recorreu-se à "unidade módulo dual", primeiramente desenvolvida por Shinskey [13]. Estas técnicas simples em associação com os controladores lineares (p.e. PID), tornam-se vantajosas ao passo que utilizam os dispositivos analógicos habitualmente encontrados nas industrias e dispensam o conhecimento profundo dos mecanismos cinético envolvidos no processo; são limitadas tanto pela introdução de parâmetros adicionais de sintonização ("preload") na estratégia de controle, quanto pelas próprias restrições do controle tipo cascata.

A Figura 2.1 ilustra a estrutura de controle tipo cascata que aparece com frequência em operações industriais. O fluxo de transferência de calor da camisa para o reator, nesta situação, é fornecido por um fluido térmico qualquer (água, óleo térmico) proveniente de um trocador externo. Outra possibilidade operacional aparece na Figura 2.2, onde a configuração tipo "split-range" da malha de controle cascata é empregada como forma de otimizar o controle de aquecimento e resfriamento, durante toda a batelada [15]. A Figura 2.3 elucida o efeito da "batch unit" no desempenho da temperatura do reator.

O grande prejuízo por trás destas estruturas de controle cascata vem quando se é necessário garantir a maior velocidade de resposta do(s) controlador(es) secundário(s) em relação ao controlador principal. Por outro lado, estes sistemas vem se mostrando superiores em comparação com as malhas de realimentação simples [11].

Como vantagens dos sistemas de controle analógico para reatores batelada, pode-se evidenciar a simplicidade e o baixo custo de implantação, e a possibilidade de execução conjunta com a teoria avançada no Controle Digital Direto (CDD).

Diante desta possibilidade do acoplamento com o CDD, Wu [14] em seu trabalho de monitoramento e análise de efeitos térmicos

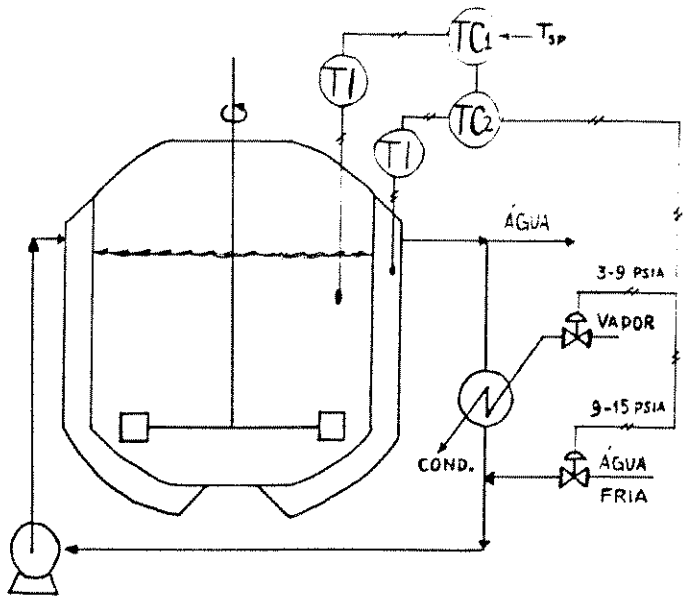


Figura 2.1

Estrutura de controles tipo cascata

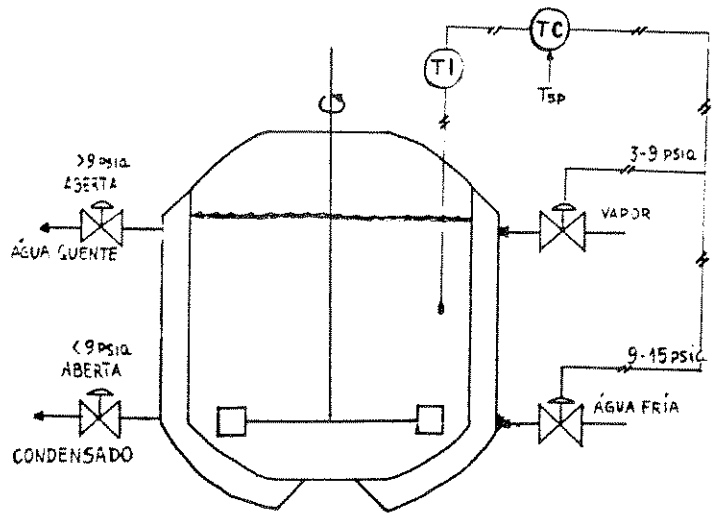


Figura 2.2

Configuração de controle tipo "split-range"

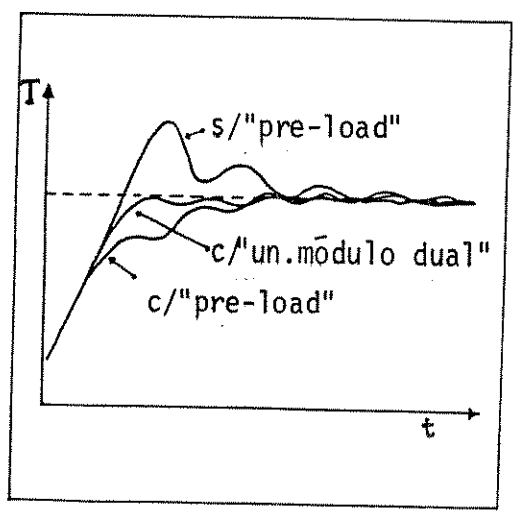


Figura 2.3

Desempenho dos sistemas de controle com "unidade módulo dual" e "pre-load".

dinâmicos em reatores semi-batelada, conciliou técnicas de controle por computador com a malha de controle cascata analógico, sendo o ajuste da temperatura do fluido refrigerante fixado por uma lei de controle por antecipação.

No capítulo 4 deste trabalho, a Figura 4.4 é outro exemplo típico da possibilidade de realização do CDD em sincronia com controladores analógicos secundários (cascata), ajustados por leis de controle mais sofisticadas.

2.3 - CONTROLE AVANÇADO DE REATORES BATELADA EXOTÉRMICOS

Em virtude das perturbações dinâmicas decorrentes do calor gerado ao longo das tranformações químicas, Q_r, a qualidade e o desempenho adequado de um sistema de controle são mais facilmente alcançados com os controladores de ganho variável [9,13].

Outro agravante no projeto de controladores para reatores descontínuos multiproduto advém da indisponibilidade de modelos que representem adequadamente cada processo em questão. Por outro lado, a disponibilidade cada vez maior do uso de computadores para o controle de processos abriu novas frentes de resolução destes problemas.

A própria característica das plantas multiproduto e o sentido de otimização de produção vêm exigindo técnicas de controle cada vez menos escoradas em árduos esforços laboratoriais. O maior desafio, porém, permanece na necessidade de se desenvolver métodos simples para identificar os modelos não lineares, e muitas vezes variantes no tempo, para que o controle ótimo seja aplicado. Assim, tem sido comum aplicar métodos de estimação "on-line" de termos dinâmicos e predição de variáveis não mensuráveis.

2.3.1 - CONTROLE COMBINADO ANTECIPAÇÃO E REALIMENTAÇÃO

Estas técnicas de estimativa de perturbações "desconhecidas" -

especificamente a parcela Q_r - usualmente servem como suporte a algoritmos antecipativos. A combinação destes algoritmos com malhas de controle por realimentação - analógicas ou não - são implementadas como forma de corrigir os erros envolvidos nos modelos que os sustentam [2].

Dentro desta filosofia, Hamer e Juba [9] desenvolveram um método prático de estimação "on-line" do calor reação em escala piloto, baseado em um modelo simples de reator. Este modelo simplificado e o estimador de Q_r permitiram projetar e implantar com sucesso uma estrutura de controle por realimentação (não linear) e antecipação, para reações com cinética pouco conhecida.

Analogamente, Jutan e Uppal [14] partiram do princípio que o valor de Q_r pode ser estimado ao longo da operação do reator e propuseram um esquema simples e interessante de controle combinado de realimentação e antecipação para a temperatura do reator, conforme ilustra a Figura 2.4. A realização desse estudo, aplicado com base em operações piloto de um reator com camisa e serpentina (Figura 3.1), coloca um problema fundamental: para uma variável controlada, a temperatura do reator, T, existem supostamente duas variáveis manipuladas, a temperatura do vapor T_s, e a vazão do fluido de resfriamento na serpentina, F_c.

Jutan e Uppal [16] alternativamente resolveram este problema, recorrendo a uma estrutura paramétrica de controle, que para o problema apresentado teria a forma:

$$T_s = \alpha_1 z + \beta_1$$
$$F_c = \alpha_2 z + \beta_2 \qquad (2.3)$$

onde z é uma variável paramétrica, adimensional, que pode variar entre 0 e 1 e α_1, α_2, β_1 e β_2, são constantes cujos valores definem a faixa de variação prevista para T_s e F_c.

As vantagens desta proposta de controle (Figura 2.4) são similares àquelas alcançadas pelas demais estruturas que combinam uma ação antecipativa com outra corretiva: É evidente que

eliminando Q_r da malha de realimentação, a ação básica desta é controlar o reator suposto "sem" reação. Desta forma, o sistema de controle torna-se mais robusto e o seu desempenho pode ser consideravelmente aperfeiçoado

Costa e Kravaris [2], por outro lado, sugerem que, para situações mais restritas onde se disponham de modelos relativamente confiáveis para resolução em tempo real, se possa usar a combinação realimentação e antecipação com desempenhos satisfatórios.

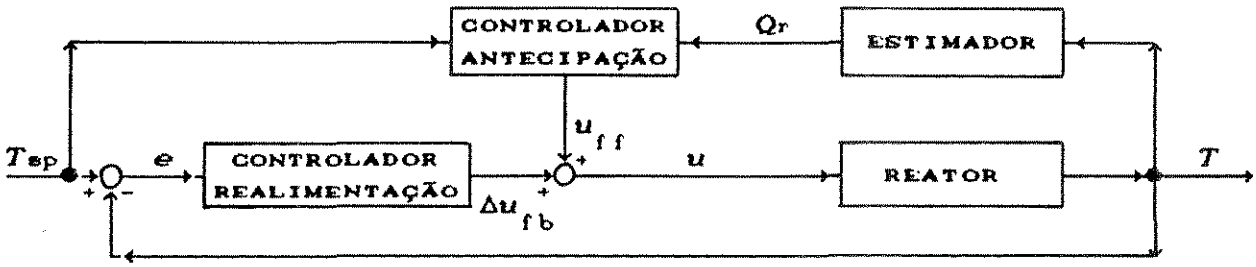


FIGURA 2.4 Diagrama de blocos simplificado do controle combinado realimentação-antecipação do reator batelada exotérmico segundo a proposta de Jutan e Uppal [16].

2.3.2 - ESTRUTURA DE CONTROLE PELA TÉCNICA DO FILTRO DE KALMAN

O Filtro Kalman (Extendido) permite, com informações da "história" do sistema, estimar a tendência das variáveis de estado imediatamente após um instante de medida. Esta técnica desenvolvida por Kalman [15], quando aplicada a um modelo de estado estocástico linearizado e discretizado conforme propoem Karlsen e Viladsen [16], pode ser usada para estimar "on-line" alguns efeitos térmicos e químicos de interesse no controle ótimo de reatores batelada [6,7,19].

Publicações recentes vêm estudando a aplicação deste método avançado e promissor, como ferramenta matemática na resolução de algoritmos de controle mais sofisticados. Mesmo embora se possam projetar sistemas de controle bem eficientes e seguros, a pouca divulgação desta técnica na área da Engenharia Química torna-a ainda de aplicação restrita.

O acesso à teoria de Filtragem Kalman pode ser conseguido em livros de controle estocástico [17,20,21].

Como exemplo da aplicação do Filtro Kalman Extendido no controle de reatores exotérmicos batelada, pode-se mencionar o trabalho de Rainer Perne [22] . Neste estudo, propôs-se um algoritmo adaptativo como alternativa no controle da potência da reação, dQ_r/dt . A técnica de filtragem foi incorporada ao sistema para fornecer as informações necessárias para a adaptação dos parâmetros de um controlador PI.

Embora se tenha alcançado uma nítida qualidade no controle ótimo e seguro da operação batelada, a aplicação da malha de controle da Figura 2.5 é limitada a sistemas reacionais que possuam modelos cinéticos no mínimo de ordem reduzida.

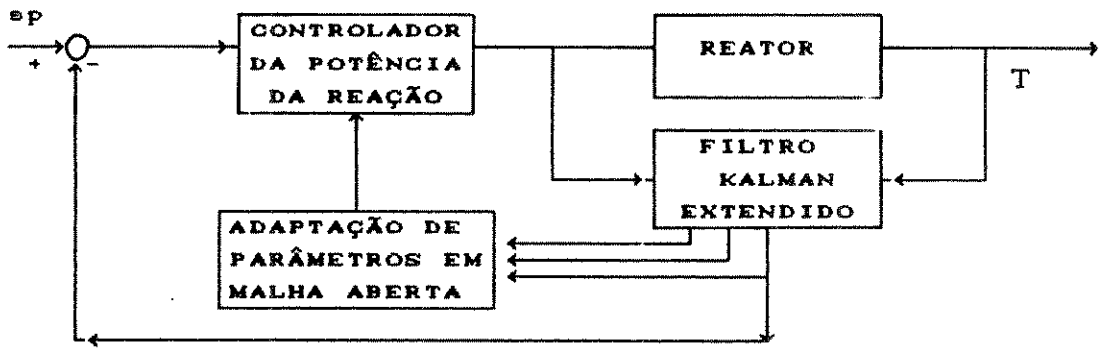


FIGURA 2.5 Diagrama de blocos simplificado do controle da temperatura do reator batelada exotérmico com adaptação de parâmetros e estimação de variáveis de estado com Filtro Kalman Extendido

2.3.3 - CONTROLE POR LINEARIZAÇÃO GLOBAL

Kravaris e Chang [23], baseando-se na estratégia apresentada por Jutan [16] com camisa e serpentina, propuseram uma transformação algébrica não linear no modelo de estado de um reator batelada para que o sistema adquirisse certas características de linearidade. Neste intúito, chegaram a uma estrutura robusta para o servocontrole do ajuste de temperatura imposto ao "set-point".

Esta operação não linear (v), sustentada pela definição de Derivada Lie, transforma um problema de controle SISO em outro BIBO (bounded-input bounded-output). Este algoritmo, quando combinado com um controlador PI analógico, resulta em uma malha de controle simplificada (Figura 2.6) e de fácil sintonização pela Teoria Clássica. Na Figura 2.6, ϕ, u e x, são respectivamente, função de transformação, variável manipulada e variável(eis) de estado.

A desvantagem do método recai novamente na necessidade de se dispor de um modelo, no mínimo de ordem reduzida a ser usado tanto no algebrismo das transformações, quanto na resolução "on-line" dos observadores das concentrações dos reagentes.

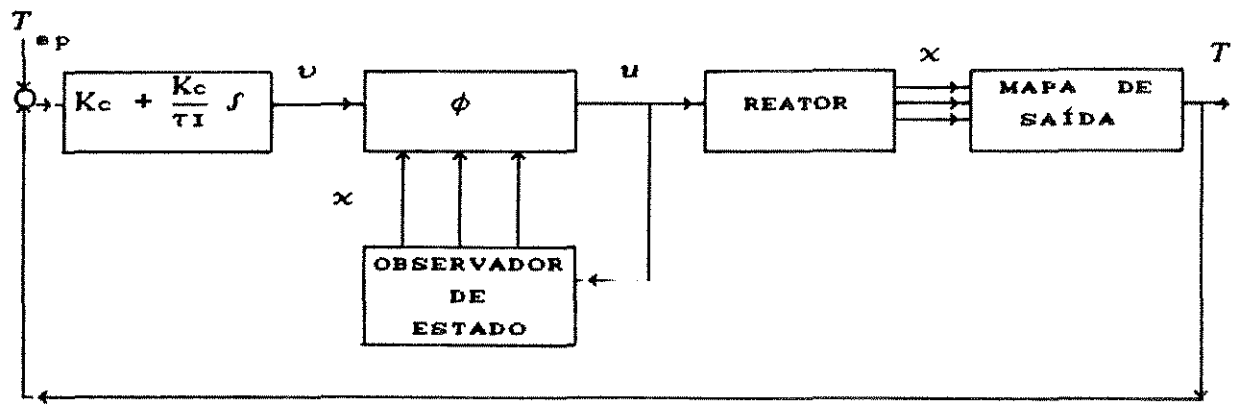


FIGURA 2.6 Diagrama de blocos simplificado do controle da temperatura do reator batelada exotérmico com Controle por Linearização Global (CLG)

2.3.4 - CONTROLE ADAPTATIVO E CONTROLE AUTO AJUSTÁVEL

De maneira a compensar as variações dinâmicas dos sistemas não lineares, inúmeros autores vêm recorrendo à técnicas de controle adaptativo, as quais diferem entre si apenas pela maneira com que os parâmetros do controlador são ajustados.

O aprimoramento dos computadores e a redução dos custos envolvidos na automação dos processos químicos, têm permitido aplicar a teoria do controle adaptativo por realimentação [21],

primeiramente divulgadas nos anos 50, no controle de reatores descontínuos. Tais algoritmos diferem em complexidade, estando esta última intimamente ligada àquilo que se deseja obter com o controle.

Lewin e Lavie [4], por exemplo, estudaram o controle ótimo de um reator batelada com reações de cinética conhecidas, e implementaram um algoritmo adaptativo dos parâmetros de um controlador padrão (PID). Outra publicação exemplo, que estuda o caso específico do controle de temperatura de um reator de polimerização de PVC [24], aplica uma lei de controle adaptativo global e compara seus resultados com os de uma estrutura de controle auto ajustável ("self-tuning"). Estes algoritmos auto ajustáveis apresentam a peculiaridade de se adequarem otimamente às necessidades do controle.

CAPITULO 3 - MODELAGEM E SIMULACAO DO REATOR BATELADA EXOTERMICO

3.1 - INTRODUÇÃO

Tecer considerações sobre o projeto, implementação e desempenho de uma estratégia de controle, torna-se possível somente quando houverem informações sobre o comportamento das variáveis controladas em detrimento de variações impostas às variáveis manipuladas. Na ausência, porém, de um processo real - especificamente para este trabalho, um reator tanque descontínuo com reações exotérmicas - se faz necessário um artifício que substitua o sistema químico a controlar.

Esta alternativa, denominada Simulação Numérica, recorre a um modelo matemático que represente a operação do processo, numericamente em computador, tão próximo da realidade quanto se faz necessário. A obtenção de um modelo determinístico confiável esbarra na dificuldade de se reproduzirem parâmetros de processo não mensuráveis ou de difícil estimativa [3]. Outra limitação dos modelos rigorosos como substitutos à realidade, se refere à aproximação feita quando reduzimos um problema "realmente" de parâmetros distribuídos como sendo outro de parâmetros concentrados.

Desta maneira, tendo este trabalho a ênfase de analisar uma estrutura de controle que dispense em seus algoritmos a necessidade de um Modelo Interno de Referência, não existe o compromisso de se reproduzir fielmente a operação de um dado processo; não se trata de uma modelagem comparativa. Entretanto, quanto mais próximo à realidade se possa recriar um reator batelada em operação, ter-se-á melhor confiabilidade associada à eficiência e ao projeto do controlador.

As seções seguintes descrevem o desenvolvimento matemático de um reator tipo batelada exotérmico hipotético em operação, e suas respectivas considerações simplificadoras.

3.2 - DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO DO MODELO DO PROCESSO

Seguindo a idéia de Luyben [15], são três os modelos abordados para a análise e simulação de bateladas industriais:

i - Modelo do equipamento

ii - Modelo cinético

iii- Modelo calorimétrico

Assim sendo, é conveniente desenvolver separadamente cada um dos sub-ítens acima.

3.2.1 - Modelo do Equipamento

Pode-se apresentar o reator (Figura 3.1) como sendo do tipo encamisado e com serpentina de arrefecimento [16]. As dimensões significativas para a modelagem foram obtidas mediante a realização de um projeto preliminar que conseguisse criar um efeito "realístico" na operação do equipamento, naquilo que diz respeito aos seguintes fatores:

- Limites máximos e mínimos das vazões dos fluidos e das temperaturas envolvidas nas trocas térmicas.
- Ordem de grandeza das dimensões do equipamento, como áreas de troca térmica, espessuras das paredes, volumes do reator, camisa e serpentina, comprimento da serpentina, tipo de agitação, dentre outras.

Diante destes dados e das considerações introdutórias, por opção, adotar-se-á no presente desenvolvimento uma modelagem simplificada como segue.

BALANÇO DE ENERGIA PARA O INTERIOR DO EQUIPAMENTO

$$\rho V c_p \frac{dT}{dt} = Q_v + Q_s \qquad (3.1)$$

onde

Q_v = Fluxo de calor da parede da camisa para o interior do equipamento,

Q_s = Fluxo de calor removido pela parede da serpentina,

T = Temperatura do meio reacional,

t = tempo.

Convém observar, porém, que :

- A equação (3.1) não considera as perdas energéticas pela superfície do líquido agitado. Quando for necessário, deve-se adicionar um termo que represente convenientemente este efeito.
- O termo $\rho V c_p$ que aparece na equação, depende dos componentes envolvidos no meio reacional estudado.

A equação diferencial (3.1) consiste no comportamento dinâmico de maior interesse, pois dela decorre a resposta da variável controlada, T, em detrimento às modificações diretas ou indiretas das variáveis manipuláveis.

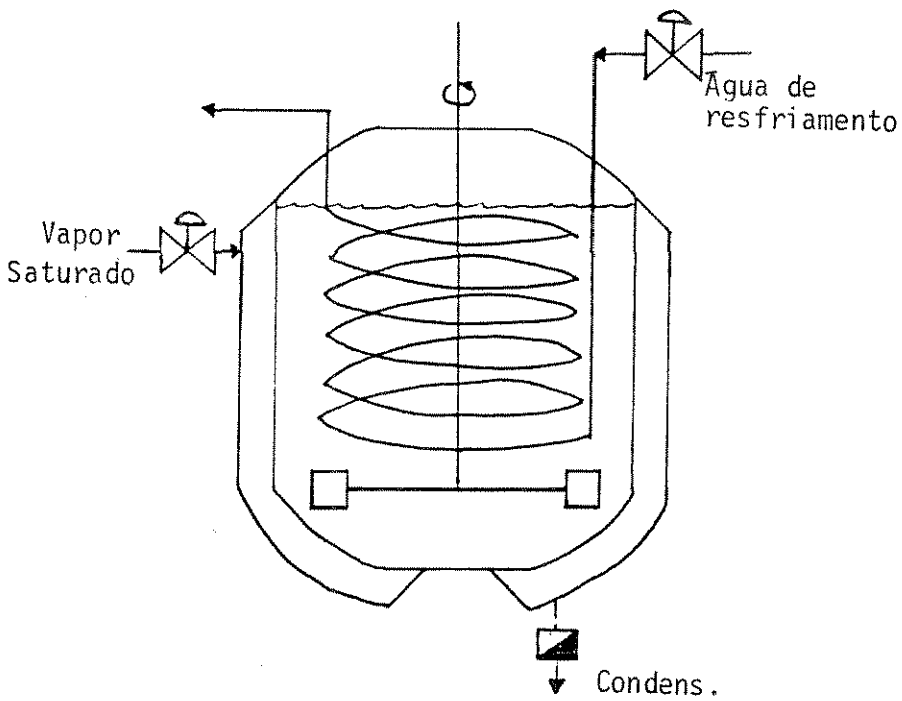


Figura 3.1

· CÁLCULO DE Q_v

O fluxo de calor da parede da camisa para o meio reacional é expresso por :

$$Q_v = h_i A_j (T_m - T) \qquad (3.2)$$

onde

A_j = Área de transferência de calor da parede de interface para o interior do reator,

T_m = Temperatura da parede de interface entre camisa e interior do reator,

h_i = Coeficiente de transferência de calor no interior do meio reacional, dado pela equação de Chilton e Drew [26] descrita abaixo:

$$h_i \frac{D_r}{K_r} = 0.87 \left(\frac{cp\ \mu}{K_r} \right)^{1/3} \left(\frac{L^2 N\ \rho}{\mu} \right)^{0.62} \left(\frac{\mu}{\mu_s} \right)^{0.14} \qquad (3.3)$$

As propriedades que aparecem em (3.3), inerentes ao meio reacional em estudo, são Kr, μ e μ_s, respectivamente, condutividade térmica e viscosidades da massa reacional a T e a Tm. Quanto aos parâmetros dimensionais, N, L e Dr, caracterizam-se por velocidade de agitação supostamente constante, comprimento equivalente da pá do agitador e diâmetro útil do tanque.

O último termo da expressão (3.3) tem a finalidade de corrigir as diferenças bruscas de viscosidade que possam existir em transformações químicas de compostos relativamente viscosos. Nos casos a serem estudados, as reações em fase líquida diluída justificam o desprezo deste termo no modelo simulado.

Para casos específicos, as propriedades físicas do meio reacional podem ser propriamente modeladas como variantes no tempo e dependentes da temperatura. No entanto pelas características das reações em ênfase, serão considerados valores médios destas propriedades a uma temperatura de operação fixa. Assim sendo, é

verdade afirmar que o termo h_i simulado assumirá um valor constante durante toda a batelada.

Convêm acrescentar que Q_v representa a parcela energética responsavel pelo aquecimento externo, onde traduz para a dinâmica da temperatura, T, as perturbações decorrentes das variações instantâneas de T_m.

· CÁLCULO DE Q_s

Aproximando o fluxo de fluido refrigerante da serpentina àquele descrito por um tubo de mesmas dimensões, e considerando a parede de interface suficientemente fina para se desprezar o efeito do acúmulo energético no metal, pode-se expressar o fluxo de calor pela parede da seguinte maneira **supondo-se um regime quase-estacionário:**

$$Q_s = F_c \rho_c cp_c (T_{cf} - T_{co}) = \frac{U_c A_c \left[(T - T_{co}) - (T - T_{cf}) \right]}{ln \left[\frac{(T - T_{co})}{(T - T_{cf})} \right]} \qquad (3.4)$$

Pode-se separar os "parâmetros" da equação anterior em dois grupos:

i - Variáveis do fluído refrigerante

F_c = Vazão volumétrica

T_{cf} = Temperatura à saída da serpentina

T_{co} = Temperatura à entrada da serpentina

U_c = Coeficiente global de transferência de calor entre o fluido refrigerante e o meio reacional

ii- Propriedades físicas dos fluidos e dimensões da serpentina

ρ_c = Densidade

cp_c = Calor específico

A_c = Área efetiva de troca térmica entre serpentina e interior do reator

Rearranjando a igualdade (3.4), chega-se a:

$$T_{cf} = T_{co} + (T - T_{co}) \left[1 - exp \left(- \frac{U_c A_c}{F_c \rho_c cp_c} \right) \right] \qquad (3.5)$$

e finalmente,

$$Q_s = F_c \rho_c cp_c (T - T_{co}) \left[1 - exp \left(- \frac{U_c A_c}{F_c \rho_c cp_c} \right) \right] . \qquad (3.6)$$

Observou-se, contudo, que o coeficiente global, Uc, pode ser relacionado com a vazão do líquido refrigerante [26]. Sendo assim, propõe-se atualizá-lo segundo a modelagem por uma correlação empírica conforme apresentado a seguir. No entanto, em simulações mais "exigentes", seria conveniente modelar tanto o comportamento dinâmico da temperatura da parede da serpentina, quanto as variações diferenciais da temperatura do líquido de arrefecimento.

· DETERMINAÇÃO DE Uc

Seguindo a suposição da ausência de resistência da parede da serpertina em oposição à transferência de calor do fluido refrigerante para o interior do reator, pode-se escrever :

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{is}} \frac{A_c}{A_{co}} \qquad , \qquad (3.7)$$

com

A_{co} = Área de transferência de calor da parede de interface para o interior do serpentina,

h_i = Coeficiente de transferência de calor no interior do meio reacional, dado pela equação (3.3),

h_{is} = Coeficiente de transferência de calor da parede para o fluido refrigerante, definido segundo a correlação apresentada por Coulson e Richardson [26], que pode ser modificada na forma de:

$$h_{is} = \left(h_{is} \right)_{\substack{tubo \\ reto}} \cdot \left(1 + 3.5 \frac{D_e}{D_c} \right) \qquad (3.8)$$

onde De é o diâmetro interno do tubo reto e Dc é o diâmetro nominal da hélice que compõe a serpentina. O termo (his)tubo é o coeficiente de película correlacionado pela expressão de Sieder e Tate [27], válida para a água em ampla faixa de Número de Reynolds.

$$h_{is} \frac{D_e}{k_c} = 0.023 \left(\frac{D_e v_c \rho_c}{\mu_c} \right)^{0.8} \cdot \left(\frac{cp_c \mu_c}{k_c} \right)^{0.4} \qquad (3.9)$$

Agrupando-se os termos, (3.9) toma a forma de :

$$h_{is} = 0.174 \frac{k_c^{0.6}}{D_e^{0.2}} \left(\frac{\rho_c F_c}{\mu_c} \right)^{0.8} \cdot \left(cp_c \mu_c \right)^{0.4} , \qquad (3.10)$$

com as propriedades físicas abaixo válidas para a água.

