

CONTROLE DE REATORES DE POLIMERIZAÇÃO BASEADO NA ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS EM TEMPO REAL

Ivan Delduga de Sousa Jr¹
André de Almeida²
Luiz Augusto da Cruz Meleiro²

Resumo

Este trabalho apresenta uma estratégia de controle baseada na estimação de parâmetros em tempo real que apresenta potencial para o desenvolvimento de sistemas de controle mais eficientes para reatores de polimerização descontínuos. Através da utilização do filtro de Kalman estendido (FKE) e de modelos simplificados dos balanços de energia no reator e na jaqueta, obteve-se a estimação simultânea do calor de reação (Q_R) e do produto entre o coeficiente global de transferência de calor e a área de troca térmica (UA) utilizando apenas as medidas das temperaturas do processo. O modelo simplificado do processo, definido para o FKE, foi utilizado para projetar um controlador por antecipação (*feedforward*), que a partir das estimativas de Q_R e UA , determina o *setpoint* para o controlador escravo (PI) em uma malha em cascata. A fim de testar a estratégia de controle proposta, utilizou-se um reator de polimerização *benchmark* proposto na literatura específica de controle de processos, cujo modelo matemático foi validado em uma planta de polimerização real. A estratégia de controle proposta, baseada na estimação de parâmetros em tempo real, foi capaz de manter a temperatura de reação adequadamente controlada frente a diversas perturbações. Além disso, esta estratégia revelou-se robusta, generalista e adequada para aplicações em reatores multipropósitos, visto que é capaz de estimar parâmetros de processo com base em modelos simplificados do balanço de energia tendo como variáveis medidas apenas as temperaturas do reator e da jaqueta.

Palavras-chave: Filtro de Kalman; Reatores em batelada; Controle em cascata.

Abstract

This work presents a control strategy based on real-time parameter estimation using the Kalman filter which offers potential for the development of more efficient control strategies for discontinuous polymerization reactors. By using the extended Kalman filter (EKF) and simplified models of energy balance in the reactor and jacket, the simultaneous estimation of reaction heat (Q_R) and of the product between the overall coefficient of heat transfer and heat exchange area (UA) was performed using only measurements of the process temperatures. The stochastic process model defined by the EKF was used to design a feedforward controller, which used the Q_R and UA estimates to determine the set point to the slave controller (PI) in a cascade control structure. In order to test the proposed control strategy, a benchmark polymerization reactor proposed on specific literature of process control was used, whose mathematical model has been validated in actual polymerization plant. The proposed control strategy based on real time parameter estimation was able to keep the reaction temperature adequately controlled despite several disturbances. In addition, it was proved to be robust, generalist and suitable for applications in multipurpose reactors, since it is able to estimate process parameters based on simplified models of energy balance using only the temperature of the reactor and the jacket as process measurement variables.

Keywords: Kalman filter; Batch reactors; Cascade control.

¹Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.

²Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro.
Correios Eletrônicos: delduga@hotmail.com; andredea@ufrj.br; meleiro@ufrj.br

1. INTRODUÇÃO

Os polímeros são macromoléculas constituídas pela ligação de um grande número de moléculas menores através de reações denominadas polimerizações e têm importância significativa no desenvolvimento tecnológico dos séculos XX e XXI. A cada ano observa-se sua participação cada vez mais intensa no setor industrial, seja no processo de produção, seja no produto final. Esta participação, além de apresentar uma grande variedade de produtos, também possui aplicações específicas com crescente importância tecnológica e econômica, principalmente pela capacidade de aumentar a produtividade através da redução de custos e da praticidade de aplicação.

De fato, a participação dos polímeros na sociedade moderna tem apresentado um deslocamento dos aspectos quantitativos para os qualitativos. Ou seja, no início, houve uma procura maior pela diversidade de aplicações intensivas desses produtos, porém, atualmente, as aplicações estão mais direcionadas, com uso de produtos com características mais particulares, obtendo, assim, maior importância sob uma ótica tecnológica e, sobretudo, econômica (Almeida, 1997).