ρ_c = massa específica,

cp_c = calor específico,

μ_c = viscosidade e

k_c = condutividade térmica.

Substituindo as correlações (3.3), (3.8) e (3.10) em (3.7), e reagrupando os termos, obtém-se a expressão abaixo, que será útil para a atualização de Uc durante a integração numérica do modelo global do reator, sempre que Fc variar.

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{A_1 F_c^{0.8}} + \frac{1}{A_2} \qquad (3.11)$$

Os parâmetros A1 e A2 são resultados das substituições indicadas acima.

Para finalizar esta etapa de modelagem, vale mencionar que, de

maneira oposta a Qv. o termo Qs contribui dinamicamente para a diminuição de T, quando Fc sofrer as variações impostas.

BALANÇO DE ENERGIA PARA A PAREDE ENTRE A CAMISA E O REATOR

Considerando uma parede, de espessura xm e massa Mm, interfaceando o meio reacional e o vapor, temos o acúmulo energetico no material dado por :

$$M_m cp_m \frac{dT_m}{dt} = h_{i_0} A_{i_0} (T_s - T_m) - h_i A_i (T_m - T) \qquad (3.12)$$

Cpm e o calor especifico do metal da parede e Ai0 e Ai correspondem, respectivamente, à área de troca térmica interna à camisa e área útil de transferência de calor entre camisa e reator. hio é o coeficiente de transferência de calor da parte interna da camisa que, no presente caso, será considerado constante.

Observa-se, ainda, que a temperatura do vapor, Ts, que aparece no primeiro termo à direita da igualdade em (3.12), consiste em uma perturbação em Tm. Embora se considere nas simulações deste trabalho Ts como variável de resposta instantânea e direta, pode-se-ia expressar o comportamento dinâmico desta variável em um modelo que a relacionasse com a vazão de admissão do vapor.

Afirmar a hipótese de resposta direta de Ts e o mesmo que desprezar o acoplamento de uma equação diferencial do balanço de energia para o vapor, com as demais equações do modelo.

3.2.2 - Modelo Cinético

Para simular uma transformação química, tal qual ocorrendo em um processo real, usualmente se recorre a um modelo matematico que expresse a velocidade de reação em função de variáveis de processo e ao longo do tempo de operação, t. As representações cinéticas segundo um modelo matematico diferem em complexidade conforme a natureza das reações químicas envolvidas e a eficiência na

representação da realidade em amplo intervalo de operação.

No entanto, o fato da maioria das reações químicas envolvidas em reatores multipropósitos enquadrarem-se em irreversíveis, reversíveis, consecutivas e simultâneas [8,10], torna razoável afirmar que os coeficientes (K) das taxas de reação crescem exponencialmente com a temperatura, conforme ilustrado abaixo:

$$K = \beta \exp\left(-\frac{E_a}{R\,T_a}\right) \qquad (3.13)$$

A energia de ativação, E_a, determina o grau de dependência de K com a temperatura absoluta do sistema, T_a, segundo a lei de Arrhenius.

A relação (3.13) estabelece uma influência direta da temperatura nas transformações químicas.

Assim, com base nas afirmações acima, as equações diferenciais de balanço de massa que serão descritas posteriormente no item 3.3 serão sustentadas pela lei de Arrhenius. Contudo, é oportuno lembrar que existem outras possibilidades de se representar esta taxa de variação, valendo-se de modelos empíricos e ajustes experimentais de dados cinéticos.

Para melhor simular o reator multiproduto-multipropósito, escolheram-se dois Casos Exemplos: 1) uma sequência de reações consecutivas e 2) uma reação reversível. Os respectivos modelos cinéticos serão definidos a seguir.

Ainda que se possa fazer uso destes modelos diferenciais para definir trajetórias de temperatura que otimizem a produtividade e a seletividade [3,10,25], não consiste objetivo deste desenvolvimento estudar a otimização do reator. Ao contrário disto, as simulações em malha fechada dos dois Casos Estudo pressupoem o conhecimento das respectivas passagens ótimas de Txt que serão usados como ajustes impostos aos "set-points" dos controladores. Estas curvas ótimas são procedentes de trabalhos de otimização publicados na literatura [3,25].

O sentido prático em se aplicar perfis sub-ótimos pré-estabelecidos no estratégia de controle recai na possibilidade de se obter tais trajetórias de maneira eficiente, e em ensaios laboratoriais mais viáveis que aqueles envolvidos na determinação da expressão matemática da taxa de reação para produção de cada produto associado ao suposto reator.

3.2.3 - Modelo Calorimétrico

Quando se fala em reações exotérmicas, a contribuição do modelo calorimétrico aparece como um termo adicionado à equação dinâmica de T (3.1), intimamente relacionado ao fluxo de calor liberado no progresso da reação. O caráter exponencial da Lei de Arrhenius sobre o Calor de Reação, Q_r, estabelece a maior não linearidade do modelo do processo. Em consequência, a magnitude deste efeito atua como uma perturbação significativa nesta operação em regime batelada. A evolução de Q_r ao longo do processo pode ser observada por curvas do tipo Qrxt que aparecem no Capítulo 5.

3.3 - DESCRIÇÃO DOS PROCESSOS ESTUDADOS

Em um reator multiproduto-multipropósito supostamente existente, cujos parâmetros dimensionais devem ser fixados nas equações do modelo do equipamento, dois processos independentes serão simulados. Os procedimentos e considerações operacionais estabelecidos a seguir serão os mesmos para os dois Casos Estudo.

O reator deve ser carregado com os reagentes específicos. Nas simulações dos processos não serão equacionadas as dinâmicas das etapas de adição.

Após selar o reator, aquece-o com vapor saturado fornecido à camisa, até um dado nível de temperatura, T_{op}. O vapor condensado é coletado e drenado por uma purga a vácuo bem projetada. A mistura

reacional deve ser continuamente agitada a uma rotação específica. Para o resfriamento, o sistema dispõe de uma serpentina com água escoando a vazões moderadas.

Diante da modelagem desenvolvida a partir da equação (3.1), supoem-se constantes todas as propriedades físicas dos fluidos de troca térmica e dos materiais de que são feitos os equipamentos. Os valores de h_{is}, h_{io} e h_i são calculados e mantidos em um valor referente à média de temperatura da operação. Quando necessário se fizer, aconselha-se modelar propriamente tais propriedades, tornando-as variantes no tempo. A temperatura de entrada da água na serpentina, T_{co}, será mantida constante.

No final do próximo capítulo serão abordadas algumas considerações sobre os limites de operação das variáveis manipuladas adotadas na estratégia de controle para os dois Casos Exemplos.

3.3.1 - Processo com Reações Consecutivas - Caso Estudo 1

Pela teoria, ao sistema de duas reações consecutivas e irreversíveis, do tipo

$$A \xrightarrow{E_1} B \xrightarrow{E_2} C \quad ,$$

deve-se associar um Perfil Ótimo de Temperatura decrescente no tempo, t, quando se deseja uma alta seletividade na produção de B.

Diante desta afirmação, válida para $E_1 > E_2$, Ray e Szekely [25] realizaram trabalhos de otimização sobre restrições de máxima seletividade de B e mínimo tempo de batelada. Se baseando no modelo diferencial dado pelas equações (3.15) e (3.16), chegaram a uma curva ótima expressa por :

$$T = c_1 + c_2 \exp(-c_3 t) \quad , \quad 0 \leq t \leq t_f \quad . \qquad (3.14)$$

t_f é o tempo total de reação e as constantes c_1, c_2 e c_3, são

relativas ao sistema de reações modelados abaixo.

$$\frac{dC_A}{dt} = -r_1 \quad , \quad C_A(0) = C_{Ao} \tag{3.15}$$

$$\frac{dC_B}{dt} = r_1 - r_2 \quad , \quad C_B(0) = 0 \tag{3.16}$$

C_A e C_B são, respectivamente, concentrações molares dos componentes A e B. Os termos C_{Ao} e C_{Bo} referem-se aos valores atribuídos a estas variáveis. As expressões das taxas de reação, r_1 e r_2, seguem, conforme anteriormente mencionado, a Lei de Arrhenius.

$$r_1 = k_{1o}\, exp\left(-\frac{E_1}{RT_a}\right) C_A^{\,2} \tag{3.17}$$

$$r_2 = k_{2o}\, exp\left(-\frac{E_2}{RT_a}\right) C_B \tag{3.18}$$

Os termos E e k_{1o} são as energias de ativação e os fatores pré-exponenciais.

Assim sendo, a contribuição calorimétrica ao balanço de energia global deste processo pode ser escrito da forma,

$$Q_r = r_1(-\Delta H_1)V + r_2(-\Delta H_2)V \tag{3.19}$$

$(-\Delta H_1)$ e $(-\Delta H_2)$ referem-se aos calores de cada uma das reações da sequência consecutiva.

Considerando-se fase líquida diluída e agitação eficiente ao longo de toda a operação, é razoável admitir as propriedades físicas, ρ, cp, k, μ, e o volume reacional, V, como constantes.

3.3.2 - Processo com Reações Reversíveis - Caso Estudo 2

Luyben [3] publicou um trabalho de otimização de uma reação reversível, da forma

$$A \underset{-2\rightarrow}{\overset{1}{\longleftarrow}} B \quad , \qquad (3.20)$$

sob as restrições de máxima seletividade de B e tempo mínimo de batelada. Em várias simulações realizadas, concluiu a existência de um perfil ótimo de temperatura diferente daqueles usualmente isotérmicos.

Entretanto, não se detendo a limitações de otimização, convém realizar uma reação em regime isotérmico, cujo nível nominal de temperatura, Top, forneça rendimentos próximos aos valores máximos.

Os parâmetros cinéticos usados nas simulações são os mesmos sugeridos por Luyben [3].

Analogamente às reações consecutiva, tem-se um balanço mássico, sustentado por um modelo cinético, representado abaixo por

$$\frac{dC_B}{dt} = \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \quad , \quad C_B(0) = 0 \quad , \qquad (3.21)$$

$$C_A = C_{AO} - (C_B - C_{BO}) \quad , \quad C_A(0) = C_{AO} \quad , \qquad (3.22)$$

onde C_A e C_B são as concentrações molares de A e B, e C_{AO} e C_{BO} são as respectivas composições no início deste processo. As expressões das taxas das reações, $\bar{r}_1$ e $\bar{r}_2$, estão dispostas abaixo.

$$\bar{r}_1 = \bar{k}_{1O} \exp\left(-\frac{\bar{E}_1}{RT_a}\right) C_A \qquad (3.22)$$

$$\bar{r}_2 = \bar{k}_{2O} \exp\left(-\frac{\bar{E}_2}{RT_a}\right) C_B \qquad (3.23)$$

Os valores relacionados a $\bar{E}e$ e $\bar{K}_{iO}$ representam as energias de ativação e os fatores de frequência pré-exponenciais.

Em se tratando de um processo isotérmico, vale admitir as propriedades como constantes.

A evolução de calor gerado ao longo da operação, poderá ser

calculado por :

$$Q_r = (-\Delta\bar{H})V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \qquad (3.24)$$

3.4 - MODELOS DIFERENCIAIS USADOS NAS SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Lançando mão dos três modelos estabelecidos nas seções 3.2 e 3.3, resta montar os sistemas de equações diferenciais que descrevam o comportamento dinâmico das variáveis de estado e que possam ser integrados no tempo com uma rotina de Integração Numérica. Como optou-se pelo estudo de dois Casos Exemplos, deve-se dispor de um sistema diferencial para cada um destes processos, que aparecem esquematizados a seguir.

Estas equações, quando integradas simultaneamente em um intervalo de tempo genérico, traduzem o comportamento dinâmico da temperatura sempre que houverem variações das variáveis de entrada.

3.4.1 - Reações Exotérmicas Consecutivas em Reator Tipo Batelada com Camisa e Serpentina (Caso Exemplo 1)

Balanço de Massa

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1(T)\,C_A^2 \qquad (3.25)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1(T)\,C_A^2 - k_2(T)\,C_B \qquad (3.26)$$

$$k_1(T) = k_{1o}\,exp\left(-\frac{E_1}{R(T+273.15)}\right) \qquad (3.27)$$

$$k_2(T) = k_{2o}\,exp\left(-\frac{E_2}{R(T+273.15)}\right) \qquad (3.28)$$

Balanço de Energia

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_r}{\rho V c_p} + \frac{h_i A_j}{\rho V c_p}(T_m - T) - \frac{F_c \rho_c c_{p_c}}{\rho V c_p}(T - T_{co})\left[1 - exp\left(-\frac{U_c A_c}{F_c \rho_c c_{p_c}}\right)\right] \quad (3.29)$$

$$\frac{dT_m}{dt} = \frac{hi_o Aj_o}{M_m c_{p_m}}(T_s - T_m) - \frac{hi\,Aj}{M_m c_{p_m}}(T_m - T) \quad (3.30)$$

$$Q_r = k_1(T)\, C_A^2 (-\Delta H_1) V + k_2(T)\, C_B\, (-\Delta H_2) V \quad (3.31)$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{A_1 F_c^{0.8}} + \frac{1}{A_2} \quad (3.11)$$

Condições Iniciais do Caso Exemplo 1

$$T(0) = To \quad , \quad T_m(0) = T_{mo} \quad , \quad T_s(0) = T_{so}$$

$$C_A(0) = C_{Ao} \quad , \quad C_B(0) = 0$$

Trajetória ótima de Temperatura

$$T = c_1 + c_2 exp(-c_3 t) \quad , \quad 0 \le t \le t_f \quad . \quad (3.14)$$

3.4.2 - Reações Exotérmicas Reversíveis em Reator Tipo Batelada com Camisa e Serpentina (Caso Exemplo 2)

Balanço de Massa

$$\frac{dC_B}{dt} = \bar{k}_1(T)\, C_A - \bar{k}_2(T)\, C_B \quad (3.32)$$

$$C_A = C_{Ao} - (C_B - C_{Bo}) \quad (3.33)$$

$$\bar{k}_1(T) = \bar{k}_{10}\, exp\left(-\frac{\bar{E}_1}{R(T+273.15)}\right) \quad (3.34)$$

$$\bar{k}_2(T) = \bar{k}_{20}\, exp\left(-\frac{\bar{E}_2}{R(T+273.15)}\right) \quad (3.35)$$

Balanço de Energia

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_r}{\rho V c_p} + \frac{h_i A_j}{\rho V c_p}(T_m - T) - \frac{F_c \rho_c c_{p_c}}{\rho V c_p}(T - T_{co})\left[1 - exp\left(-\frac{U_c A_c}{F_c \rho_c c_{p_c}}\right)\right] \quad (3.36)$$

$$\frac{dT_m}{dt} = \frac{hi_o Aj_o}{M_m c_{p_m}}(T_e - T_m) - \frac{hi\,Aj}{M_m c_{p_m}}(T_m - T) \quad (3.37)$$

$$Q_r = \left(\bar{k}_1(T)\, C_A - \bar{k}_2(T)\, C_B\right)(-\Delta\bar{H})V \quad (3.38)$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{A_1 F_c^{0.8}} + \frac{1}{A_2} \quad (3.11)$$

Condições Iniciais do Caso Exemplo 2

$$T(0) = To \quad , \quad T_m(0) = T_{mo} \quad , \quad T_e(0) = T_{eo}$$

$$C_A(0) = C_{Ao} \quad , \quad C_B(0) = 0$$

Trajetória Ótima de Temperatura

$$T = Top \quad , \quad 0 \le t \le t_f \quad . \quad (3.39)$$

3.5 - Método Numérico Para a Integração das Equações do Modelo

Mediante todas simplificações impostas no decorrer destas modelagens, pode-se perceber que, mesmo em suas formas abreviadas, ambos desenvolvimentos matemáticos resultam em um sistema de equações de estado genericamente do tipo :

$$\frac{dC_A}{dt} = F_1(C_A, C_B, T) \quad (3.40)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = F_2(C_A, C_B, T) \qquad (3.41)$$

$$\frac{dT}{dt} = F_3(C_A, C_B, T, T_m, F_c) \qquad (3.42)$$

$$\frac{dT_m}{dt} = F_4(T, T_m, T_s) \qquad (3.43)$$

onde as duas primeiras equações pertencem aos balanços de massa e as demais correspondem aos balanços energéticos do processo.

Para a realização da simulação numérica deste conjunto de equações que modelam cada Caso Exemplo, implementa-se em computador uma rotina de integração sustentada pelo método de Runge-Kutta de 4º ordem.

A representação deste método para o k-ésimo intervalo da integração simultânea aparece exemplificado no algoritmo abaixo, dado para o Caso Exemplo 1.

$$C_{A_{k+1}} = C_{A_k} + \frac{1}{6}(K_{11} + 2K_{21} + 2K_{31} + K_{41}) \qquad (3.44)$$

$$C_{B_{k+1}} = C_{B_k} + \frac{1}{6}(K_{12} + 2K_{22} + 2K_{32} + K_{42}) \qquad (3.45)$$

$$T_{k+1} = T_k + \frac{1}{6}(K_{13} + 2K_{23} + 2K_{33} + K_{43}) \qquad (3.46)$$

$$Tm_{k+1} = Tm_k + \frac{1}{6}(K_{14} + 2K_{24} + 2K_{34} + K_{44}) \qquad (3.47)$$

onde :

$$K_{11} = h.F_1(C_{A_k}, C_{B_k}, T_k)$$

$$K_{12} = h.F_2(C_{A_k}, C_{B_k}, T_k)$$

$$K_{13} = h.F_3(C_{A_k}, C_{B_k}, T_k, Tm_k, F_c)$$

$$K_{14} = h.F_4(T_k, Tm_k, T_s)$$

$$K_{21} = h.F_1\left(C_{A_k}+.5K_{11}, C_{B_k}+.5K_{12}, T_k+.5K_{13}\right)$$

$$K_{22} = h.F_2\left(C_{A_k}+.5K_{11}, C_{B_k}+.5K_{12}, T_k+.5K_{13}\right)$$

$$K_{23} = h.F_3\left(C_{A_k}+.5K_{11}, C_{B_k}+.5K_{12}, T_k+.5K_{13}, T_{m_k}+.5K_{14}, F_c\right)$$

$$K_{24} = h.F_4\left(T_k+.5K_{13}, T_{m_k}+.5K_{14}, T_e\right)$$

$$K_{31} = h.F_1\left(C_{A_k}+.5K_{21}, C_{B_k}+.5K_{22}, T_k+.5K_{23}\right)$$

$$K_{32} = h.F_2\left(C_{A_k}+.5K_{21}, C_{B_k}+.5K_{22}, T_k+.5K_{23}\right)$$

$$K_{33} = h.F_3\left(C_{A_k}+.5K_{21}, C_{B_k}+.5K_{22}, T_k+.5K_{23}, T_{m_k}+.5K_{24}, F_c\right)$$

$$K_{34} = h.F_4\left(T_k+.5K_{23}, T_{m_k}+.5K_{24}, T_e\right)$$

$$K_{41} = h.F_1\left(C_{A_k}+K_{31}, C_{B_k}+K_{32}, T_k+K_{33}\right)$$

$$K_{42} = h.F_2\left(C_{A_k}+K_{31}, C_{B_k}+K_{32}, T_k+K_{33}\right)$$

$$K_{43} = h.F_3\left(C_{A_k}+K_{31}, C_{B_k}+K_{32}, T_k+K_{33}, T_{m_k}+K_{34}, F_c\right)$$

$$K_{44} = h.F_4\left(T_k+K_{33}, T_{m_k}+K_{34}, T_e\right)$$

e

subscrito k = número de iteração atual

h = passo de integração

O passo de integração utilizado nas simulações foi obtidos por tentativa e erro, assumindo valores tão pequenos quanto necessários.

Quando o processo estiver operando em malha fechada, este incremento de iteração deve satisfazer a seguinte condição:

$$\Delta/h = n_i \quad , \; n_i \in \mathbb{N}^* \quad ,$$

onde Δ é o intervalo de tempo de amostragem e n_i representa o número total de iterações durante este intervalo.

Deve-se perceber que, ao sistema composto por (3.44) a (3.47),

associam-se duas entradas dinâmicas, F_c e T_e, cujas variações serão impostas em função da estratégia de controle desenvovida no próximo capítulo.

Esta sequência de cálculo consiste numa ferramenta matemática que relaciona a variável controlada, T, com as variáveis manipuláveis, m(t), genericamente esquematizado como segue.

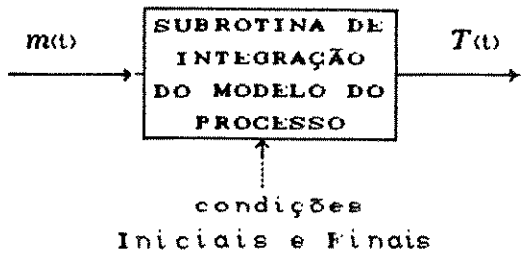


FIGURA 3.2 - Bloco do Algoritmo de Integração dos Modelos Estudados

CAPITULO 4 - CONTROLE COMBINADO REALIMENTAÇÃO-ANTECIPAÇÃO DO REATOR BATELADA EXOTÉRMICO

4.1 - INTRODUÇÃO

Antes de estudar algumas maneiras possíveis de se controlar as reações químicas ocorrendo no reator descrito no capítulo anterior, deve-se ter em mente os principais objetivos a serem alcançados.

Como objetivo deste trabalho pode-se considerar a implementação de uma estratégia de controle que atenda com flexibilidade a questão do servocontrole e controle regulatório de um reator multipropósito.

Na Indústria Química, o processamento descontínuo aparece com frequência em plantas multiproduto onde um mesmo equipamento é usado para processar produtos diferentes e com escala de produção reduzida. Assim, para ressaltar o sentido prático deste desenvolvimento, deve-se respeitar as imposições de viabilidade e as restrições operacionais dos procedimentos que comumente são realizados na indústria.

Ao contrário dos processos contínuos, nos processos batelada não existe o ímpeto econômico em se derivar experimentalmente um modelo cinético para cada produto a ser processado. As quantidades a produzir frequentemente não justificam os esforços laboratoriais envolvidos na determinação de uma expressão matemática confiável da taxa global de reação para cada síntese presente na planta multiproduto.

Por outro lado, deve existir um compromisso, por parte da política adotada, com a segurança das operações e com a qualidade dos produtos obtidos.

Por estas razões, controlar um processo batelada sob tais políticas, consiste em desenvolver uma estratégia que requeira um conhecimento mínimo do mecanismo e da cinética das transformações químicas associadas a cada produto.

Na prática, estas informações mínimas podem ser extraídas em uma análise preliminar em escala piloto ou em ensaios de bancada. Esta verificação teria por finalidade tanto observar por

calorimetria os efeitos exotérmicos durante as reações quanto traçar as passagens de temperatura que conduzam às melhores condições finais de rendimento e seletividade sem comprometer a segurança do processo (seção 4.5).

Portanto, na ausência de condições experimentais, os ensaios acima sugeridos não serão estudados no presente trabalho. Ao contrário disto, nas simulações numéricas serão utilizados, para cada Caso Exemplo, os perfis ótimos de temperatura previamente observado em trabalhos de otimização publicados [3,25].

Usualmente, em se tratando de controle de reações químicas em reatores de batelada, considera-se a temperatura como variável controlada [10]. Instrumentos precisos de aquisição de dados de temperatura para controle digital direto (CDD) são facilmente encontrados no mercado sob custos acessíveis o que viabiliza elaborar uma técnica de controle sustentada em medidas "on-line" desta variável [8]. Variáveis como concentrações de reagentes, mesmo embora de influência imediata na dinâmica das reações, não podem ser medidas diretamente do processo em tempo real; ao contrário, muitas vezes estas são inferidas com dados de temperatura, exigindo o conhecimento da expressão matemática da cinética das reações em questão [2].

O reator batelada com reação exotérmica modelado anteriormente configura um regime dinâmico não linear onde ocorre a ausência de um estado estacionário nominal. Por esta razão, os controladores clássicos sintonizados por testes dinâmicos do processo tem normalmente um desempenho inadequado [13]. Assim sendo, a ocorrência do termo Q_r nas equações linearizadas do balanço de energia, exige um controlador de ganho variável na malha de realimentação.

Todas as motivações anteriores levaram a procura de um método de controle digital direto da temperatura do reator, que dispensasse a resolução dos balanços de massa em seus algoritmos, e fosse baseado em esforços laboratoriais reduzidos. Outras características desejadas a esse sistema de controle são a

habilidade em perseguir as trajetórias de temperatura impostas ao "set-point", a não abordagem do problema sob o ângulo do controle ótimo "on-line", e a capacidade de se adaptar parâmetros de sintonia ao longo da operação.

Diante das alternativas apresentadas na revisão bibliográfica, escolheu-se o controle combinado realimentação-antecipação baseado inicialmente na proposta dada por Jutan e Uppal [16],com qual se é possível atender aos objetivos mencionados

4.2 - DEFINIÇÃO DA ESTRATEGIA DE CONTROLE

Para os objetivos de controle não é exigido um modelo rigoroso do processo. Ao contrário disto, os modelos simplificados (ordem reduzida) são suficientes quando se quer relacionar a dinâmica da variável controlada com as possíveis variáveis manipuladas em malha fechada.

A implementação da malha de controle de temperatura por realimentação-antecipação do reator descrito no capítulo anterior será sustentada, a princípio, no balanço de energia (capítulo anterior) reescrito na forma:

$$V\rho_r c_r \frac{dT}{dt} = U_s A_j (T_s - T) + Q_r + F_c \rho_c c_{p_c} (T - T_{c0}) \left\{ 1 - exp\left(- \frac{U_c A_c}{F_c \rho_c c_{p_c}} \right) \right\} \quad , \tag{4.1}$$

onde U_s é o coeficiente global de transferência de calor entre o vapor e o meio reacional, dado por

$$\frac{1}{U_s} = \frac{1}{h_i} + \frac{x_m}{k_m} \frac{A_j}{A_{jo}} + \frac{1}{h_{io}} \frac{A_j}{A_{jo}} \tag{4.2}$$

Antes, porém, de se contornar o problema das não linearidades impostas nos dois últimos termos da igualdade (4.1), deve-se atentar à existência de duas variáveis fisicamente manipuláveis, a

vazão da água de resfriamento, F_c, e a temperatura do vapor, T_e.

Normalmente, uma única variável manipulada, por exemplo T_e, seria suficiente para estabelecer o sistema de controle da temperatura T. Mas, como forma de otimizar os efeitos das trocas térmicas ao longo das variações impostas ao set-point nas etapas de servocontrole, torna-se vantajoso agrupar camisa e serpentina no mesmo reator. Esta configuração, no entanto, traz como consequência um sistema de controle superestimado com dois graus de liberdade, ou seja,

$$T = T(F_c, T_e) \ . \qquad (4.3)$$

Jutan e Uppal propuseram relacionar F_c e T_e, recorrendo a uma estratégia paramétrica de controle, que para o presente problema teria a forma

$$\begin{aligned} T_e &= \alpha_1 z + \beta_1 \\ F_c &= \alpha_2 z + \beta_2 \end{aligned} \ , \qquad (4.4)$$

onde z é uma variável adimensional que pode variar entre 0 e 1. Esta variação ponderada e conjunta de T_e e F_c, trata indistintamente as etapas características dos processos batelada reais, que são habitualmente bem diferenciadas como etapas de aquecimento e resfriamento e etapa isotérmica. Às duas primeiras vem associado o problema do servocontrole sendo a última ligada ao problema regulatório. É oportuno lembrar que em operações batelada podem coexistir uma combinação destas etapas.

Como consequência, esta estratégia paramétrica de controle (4.4) confere um caráter oscilatório de T, nas regiões de transição do perfil desejado de temperatura onde ocorrem variações bruscas nas derivadas das curvas de ajuste.

Sugere-se, como alternativa, contornar esse problema mediante a distinção das passagens básicas, às quais submetem-se os processos de batelada reais, geralmente sequenciadas para reações exotérmicas

como etapas de aquecimento, de transição e de resfriamento (ou regulatórias) [8].

Na etapa de aquecimento, o Controlador de T deve perseguir a curva de ajuste desejada, T_{ep}, até as proximidades da temperatura nominal de operação, T_{op}, que é geralmente aquela referente ao encontro do perfil do "set-point" na subida com aquela da etapa de resfriamento onde ocorre a maior exotermia do processo (Figura 4.2). Durante este período inicial, manipula-se T_e e fixa-se F_c em um valor mínimo estipulado pela análise preliminar na seção 4.5.

A etapa de transição será acessada tão somente seja atingida certa condição imposta com um algoritmo de verificação no mesmo computador diretamente acoplado ao reator. Seu comportamento, semelhante à "unidade módulo dual" referida por Lipták [8], pretende eliminar a ocorrência de sobrelevações no encontro das passagens impostas. Oportunamente serão discutidos os critérios usados na elaboração deste algoritmo.

Tendo atingido a temperatura nominal, o processo entra na etapa de reação (ou resfriamento), quando se é acionado o controlador de F_c. O controlador de T_e, já desconectado da malha principal, opera simplesmente para manter uma determinada carga "mínima" de aquecimento sendo seu ajuste fixado em função de medidas de T diretas do processo. Caso deseje-se uma trajetória variável de T durante esta fase, deve-se variar adequadamente a curva de ajuste do controlador de F_c a cada intervalo de controle, Δ.

Na prática, aplicar distintamente estas 3 etapas em uma determinada operação, somente é possível mediante a verificação proposta no final deste capítulo.

4.3 - ESTRUTURA DO CONTROLADOR DE TEMPERATURA

Examinando o balanço de energia (4.1), observa-se que, fora o termo Q_r e a não linearidade do termo exponencial, tem-se um modelo de 1ª ordem simples para controle. Assim, tratando-se Q_r como se

fosse uma perturbação obtida inferencialmente do processo com medidas de T, pode-se derivar um sistema de controle antecipativo que venha cancelar o efeito da exotermia das transformações sobre a dinâmica de T. Porém, a este método de controle por antecipação, vêm associados erros nas estimativas e nas predições. Assim, não haverá eficiência de controle, a menos que se corrijam tais imperfeições recorrendo a uma malha de controle por realimentação. Este algoritmo de correção deve ter seus parâmetros variáveis na etapa de resfriamento sendo sua forma discretizada obtida da linearização do termo exponencial da equação (4.1).

A estratégia definida no ítem anterior transforma o processo representado por (4.1) em dois sistemas de controle SISO distintos. Como consequência, aparece a necessidade do projeto de dois controladores diferentes, o primeiro atendendo à etapa de aquecimento sendo o outro, responsável pela etapa de resfriamento (ou regulatória). O diagrama de blocos do sistema de controle por realimentação-antecipação está esquematicamente representada na Figura 4.1, com u representando a variável manipulada genérica.

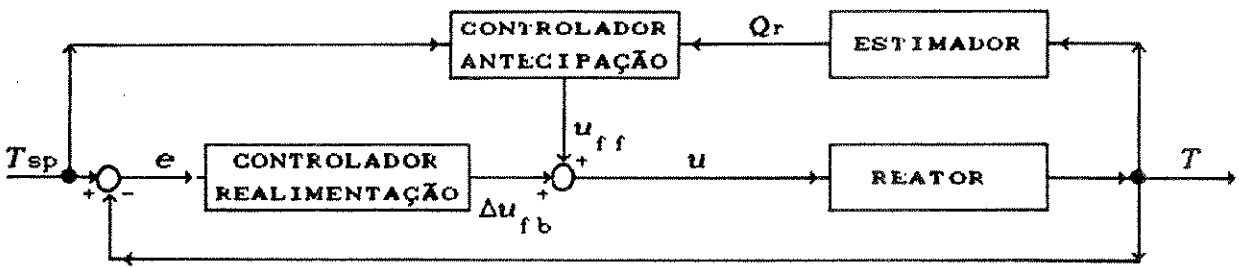


FIGURA 4.1 - Diagrama de blocos simplificado do controle combinado realimentação-antecipação do reator batelada

A Figura 4.2 esboça as diferanças entre as etapas sugeridas nesta estratégia de controle e apresenta as curvas de ajustes impostas aos dois casos exemplos advindos dos trabalhos de otimização mencionados anteriormente.

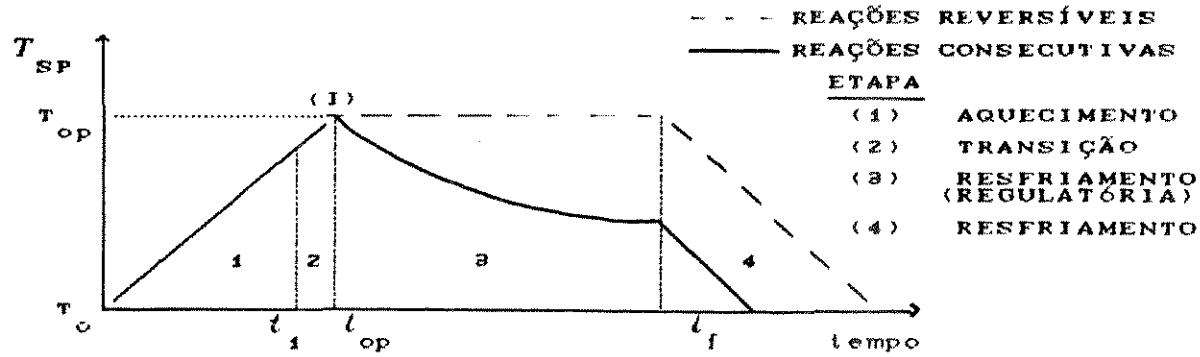


FIGURA 4.2 - Passagens da estratégia de controle adotada.

A região 4 poderia ser estudada como um problema de servocontrole, análogo à região 1. Porém, por se referir a um período superior ao tempo final da batelada, tf, esta etapa não assume importância crítica sob o prisma operacional, sendo, assim, desconsiderada do escopo deste trabalho.

4.4 - ALGORITMOS DE CONTROLE

Uma maneira de se estudar um processo batelada é considerá-lo como uma sucessão de estados pseudo estacionários, cada qual relativo a um determinado intervalo de controle em tempo real, Δ. Para atender a esta hipótese, posteriormente haverá necessidade de representar a resposta da malha fechada de realimentação se baseando em uma lei de controle que relacione a variação da variável manipulada com o erro em cada intervalo de amostragem de T. Como sugerem Jutan e Uppal[16], usar-se-á o algoritmo de Dahlin apresentado a seguir.

4.4.1 - Algoritmo de Dahlin

Aproximando a resposta de uma malha fechada de Controle Digital Direto, quando submetida a um variação em degrau do

"set-point", como um comportamento análogo a um sistema de 1ª ordem com tempo morto (td), Dahlin [28] derivou o algoritmo que aparece abaixo em sua forma posição.

$$m_n = \frac{\gamma_a}{\gamma_b K}\left[e_n - (1-\gamma_b)e_{n-1}\right] + (1-\gamma_a)m_{n-1} + \gamma_a m_{n-(N+1)} \qquad (4.5)$$

onde m é a variável manipulada, e é o erro da variável controlada, N é o número de intervalos de tempo morto, n é o operador inteiro referente ao intervalo de controle Δ e K é o ganho no estado estacionário correspondente à curva de reação do processo, com

$$\gamma_a = 1 - exp(-\frac{\Delta}{\lambda}) \quad e$$
$$\gamma_b = 1 - exp(-\frac{\Delta}{\tau}) \quad . \qquad (4.6)$$

Δ é o intervalo de controle em tempo real, τ é a constante de tempo do processo e λ é o parâmetro de sintonização da malha fechada. Segundo o conceito de Dahlin, λ deve ser menor que τ para que o processo seja realizável. Ele sugere ainda usar valores pequenos quando se desejam respostas mais rápidas da malha fechada. Este algoritmo resolve bem o problema do estado estacionário, tanto por sua habilidade em compensar o tempo morto, quanto incorporar a suas equações apenas um parâmetro de sintonização.

4.4.2 - Controlador para a etapa de aquecimento

Este período compreende o início da batelada até o tempo ao qual supostamente atinge-se a etapa de transição, t_1 (ver Figura 4.2). Quando, porém, não for necessário o acesso à etapa de transição, t_1 cede lugar a t_{op} correspondente ao tempo total de subida. Nesta etapa inicial, a vazão de água é fixada em um valor mínimo de operação, F_{cmin}.

MALHA DE REALIMENTAÇÃO

Na prática, poder-se-ia reduzir a ordem elevada dos processos reais a uma aproximação de um sistema de primeira ordem com tempo morto, obtida pelo método da curva de reação do processo, G_{crp}.

$$G_{crp(s)} \cong \frac{T(s)}{T_e(s)} = \frac{K\, e^{(-t_d s)}}{(\tau s + 1)} \qquad (4.7)$$

Pode-se assim reescrever o algoritmo de Dahlin em sua forma posição para cada intervalo Δ, como

$$(T_{e_n})_{FB} = \frac{\gamma_a}{\gamma_b K}\left[e_n - (1-\gamma_b)e_{n-1}\right] + (1-\gamma_a)T_{eT_{n-1}} + \gamma_a T_{eT_{n-(N+1)}}. \qquad (4.8)$$

τ e K estão caracterizados em (4.7) e N é definido como múltiplo inteiro positivo de td, de tal modo que

$$td = N.\Delta \qquad (4.9)$$

O parâmetro de sintonização do algoritmo acima, λ, pode ser o mesmo para todos os intervalos que compõe o período de aquecimento, mesmo embora não seja esta uma restrição.

Supõe-se, para o presente desenvolvimento, porém, resposta instantânea do vapor às atuações de controle e como sendo desprezíveis os efeitos dinâmicos dos atuadores, medidores e outros dispositivos da malha de controle. Tal afirmação pressupõe que a temperatura do vapor se mantem igual àquela calculada pelo algoritmo de controle, $T_{eT(n)}$, que será definido na sequência desta trabalho.

Na ausência da curva de reação do processo, a implementação do algoritmo por realimentação ao referido estado estacionário de cada intervalo de controle, requer a linerarização do modelo

simplificado (4.1) em torno do ponto de operação corrente. Para esta etapa, contudo, observa-se desnecessário aplicar este artifício matemático em virtude da relação linear explícita entre a variável controlada, T, e a variável manipulada, T_e no modelo dinâmico do equipamento. O termo Q_r e seu efeito serão desconsiderados na elaboração deste algoritmo.

Observa-se assim o modelo dinâmico de T, em termos de variáveis desvio, como:

$$\tau_a \frac{dT^*}{dt} + T^* = K_a T_e^* \qquad (4.10)$$

onde τ_a e K_a são a constante de tempo e o ganho naturais do sitema dados por (4.11) e (4.12).

$$\tau_a = \frac{\rho V c_p}{(U_e A_j + \alpha)} \qquad (4.11)$$

e

$$K_a = \frac{U_e A_j}{(U_e A_j + \alpha)} \quad , \qquad (4.12)$$

onde

$$\alpha = F_{c_{min}} \rho_c c_{p_c} \left\{ 1 - exp\left(- \frac{U_c A_c}{F_{c_{min}} \rho_c c_{p_c}} \right) \right\} \quad . \qquad (4.13)$$

Estes valores de τ_a e K_a permitem aplicar o algoritmo de Dahlin em sua forma discretizada a parâmetros constantes, que para o caso onde N=0, se reduz a

$$\Delta T_{e_{FB_n}} = (T_{e_n})_{FB} - T_{e_{n-1}} = \frac{\gamma_1}{\gamma_2 K_a} \left[e_n - (1 - \gamma_2) e_{n-1} \right] \qquad (4.14)$$

com

$$\gamma_1 = 1 - exp(-\frac{\Delta}{\lambda_a}) \quad ; \tag{4.15}$$

$$\gamma_2 = 1 - exp(-\frac{\Delta}{\tau_a}) \quad ; \tag{4.16}$$

$$e_n = (T_n)_{SP} - T_n \quad e \tag{4.17}$$

$$(T_n)_{SP} = \beta_1 + \beta_2 t \quad , 0 \leq t \leq t_1 \quad . \tag{4.18}$$

Os valores de β_1 e β_2 são parâmetros referentes à curva de ajuste de subida em rampa desejada, que representa o período de aquecimento dado na Figura 4.2.

λ_a é o único parâmetro de sintonização associado ao sistema de controle por realimentação nesta etapa. Para valer o conceito de controle realizável é óbvio admitir que a magnitude de λ_a deva ser no máximo igual a τ_a de tal forma a ser possível relaciona-lo como segue:

$$\lambda_a = \delta_a . \tau_a \quad , \tag{4.19}$$

onde δ_a é o novo parâmetro fixo de sintonização da malha de realimentação. Embora aparentemente sem importância, a relação acima será de grande utilidade na elaboração do algoritmo de Dahlin adaptativo na etapa de resfriamento.

ALGORITMO DE ANTECIPAÇÃO

Discretizando o balanço de energia (4.1) para F_c em um valor mínimo, F_{cmin}, e reagrupando os termos impõe-se a variável manipulada T_e uma contribuição dada por

$$(T_e)_{FF} = \frac{V\rho c_p}{U_e A_j} \frac{(T_{sp})_{n+1} - T_n}{\Delta} + \frac{T_n}{K_{FF_a}} - \alpha \frac{T_{co}}{U_e A_j} - \frac{Qr_n}{U_e A_j} \quad , \tag{4.20}$$

onde α é dado por (4.13) e K_{FF} é igualado a Ka.

O termo $T_{ep(n+1)}$, por ser a temperatura desejada no próximo intervalo Δ, tende a conduzir a reação sobre o perfil imposto ao ajuste de T no servocontrole do período de aquecimento, (4.18).

Para se estabelecer a lei de controle acima, se faz necessário estimar o calor de reação, $Q_{r(n)}$. Para isso, rearranja-se a equação (4.1), definindo-se um algoritmo de predição de Q_r abaixo, sustentado por medidas de T e Tcf diretas do processo, e com o valor calculado para a Temperatura do vapor na última manipulação, T_{eT}. Na prática, ao contrário disto, poder-se-ia utilizar neste algoritmo medidas de T_e diretamente do processo conforme aparece em (4.21), apenas acoplando à camisa do reator um termômetro para CDD.

Na prática, o termo Q_r poderia ser inferido por:

$$Q_{r_n} = V\rho c_p\left(\frac{dT}{dt}\right)_n - U_e A_j (T_{e_n} - T_n) + F_{c_{min}} \rho_c c_{p_c} (T_{cf_n} - T_{co}) \quad . \qquad (4.21)$$

Porém, para efeito de simulação, Q_r será calculado por

$$Q_{r_n} = V\rho c_p\left(\frac{dT}{dt}\right)_n - U_e A_j (T_{eT_{n-1}} - T_n) + \alpha (T_n - T_{co}) \quad . \qquad (4.22)$$

(dT_n/dt) pode ser obtido por diferenciação numérica usando-se tantos pontos passados de temperatura quantos forem necessários [29].

Por conveniência, inicialmente adotar-se-á para este cálculo apenas dois pontos sucessivos de amostragem de temperatura, como está representado abaixo:

$$\left(\frac{dT}{dt}\right)_n \cong \frac{(T_n - T_{n-1})}{\Delta} \qquad (4.23)$$

Tal qual abordado pelas as expressões (4.21) e (4.22), $Q_{r(n)}$ prediz o calor gerado pela reação sob as tendências do sistema no intervalo de controle imediatamente anterior. Por esta razão,

quando se estudar reações com níveis de exotermia relativamente elevados, deve-se extrapolar o cálculo de Q_r um passo à frente com a fórmula de Newton-Raphson às diferenças conforme propõe Jutan [16].

Como maior vantagem da estimação "on-line" do calor de reação neste algoritmo antecipativo aparece o desacoplamento de um balanço de massa específico na execução deste sistema de controle, justificando a hipótese inicial do desconhecimento de um modelo cinético matematicamente representado.

MALHA TOTAL

Uma maneira de se relacionar as contribuições advindas das malhas de realimentação e antecipação, T_{eT}, seria aquela combinação sugerida por Uppal [16], onde

$$T_{eT_n} = (T_{e_n})_T = E_1.(T_{e_n})_{FB} + (1-E_1).(T_{e_n})_{FF} \qquad (4.24)$$

Porém, inserir um parâmetro de sintonia adicional, E_1 torna-se dispensável quando se é permetido efetuar as contribuições como,

$$T_{eT_n} = (T_{e_n})_T = (T_{e_n})_{FF} + \Delta T_{e_{FB_n}} \qquad (4.25)$$

$\Delta T_{eFB(n)}$ e $T_{eFF(n)}$ são dados por (4.14) e (4.20), respectivamente.

A Figura 4.3 ilustra a malha total para Controle Digital Direto de Temperatura para o período de aquecimento.

Os sinais totais, $T_{eT(n)}$, emitidos da malha global ao atuador, são informações com grandezas de Temperatura. Portanto, nas simulações deste trabalho, como se despreza a dinâmica do vapor e dos demais dispositivos, admite-se que a temperatura do vapor, $T_{e(n)}$, assumirá sempre o valor calculado em (4.25), $T_{eT(n)}$, e que esta se manterá invariante durante o intervalo de controle

subsequente, n+1. Esta consideração é o mesmo que afirmar que a leitura do termômetro de T_s simulado no instante n é aquela referente à saída da malha total (Figura 4.3), $T_{sT(n-1)}$.

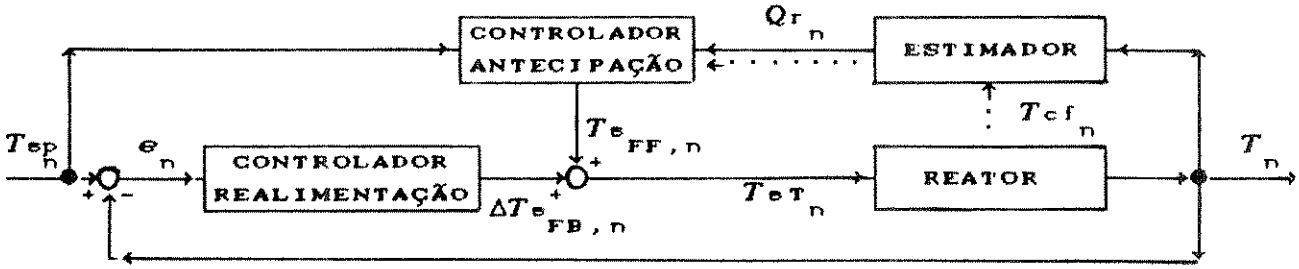


FIGURA 4.3 - Diagrama de blocos do controle combinado realimentação e antecipação o reator batelada exotérmico para a etapa de aquecimento.

Implementar, na prática, o algoritmo de controle em malha fechada representado pela Figura 4.3, onde desconsidera, em sua elaboração, os efeitos dinâmicos da camisa de vapor, é o mesmo que afirmar que o processo real dispõe de um controlador da pressão da camisa, P_s, eficientemente mais rápido que o controlador de T. Assim dizendo, forçosamente se teria uma estrutura de controle tipo Cascata onde o controlador de P_s, secundário, teria seu ponto de ajuste fixado pelos valores de $T_{sT(n)}$ procedentes da malha principal. A este estrutura secundária seria desejado realizar o controle regulatório da temperatura da camisa em torno de $T_{sT(n)}$.

Na Figura 4.4 aparece o esquema desta malha de controle tipo cascata com um controlador PID atuando com m(k) sobre uma válvula de vazão do vapor. Os valores de $T_{sT(n)}$ são convertidos em "medidas" de pressão, $P_{sT(n)}$, por intermédio de uma correlação de estado para o vapor da camisa. A aplicação desta malha combinada com aquela estabelecida pela Figura 4.3 é justificada se, e somente se,

$$\Delta n = \theta . \Delta k \quad , \quad \forall\, \theta \in \mathbb{N}^* \qquad (4.26)$$

com Δk sendo o intervalo de amostragem de dados de pressão em tempo

real.

Outra maneira, talvez menos eficiente de se considerar a dinâmica da camisa em um reator industrial, seria traduzir as

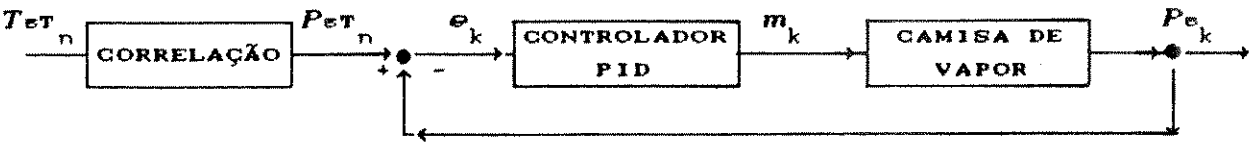


FIGURA 4.4 - Diagrama de blocos simplificado da malha secundária do controle tipo cascata.

medidas de $T_{ET(n)}$ para valores de pressão, usando-se uma correlação para vapor em equilíbrio, e atuar em malha fechada sobre uma purga bem ajustada à saída do condensado.

Entretanto, por ser praticamente possível se atingir um nível de controlabilidade eficaz da temperatura (ou pressão) do vapor [8,11] com os dispositivos existentes no mercado, e, mesmo diante das limitações operacionais apresentadas acima, parece viável desconsiderar, à princípio, os efeitos dinâmicos da camisa de vapor no estudo das respostas em malha fechada do Capítulo 5. Porém, caso haja necessidade, deve-se analisar a malha de controle secundária com maiores detalhes.

4.4.3 - Algoritmo para etapa de transição

Ao final do período de subida em rampa, a temperatura do reator, T, encontra-se na eminência de se descontrolar em virtude da ocorrência do pico exotérmico nas imediações de T_{op} (Figura 4.2) e da inércia associada a transição entre a etapa de aquecimento e a etapa de resfriamento.

É observado na Figura 4.2 que, no instante t_{op}, ocorre uma variação brusca na magnitude da derivada da trajetória desejada, T_{ep} versus t, quando o sistema caminha da etapa de aquecimento para o período de resfriamento. Assim, mesmo a sintonização ótima do

UNICAMP BIBLIOTECA CENTRAL

controlador da etapa de aquecimento não garante a eliminação absoluta das sobrelevações de T durante os primeiros intervalos de controle do período de resfriamento [8,13].

Como caráter preventivo, é conveniente fornecer à estratégia de controle, uma passagem adicional, denominada Etapa de Transição, cuja finalidade é manter invariante a carga térmica do vapor, por alguns intervalos de controle imediatamente inferiores a t_{op}. Desta forma, quando o sistema ingressa nesta fase em t_1, deve-se manter T_s em seu último valor de manipulação, $T_{ST}(t_1)$, e deixar a temperatura do sistema evoluir livremente por exotermia até a temperatura nominal de reação, T_{op}.

O instante exato de acesso a esta etapa, t_1, poderia ser intuitivamente estabelecido como aquele no qual a temperatura do reator se encontrasse a alguns graus abaixo de T_{op}. No entanto, sugere-se um algoritmo de verificação que permita estabecer, paralelamente ao controle da etapa de aquecimento, o instante em que se deve fixar T_s e desconectar o controlador de T que atende ao período de subida.

Este algoritmo de verificação, sustentado por medidas correntes de temperatura do processo, T, é acionado em um instante de tempo arbitrário, t^*, tal que

$$t_{op}/2 \leq t^* < t_{op} \quad , \qquad (4.27)$$

e se baseia na resolução numérica da dinâmica da temperatura em malha aberta, representada pela expressão abaixo em variáveis desvio.

$$\tau_v \frac{dT^*}{dt} + T^* = K_v \qquad (4.28)$$

τ_v é a constante de tempo do sistema e é equivalente a τ_a. K_v é o ganho variável com o calor de reação, Q_r, dado por

$$K_v = \frac{U_s A_j . T_{ST} + \alpha . T_{co} + Q_r}{U_s A_j} \qquad (4.29)$$

Aplicando a transformada de Laplace na equação (4.28), e discretizando para um intervalo de tempo genérico, Δi, tal que

$$\Delta = J.\Delta i \quad , \tag{4.30}$$

com J inteiro e positivo, obtem-se a expressão algébrica (4.31), que deve ser calculada numéricamente até t_{op}.

$$T_i = K_v\left(1 - exp\left(-\frac{\Delta_i}{\tau_v}\right)\right) + T_{i-1} \tag{4.31}$$

Para definir a sequência de cálculos que aparece no diagrama de blocos da Figura 4.5, deve-se ainda recalcular o valor de Q_r a cada iteração. Para isso, usar-se-á a equação (4.22) reescrita na forma:

$$Q_{r_i} = V\rho c_p \frac{(T_i - T_{i-1})}{\Delta_i} - U_s A_j (T_{sT} - T_i) + \alpha (T_i - T_{co}) \quad . \tag{4.32}$$

A esta subrotina cabe, então, repetir a sequência de cálculo dada a seguir, para cada intervalo Δ, em tempo real, executado pelo programa principal do controlador de T. Esta investigação é realizada dentro da subrotina com integração desde o tempo corrente, t_n, até o tempo de subida, t_{op}, com o número de iterações, I, determinado, "on-line", por:

$$I = J.\frac{(t_{op} - t_n)}{\Delta} = \frac{(t_{op} - t_n)}{\Delta i} \tag{4.33}$$

Como resultado deste algoritmo se tem uma projeção da temperatura do reator, T_I, quando supostamente se atinge o ponto de operação em t_{op}. Desta forma, a etapa de transição será iniciada se, e somente se, for satisfeita uma exigência pré-estabelecida. Como sugestão deste procedimento, será adotada a seguinte condição:

$$|T_{op} - T_1| \leq Er \quad , \qquad (4.34)$$

onde Er é um parâmetro de "minimização" das sobrelevações.

4.4.4 - Controlador para a etapa de resfriamento (ou regulatória)

Tão logo se atinja o nível de operação nominal, definido como aquele correspondente à temperatura desejada, Top, aciona-se o controlador da vazão de água da serpentina, no instante top (ver Figura 4.2). O valor ótimo de top deveria ser obtido em função do comportamento dinâmico de T, durante a etapa de transição. Porém, como imposição da estratégia global de controle, top será previamente fixado como aquele correspondente ao tempo de subida em rampa, ts, definido pelas análises preliminares.

Para complementar esta estratégia, cabe ainda fazer variar Ts de maneira a assumir alguns graus acima de T, em cada intervalo de controle, Δ, conduzindo a operação do reator até o final do período de reação, tf. Esta outra estratégia vem garantir um valor "mínimo" da carga de aquecimento.

Na prática, optando-se pelo mesmo esquema em cascata da Figura 4.4, vale afirmar que, mesmo desconectado da malha principal, o controlador secundário de Ts teria seu ponto de ajuste, Tsep, fixado por medidas diretas de Tn, conforme estabelece a relação abaixo:

$$(T_{s_n})_{sp} = T_n + C_{sp} \qquad (4.35)$$

onde csp é uma constante previamente fixada, e referente à estratégia de controle definida à priori. Contudo, parece razoável adotar,

$$c_{sp} = \frac{(T_{s_{max}} + T_{s_{min}})}{2} - T_{op} \qquad (4.36)$$

Tsmin e Tsmax são os limites de operação, máximos e mínimos, da

variável manipulada, T_e. O objetivo destes valores limites "mínimos" é o de contribuir para assegurar a estabilidade da operação do reator.

Porém, reforçando aquela suposição de resposta instantânea de T_e, admitir-se-á, nas simulações, que:

$$T_{e_n} = (T_{e_n})_{SP} \quad , \forall\, t \;/\; t_{op} \leq t \leq t_f \quad . \qquad (4.37)$$

$T_{e(n)sp}$, que aparece na expressão acima, é dado pela relação (4.35).