A busca efetiva por ganho de produtividade é inerente às atividades produtivas e é determinante na existência e longevidade de instituições com fins lucrativos. No entanto, a busca por ganhos de produção com redução de custos esbarra em premissas cada vez mais consolidadas na atualidade. A qualidade, que é uma dessas premissas, tem se tornado um dos mais importantes fatores de decisão dos consumidores e, muitas vezes, concorre com a necessidade de reduzir os recursos empregados no processo. Essa nova conjuntura, de busca de produtos com alto valor agregado, foco na qualidade final do produto e na segurança, respeito ao meio ambiente e a preocupação com o aumento de produtividade, privilegia a utilização da mesma instalação para a fabricação de diferentes produtos. Portanto, neste cenário, torna-se cada vez mais necessária a busca por equipamentos multipropósitos

associados a estratégias de controle mais eficientes.

Na indústria química este perfil não é diferente e os reatores de polimerização descontínuos (batelada ou semibatelada) surgem como alternativas viáveis e muitas vezes indispensáveis. Há grande oportunidade quando este tipo reator é operado de forma robusta e precisa, de modo a proporcionar flexibilidade para fabricar grande variedade de produtos sem comprometer a qualidade intrínseca de cada um, tampouco os aspectos de segurança da operação e das pessoas, assim como as exigências ambientais e legais.

A fim de satisfazer todas essas restrições, faz-se necessário um monitoramento eficaz do processo e de suas principais variáveis, buscando a correção necessária diante de desvios inaceitáveis. Porém, a falta de instrumentos robustos para medição em tempo real de variáveis-chaves de processo ou das características mais relevantes para os produtos caracteriza um desafio tecnológico a ser superado. Uma alternativa para a falta de instrumentação adequada seria a utilização de modelos cinéticos, que também apresenta sérias restrições quando aplicada a equipamentos multipropósitos, pois tais modelos deveriam ser desenvolvidos especificamente para cada tipo de reação e seriam necessários tantos modelos quanto produtos diferentes houvesse, tornando a alternativa inviável na prática (Almeida, 1997).

Sob esta perspectiva, os critérios tornam-se desafiadores para o controle de processos, uma vez que surge a necessidade de manter bem controlada a reação de polimerização e porque esses tipos de processos apresentam complicadores intrínsecos à sua natureza: operação multivariável com cinética de reação dinâmica, processo em regime transitório e de natureza não linear e existência de tempos mortos. Dessa forma, a busca de estratégias com base no modelo mostra grande potencial, porém, esbarra no problema de falta de medições de determinadas variáveis e isso também pode inviabilizar sua aplicação.

A utilização dos balanços de energia em tempo real, embora seja uma excelente

alternativa para determinação de variáveis de interesse, apresenta parâmetros, tais como taxa de reação e coeficiente de transferência de calor, que são de difícil medição e, portanto, inviabilizam a sua aplicação direta em estratégias de controle de reatores de polimerização. No entanto, medições de temperatura e vazão são métodos consolidados e, de modo geral, essas variáveis podem ser utilizadas em estratégias de controle de reatores. Por outro lado a obtenção de balanços de energia para reatores é uma tarefa exequível e bem estabelecida, além de ter a vantagem de não depender substancialmente do tipo de reação (Almeida, 1997).

Dessa forma, as medidas de determinadas variáveis e a disponibilidade dos modelos dinâmicos para os balanços de energia podem fornecer importantes informações em tempo real a respeito do processo e permitem estabelecer inferências sobre o andamento da reação até a formação do produto, sendo possível seu uso para fins de monitoramento e na estrutura de controle. Assim, a estimação de parâmetros em tempo real baseada na técnica do Filtro de Kalman destaca-se como uma alternativa adequada para superar algumas das dificuldades apresentadas no monitoramento de reações de polimerização e contribui para o desenvolvimento mais eficiente de estratégias de controle.

O Reator de Chylla-Haase

Para testar a estratégia de controle proposta no presente trabalho, utilizou-se como estudo de caso o reator de polimerização *benchmark* proposto por Chylla e Haase (1993), apresentado como um desafio para estratégias de controle de processos. O problema baseia-se em um processo de polimerização em emulsão, com o reator operando em modo semibatelada para diferentes produtos e condições operacionais. Este é um problema que tem sido frequentemente estudado e os resultados apresentados na literatura são comentados sucintamente a seguir:

Helbig *et al.* (1996), após corrigirem algumas equações do artigo original (Chylla e Haase, 1993), utilizaram uma abordagem não linear e um controlador com modelo preditivo utilizando em sua estrutura o filtro

de Kalman. Seus resultados foram comparados com um controlador PID típico e tiveram êxito em relação ao controle de temperatura dentro de uma faixa aceitável, mesmo com variação de tempos mortos.