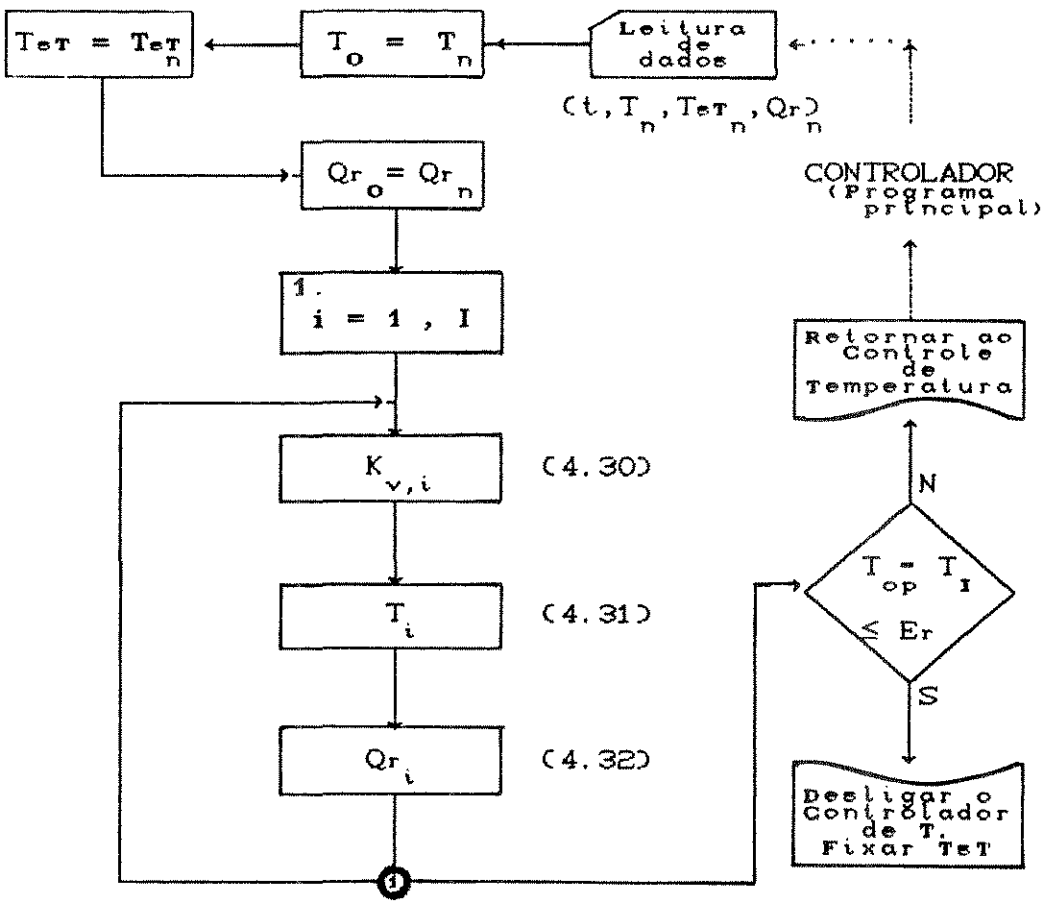


FIGURA 4.5 - Fluxograma do algoritmo de verificação (válido para $t^* < t_n < t_{op}$)

MALHA DE REALIMENTAÇÃO

Novamente, deixa-se a correção do efeito de $Q_{r(n)}$ para o algoritmo de antecipação. Como mostra a equação simplificada do reator batelada exotérmico (4.1), a vazão do líquido refrigerante, F_c, e o coeficiente global de remoção de calor, U_c, variam no tempo,t. Este fato permite dizer que, derivar um modelo dinâmico de 1ª para a aplicação do algoritmo de Dahlin na malha de realimentação, exige a linearização do termo correspondente ao calor removido pelo fluido da serpentina.

Realizando tal método de aproximação matemática em torno do pseudo estado estacionário, compreendido entre manipulações sucessivas em F_c, e admitindo-se T_s constante durante toda esta etapa, abrevia-se o processo como:

$$\tau_c \frac{dT^*}{dt} + T^* = K_1 F_c^* + K_2 U_c^* \quad , \tag{4.38}$$

com o asterisco superior designando as variáveis desvio. τ_c, K_1 e K_2 aparecem nas equações (4.39) a (4.41).

$$\tau_c = \frac{\rho V c_p}{\rho_c c_{p_c} F_{c_0} (1 - \phi_1) + U_s A_j} \tag{4.39}$$

$$K_1 = \frac{\rho c_p c_{p_c} (T_{c_0} - T_0) \left(1 - \phi_1 (1 + \phi)\right)}{\rho_c c_{p_c} F_{c_0} (1 - \phi_1) + U_s A_j} \tag{4.40}$$

$$K_2 = \frac{\rho c_p c_{p_c} (T_{c_0} - T_0) \phi \phi_1}{\rho_c c_{p_c} F_{c_0} (1 - \phi_1) + U_s A_j} \tag{4.41}$$

$$\phi = \frac{A_c}{\rho_c c_{p_c}} \tag{4.42}$$

$$\phi_1 = exp(-\frac{\phi\ U_{c_o}}{F_{c_o}}) \qquad (4.43)$$

Considerou-se no capítulo anterior uma correlação empírica com a finalidade de atualizar os valores de Uc em decorrência das variações de Fc durante a etapa de resfriamento. Assim, realizando a linearização de (3.11) nas imediações do mesmo estado estacionário considerado anteriormente, chega-se a:

$$U_c^* = Der.F_c^* \qquad (4.44)$$

onde o termo Der tem a forma

$$Der = \frac{.8A_1A_2F_{c_o}^{-.2}}{(A_1F_{c_o}^{.8} + A_2)^2} \qquad (4.45)$$

onde A1 e A2 são parâmetros da correlação.

Substituindo (4.44) em (4.38) pode-se reescrever a dinâmica de T como:

$$\tau_c \frac{dT^*}{dt} + T^* = K_cF_c^* \qquad (4.46)$$

onde τ_c e Kc são parâmetros variáveis do processo para etapa de reação e o subscrito o nas variáveis Fc, T e Uc designa os valores das mesmas no estado estacionário genérico usado como referência na linearização.

$$K_c = K_1 + K_2Der \qquad (4.47)$$

Discretizando o algoritmo de Dahlin para o n-ésimo intervalo de controle localmente linearizado, e, observando que entre intervalos

sucessivos do servocontrole, os termos To, Fco e Uco variam em malha fechada, pode-se definir um algoritmo de controle adaptativo onde os termos τ_c e Kc, dados por (4.39) e (4.47), sejam recalculados a cada passo Δ. Desta forma, caracterizando To como uma medida direta da temperatura do processo, Tn, e Fco como a última atuação nominal realizada sobre a vazão de água, $F_{cT(n-1)}$, é possível escrever a lei de controle por realimentação da forma

$$(F_c)_{FB_n} = \frac{\gamma_{a_n}}{\gamma_{4_n} K_{c_n}} \left[e_n - (1-\gamma_{4_n}) e_{n-1}\right] + (1-\gamma_{a_n}) F_{cT_{n-1}} + \gamma_{a_n} F_{cT_{n-(M+1)}} \quad , \tag{4.48}$$

que com a ausência de tempo morto (M=0) recai na forma às diferenças, dada por:

$$\Delta F_{c_{FB_n}} = (F_c)_{FB_n} - F_{cT_{n-1}} = \frac{\gamma_{a_n}}{\gamma_{4_n} K_{c_n}} \left[e_n - (1-\gamma_{4_n}) e_{n-1}\right] \tag{4.49}$$

$$\gamma_{a_n} = 1 - exp\left(-\frac{\Delta}{\lambda_{c_n}}\right) \quad ; \tag{4.50}$$

$$\gamma_{4_n} = 1 - exp\left(-\frac{\Delta}{\tau_{c_n}}\right) \quad ; \tag{4.51}$$

$$e_n = T_n - (T_n)_{SP} \qquad e \tag{4.52}$$

$$(T_n)_{SP} = \beta_3 + \beta_4 exp\,(-\beta_5 t) \quad , \quad t_i \leq t \leq t_f \quad . \tag{4.53}$$

Os parâmetros β_3, β_4 e β_5 são relativos à curva ótima das reações consecutivas do Caso Estudo 1, referido no capítulo 3. Para o Caso Estudo 2, onde aparecem as reações reversíveis, o perfil dado em (4.53) será constante, tornando o problema do servocontrole num outro problema de controle regulatório.

Cabe ainda ao algoritmo dado pelas equações (4.42) a (4.46)

adaptar seus parâmetros, τ_{cn}, K_{cn}, ϕ_n e λ_{cn}, por intermédio das expressões algébricas abaixo, aplicada ao n-ésimo intervalo de controle.

$$\tau_{c_n} = \frac{\rho V c_p}{\rho_c c_{p_c} F_{c_{n-1}} (1 - \phi_{1_n}) + U_s A_j} \qquad (4.54)$$

$$K_{c_n} = \frac{\rho_c c_{p_c}}{\rho c_p V} \tau_{c_n} (T_{c_0} - T_n) \left\{1 - \phi_{1_n} \left(1 + \phi \left(\frac{U_{c_{n-1}}}{F_{c_{n-1}}} - Der_{n-1}\right)\right)\right\} \qquad (4.55)$$

$$\phi_1 = exp\left(-\frac{\phi\, U_{c_{n-1}}}{F_{c_{n-1}}}\right) \qquad (4.56)$$

$$\lambda_{c_n} = \delta_c . \tau_{c_n} \qquad (4.57)$$

com

$$Der_n = \frac{.8 A_1 A_2 F_{c_{n-1}}^{-.2}}{(A_1 F_{c_{n-1}}^{.8} + A_2)^2} \qquad (4.58)$$

δ_c é o parâmetro de sintonização da malha fechada de realimentação para a etapa de resfriamento, sendo seu valor inferior à unidade e fixo, segundo o conceito de Dahlin para o controle realizável.

É importante observar que se T_s variar nesta etapa, conforme está proposto na equação (4.37), tem se na operação do reator um fornecimento de calor invariante do vapor para o reator, Q_v, de um intervalo de controle a outro, dado por

$$Q_v = U_s A_j c_{SP} \qquad (4.59)$$

Como mencionado anteriormente, a hipótese pode ser realizada em um reator em operação somente se um controlador de T_e eficiente estiver disponível.

Procedendo-se todas as etapas matemáticas anteriores e usando (4.59), observa-se que (4.54) toma a forma de

$$\tau_{c_n} = \frac{\rho V c_p}{\rho_c c_{p_c} F_{c_{n-1}} (1 - \phi_1)_n} \quad . \qquad (4.60)$$

sendo os demais termos inalterados.

ALGORITMO DE ANTECIPAÇÃO

A discretização do balanço de energia com o termo de remoção de calor, Q_e, em sua forma exponencial, admite solução em F_{cFF}, somente utilizando uma rotina de cálculo para raízes de funções.

Por outro lado, considerando-se a disponibilidade de um sistema de aquisição de dados para medidas "on-line" da temperatura de saída da água de resfriamento na serpentina, em um reator em operação, pode-se remodelar Q_e como

$$Q_e = \rho_c c_{p_c} F_c (T_{cf} - T_{c0}) \quad . \qquad (4.61)$$

A simulação das "medidas" de $T_{cf(n)}$ é realizada pela expressão (3.5) da modelagem do reator, tanto para esta etapa quanto para o período de aquecimento.

Substituindo a expressão (4.61) na forma discretizada do balanço energético do processo dado por (4.1) e admitindo variação do ponto de ajuste dado por (4.53), e resolvendo para $F_{cFF(n)}$, chega-se ao **algoritmo por antecipação** para a fase de resfriamento como segue.

$$(F_{c_n})_{FF} = \frac{1}{K_{FF_c}} (T_{e_n} - T_n) + \frac{Q_{r_n}}{\Phi} - \frac{V \rho c_p}{\Phi} \cdot \frac{(T_{n+1})_{sp} - T_n}{\Delta} \qquad (4.62)$$

$T_{s(n)sp}$, que aparece na expressão acima, é dado pela relação (4.35).

onde K_{cFF} é o novo ganho, dado por

$$K_{FF_c} = \frac{\rho_c c_{p_c}}{U_e A_j} (T_{cf_n} - T_{co}) \qquad (4.63)$$

e

$$\Phi = \rho_c c_{p_c} (T_{cf_n} - T_{co}) \qquad (4.64)$$

$Q_{r(n)}$ pode ser estimado diretamente do processo, de maneira análoga à etapa de aquecimento, fazendo uso da operação numérica de diferenças finitas referida em (4.23). Este cálculo, definido por (4.65), leva em conta os valores atribuídos à variável manipulada, F_c, no intervalo de controle, Δ, imediatamente anterior a n.

$$Q_{r_n} = V\rho c_p \left(\frac{dT}{dt}\right)_n - U_e A_j (T_{s_n} - T_n) + F_{cT_{n-1}} \rho_c c_{p_c} (T_{cf_n} - T_{co}) \qquad (4.65)$$

com T_{sn} dado por (4.37), ou por outro "medidor de temperatura" do vapor de processo.

MALHA TOTAL

Analogamente à expressão (4.25), pode-se combinar as contribuição dos "sinais" de controle de realimentação (4.49) e antecipação (4.62), que nesta etapa da operação toma a forma de

$$F_{cT_n} = (F_{c_n})_T = (F_{c_n})_{FF} + \Delta F_{c_{FB_n}} \qquad (4.66)$$

Pode-se considerar a relação ponderada das duas contribuições, de forma semelhante aquela proposta pela expressão (4.24), onde

$$Fc_{T_n} = (Fc_n)_T = Ez.(Fc_n)_{FB} + (1-Ez).(Fc_n)_{FF} \qquad (4.67)$$

Como desvantagem aparente, menciona-se a inserção de um novo parâmetro de sintonia, Ez, na malha total, mesmo embora se possa sintonizar a malha de realimentação independentemente dos sinais anteriores da malha total, como sugere a combinação abaixo.

$$(Fc_n)_{FB} = (Fc_n)_{FB} + \Delta Fc_{FB_n} \qquad (4.68)$$

Na Figura 4.6 aparece o esquema proposto para o controle digital direto para o reator exotérmico operando na fase de resfriamento (ou regulatória), valendo-se da relação (4.66).

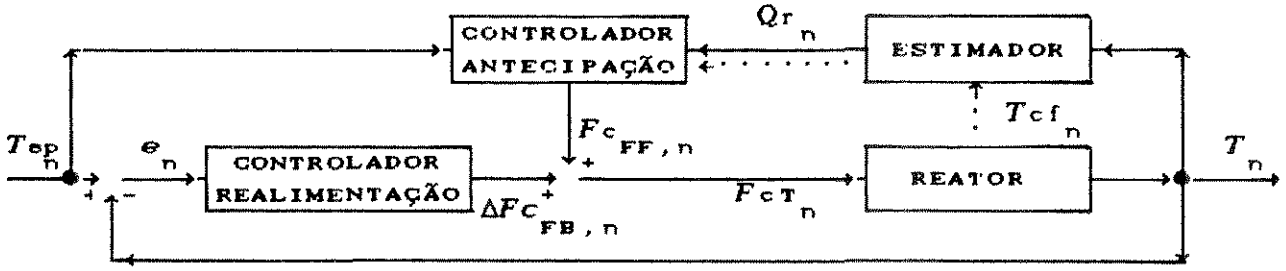


FIGURA 4.6 - Diagrama de blocos do controle combinado realimentação e antecipação do reator batelada exotérmico para a etapa de resfriamento (ou regulatória).

4.5 - CONSIDERAÇÕES SOBRE OS LIMITES DE OPERAÇÃO

Os limites de operação mínimos e máximos de T_s e F_c, respectivamente, T_{smin}, T_{smax}, F_{cmin} e F_{cmax}, tem por finalidade assegurar a estabilidade da operação do reator e devem ser previamente fixados em função do grau de exotermia da reação em processamento.

A análise preliminar proposta por Lewin [4] em seu trabalho, que considera a existência de um modelo diferencial de balanço de

massa, a princípio poderia ser usada neste trabalho. Na prática, porém, esta alternativa seria inadequada para o presente procedimento, onde a hipótese principal sobre os processos estudados e suas respectivas estratégias de controle, baseia-se na inexistência de um modelo cinético preciso. Como consequência, perder-se-ia o compromisso prático com a política operacional envolvida em uma planta multiproduto-multipropósito, que usualmente é sustentada em observações experimentais restritas a ensaios calorimétricos.

Estes ensaios calorimétricos exigem apenas a existência de um calorímetro bem equipado que possa observar, com relativa precisão, o nível máximo de calor, Q_{rmax}, liberado pelas reações exotérmicas [16].

Tendo em mãos a ordem de grandeza de Q_{rmax} obtido em escala piloto, pode-se fazer o "scale-up" para a escala industrial, realizando a Análise Integral Aproximada descrita a seguir para estabelecer os limites mínimos e máximos para uma operação segura.

· ANÁLISE INTEGRAL APROXIMADA

Para elaborar esta análise deve-se estabelecer algumas restrições operacionais e impor condições limites à equação de balanço de energia em sua forma integral. Abaixo aparecem algumas destas considerações de importância.

i -A temperatura máxima do processo, T_{op}, é previamente estabelecida.

ii -Os limites máximos e mínimos da temperatura do vapor são fixados em um valor disponível pelo suprimento de utilidades da planta.

iii -A integração aproximada será realizada durante todo o período de subida, t_s, definido pela estratégia de controle (Figura 4.2).

iv -O sistema supostamente tem a capacidade de perseguir a trajetória de temperatura, T_{sp}, imposta a etapa de aquecimento (equação 4.18).

v -Os coeficientes globais de transferência de calor podem ser calculados, de maneira aproximada por equações do tipo (3.7).

vi -O coeficiente α é definido pela relação (4.13), sendo considerado uma incógnita desta análise.

A integração do modelo diferencial aproximado dado por 4.1, ao longo da fase de aquecimento, define a igualdade abaixo:

$$\int_c^{t_s} \rho V c_p \frac{dT}{dt}\, dt = \int_c^{t_s} U_s A_j (T_s - T)\, dt - \int_c^{t_s} \alpha\, (T - T_{co})\, dt + \int_c^{t_s} Q_r\, dt \qquad (4.69)$$

Dispondo-se das considerações mencionadas pode-se modificar (4.69), simplificando os termos como mostram as aproximações a seguir, que se baseiam na estratégia de controle inerente aos processos batelada em questão.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{dT}{dt}\Big|_0^{t_s} \simeq \frac{T_{op} - T_o}{t_s} \qquad (4.70)$$

Como imposição à operação do reator, é válido admitir que a temperatura do vapor T_s persiga uma trajetória linear durante a fase de aquecimento, como mostra a relação (4.71).

$$T_s = \frac{(T_{s_{max}} - T_{s_{min}})}{t_s} t + T_{s_{min}} \qquad (4.71)$$

De maneira análoga à curva (4.71), a temperatura do processo submetido a uma estrutura de controle eficiente, desenvolverá um percurso próximo aquele definido por :

$$T = \frac{dT}{dt}\Big|_{c}^{t_s} t + T_o \qquad (4.72)$$

Com referência ao termo de calor de reação, quando não se dispuser de uma curva calorimétrica experimental aceitável, pode-se aproximar grosseiramente o termo integral como:

$$\int_{c}^{t_s} Q_r \, dt = \frac{Q_{r_{max}}}{2} t_s \qquad (4.73)$$

Realizando as respectivas substituições de (4.70) a (4.73) em (4.69), e resolvendo as integrais, é possível estabelecer fronteiras à igualdade (4.69), transformando-a em uma inequação (4.74), cujas soluções em Fcmin garantem uma operação segura e realizável. Este tipo de análise substitui de maneira razoável o procedimento por Simulação Preliminar, proposto por Lewin [4].

$$\alpha \geq \frac{a_1 t_s + a_2}{a_3 t_s} \qquad (4.74)$$

com,

$$a_1 = \frac{\{ U_s A_j [(T_{s_{max}} + T_{s_{min}}) - (T_{op} + T_o)] + Q_{r_{max}} \}}{2} \qquad (4.75)$$

$$a_2 = \rho V c_p (T_o - T_{op}) \qquad (4.76)$$

$$a_3 = \frac{(T_{op} + T_o - 2T_{co})}{2} \qquad (4.77)$$

Por fim, com o valor de α satisfazendo a condição (4.74), calcula-se o respectivo valor de Fcmin, resolvendo a equação (4.13) com uma rotina de zero de função.

Uma análise integral similar, aplicada para a etapa de

resfriamento máximo (ver Figura 4.2), pode ser desenvovida para a determinação de Fcmax. Para os propósitos deste trabalho, contudo, não é necessário enfatizar este problema operacional restrito ao término do processo de batelada.

4.6 - INFORMAÇÕES ADICIONAIS

As equações algébricas, que vieram a compor o presente desenvolvimento da estrutura de controle combinado de realimentação e antecipação, são consideradas supostamente flexíveis para atender ao controle dos processos envolvendo as duas classes de reações em estudo.

Os algoritmos obtidos até então consistem numa ferramenta para a análise preliminar do comportamento dinâmico do processo em malha fechada. Quaisquer mudanças a realizar, contudo, devem seguir as leis de controle neles estabelecidas até que, sequencialmente, se alcance o melhor nível de eficiência.

As análises e questionamentos dos resultados, bem como os critérios comparativos de controlabilidade dos processos, serão relatados no capítulo a seguir.

Como forma de situar os algoritmos de controle nas simulações realizadas, é válido representar a relação entre as variáveis manipuladas, m(t), e a controlada, T(t), com os diagramas de blocos a seguir. Esta representação, quando conectada à Figura 3.2, esquematiza a sequência de cálculo usada na simulação do comportamento dinâmico do reator batelada exotérmico em malha fechada.

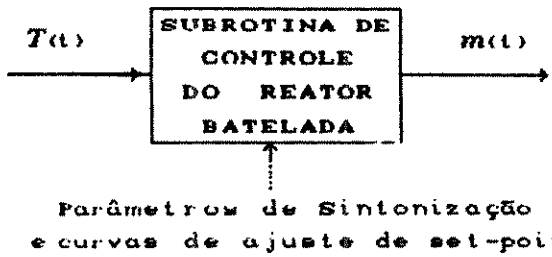


FIGURA 4.7 - Bloco dos Algoritmos de Controle de Temperatura

CAPITULO 5 - Implementação e Análise de Desempenho do Sistema de Controle

5.1 - INTRODUÇÃO

O presente capítulo tem por finalidade avaliar o desempenho do algoritmo de controle desenvolvido no capítulo anterior, aqui chamado de Algoritmo 1, e, a partir desta análise, propor eventuais mudanças para aperfeiçoar o desempenho, sem fugir porém da estrutura básica de controle combinado antecipação- realimentação.

O sequenciamento das análises foi estudado, à princípio, com referência ao processo com reações consecutivas do Caso Exemplo 1. Tão logo se definiu o melhor algoritmo, ao final, testou-se a versatilidade desta estrutura de controle, simulando-se a reação reversível do Caso Exemplo 2 neste mesmo equipamento.

Dentro das investigações que se sucederam, existiam basicamente 2 objetivos a serem alcançados. O primeiro consistia em julgar a capacidade do controlador em perseguir as trajetórias ótimas imposta, T_{ep} x t, entre fronteiras de um determinado critério de desempenho.

Ao outro, cabia a avaliação do poder de precisão da estimativa "on-line" de Q_r, etapa importante na elaboração do algoritmo antecipativo.

Mesmo embora sejam comportamentos aparentemente independentes [16], esforços foram realizados no sentido de adquirir eficiência conjunta destes dois objetivos.

5.2 - SIMULAÇÃO DO CONTROLE DO PROCESSO COM REAÇÕES CONSECUTIVAS - ALGORITMO 1

As simulações subsequentes foram realizadas em computador tipo PC-XT fazendo uso da versão 2.8 da linguagem FORTRAN (77). Na Tabela 5.1 aparecem listados os parâmetros e propriedades do modelo matemático sistematizado na seção 3.4.1. As propriedades físicas foram obtidas a um valor médio de T (80°C) e os números

apresentados dizem respeito à valores efetivos de volume reacional. Como exemplo, a área de transferência de calor entre a serpentina e o interior do reator é aquela correspondente ao contato com o líquido em agitação.

REATOR BATELADA COM SERPENTINA E CAMISA		
◦ Interior do Reator e Meio Reacional		
$D_r = 1.12$	$V = 1.00$	$cp = 1.00$
$N = 3.00$	$h_i = 4.22$	$\mu = 7.80\ 10^{-4}$
$l = 0.70$	$\rho = 1.00\ 10^{3}$	$k_r = 6.90\ 10^{-4}$
◦ Serpentina		
$A_{co} = 4.20$	$A_1 = 3.66$	$k_c = 6.60\ 10^{-4}$
$A_c = 5.00$	$A_2 = 1.504\ 10^{3}$	$cp_c = 4.18$
$D_c = 0.35$	$x_e = 4.00\ 10^{-3}$	$\rho_c = 1.00\ 10^{3}$
$D_e = 0.04$	$k_e = 4.50\ 10^{-2}$	$\mu_c = 8.50\ 10^{-4}$
$T_{co} = 25.00$		
◦ Parede e Camisa		
$A_j = 4.00$	$x_m = 2.54\ 10^{-2}$	$cp_m = 1.13$
$A_{jo} = 4.30$	$M_m = 1168.0$	$k_m = 4.50\ 10^{-2}$
$h_{io} = 5.11$		
* A nomenclatura de unidades encontra-se no apêndice		

TABELA 5.1 - Propriedades Físicas e parâmetros usados nas simulações

Os limites iniciais e finais do processo, apresentados na Tabela 5.2, bem como as trajetórias impostas ao ajuste dos controladores, definem as fronteiras da simulação do processo em detrimento daquilo que se deseja "realizar".

◦ Condições Iniciais

$C_{AO} = 1.00$ $C_{BO} = 0.00$ $T_o = 25.00$
$T_{mo} = 25.00$

◦ Tempos do Processo

$t_e = 200.0$ $t_f = 3800.0$

◦ Limites e Níveis de Operação

$Fc_{min} = 2.50\ 10^{-4}$ $Te_{min} = 70.00$ $T_{op} = 97.00$
$Fc_{max} = 6.50\ 10^{-3}$ $Te_{max} = 150.00$

◦ Ajustes dos Controladores

Etapa de Aquecimento ($0 \leq t \leq t_e$)

$T_{ep} = 0.36\ t + 25.00$ (rampa)

Etapa de Resfriamento ($t_e \leq t \leq t_f$)

$T_{ep} = 54.00 + 71.00\ exp\ (-\ 2.5\ 10^{-3} t)$ [25]

$C_{ep} = 13.00$

TABELA 5.2 - Condições iniciais e finais das variáveis de estado, condições limites de operação. Curvas de ajustes do servocontrole.

Quando não for mencionado, o intervalo de controle adotado nas simulações é Δ=10 s, valor comumente realizável em tempo real com sistemas de aquisição de dados não muito sofisticados.

Da mesma forma, os parâmetros de sintonização de Dahlin e c_{ep}, a princípio, foram os mesmos entre uma simulação e outra ($\delta_a = \delta_c = 0.01$ e c_{ep}= 13.0 °C). Suas influências na estabilidade e no desempenho dos processos, foram verificadas a posteriori.

O algoritmo de transição, definido na seção 4.4.3, foi implementado com sucesso para valores de J=10 e Er=.5°C. No entanto, em situações reais, esta etapa deve ser estudada por

último como um refino da estratégia de controle, pois na região onde a temperatura se encontra nas imediações do ponto de intersecção das duas curvas de ajuste da Tabela 5.2, é de se esperar que ocorra um caráter oscilatório na variável controlada, T.

5.2.1 - Parâmetros de Desempenho

As análises subsequêntes usualmente recorrem ao uso de um parâmetro para quantificar a eficiência da estrutura de controle dentro de um Critério de Desempenho requerido no projeto do sistema.

Assim, para avaliar o comportamento da temperatura do reator, T, na realização do perfil de ajuste, T_{epxt}, bem como a intensidade da variação das variáveis manipuladas, três parâmetros numéricos foram escolhidos.

I - INTEGRAL DO ERRO ABSOLUTO (IAE):

$$IAE = \int_0^{\infty} |e(t)|\,dt \qquad [30]$$

Para o período de aquecimento, IAE será calculado por :

$$IAE = \int_c^{ts} |e(t)|\,dt \qquad (5.1)$$

onde o termo integral é aproximado numericamente pelo método das "áreas" de Simpson, que realiza o somatório das áreas das regiões entre as oscilações de T ao longo de T_{sp}.

Analogamente, para o período de resfriamento, aproxima-se o numericamente o termo integral conforme abaixo:

$$IAE = \int_{ts}^{tf} |e(t)|\,dt \qquad (5.2)$$

Os valores de ts e tf são característicos da estratégia de

controle (Capítulo 4).

II - ESFORÇO DA VARIÁVEL CONTROLADA (Perf.T):

Para o aquecimento definiu-se arbitrariamente Perf.T como sendo:

$$Perf.T = \left(\sum_{i=1}^{Np} |e(i)| \right) / Np \quad , \quad Np = \frac{t_a}{\Delta} \qquad (5.3)$$

Para o resfriamento, Perf.T é dado por:

$$Perf.T = \left(\sum_{i=1}^{Np} |e(i)| \right) / Np \quad , \quad Np = \frac{t_f - t_a}{\Delta} \qquad (5.4)$$

III- ESFORÇO DA VARIÁVEL MANIPULADA T_a (Perf.T_a):

Para avaliar indiretamente a frequência de atuação da válvula de admissão de vapor e o esforço mecânico sobre este dispositivo, estipulou-se a seguinte sequência de calculo para o aquecimento:

$$Perf.T_a = \left(\sum_{i=1}^{Np} |T_{a(i)} - T_{a(i-1)}| \right) / Np \quad , \quad Np = \frac{t_a}{\Delta} \qquad (5.5)$$

O mesmo raciocínio poderia ser aplicado para o atuador de Fc. No entanto, como será mostrado a seguir, a eficiência do controle de T durante a fase de resfriamento não exige este tipo de abordagem.

5.2.2 - Análise da Estrutura de Controle por Simulações em Malha Fechada

◦ Algoritmo 1

A Simulação em malha fechada do Algoritmo inicialmente proposto - Capítulo 4 - fez observar (Figura 5.1) que, durante a etapa de aquecimento, a temperatura do processo, T, persegue a

trajetória desejada de maneira oscilante e exige um esforço na manipulação de T_e. Para a etapa de resfriamento (Figura 5.2), ao contrário, consegue-se uma boa qualidade no controle.

A má qualidade do estimador de Q_r, revelada pela Figura 5.3, levantou a suspeita de que um tal resultado, que pode influenciar o desempenho do controle, estaria associado ao fato de ter desprezado o efeito da capacidade térmica da parede da troca de calor vapor/parede.

5.3 - MODIFICAÇÕES DO ALGORITMO 1 PARA O CONTROLE DO REATOR COM REAÇÕES CONSECUTIVAS

5.3.1 - Algoritmo 2

As observações anteriores sugeriram a inclusão de um termo Q_p, às equações (4.22) e (4.65), que leva em conta o acúmulo energético nas paredes do reator em cada intervalo de controle Δ, termo esse dado por:

$$Qp_n = M_m cp_m \frac{(Tp_n - Tp_{n-1})}{\Delta} \qquad (5.6)$$

Falou-se, então, de um inferenciador da temperatura da parede, T_p, com medidas de T e T_e diretas do processo. Partindo da consideração de um pseudo-estado estacionário entre manipulações sucessivas, tem-se que :

$$U_e A_j (T_e - T) = h_{io} A_{jo} (T_e - T_p) \qquad (5.7)$$

Rearranjando e discretizando (5.7), chegou-se a :

$$Tp_n = Te_{n-1} - \frac{U_e A_j}{h_{io} A_{jo}} (Te_{n-1} - T_n) \quad , \qquad (5.8)$$

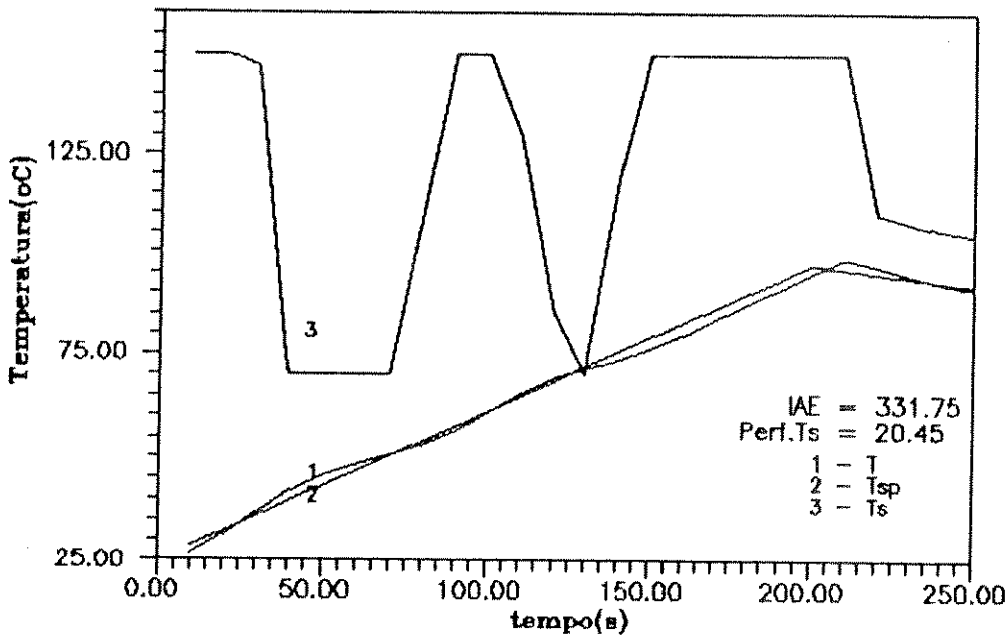


FIGURA 5.1 - Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Algoritmo)

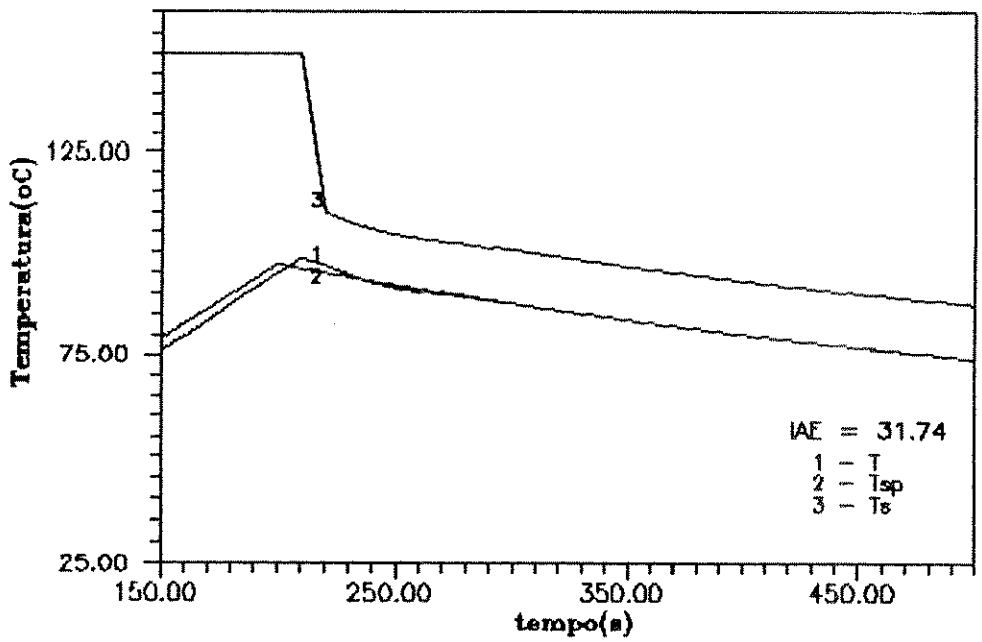


FIGURA 5.2 - Desempenho de T e Ts para a fase de resfriamento (Algoritmo 1)

o que permite reescrever as equações (4.22) e (4.65) como :

$$Qr_n = V\rho cp \left(\frac{dT}{dt}\right)_n - UeAj(Te_{n-1} - T_n) + F_{cT_{n-1}}\rho_c cp_c (T_{cf_n} - T_{co}) + Qp_n \qquad (5.9)$$

$Tcf(n)$ e $T(n)$ são "medidas" do processo e $TeT(n-1)$ e $FcT(n-1)$ são os últimos sinais enviados das malhas de controle aos respectivos atuadores.

Analogamente à simulação anterior, percebeu-se o mesmo desempenho de T ao longo de Tepxt. Pode-se observar pela curva 2 da Figura 5.3 que, mesmo com as nítidas melhorias na ordem de grandeza de $Qr(n)$, ainda prevalecia o efeito da parede nesta predição na etapa de resfriamento.

Quanto à etapa de aquecimento, não houve sucesso no cálculo de $Qr(n)$ em virtude das oscilações do perfil de T ao longo das passagem imposta pelo "set-point". Suspeitou-se, assim, de uma predição incorreta de $Tp(n)$, no que levou a reformular a atribuição do estado estacionário tal qual trata a relação (5.7).

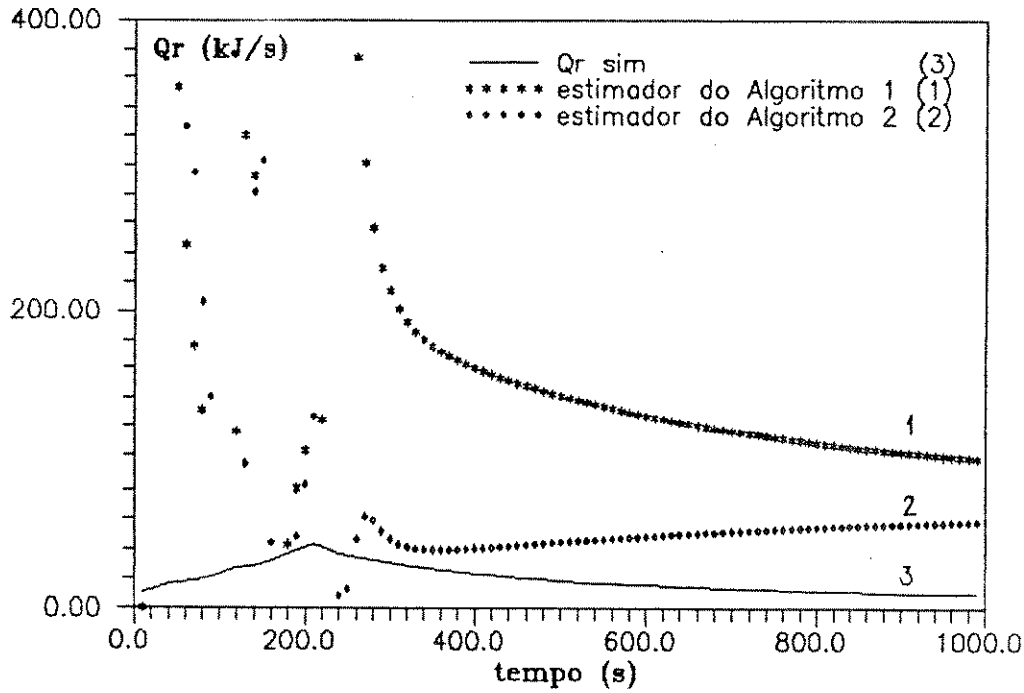


FIGURA 5.3 – Estimador de Qr

Como sugestão, definiu-se um modelo diferente onde se recorre à forma discretizada de (3.12) para a compensação dinâmica "on-line" da resistência térmica da parede, que resolvido para T_p, fornece a relação (5.10).

$$T_{p_n} = \frac{\frac{M_m c_{p_m}}{\Delta} T_{p_{n-1}} + h_{io} A_{jo} T_{eT_{n-1}} + h_i A_j T_n}{\frac{M_m c_{p_m}}{\Delta} + h_{io} A_{jo} + h_i A_j} \qquad (5.10)$$

5.3.2 - Algoritmo 3

Uma simulação , realizada com Q_r sendo predito por (5.9) e indiretamente por $T_{p(n)}$ dado pela expressão (5.10), não revelou melhores resultados. Por esta razão, abandonou-se a idéia de estimar Q_r sob aquela consideração de estado estacionário na transferência de calor pela parede, embutido na equação (5.6).

O coeficiente global de transferência térmica, U_e, cedeu, então, lugar ao coeficiente de película que levou Q_r a ser estimado por:

$$Q_{r_n} = V \rho c_p \frac{dT}{dt}_n + F_{cT_{n-1}} \rho_c c_{p_c} (T_{cf_n} - T_{co}) - h_i A_j (T_{p_{n-1}} - T_n) \qquad (5.11)$$

com $T_{p(n)}$ calculado por (5.10).

A análise qualitativa da eficiência dos preditores foi, a princípio, realizada na região de resfriamento, onde a magnitude das mudanças dinâmicas das Temperaturas, T e T_e, foi observada como inferior àquela do período de aquecimento.

Para este estudo, a contribuição da malha de antecipação (Figura 4.6) sobre a variável manipulada, F_c, foi alterada para :

$$(F_{c_n})_{FF} = \frac{1}{K_{FF_c}} (T_{p_n} - T_n) + \frac{Q_{r_n}}{\Phi} - \frac{V \rho c_p}{\Phi} \frac{(T_{n+1})_{ep} - T_n}{\Delta} \quad , \qquad (5.12)$$

com $T_{p(n)}$ calculado por (5.10) e

$$K_{FF_c} = \frac{\Phi}{h_i A_j} \qquad (5.13)$$

As demais relações algébricas das malhas de realimentação (Seção 4.4.4) , até este ponto, mantiveram-se inalteradas. As Figuras 5.4 e 5.5, trazem plotados o resultado da simulação realizada com as modificações no algoritmo, decorrentes das mudanças de (5.10) à (5.13)

Comparativamente aos gráficos anteriores, obteve-se, com este algoritmo, uma eficiência superior em ambas etapas do processo. Durante o aquecimento, como mostra a Figura 5.4, a temperatura do processo persegue o "set-point" com oscilações nos instantes iniciais em virtude do gradiente elevado de temperatura imposto à parede, pois quando t=0 s, $T_{m(o)}$=25 e T_e=T_{emax}. Tão logo estes gradientes se dissipem, em T próximos a 70 °C, alcança-se um nível superior nas predições de T_p e Q_r e, consequentemente se reduzem os desvios relativos ao ajuste desejado.

Outra observação diz respeito à redução do esforço da variável T_e, adquirido pela conceito inserido na predição de $T_{p(n)}$.

O perfil de T para o período de resfriamento, dado na Figura 5.5, comporta-se de maneira semelhante àqueles das simulações anteriores.

Estudando-se o efeito do intervalo de controle, Δ, no desempenho deste tipo de algoritmo, elaboraram-se as Figuras 5.6A e 5.6B, onde se observam sensíveis reduções no IAE para valores menores de Δ, na malha de controle para a etapa de aquecimento. Quanto à variável manipulada, nota-se um "alisamento" da curva de T_{ext} para Δ=5 e e um comportamento quase que "on-off" para Δ=1 e.

O mesmo efeito não foi observado na etapa de resfriamento porque as diferenças entre as forças motrizes problemáticas do processo de transferência de calor, (T_e-T_m) e (T_m-T), não variam

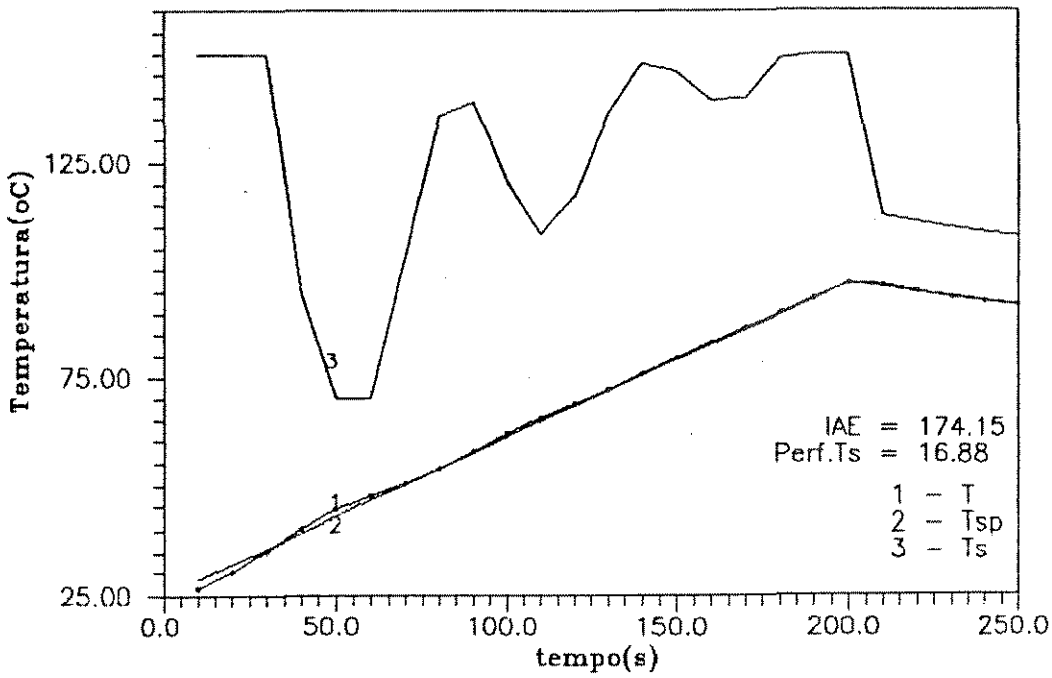


FIGURA 5.4 – Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Algoritmo 3)

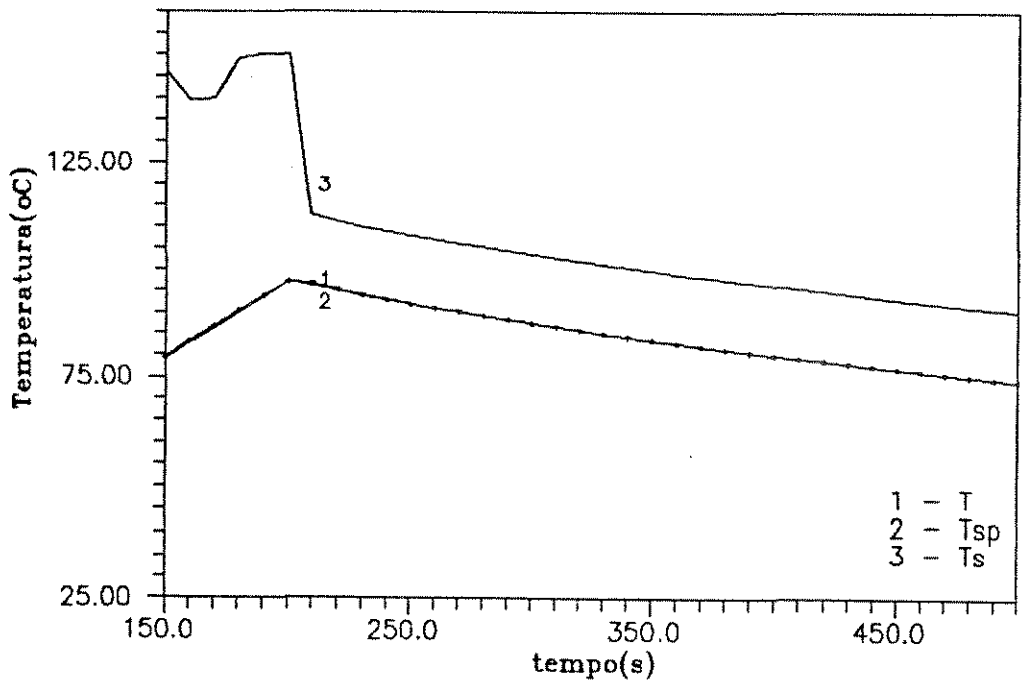


FIGURA 5.5 – Desempenho de T e Ts para a fase de resfriamento (Algoritmo 3)

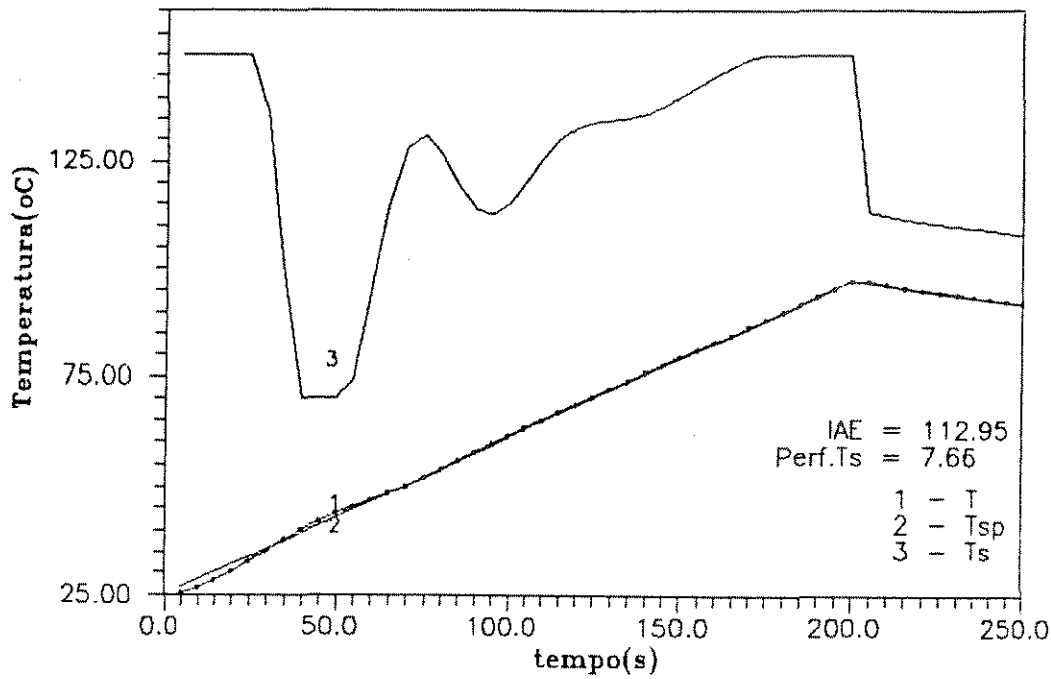


FIGURA 5.6A – Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Δ= 5s) (Algoritmo 3)

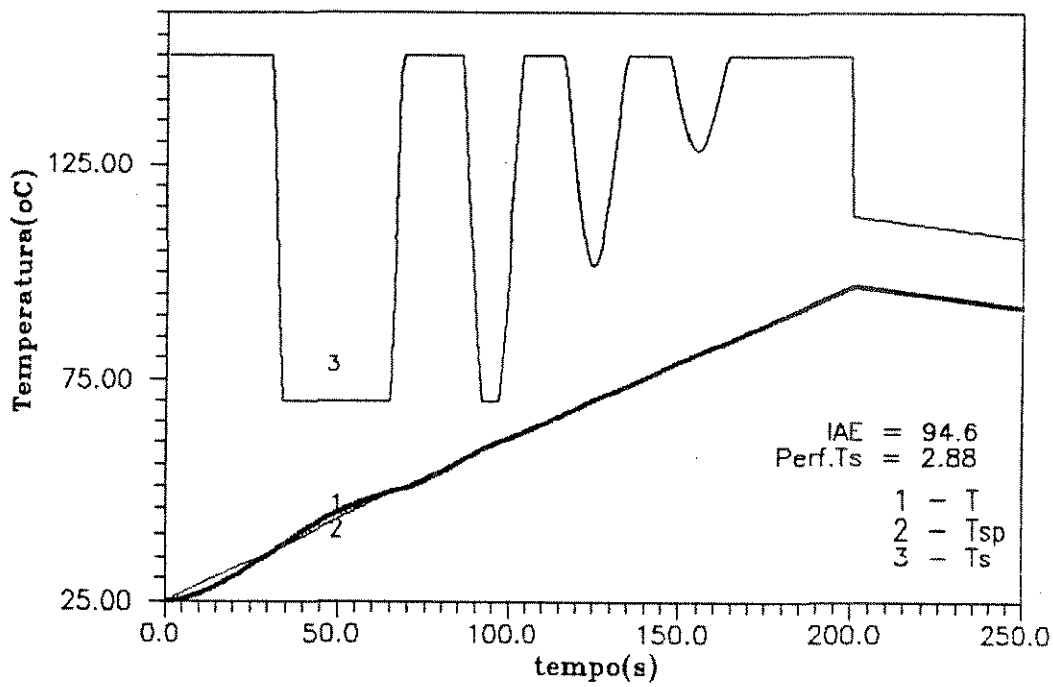


FIGURA 5.6B – Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Δ= 1 (Algoritmo 3)

significantemente entre atuações sucessivas de Fc. Esta observação permitiu validar, para esta fase, a hipótese de ocorrência de um pseudo estado estacionário entre a serpentina e o meio reacional, para cada Δ, de tal forma a tornar este algoritmo como definitivo para o resfriamento do reator.

Outro grande progresso da implementação deste algoritmo recai no nível de estimação de Qr, na mesma ordem de grandeza daquele desenvolvido pela exotermia da reação (ver Figura 5.7). A Figura 5.7 mostra ainda uma precisão superior nesta estimação quando se usa valores de Δ= 1 s.

5.3.3 - Algoritmo 4

Para retomar o sentido prático do presente trabalho, "simulou-se" a Curva de Reação do Processo (CRP), como forma de verificar a aplicabilidade do Algoritmo 3 em uma situação "real".

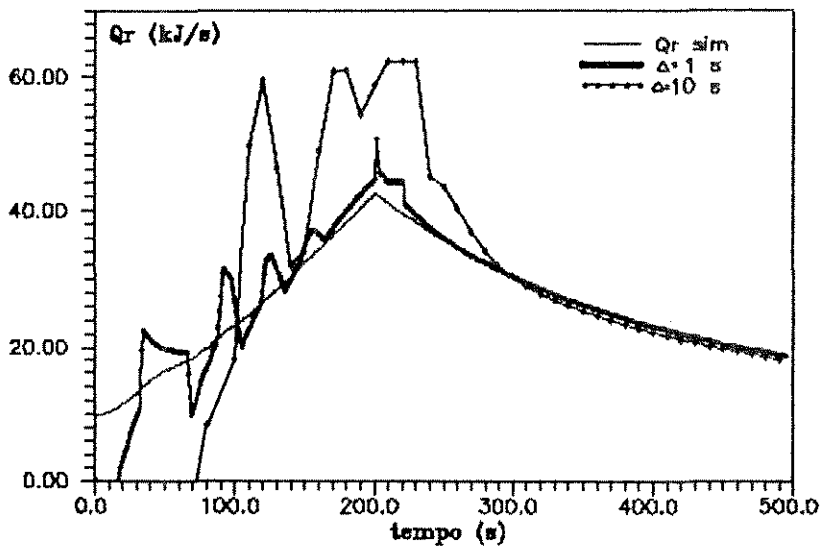


FIGURA 5.7 – Estimador de Qr (Algoritmo 3)

Simulou-se, então a resposta dinâmica em malha aberta da temperatura do reator cheio de água, quando submetido a uma

variação em degrau, na variável manipulada, T_e. Calculou-se o ganho do processo, K_a, pelo procedimento usual deste método e determinou-se o valor aproximado de U_e de acordo com a equação (4.12):

$$U_e = \left(\frac{K_a}{1 - K_a} \right) \frac{\alpha}{A_j} \qquad (5.14)$$

A relação (5.14) veio permitir o cálculo aproximado da constante de tempo dada pela equação (4.11). O tempo morto, t_d, pode ser encontrado diretamente do gráfico da CRP, conforme representado nas Figuras 5.8A e 5.8B.

Para o processo em questão, uma variação em degrau de 5°C em T_e forneceu U_e=2.35, t_d=2.0 s e um comportamento dinâmico característico de um sistema de 1ª ordem com atraso de transporte, justificado pela ordem de grandeza da espessura da parede entre a camisa e o meio reacional(x_m=2.54 cm).