MacGregor e Clarke-Pringle (1997) utilizam um controlador adaptativo não linear com base em geometria diferencial e uso do Filtro de Kalman. A simulação utilizou o modelo original do reator de Chylla e Haase (1993) e seus resultados mostraram que diante de mudanças de temperatura, múltiplos produtos, efeito gel e outras variedades do processo, o algoritmo foi capaz de manter o controle de temperatura do reator dentro de uma faixa aceitável para o processo.

O trabalho realizado por MacGregor e Clarke-Pringle (1997) destaca alguns pontos que devem ser relevantes, como a produção de vários produtos no mesmo reator, a mudança da taxa de transferência de calor durante a uma batelada e de corrida para corrida, a taxa de variação de tempo de reação – que é não linear devido à mudança de concentração de monômero – e reações de difusão controlada (efeito gel), além da ausência de modelos cinéticos para os reatores. Os resultados encontrados por esses autores com um controlador adaptativo não linear com base em geometria diferencial em conjunto com o filtro de Kalman estendido forneceu excelentes resultados quando comparados a um sistema tradicional de controle. As temperaturas foram controladas dentro da faixa esperada para o processo, mesmo diante de circunstâncias adversas. Deve-se destacar que a estimativa em tempo real é fundamental para o bom desempenho do controlador não linear.

O trabalho de Binder *et al.* (2000) foca a otimização dinâmica através de uma estratégia de vetor de parametrização para o controlador adaptativo. Os autores aplicam sua estratégia no reator *benchmark* de Chylla e Haase (1993) e obtém bons resultados em relação ao controle de temperatura da reação.

Resultados satisfatórios também foram alcançados por Ng e Hussain (2004) no mesmo *benchmark* (Chylla e Haase, 1993), onde as simulações mostraram as vantagens e a robustez de utilizar a rede neuronal em

uma estratégia híbrida, especialmente quando um algoritmo adaptativo é implementado.

Graichen *et al.* (2006) desenvolveram um controlador adaptativo *feedforward* para o reator CSTR *benchmark* e seus resultados mostraram que o controlador demonstrou robustez mesmo diante de incertezas em seu modelo.

Beyer *et al.* (2008) utilizaram uma estrutura de controle adaptativo por linearização exata com Filtro de Kalman Sigma-Point. Essa estratégia é utilizada em um reator de Chylla e Haase (1993) modificado para o controle da temperatura de polimerização. Seus resultados mostram que a estratégia obtém estimações precisas, o que contribui para a estratégia de controle aplicada.

Filtro de Kalman Estendido

O filtro Kalman (FK) apresenta como principal característica a estimativa de um vetor de estado de um modelo linear de um sistema dinâmico. No entanto, muitos sistemas reais apresentam dinâmicas não lineares e, dessa forma, uma das premissas desta abordagem não é satisfeita e perde-se a condição ótima do FK. Se, no entanto, o modelo não é linear, pode-se adaptar o filtro de Kalman através de um procedimento de linearização. Como o filtro estima o estado do sistema, pode-se utilizar a sua estimativa como a própria trajetória nominal de estado. Este é o método implícito. A linearização é feita em torno da estimativa feita pelo filtro de Kalman que, por sua vez, é baseada no sistema já linearizado. Nesse caso, as equações não lineares são expandidas em série de Taylor e truncadas no termo de primeira ordem, de modo a aproximar o sistema para um conjunto de equações lineares e assim atingir uma condição considerada sub-ótima. Essa abordagem é denominada Filtro de Kalman Estendido (FKE) e foi originalmente proposta por Stanley Schmidt para que o filtro de Kalman pudesse ser aplicado a problemas não lineares de navegação aeroespacial (Haykin, 2001; Santos, 2005 e Simon, 2006). O processo de filtragem com modelos linearizados é bastante simples e eficiente. Além disso, o FKE tem encontrado muitas aplicações em tempo real que são relevantes

(Chui e Chen, 2009). Em razão disso, o FKE foi a técnica utilizada neste trabalho, onde as equações não lineares dos modelos do artigo original foram linearizadas.