Poder-se-ia desprezar o efeito de t_d no algoritmo de Dahlin, porém sua magnitude em relação à constante de tempo do sistema (95.3 s) e a Δ=10 s, torna-o importante na resposta dinâmica da malha fechada. Assim, como modificação à parcela de realimentação do Algoritmo 3 para o aquecimento, sugeriu-se usar o algoritmo de Dahlin em sua forma original discretizada dada pela equação (4.8)

A implementação do t_d na expressão (4.8) está limitada à condição :

$$t_d \geq N.\Delta \qquad , N \in \mathbb{N}^* \qquad (5.15)$$

Logo, o valor mínimo possível para t_d, segundo (5.15), deveria ser Δ. Como neste exemplo t_d=2.0 s, aplicou-se um valor interpolado de $T_{st(n-(1+N))}$ no algoritmo, como :

$$T_{sT_{n-(N+1)}} = \frac{T_{sT_{n-1}} - T_{sT_{n-2}}}{\Delta} (\Delta - t_d) + T_{st_{n-2}} \qquad (5.16)$$

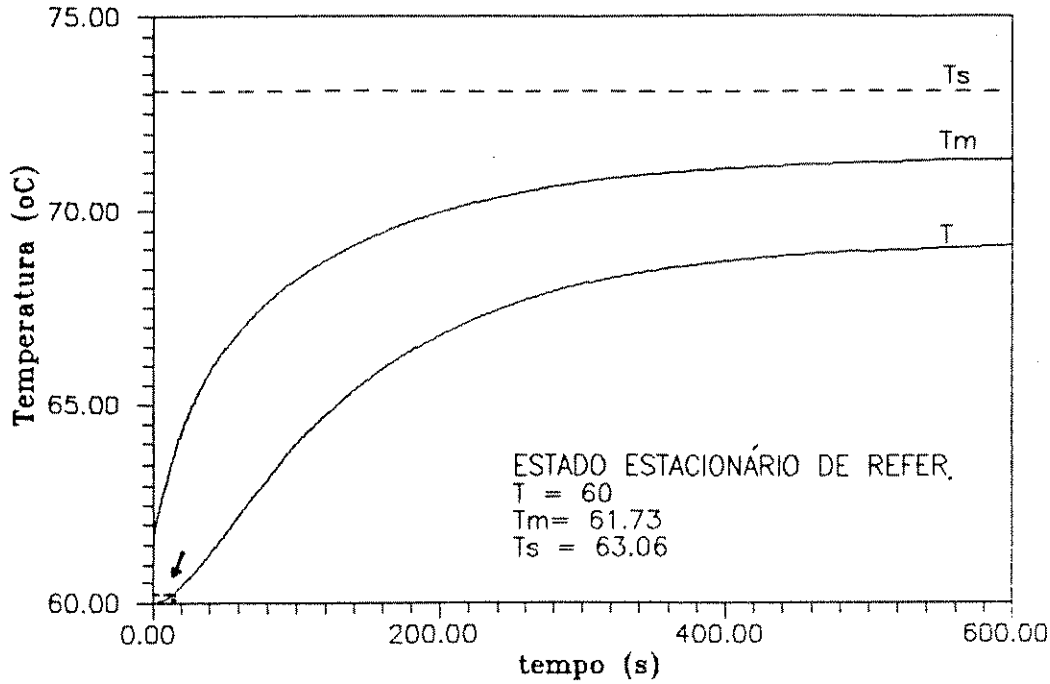


FIGURA 8A – Simulação da Curva de Reação do Processo (CRP)

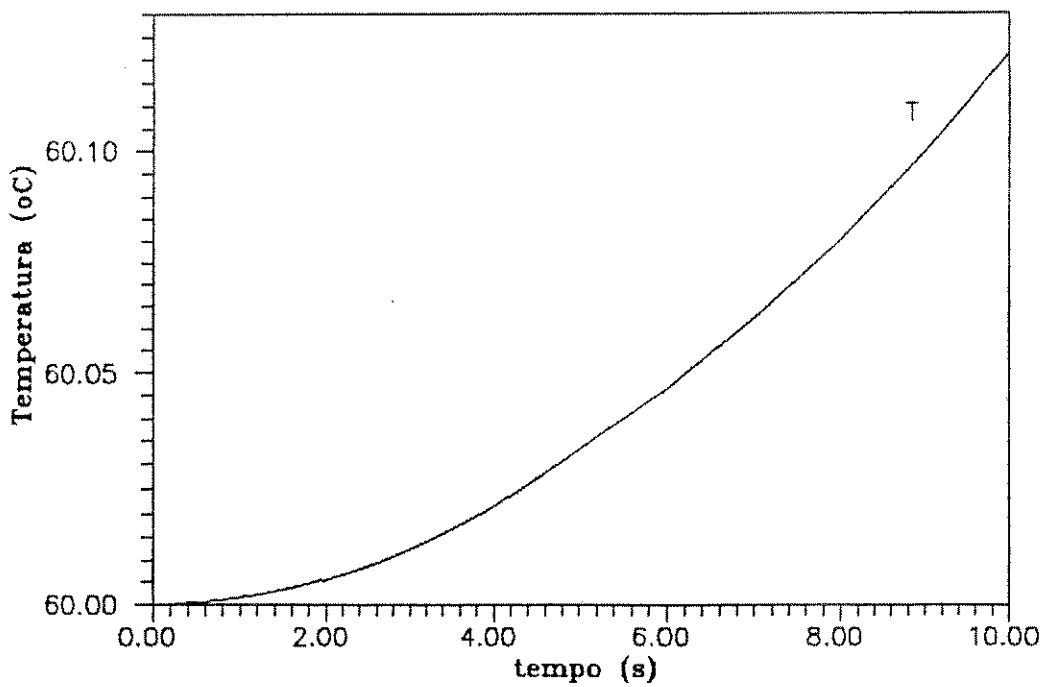


FIGURA 8B – Ampliação da região hachurada da Figura 8A

A simulação conjunta destas modificações na malha de realimentação do sistema de controle do aquecimento, com as demais considerações do Algoritmo 3, forneceu resultados de desempenho superior à simulação anterior. Para o período de aquecimento, observaram-se reduções tanto em IAE, quanto em Perf.Ts. Pela Figura 5.9, percebe-se uma nítida diminuição do esforço de T_s, justificado pela compensação dinâmica de t_d e da utilização de U_s **"real" na malha de realimentação.**

As Figuras 5.10A e 5.10B, trazem plotados os resultados das simulações realizadas com valores de Δ=5 s e Δ=1 s, respectivamente. Para Δ=5 s, a aproximação da CRP e o termo de compensação do tempo morto no algoritmo de Dahlin, dado pelas equações (4.8) e (5.16), induzem um comportamento oscilatório na variável manipulada durante a subida. Estas "oscilações" em T_s tornaram-se mais acentuadas para intervalos de controles inferiores. Para Δ=1 s tem-se uma situação quase "on-off", provavelmente em decorrência da desestabilização da malha de realimentação em cada Δ, conferida pela situação em que $t_d > \Delta$.

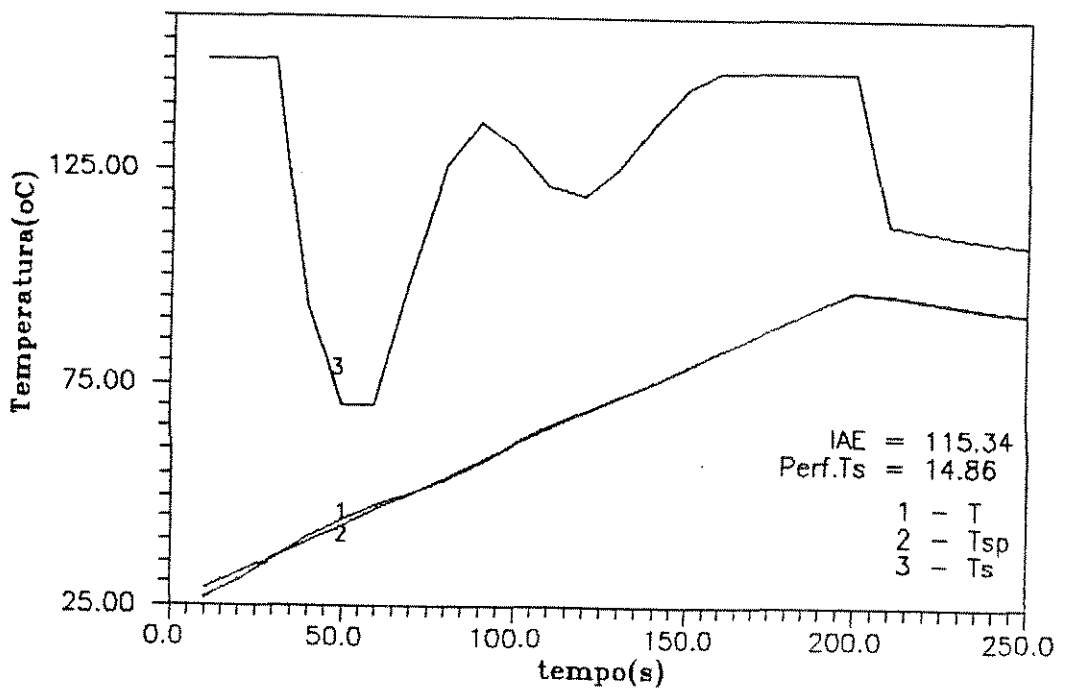


FIGURA 5.9 - Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Algoritmo 4)

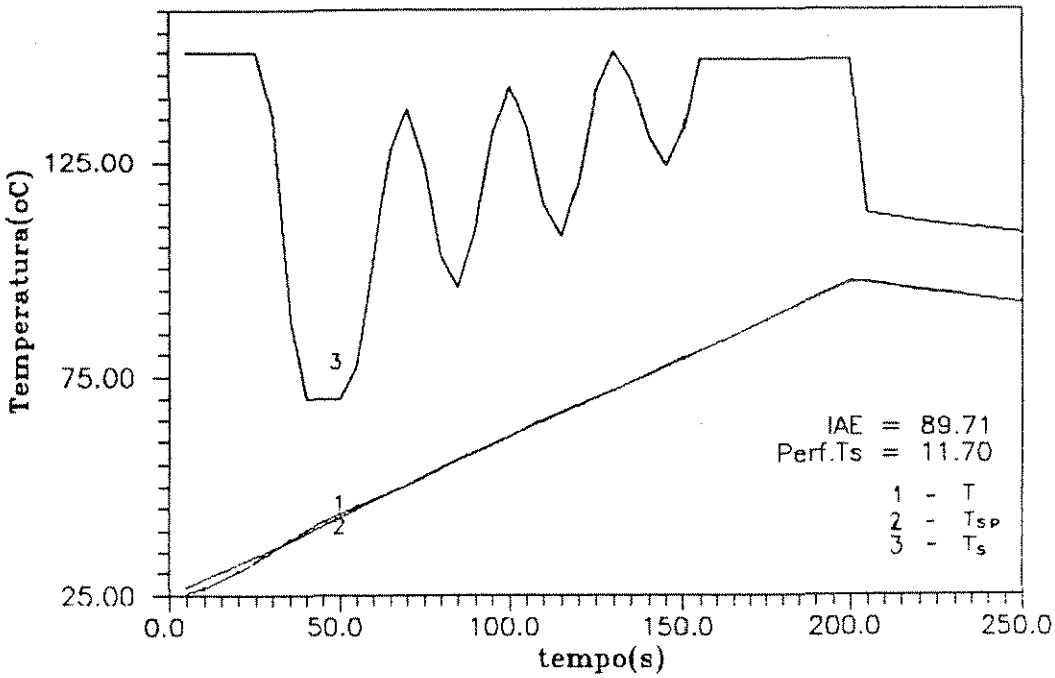


FIGURA 5.10A - Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Δ= 5s) (Algoritmo 4)

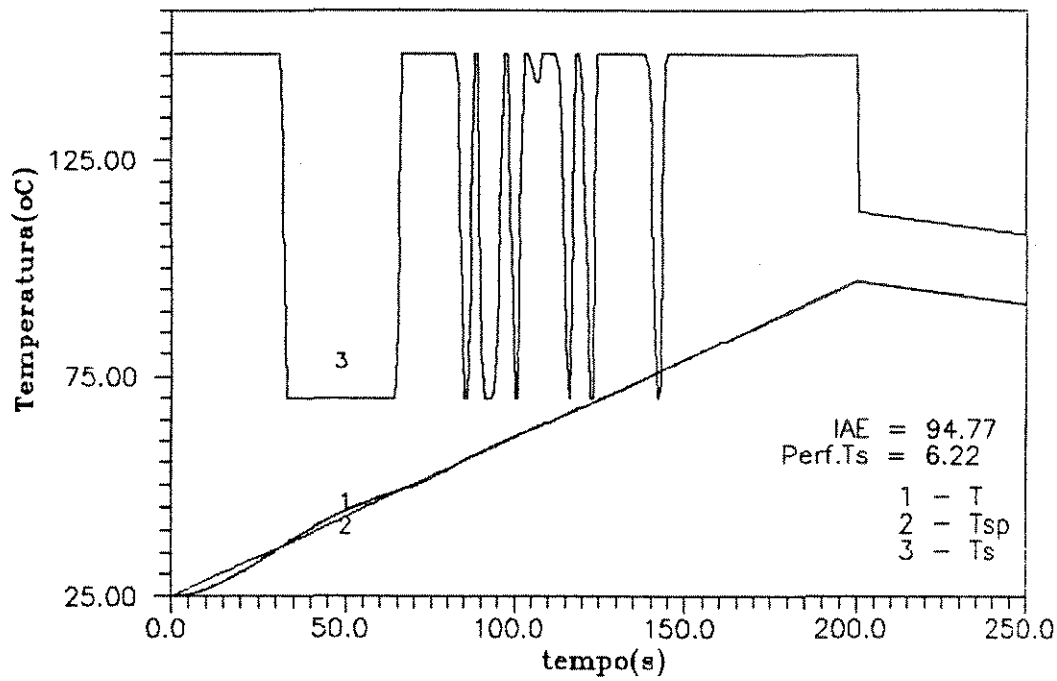


FIGURA 5.10B - Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Δ= 1s) (Algoritmo 4)

Por outro lado, quando se diminuiu Δ para 5 s, tem-se um acréscimo na eficiência no controle de T, pois associa-se ao período de subida um IAE inferior aquele correspondente a Δ=10 s.

A Figura 11 ilustra o excelente desempenho do estimador de Qr para valores de Δ diferentes, sendo de comportamento semelhante àquele desenvolvido no Algoritmo 3.

5.3.4 - Algoritmo 5

Uma vez definido o algoritmo para a etapa de resfriamento, atentou-se a uma "otimização" da estrutura do controlador para o período de aquecimento, com a finalidade de se reduzir ainda mais o IAE.

Numa simulação realizada com U_e calculado de tal forma a desconsiderar a espessura da parede (5.17), foi observado um "desvio permanente instantâneo", como aparece na Figura 5.12A. Como vantagem, porém, tem-se uma redução no esforço de T_e durante o aquecimento.

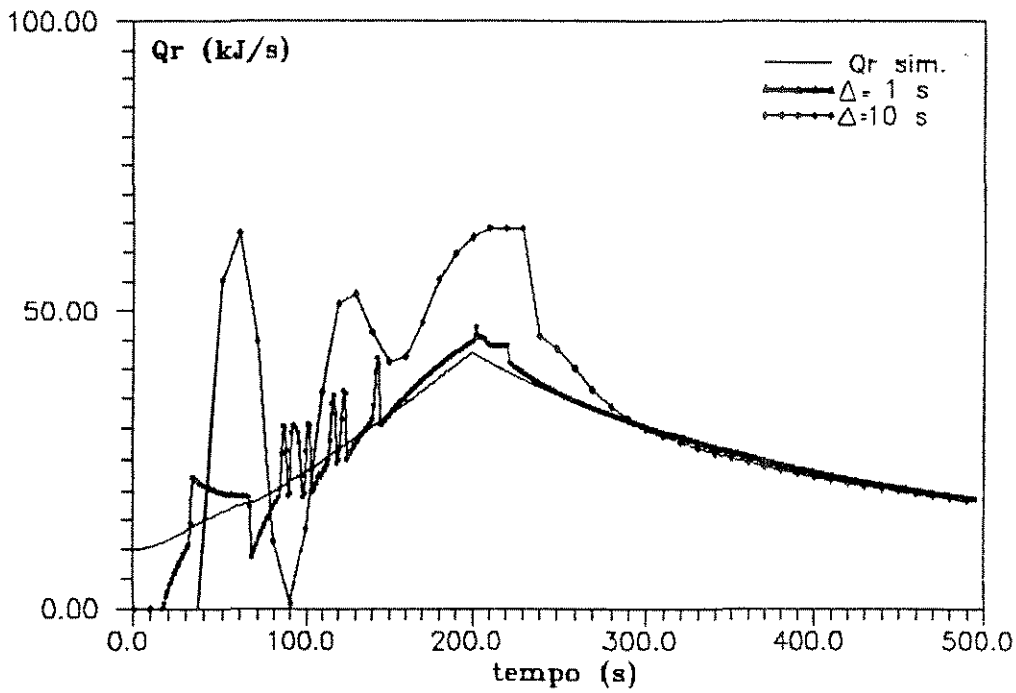


FIGURA 5.11 – Estimador de Qr
(Algoritmo 4)

$$\frac{1}{U_s} = \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{io}} \frac{A_j}{A_{jo}} \qquad (5.17)$$

Suspeitou-se, com isso, da interferência de U_s no poder de resolução do algoritmo de antecipação. Deixando-se os problemas conceituais dos parâmetros do algoritmo de Dahlin, K_a, τ_a e N, a cargo de um método experimental aproximado (Curva de Reação do Processo), buscou-se uma equação alternativa para o módulo de antecipação que não fosse sustentada pelo conceito de U_s.

Ao contrário daquela metodologia desenvolvida no Capítulo 4, optou-se por discretizar em conjunto as equações diferenciais (3.29) e (3.30). Aplicando a estratégia de controle para esta fase de aquecimento, obteve-se o sistema de equações algébricas que aparece a seguir.

Discretizando (3.29) e rearranjando os termos chegou-se a:

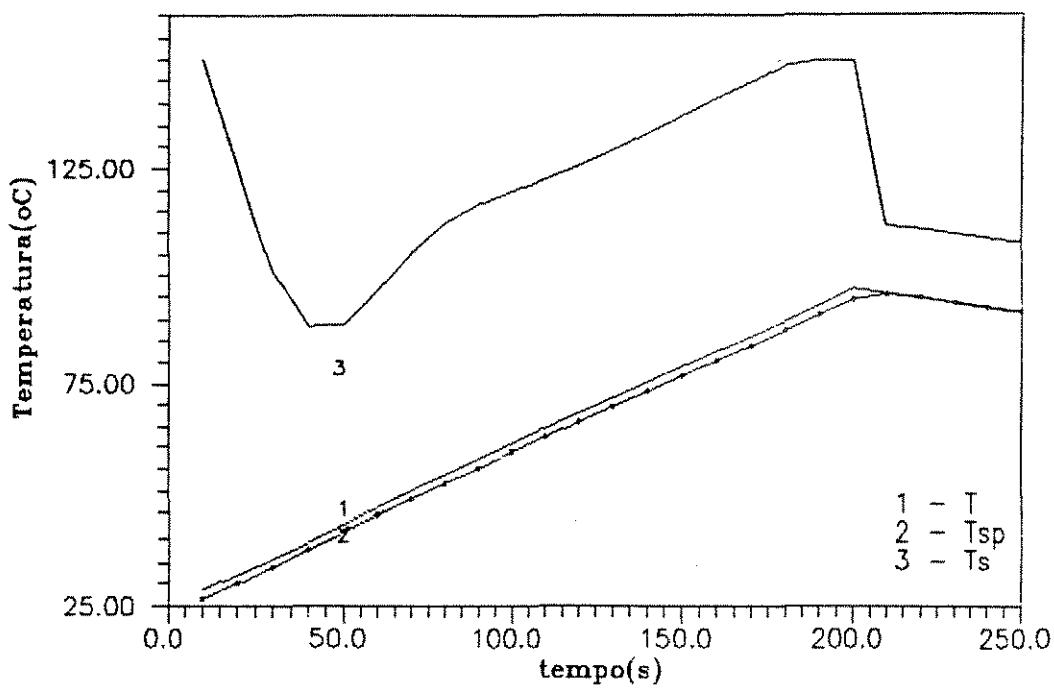


FIGURA 5.12A - Desempenho de T .

$$(T_m)_{n\,FF} = \frac{V\rho c_p}{hiA_j}\,\frac{(T_{n+1})_{ep} - T_n}{\Delta} + \frac{(T_{n+1})_{ep}}{K_{FF_a}} - \alpha\,\frac{T_{co}}{hiA_j} - \frac{Q_{r_n}}{hiA_j} \qquad (5.18)$$

com

$$K_{FF_a} = \frac{hiA_j}{(hiA_j + \alpha)} \qquad (5.19)$$

$(T_m)_{FF}$ é a temperatura aproximada na qual se deve submeter a parede do reator para que a temperatura do processo persiga o **"set-point" até o instante n+1.**

Discretizando (3.30) e resolvendo em T_{ST} tem-se que :

$$(T_s)_{n\,FF} = \frac{\left[Mc_p\,\frac{(T_m)_{n\,FF} - T_{p_n}}{\Delta} + hiA_j\,(T_{p_n} - (T_{n+1ep})\right]}{hioA_{jo}} + T_{p_n} \quad , \qquad (5.20)$$

com $T_{p(n)}$ normalmente calculado por (5.10).

As simulações (Figura 5.12) realizadas com esta estrutura em associação ao algoritmo de Dahlin com a CRP, conduziram a resultados satisfatórios, tendo em vista a obtenção do menor IAE até então. Em relação aos demais algoritmos, o sistema exigiu um aumento do esforço nas manipulações de T_s, como pode mostrar o coeficiente Perf.T_s e a observação da Figura 5.12.

A análise das simulações representadas nas Figuras 5.13A e 5.13B, mostrou que a redução de Δ, para este algoritmo, incorre na perda de eficiência da estrutura de controle em virtude do nítido comportamento oscilatório de T_s , indesejável para o aquecimento **"ideal"**. Sob o **aspecto mecânico**, porém, a diminuição de Perf.T_s para Δ=1 s indica por analogia um melhor desempenho da frequência de variação do posicionador da válvula de vapor, quando em uma situação real.

A observação do estimador de Q_r da Figura 5.14 veio por confirmar a eficiência do preditor de $T_{p(n)}$ (equação 5.10) sobre o poder de resolução da equação (5.11), ainda mais preciso para intervalos pequenos de Δ.

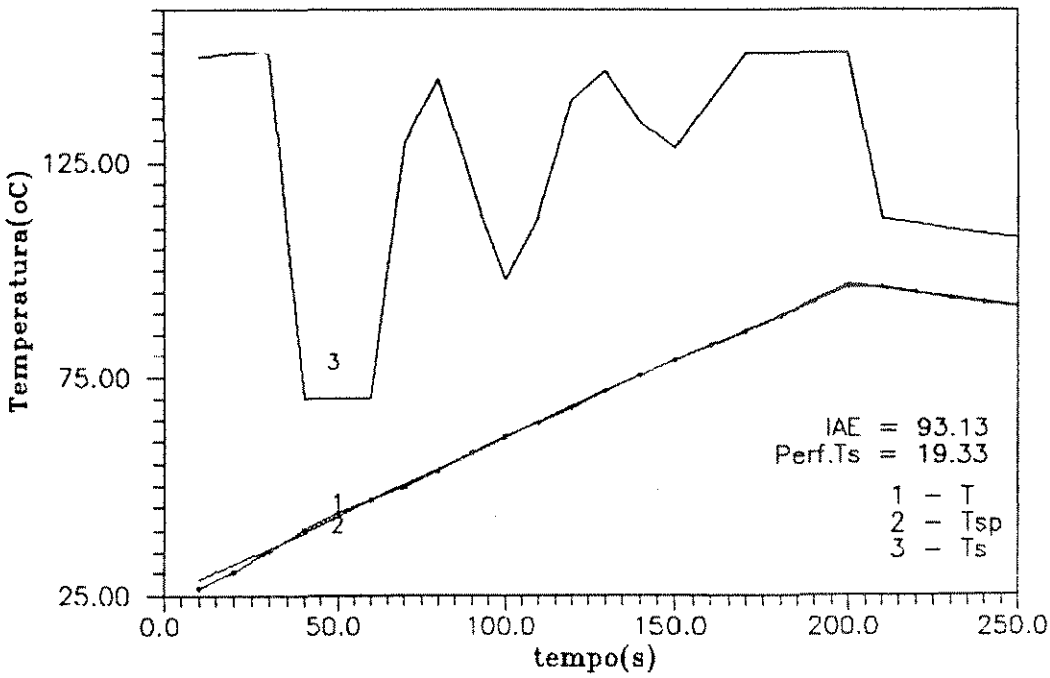


FIGURA 5.12 – Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Algoritmo 5)

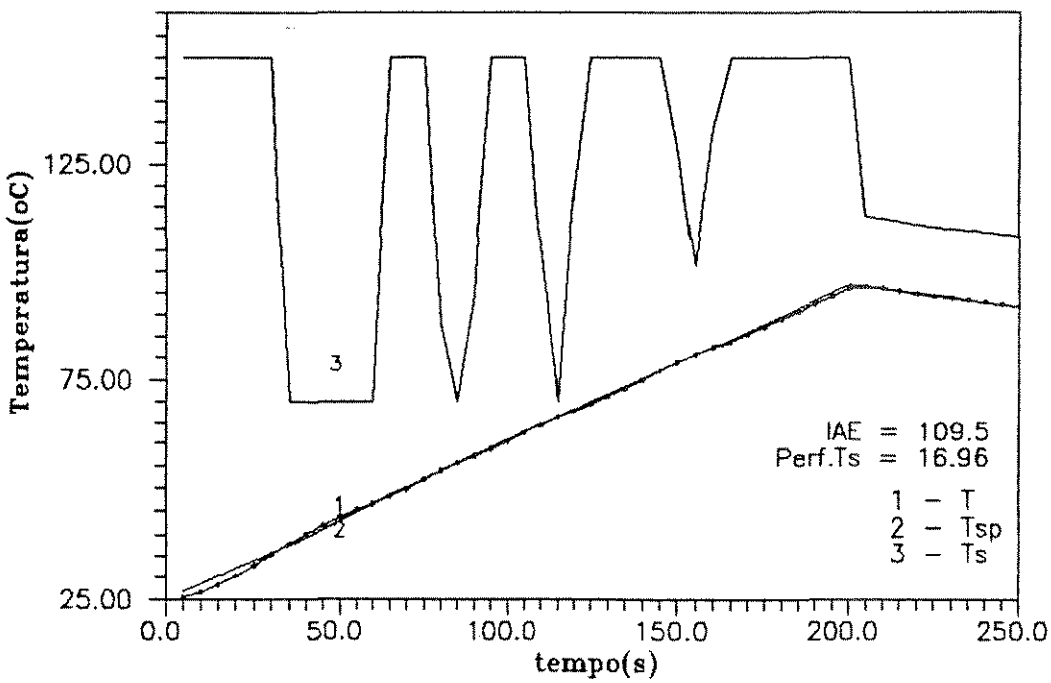


FIGURA 5.13A – Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Δ=5s) (Algoritmo 5)

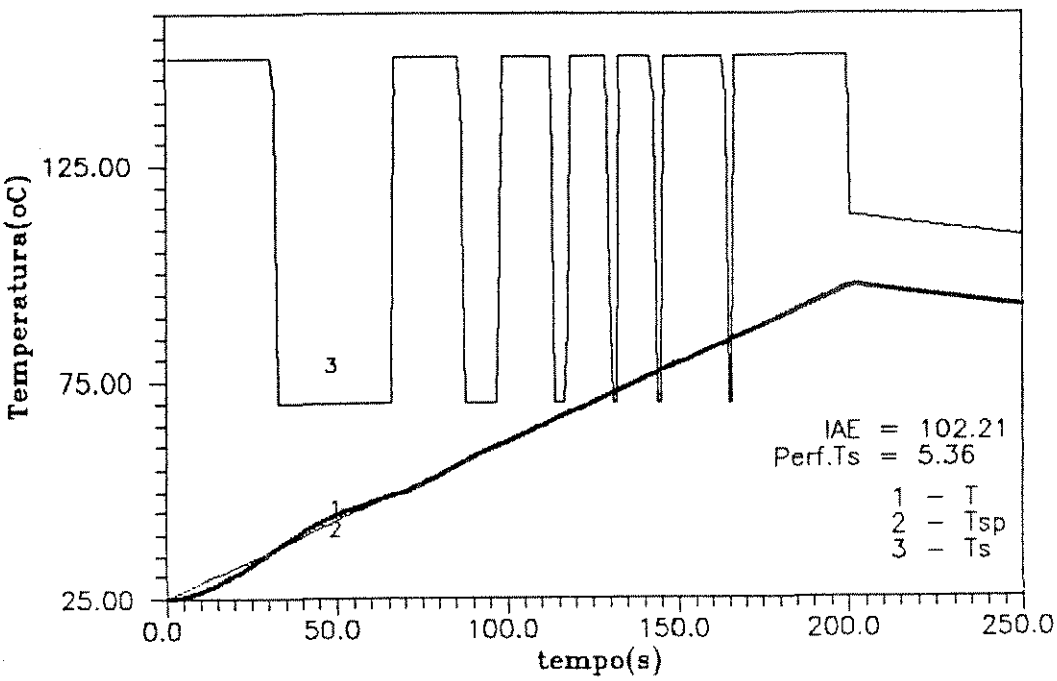


FIGURA 5.13B - Desempenho de T e Ts para a fase de aquecimento (Δ=1s)
(Algoritmo 5)

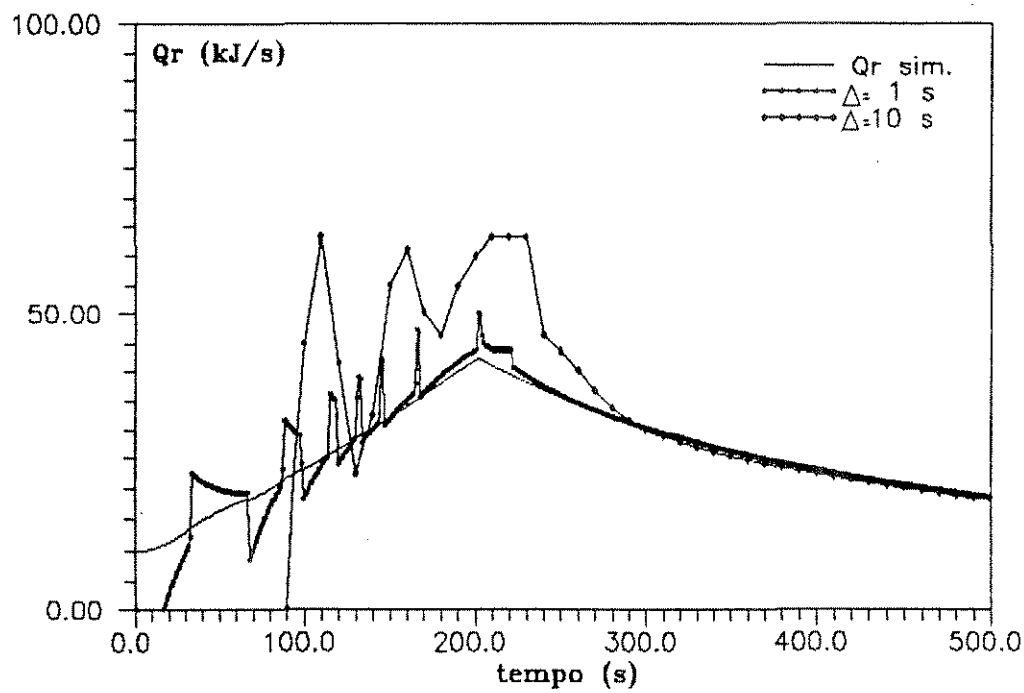


FIGURA 5.14 - Estimador de Qr
(Algoritmo 5)

5.4 - SINTONIZAÇÃO DOS CONTROLADORES

Pelas características da estrutura de controle, desenvolveram-se dois procedimentos distintos para atender à sintonização do controle do aquecimento (Figura 4.3) e do controle de resfriamento (Figura 4.6). O critério de desempenho utilizado neste método, baseia-se unicamente na "minimização" de IAE que serve tanto para o aquecimento, quanto para o resfriamento.

Estes procedimentos serão sequencialmente explicados a seguir.

I - SINTONIZAÇÃO DO PARAMETRO DE DAHLIN PARA A MALHA DE REALIMENTAÇÃO - AQUECIMENTO

i - Fixar Δ= 10 s. Esta consideração advem da disponibilidade de sistemas de aquisição de dados acessíveis e precisos para este intervalo de controle em tempo real, como fora mencionado anteriormente.

ii - Atribuir um valor qualquer δ_r, $\forall\ \delta_r<1$, e c_{sp} calculado pela equação (4.36).

iii- Variar δ_a tantas vezes quantas forem necessárias para elaboração de curvas do tipo IAExδ_a.

iv - Tendo em mãos as curvas obtidas por (iii), encontrar graficamente o valor do parâmetro δ_a que corresponda ao menor valor de IAE. Por princípio, este será o valor ótimo de sintonização, δ_{amin}, que confere ao sistema o melhor desempenho na evolução de T durante o aquecimento.

II - SINTONIZAÇÃO DO PARAMETRO DE DAHLIN PARA A MALHA DE REALIMENTAÇÃO - RESFRIAMENTO

i - Fixar Δ=10 s.

ii - Realizar a etapa do servocontrole de aquecimento com δ_{amin}, dado na sintonização anterior.

iii- Atribuir um valor δr, $\forall\ \delta r \ll 1$, e variar c_{ep} no intervalo de $0 \leq c_{ep} \leq (T_{emax} - T_{emin})$, de tal maneira a gerar curvas do tipo $IAE \times c_{ep}$. à δr constante.

iv - Repetir o sub-item (iii) para valores maiores de δr, $\forall\ \delta r \leq 1$, gerando curvas do tipo (iii). Usar como parâmetro de sintonização ótimo, aquele valor δr que "minimize" IAE e como parâmetro de processo, o valor correspondente de c_{ep}.

Para estes métodos de sintonização, os valores de δa e δr usados, devem satisfazer o conceito proposto por Dahlin ($\delta < 1$).

O parâmetro c_{ep} ótimo não necessariamente será pequeno o suficiente para minimizar a carga térmica de aquecimento, Qv. Esta consideração torna-se viável em reações batelada. Neste processos descontínuos, geralmente ligados à síntese de especialidades, o custo das "utilidades" na produção é percentualmente mínimo quando comparado com do produto acabado.

Aplicou-se, então, a Sequência I para a sintonização da malha de realimentação durante o aquecimento do Caso Exemplo 1. As simulações realizadas para os Algoritmos 3,4,5 forneceram as curva de sintonização respectivamente representadas nas Figuras 5.15, 5.16 e 5.17.

Pode-se perceber ,pelos gráficos, uma semelhança de comportamento no processo de "minimização" de IAE. Para valores de δa na ordem de 0.01, há um nível mínimo de IAE correspondente. Pode-se afirmar, então, que IAE é inversamente proporcional à rapidez da malha de realimentação. Esta observação vem confirmar a idéia de Dahlin, que a valores pequenos de δ se tem associado uma resposta mais rápida da malha de controle.

Detendo-se à Sequência II, as simulações realizadas com o Algoritmo 3 forneceram as curvas que aparecem nas Figuras 5.18A e 5.18B. Como se pode perceber, a ordem de grandeza das variações de IAE, entre simulações sucessivas, é relativamente pequena.

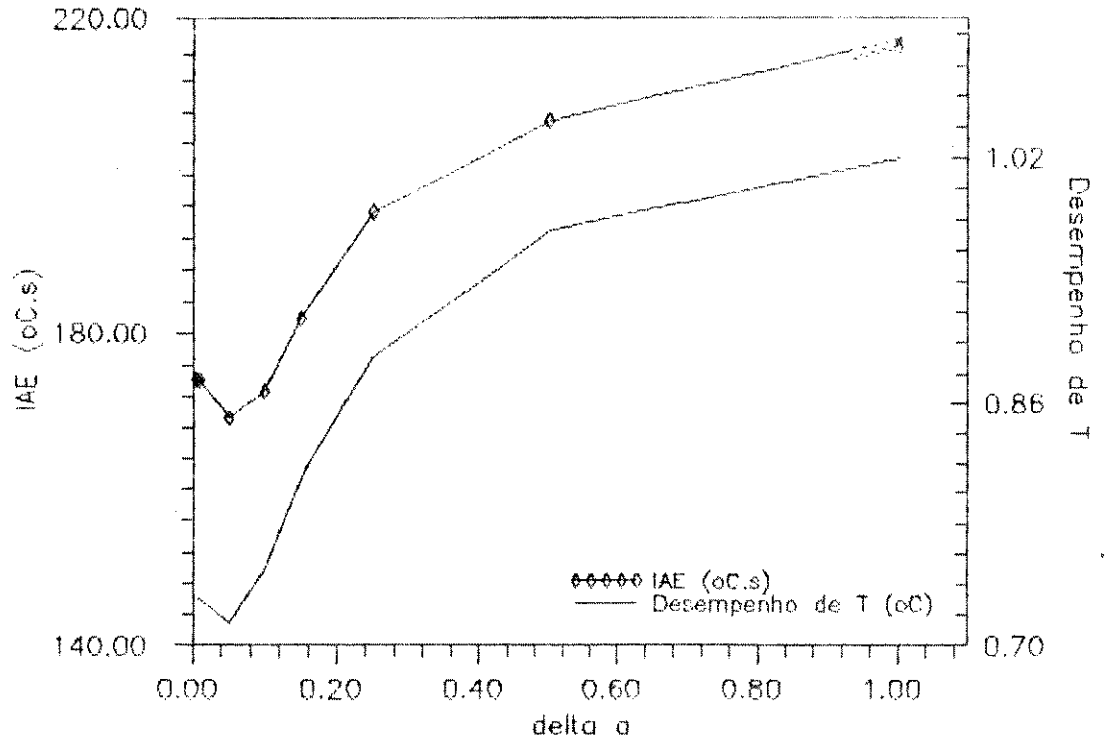


FIGURA 15 – Curvas de minimizacao de IAE usadas na sintonizacao do algoritmo de Dahlin para a etapa de aquecimento

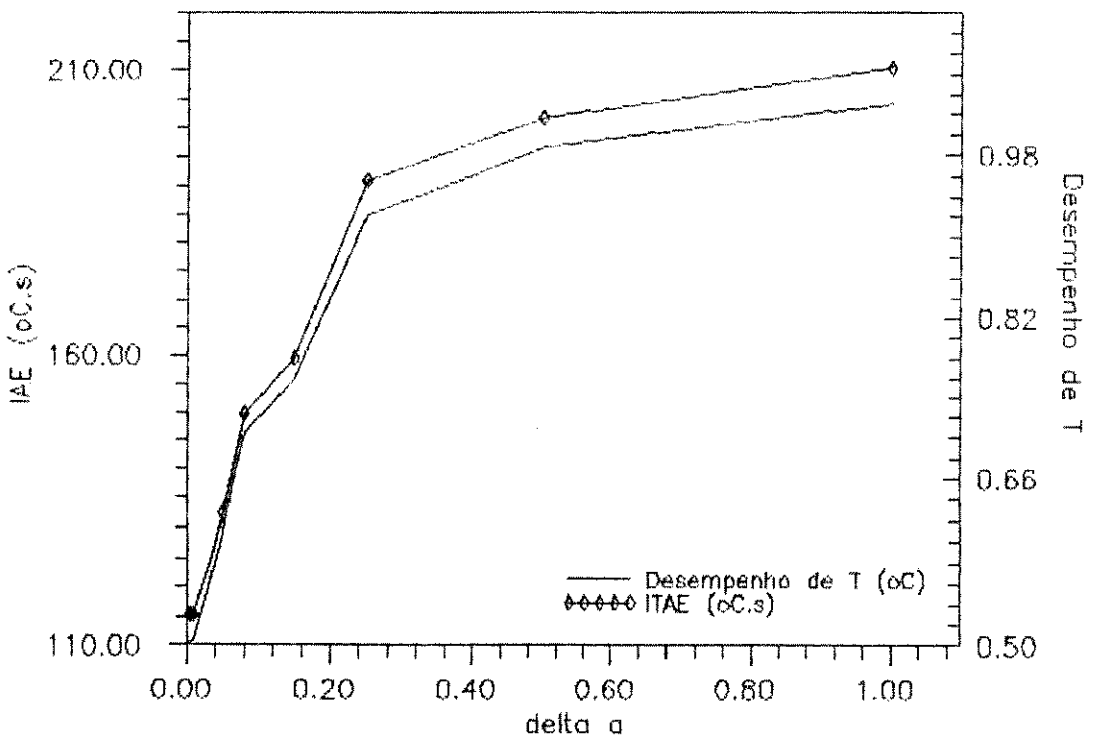


FIGURA 16 – Curvas de minimizacao de IAE usadas na sintonizacao do algoritmo de Dahlin para a etapa de aquecimento

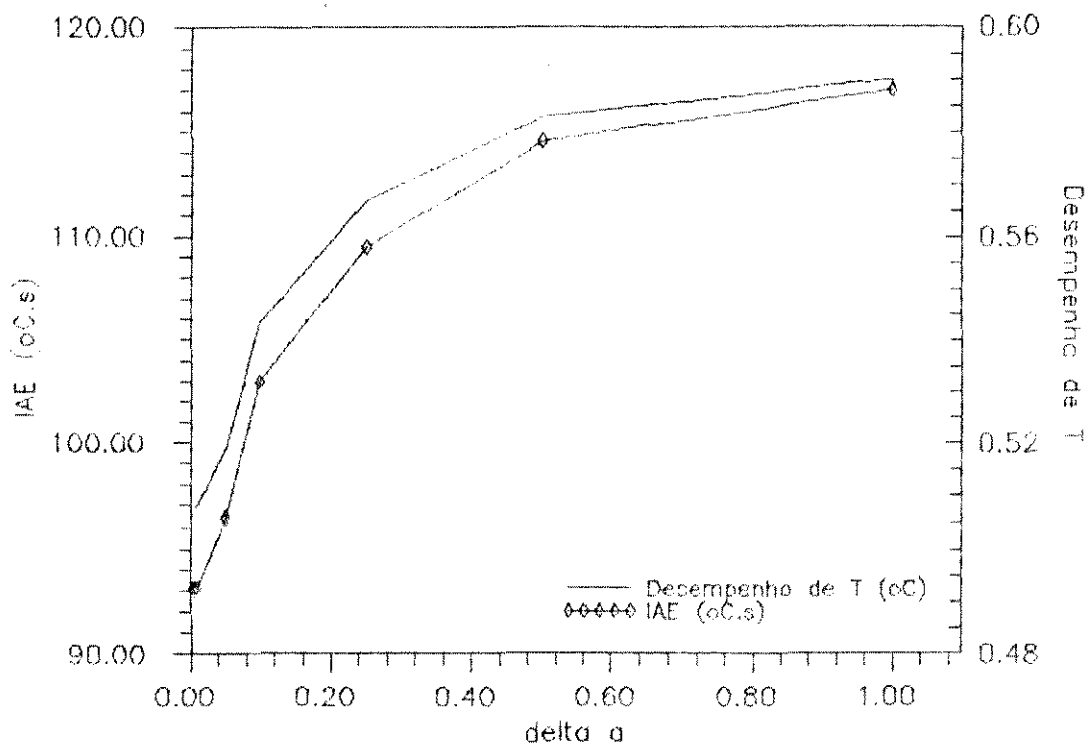


FIGURA 17 - Curvas de minimizacao de IAE usadas na sintonizacao do algoritmo de Dahlin para a etapa de aquecimento

O fato leva a crer que o desempenho do sistema não está comprometido com o valor de δ_r sintonizado. Assim sendo, não houve necessidade de estudar a sintonização de δ_r para os demais algoritmos.

Na Tabela 5.3 encontram-se os parâmetros ótimos de sintonização para os três algoritmos estudados. O valor de c_{ep} é aquele correspondente ao IAE mínimo da Figura 5.18B.

Como conclusão deste estudo de sintonização se pode estabelecer que em uma situação prática se deva usar parâmetros de sintonização pequenos (δ_a=δ_r=0.01) como garantia de desempenho da Temperatura.

ALGORITMO	δ_a	δ_r	C_{sp}, °C
3	0.01	0.01	30.0
4	0.005	0.01	30.0
5	0.005	0.01	30.0

TABELA 5.3 - Parâmetros ótimos de sintonização dos algoritmos estudados

5.5 - SELEÇÃO DO MELHOR ALGORITMO

Para a definição daquele algoritmo que melhor atenda aos propósitos deste trabalho, é interessante que o sistema escolhido satisfassa à maioria das seguintes exigências :

i - IAE seja reduzido. Como forma de garantir a qualidade do produção, é desejável que o sistema persiga a trajetória estipulada com o mínimo de oscilações.

ii - O estimador de Q_r apresente mesma ordem de grandeza que a evolução exotérmica do sistema.

iii- Tenha-se à variável manipulada T_e, um esforço relativamente pequeno durante o período de aquecimento, o mais próximo possível de um rampa paralela à subida de T.

iv - Que seja possível a implementação da estrutura de controle em um processo real, preservando assim o sentido prático deste trabalho.

Realizando-se a análise comparativa dos Algoritmos 3,4 e 5, para Δ=10 s e sob este Critério de Escolha apresentado, escolheu-se o Algoritmo 3, pela comodidade em se fixar valores de U_e genéricamente usados em reatores tipo tanque. Por outro lado, na prática, quando houverem condições apropriadas para a elaboração da CRP, é preferível implementar o Algoritmo 4.

Mesmo embora apresentasse o menor valor de IAE, o Algoritmo 5 mostrou-se pouco robusto a variações não tão significativas de Δ.

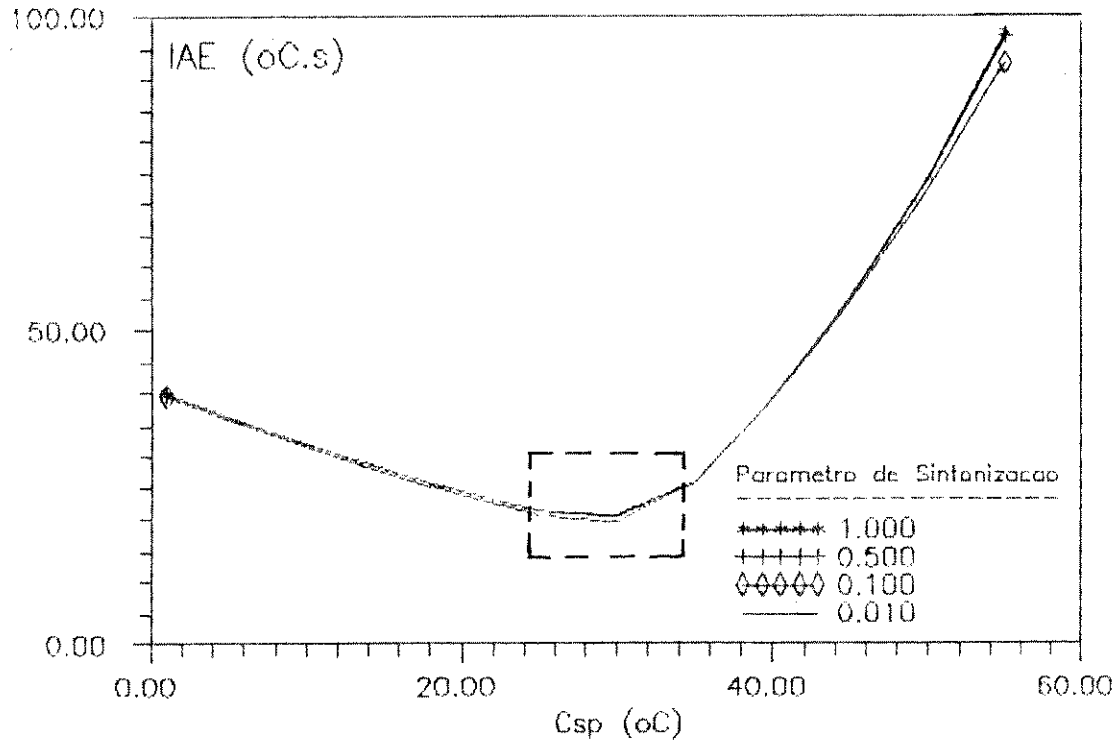


FIGURA 18A – Curvas de minimizacao de IAE usadas na sintonizacao da malha de controle para a etapa de restriamento

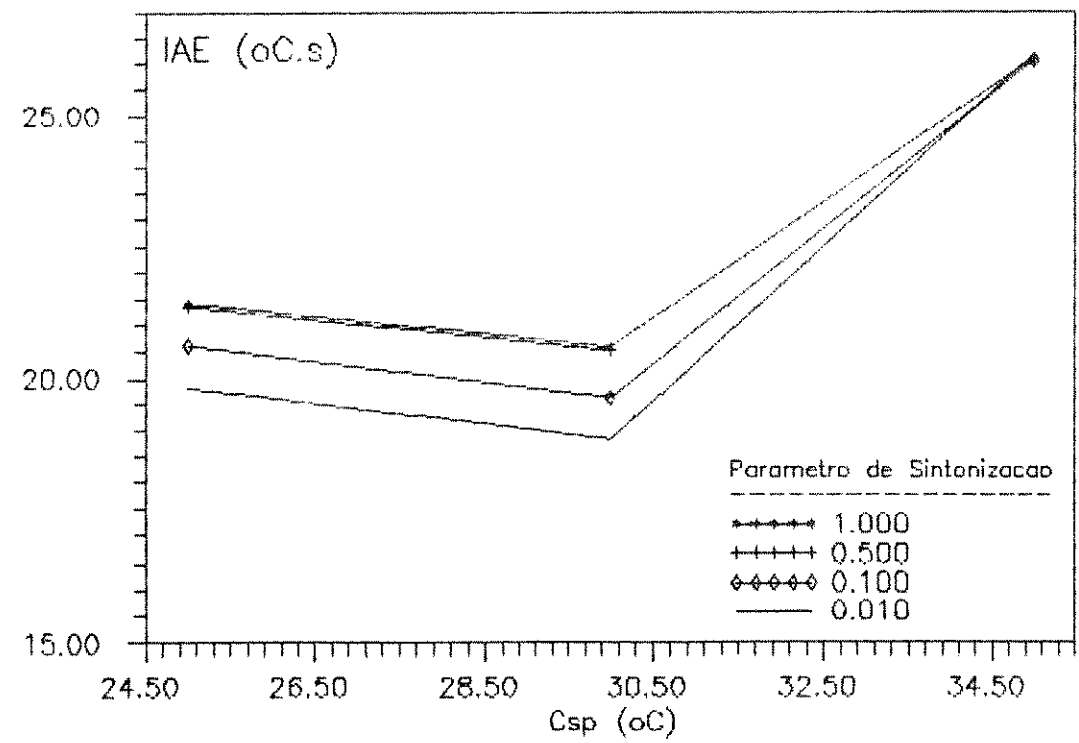


FIGURA 18B – Regiao hachurada da Figura 18 **A**

A Limitação prática desta estrutura esbarra na determinação precisa do termo hio.

A Figura 5.19 representa o contole do processo valendo-se do Algoritmo 3, sintonizado com os parâmetros ótimos da Tabela 5.3.

5.6 - SENSIBILIDADE DO SISTEMA DE CONTROLE

Para estudar a robustes do sistema de controle escolhido na seção anterior, foram realizadas algumas simulações para avaliar o desempenho do controlador em função das variações de Δ e C_{Ao}, e em detrimento do parâmetro de sintonização, δ_a. Usou-se novamente o parâmetro de desempenho IAE.

Outra razão para este tipo de análise está em observar como se pode sintonizar otimamente a malha de realimentação , em meio a estas variações impostas no modelo do processo.

- INFLUÊNCIA DE Δ

A Figura 5.20 mostra nitidamente a influência do tempo de amostragem no desempenho do sistema, onde a menores intervalos de Δ se tem associado valores mínimos de IAE.

De maneira similar à seção 5.2.3, percebe-se a influência direta da velocidade de resposta da malha fechada sobre a performance do sistema.

- INFLUÊNCIA DE C_{Ao}

A variação em C_{Ao} interfere diretamente na magnitude do calor gerado pela reação em ênfase. Desta forma, pode-se avaliar o poder de estimação de Q_r em processos mais exotérmicos, como aparece na Figura 5.23 (reações reversíveis).

A Figura 5.21 retrata a influência de C_{Ao} no desempenho e no nível de sintonização do sistema de controle.

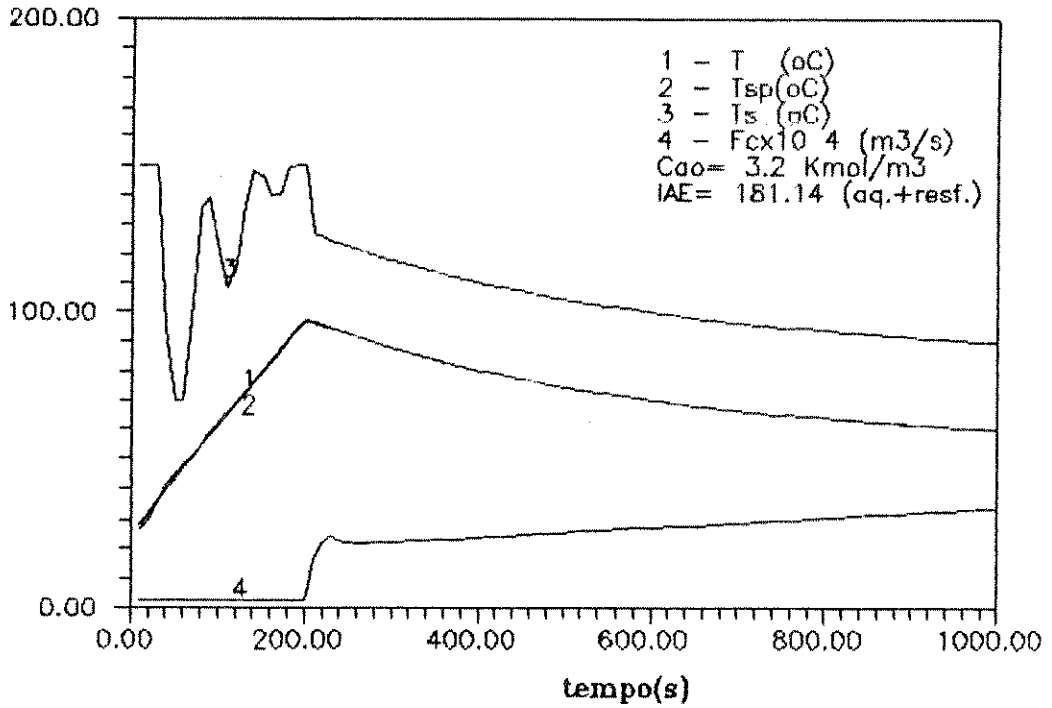


FIGURA 5.19 – Temperatura do reator e vapor e vazao de agua (Reacoes Consecutivas)

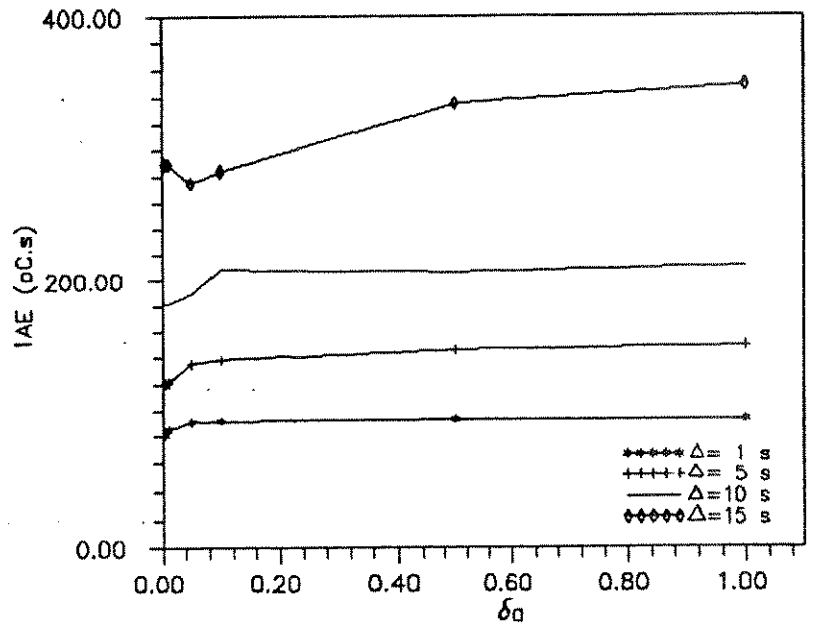


FIGURA 5.20– Curvas do desempenho (IAE) do sistema de controle para a fase de aquecimento segundo variacoes dos parametros δ_a e Δ

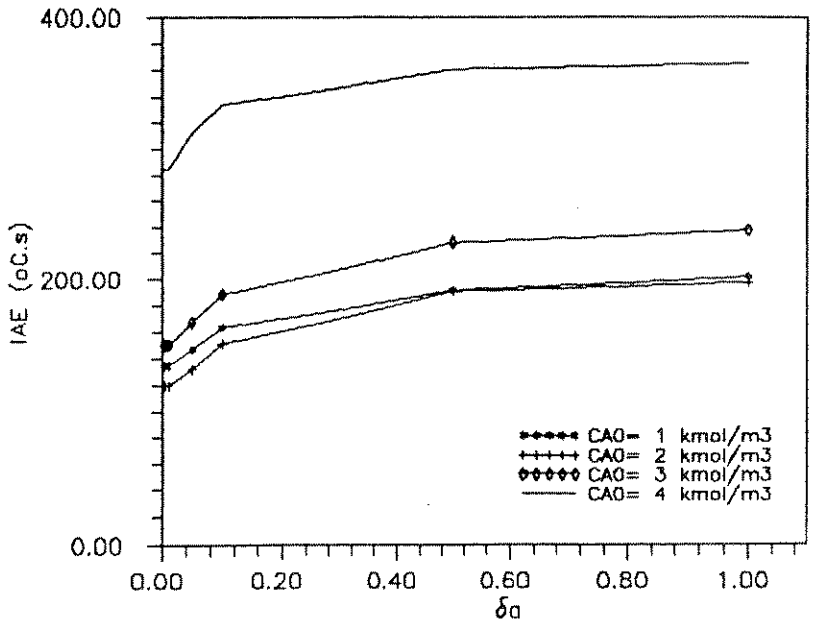


FIGURA 5.21 – Curvas do desempenho (IAE) do sistema de controle para a fase de aquecimento segundo variações dos parâmetros δ_a e Ca0

5.7 - SIMULAÇÃO DO CONTROLE DO PROCESSO COM REAÇÕES REVERSÍVEIS

Conforme a proposta anterior, implementou-se o Algoritmo 3 como forma de testar a versatilidade desta estratégia de controle na aplicação em um reator multiproduto.

Como resultado do controle do Caso Exemplo 2, elaborou-se a Figura 5.22, simulado com os parâmetros da Tabela 5.3. O estimador de Qr e as curvas de sintonização ótima para o aquecimento, estão representados nas Figuras 5.23 e 5.24, respectivamente. O valor de c_{ep} foi arbitrariamente escolhido em um valor mínimo (c_{eq}. 4.36), mesmo embora se pudesse sintonizar a malha de controle pela Sequência II da seção anterior.