Estimação em Tempo Real com Base no Filtro de Kalman

Segundo Jazwinski (1970), o FK gera novas estimativas de estado na medida em que novas observações se tornam disponíveis, abrindo assim a possibilidade de estimativa em tempo real para os parâmetros e estados dos processos. Essa característica é importante para o desenvolvimento da proposta apresentada neste trabalho, pois como muitos dados e parâmetros operacionais (tais como o calor de reação e o coeficiente global de transferência de calor) são inacessíveis na prática, a estimativa dessas variáveis viabiliza o desenvolvimento da estratégia de controle proposta e, simultaneamente, propicia o monitoramento da reação.

O conjunto de equações do FK fornece um recurso para a estimação do vetor de estados. Todas as medidas tomadas em conjunto e seus erros são combinados com o conhecimento da dinâmica do sistema, com os equipamentos de medidas e a estatística do ruído dinâmico. Nesse sentido o FK é um algoritmo utilizado para estimar os estados de um sistema dinâmico baseado na medição da confiabilidade dos dados observados a partir de uma matriz de covariância, que é atualizada a cada novo processo de estimação que utiliza o filtro. A partir de um ponto inicial conhecido, o algoritmo combina todos os dados adicionados ao conhecimento anterior do sistema e realiza a estimativa das variáveis desejadas reduzindo o erro (Santos, 2005).

Diversos trabalhos têm utilizado o FK ou FKE como parte da estratégia de controle de processos. Dentre eles, pode-se citar MacGregor (1986) ao estudar um balanço de energia em tempo real (BETR), obtendo sucesso na implementação com resultados de controle satisfatórios para um reator com jaqueta.

Helbig *et al.* (1996) estudaram o mesmo reator *benchmark* e identificaram erros no equacionamento do modelo. Através de correções propostas, os autores aplicaram um controlador preditivo não

linear, utilizando em sua estrutura o Filtro de Kalman. Seus resultados foram comparados com um controlador PID padrão, tendo obtido êxito em relação ao problema de controle de manter a temperatura reacional dentro de uma faixa aceitável, mesmo quando a variação dos tempos mortos foi considerada.

MacGregor e Clarke-Pringle (1997) aplicaram o FKE em conjunto com geometria diferencial. Seus resultados mostraram a superioridade do conjunto desenvolvido quando comparado com o sistema tradicional de controle em cascata. A estratégia desenvolvida considerou em seu modelo os efeitos do aumento da viscosidade promovidos pelo efeito gel.

Almeida (1997) fez uma grande investigação sobre o uso do FKE como forma de estimar alguns parâmetros através das próprias equações do balanço de energia com modelos simplificados. Essa abordagem foi fundamental para o desenvolvimento do presente trabalho, pois os resultados alcançados por aquele autor mostraram a viabilidade de aplicação de tal técnica na estrutura de controle proposta.

Santos (2005) também utilizou a estrutura do FKE em seu trabalho para realizar estimativas de parâmetros energéticos para uso na estrutura de controle. O autor utilizou diferentes modelos para descrever o comportamento dos estados estocásticos, como caminho aleatório, rampa aleatória e exponenciais.

Graichen *et al.* (2006) implementaram a estimação *on-line* para um controlador *feedforward* aplicado ao reator do Chylla e Haase (1993), onde os parâmetros de calor de reação e transferência global de energia são estimados. No entanto, diferentemente da proposta apresentada neste trabalho, esses autores utilizaram os modelos completos para a estimação de resultados.

Trabalho semelhante foi realizado por Beyer *et al.* (2008), porém para um sistema de controle com linearização adaptativa através da implementação do filtro do Filtro de Kalman "Sigma-Point". Esses autores também utilizaram modelos mais complexos na estrutura do controlador e, nesse sentido, destoa do conceito que se pretende implementar para a estratégia proposta neste trabalho.

Outro trabalho importante em que o Filtro de Kalman foi utilizado como estimador foi apresentado por Vasanthi *et al.* (2011). Seus resultados foram alcançados pela implementação do Filtro de Kalman "unscented" e utilizando os modelos completos do reator dados pelo artigo original. A vantagem da estratégia proposta por Vasanthi *et al.* (2011) é que não é necessário linearizar as equações do filtro utilizado.