Para enfatizar o sentido prático da implementação, simulou-se o controle da reação reversível com o Algoritmo 4. O comportamento da temperatura e as curvas de sintonização para o aquecimento aparecem nas Figuras 5.25 e 5.26.

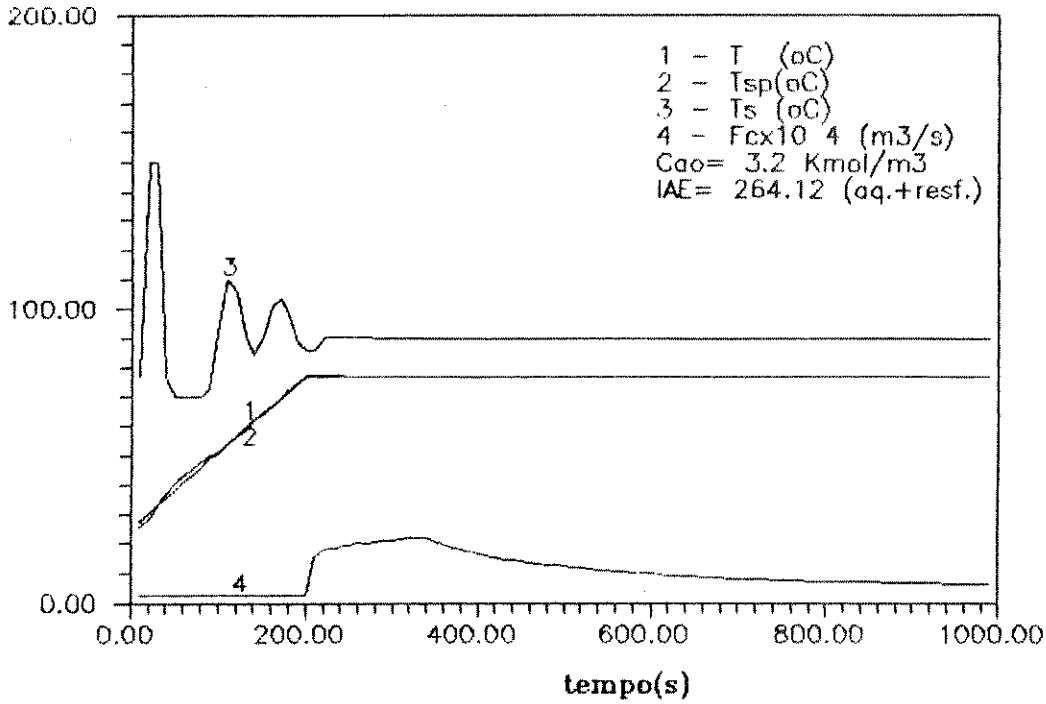


FIGURA 5.22 – Temperatura do reator e vapor e vazao de agua (Reacoes Reversiveis)

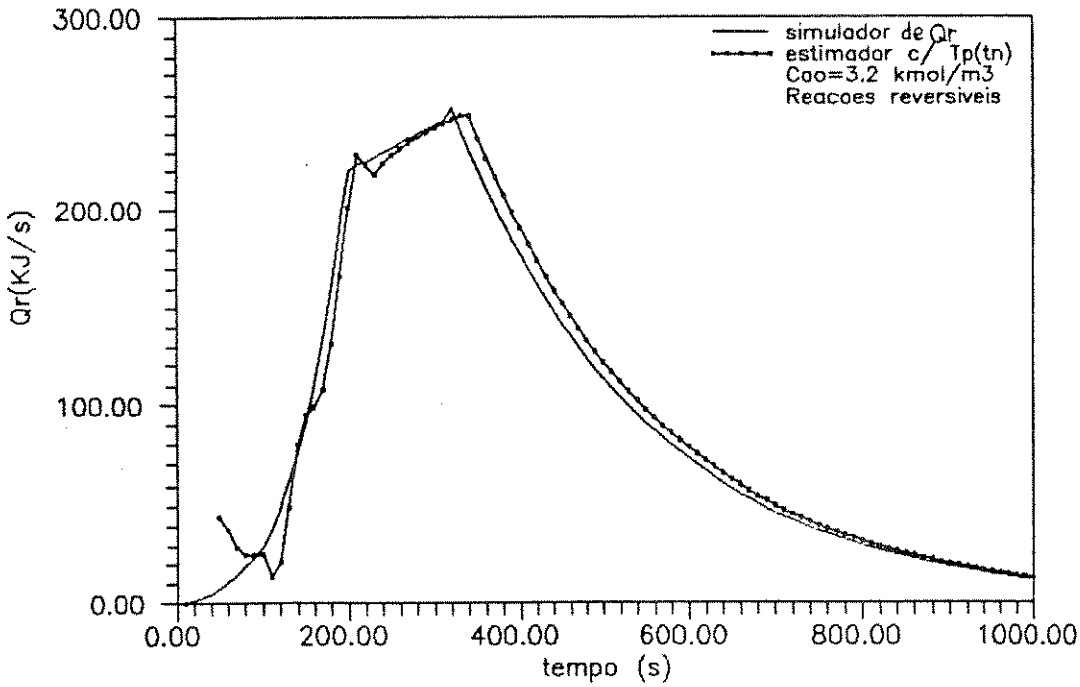


FIGURA 5.23 – Estimador de Qr

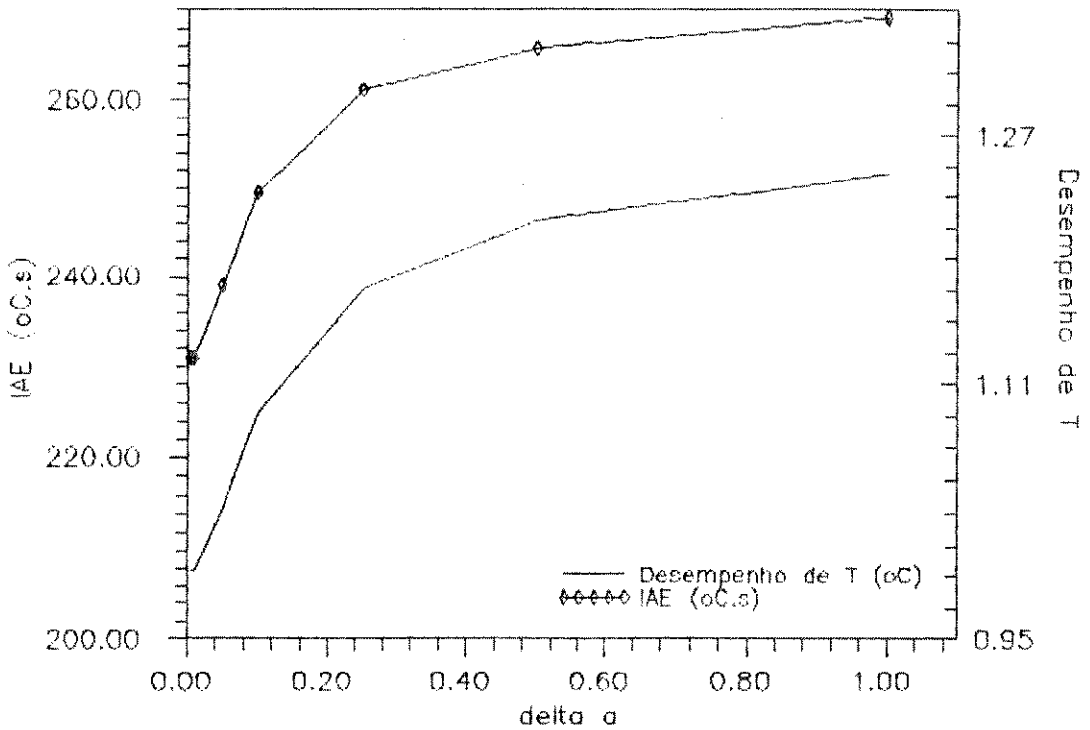


FIGURA 24 - Curvas de minimizacao de IAE usadas na sintonizacao do algoritmo de Dahlin para a etapa de aquecimento

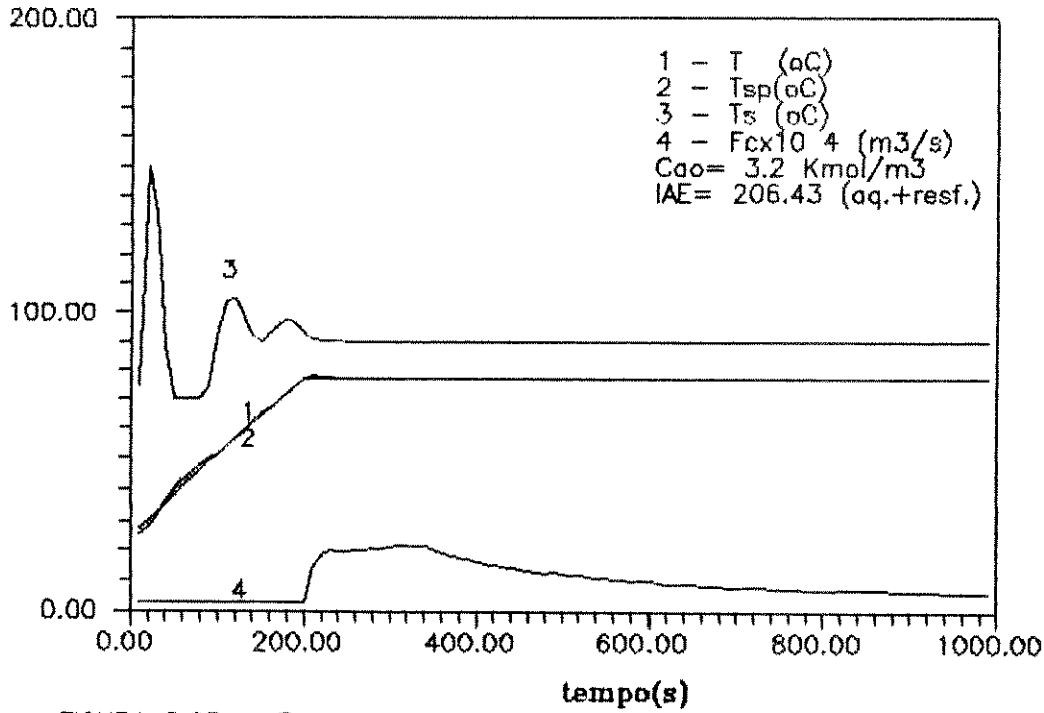


FIGURA 5.25 - Temperatura do reator e vapor e vazao de agua (Reacoes Reversiveis)

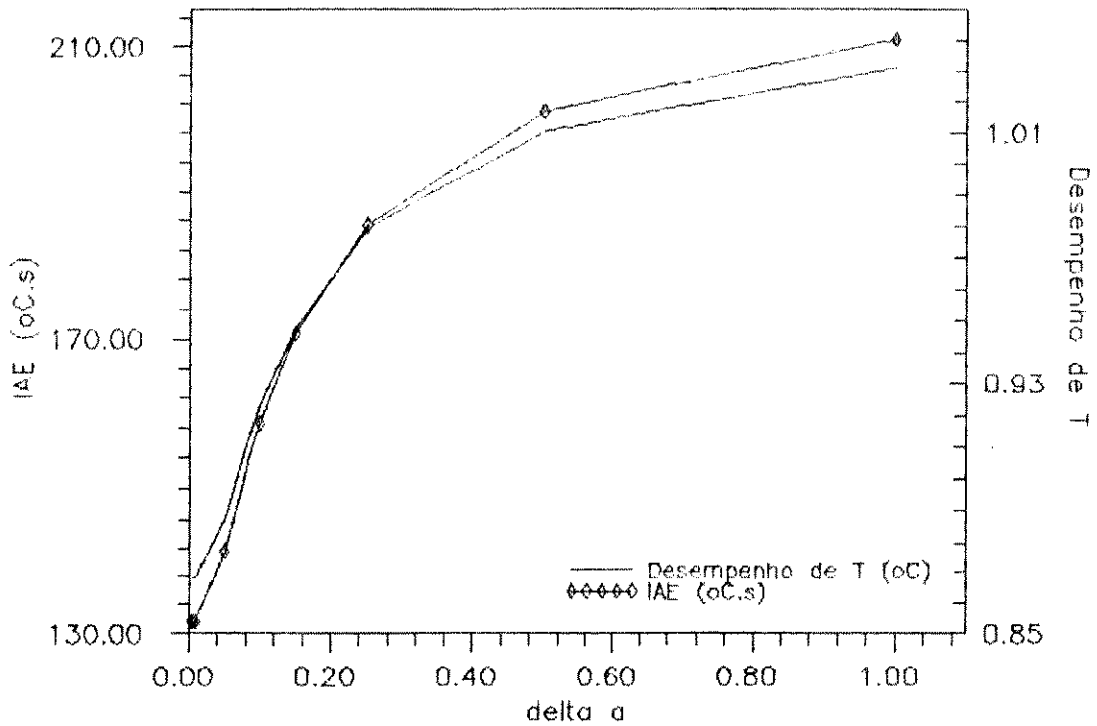


FIGURA 26 – Curvas de minimizacao de IAE usadas na sintonizacao do algoritmo de Dahlin para a etapa de aquecimento

CAPITULO 6 - CONCLUSÕES

Mesmo embora se tenha recorrido a um modelo simplificado para representar o reator batelada exotérmico com reações consecutivas e reversíveis, foram alcançados resultados satisfatórios, como mostrou a análise do capítulo anterior.

Em face aos objetivos pretendidos no Capítulo 1, pode-se dizer que houve êxito na definição de uma estratégia ágil e eficiente, como nova alternativa para o controle de reatores batelada exotérmicos. Combinando técnicas habituais do Controle Clássico com algoritmos mais sofisticados para implementação em CDD, a estrutura antecipação-realimentação desenvolvida mostrou-se robusta para o servo controle dos processos em questão.

A análise do comportamento dinâmico do reator pelo critério IAE traduz um bom nível de desempenho do sistema de controle em perseguir as trajetória impostas aos "set-points", e uma qualidade aceitável no poder de estimação de Q_r diretamente do processo.

Esta malha de controle exige apenas dois parâmetros de sintonia independentes e o método de sintonização relativamente simples veio confirmar a idéia de Dahlin de que para valores pequenos de δ se tem uma resposta mais rápida da malha. Mais que isto, pode-se verificar que para valores fixos de δ_a e δ_c existe uma garantia na performance da temperatura.

O artifício algébrico do estimador de Q_r com medidas de T diretas do processo comportou-se satisfatoriamente e forneceu valores de mesma ordem de grandeza dos desenvolvidos pela reação. O preditor de Tp contribuiu bastante para o desempenho do estimador de reação, mesmo embora seus resultados não apareçam divulgados neste trabalho. Outra vantagem deste sistema está na robustez em resolver eficientemente um problema de controle onde a espessura da parede induz uma constante de tempo, τ_m, de mesma ordem de grandeza que a constante de tempo "dominante", τ_p; basta observar a relação entre uma parede de 2.5 cm de espessura e um volume reacional de 1 m^3. Assim, diante dos resultados, é válido afirmar que o poder de compensação do tempo morto do algoritmo de Dahlin que foi aplicado, permite a eliminação destes efeitos dinâmicos e garantem de certa

forma o "scale-up" desta estrutura.

Um importante benefício adquirido com esta estratégia de controle, por assim dizer "sub-ótima", vem associado com a aplicação prática dos controladores em reatores industriais. O método da Curva de Reação do Processo, a peculiaridade dos ensaios calorimétricos e a Análise Integral "off-line", aproximam esta Política de Controle de Processos àquela usualmente implantadas na Indústria Química. Em termos de viabilidade, este sistema de controle, por ser sustentado somente por medidas de Temperatura e por dispensar de seus algoritmos modelos específicos de Balanço de Massa, reduz os altos investimentos laboratoriais envolvidos nos estudos cinéticos e nos custos de implantação dos dispositivos da malha de controle.

Concluindo, os resultados das simulações distintas dos Casos Exemplos 1 e 2 vêm confirmar a boa aplicabilidade e a versatilidade desta estratégia para o controle de reatores multiproduto.

Seguem abaixo algumas sugestões para trabalhos futuros que venham dar prosseguimento ao estudo de controle de temperatura em reatores batelada exotérmico:

- Realizar uma modelagem mais rigorosa do reator, envolvendo a dinâmica do vapor na camisa e da água na serpentina, as dissipações de calor para o meio ambiente, e os modelos de propriedades físicas variantes no tempo.
- Comparar o comportamento dinâmico de um reator batelada piloto com o Modelo de Ordem Reduzida do tipo acima (ou qualquer outro).
- Lançando mão de um Modelo de Ordem reduzida que represente adequadamente o reator piloto, implementar algoritmos mais sofisticados (Filtro Kalman, controle adaptativo) no CDD deste reator
- Estudar a velocidade de resposta da malha secundária - Figura 4.4 - e seu efeito sobre a dinâmica da malha principal.
- Obter expressões algébricas para atualização "on-line" (estimação) de variáveis de difícil medida durante a operação,

tais como viscosidade e coeficientes globais de troca térmica. Estas relações numéricas podem ser conseguidas com considerações e algebrismo análogos à estimação de Q_r.

NOMENCLATURA

A_1, A_2 = parâmetros da relação empírica (3.11)

A_c = área efetiva de troca térmica entre serpentina e o interior do reator (m^2)

A_{co} = área de transferência de calor da parede de interface para o interior da serpentina (m^2)

A_j = área de transferência de calor da parede da camisa para o interior do reator (m^2)

A_{jo} = área de troca térmica da parede de interface para o interior da camisa de vapor (m^2)

c_1, c_2, c_3 = parâmetros da curva de ajuste do controlador para as reações do Caso Exemplo 1

C_A = concentração do reagente A (kmol m^{-3})

C_B = concentração do reagente B (kmol m^{-3})

c_p = calor específico (kJ $kg^{-1}\,°C^{-1}$)

c_{sp} = constante de ajuste do controlador de T_s para a etapa de resfriamento (°C)

D_c = diâmetro nominal da hélice da serpentina (m)

D_{er} = constante da linearização da relação (3.11)

D_r = diâmetro útil do reator (m)

D_s = diâmetro interno do tubo da serpentina (m)

e = erro da medida de T (°C)

E_1, E_2 = parâmetros de ponderação das contribuições das malhas de antecipação e realimentação [16]

E_i = energias de ativação das reações consecutivas (kJ $kmol^{-1}$)

$\overline{E}_i$ = energias de ativação das reações reversíveis (kJ $kmol^{-1}$)

E_a = energia de ativação da lei de Arrhenius

E_r = condição imposta para o acesso à etapa de transição (°C)

F_c = vazão volumétrica da água na serpentina ($m^3 s^{-1}$)

G_{crp} = função de transferência da curva de reação do processo

h = passo de integração do algoritmo de Runge-kutta (s)

h_i = coeficiente de transferência de calor das paredes para o meio reacional (kJ $m^{-2}\,°C^{-1}\,s^{-1}$)

h_{io} = coeficiente de transferência de calor da parede de interface para o interior da camisa de vapor (kJ $m^{-2}\,°C^{-1}\,s^{-1}$)

h_{ie} = coeficiente de transferência de calor da parede de interface para o interior da serpentina de resfriamento (kJ $m^{-2}°C^{-1}$ s^{-1})

I = número de iterações do algoritmo de verificação - variável

J = número inteiro positivo, relativo à etapa de transição

k = condutividade térmica (kJ $m^{-1}°C^{-1}$ s^{-1})

k_e = condutividade térmica da parede da serpentina (kJ $m^{-1}°C^{-1}$ s^{-1})

K_{ij} = parâmetros do método de Runge-Kutta 4ª ordem

k_{io} = fatores pré-exponenciais de velocidade das reações consecutivas

$\bar{k}_{io}$ = fatores pré-exponenciais de velocidade das reações reversíveis

L = comprimento equivalente da pá do agitador (m)

m = variáveis manipuladas

M = massa (kg)

n_i = número de iterações do algoritmo de integração para cada intervalo Δ

$\mathbb{N}^*$ = conjunto dos números inteiros positivos e diferentes de zero

P_s = pressão do vapor da camisa

Q_p = estimador da capacidade térmica da parede (kJ s^{-1})

Q_r = calor de reação (kJ s^{-1})

Q_{rn} = calor de reação estimado diretamente do processo (kJ s^{-1})

Q_e = fluxo de calor removido pela parede da serpentina (kJ s^{-1})

Q_v = fluxo de calor removido pela parede de interface entre vapor e meio reacional (kJ s^{-1})

r_i = taxa das reações consecutivas (kmol $m^{-3}s^{-1}$)

$\bar{r}_i$ = taxa das reações reversíveis (kmol $m^{-3}s^{-1}$)

R = constante universal dos gases ideais

t_i = instante relativo ao início da etapa de transição (s)

t = tempo corrente (s)

t^* = instante no qual se inicia a verificação "on-line" para o acesso à etapa de transição (s)

t_d = tempo morto do processo (s)

t_f = tempo de duração da batela (s)

t_{op} = instante de tempo no qual o reator atinge T_{op}, (s)

t_s = tempo de subida em rampa da Temperatura, (s)

T = temperatura do meio reacional (°C)

T_a = temperatura absoluta (K)

T_c = temperatura do fluido refrigerante (°C)

T_I = temperatura calculada no final de cada verificação (°C)

T_p = preditor da temperatura da parede (°C)

T_s = temperatura do vapor (°C)

T_{sp} = temperatura imposta ao "set-point" do controlador de T (°C)

u = variável paramétrica proposta por Uppal [16]

U_c = coeficiente global de troca térmica entre o meio reacional e o fluido refrigerante (kJ m^{-2} °C^{-1} s^{-1})

U_s = coeficiente global de troca térmica entre o meio reacional e a vapor da camisa (kJ m^{-2}°C^{-1} s^{-1})

V = volume reacional (m^3)

v_c = velocidade do fluido refrigerante (m s^{-1})

x = espessura da parede (m)

x_s = espessura da parede da serpentina (m)

z = variável paramétrica análoga a u

LETRAS GREGAS

α = parâmetro definido para a etapa de aquecimento (eq. 4.13)

$\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\alpha_4$ = parâmetros da relação paramétrica entre F_c e T_s

$\beta_1,\beta_2,\beta_3,\beta_4,\beta_5$ = constantes das curvas de ajuste (4.18 e 4.53)

γ = parâmetro do algoritmo de Dahlin

δ = parâmetro de sintonização do algoritmo de Dahlin

Δ = intervalo de amostragem ≡ intervalo de controle (s)

Δ_i = intervalo de tempo usado no algoritmo de verificação (s)

ϕ,ϕ_1 = constantes do algorimto adaptativo da etapa de resfriamento

K = ganhos de processo

λ = parâmetro de sintonização intermediário do algoritmo de Dahlin adaptativo

μ = viscosidade (kg $m^{-1}s^{-1}$)

ρ = peso específico (kg m^{-3})

τ = constantes de tempo dos processos (s)

SUBSCRITOS

o = estado estacionário de referência ou condição inicial

a = etapa de aquecimento ou valores absolutos

c = fluido refrigerante ≡ água

f = valor final

FB = contribuição da malha de realimentação - Feedback

FF = contribuição da malha de antecipação - Feedforward

i = indicador de iteração numérica

k = operador inteiro relativo ao tempo de amostragem de um controlador secundário (ver Figura 4.4)

m = metal da parede de interface entre camisa de vapor e meio reacional

max = limite máximo de variáveis

min = limite mínimo de variáveis

n = operador inteiro positivo dos sucessivos intervalos de amostragem (e controle) de temperatura do reator

op = valor nominal de operação

p = caracteriza o processo ou um preditor

r = relativo ao meio reacional

s = vapor

sp = ponto de ajuste dos controladores (set-point)

T = contribuição da malha total à variável manipulada

v = relativo a verificação

BIBLIOGRAFIA

1 - Metha,G.A.
"The Benefits of Batch Process Control"
Chem. Engng Progress. 79 (10), 47 (1983)

2 - Kravaris, C.; Wright, R.A.
"Nonlinear Controllers for Trajectory Tracking in Batch Process"
Comp. Chem. Engng 13, 73 (1989)

3 - Marroquin, G.; Luyben, W.L.
"Practical control studies of batch reactors using realistic mathematical models"
Chem. Engng Sci. 28, 993 (1973)

4 - Lewin,D.R.; Lavie, R.
"Desining and Implementing Trajectories in Exothermic Batch Chemical Reactor"
Ind. Engng Chem., 29, 89 (1990)

5 - Schuler, H.; Suzhen, Z.
"Real-time estimation of the chain lenght distribution in a polimerization reactor"
Chem. Engng Sci. 40(10), 1891 (1985)

6 - Bonvin, P.D.; Vallière, P.; Rippin, D.W.T.
"Application of Estimation Techniques to Batch Reactors - I. Modelling Thermal Effects"
Comp. Chem. Engng 13(1/2), 1 (1989)

7 - Bonvin, P.D.; Vallière, P.
"Application of Estimation Techniques to Batch Reactors - II. Experimental Studies in State and Parameter Estimation"
Comp. Chem. Engng 13(1/2), 11 (1989)

8 - Lipták, B.G.
"Controlling and optimizing chemical reactors"
Chem. Engng 26, 69 (1986)

9 - Juba, M.R.; Hamer, J.W.
"Progress and Challenges in Batch Process Control"
em Chemical Process Control - CPCIII; Morari, M.; Mc Avoy, T.J.; Elsevier, 139 (1986)

10- Rippin, D.W.T.
"Simulation of single- and multibatch chemical plants for optimal design and operation"
Comp. Chem. Engng 7(3), 137 (1983)

11- Anonymous
"Temperature Control"
Chem. Engng 402, 29 (1984)

12- Marroquin, G.; Luyben, W.L.
"Experimental Evaluation of Nonlinear Cascade Controllers for Batch Reactors"
Ind. Engng Chem. Fundam. 11(4), 552 (1972)

13- Shinskey, F.G.
"Process Control Sistems - Application, Design and Tuning"
New York, McGraw-Hill, 1979

14- Wu, R.S.H.
"Dynamic Thermal Analyzer for Monitoring Batch Process"
chem. Engng Progr. 9, 57 (1985)

15- Luyben, W.L.
"Process modelling, simulation and control for chemical engineers"
New York, McGraw-Hill

16- Jutan, A., Uppal, A.
"Combined Feedforward-Feedback Servo Control Scheme for an Exothermic Batch Reactor"
Ind. Engng Chem. Process Des. Dev. 23, 597 (1984)

17- Kalman, R.E.
"A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems"
Trans. ASME, J. Basic Engng, 82, 35 (1960)

18- Karlsen,L.G.; Villadsen,J.
"Isothermal Reaction Calorimeters- 1. A literature Review"
Chem. Engng Sci. 42, 1153
"Isothermal Reaction Calorimeters- 2. Data Treatment"
Chem. Engng Sci. 42, 1165 (1987)

19- Bonvin, P.D.; Vallière, P.
"Application of Estimation Techniques to Batch Reactors - III. Modelling Refinements Which Improve the Quality of State and Parameter Estimation "
Comp. Chem. Engng **14** (7), 799 (1990)

20- Åstrom, K.J.
"Introduction to Stochastic Control Theory"
Ac. Press (1970)

21- Åstrom, K.J.; Wittenmark, B.
"Adaptative Control"
Addison-Wesley Publishing Company, 1989

22- Rainer Perne
"Model-Based Control for Exothermic Chemical Reactions"
11Th IFAC World Congress **11**, Tallinin (1990)

23- Kravaris, C.; Chung,C.B.
"Nonlinear State Feedback Sinthesis by Global Input/output Linearization"
AICHE Journal 33(4), 592 (1987)

24- Kiparissides, C.; Shah, S.L.
"Self-tuning and Stable Adaptative Control of a Batch Polymerization Reactor"
Automatica **19**(3), 225 (1983)

25- Ray,W.H.; Szekely, J.
"Process Optimization"
wiley, New York (1973)

26- Coulson, J.M.; Richardson, J.F.
"Chemical Engineering"
3ª Edição - Pergamon Elmoford, New York (1977)

27- Perry, R. A.; Chilton, C.H.
"Manual de Engenharia Química"
Guanabara Dois - **10** - 14 (1980)

28- Dahlin, E.B.
"Designing and Tuning Digital Controllers"
Instrum.Control Syst., **41**(6), 77(1968)

29- Lapidus, L.
"Digital Computations for Chemical Engineers"
Mc Grawm Hill, New York (1962)

30- Stephanopoulus, G
"Chemical Process Control - An introduction for theory and practice"
Prentice-Hall, New Jersey (1984)