Balanço de Energia com Estimação de Parâmetros em Tempo Real

O presente trabalho faz uso da abordagem proposta por Chylla e Haase (1993), que apresenta um problema de controle de temperatura para reatores de polimerização em emulsão. Neste problema, a produção geralmente é limitada a um procedimento específico para cada etapa do processo. O controle de temperatura para os reatores de polimerização descontínuos é um problema importante e muitas vezes não elementar, pois conforme relatado por MacGregor e Clarke-Pringle (1997), o processo apresenta comportamento não linear ao longo do tempo devido à natureza de sua reação.

Como fator complicador, algumas variáveis de processo não podem ser medidas diretamente, medidas essas relevantes e fundamentais para obtenção do produto final dentro da especificação. Nesse sentido, a estimação de parâmetros em tempo real de variáveis de processo surge como uma técnica bastante adequada para reatores de polimerização, tanto em estratégias de monitoramento como em estratégias de controle. A estimação de parâmetros em tempo real através do Filtro de Kalman traz uma importante contribuição como um instrumento inferencial para medição, além de tornar possível a determinação de variáveis normalmente indisponíveis, tais como a taxa de transferência de calor, o calor de reação, a conversão, entre outros, fazendo uso de balanços de energia bastante gerais e simplificados.

Conforme destacado nos trabalhos de Almeida (1997), MacGregor e Clarke-Pringle (1997), Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008), dentre outros, o reator

de polimerização de Chylla-Haase (1993) é amplamente empregado como um problema modelo para avaliação de estratégias de controle para reatores de polimerização em batelada.

A temperatura da jaqueta, embora influencie a dinâmica do processo, é adotada por muitos autores como uma temperatura média ou, alternativamente, o fluido da jaqueta é considerado perfeitamente misturado. Schuler e Schmidt (1992) em seu trabalho de estimadores de estado calorimétrico mostraram diversos balanços de energia para diferentes projetos de reator com dinâmicas térmicas específicas.

Essa premissa não foi verificada, por exemplo, em Bouhenchir *et al.* (2001), que fez a modelagem da jaqueta para o enchimento e esvaziamento e para a troca térmica com a parede para um reator de jaqueta para a reação de glicol para formação de polímero.

O processo de polimerização pode ser subdividido em um intervalo de aquecimento com um período de produção subsequente. Durante o período de aquecimento, a matéria-prima é levada à temperatura de produção específica, que deve ser mantida constante até o término da operação. As mudanças que ocorrem no meio reacional ao longo do processo de polimerização promovem alterações nas características de transferência de calor. As condições operacionais mudam de lote para lote, pois algumas vezes, mais de uma batelada ocorre em sequência sem que haja limpeza do reator e certa quantidade de material se adere às paredes do equipamento na medida em que as bateladas são conduzidas. Também há mudanças nas condições ambientais, como temperatura externa, temperatura da água de arrefecimento e perda de calor para o ambiente. Esses fenômenos provocam alterações nos fenômenos de transferência de calor que, por sua vez, exercem um forte impacto na cinética de polimerização (Graichen *et al.*, 2006 e Beyer *et al.*, 2008).

O presente trabalho trata do desenvolvimento de uma estratégia de controle de temperatura para reatores de polimerização em batelada através da estimação de parâmetros em tempo real com o Filtro de Kalman. A estratégia proposta

realiza a estimação simultânea do calor de reação (Q_R) e do produto entre o coeficiente de transferência de calor e a área de troca térmica (UA) através do Filtro de Kalman Estendido (FKE). O FKE, por sua vez, utiliza modelos simplificados do balanço de energia do reator e da jaqueta, além de medidas das temperaturas do processo. Como proposta, foi desenvolvido um controlador mestre do tipo *feedforward* que utiliza as estimativas de Q_R e UA fornecidas pelo FKE para determinar o *setpoint* para o controlador escravo em uma malha de controle em cascata.

2. METODOLOGIA

2.1. Descrição do Processo

Com objetivo de estudar o desempenho da estrutura de controle proposta neste trabalho, que é baseada na estimação de parâmetros em tempo real utilizando o Filtro de Kalman Estendido (FKE), foi utilizado como estudo de caso um reator de polimerização em batelada, do tipo tanque agitado, com jaqueta de resfriamento e descrito na literatura como um desafio para testes de estratégias de controle. Este *benchmark* foi proposto originalmente por Chylla e Haase (1993) e reproduz um reator real que apresenta uma série de dificuldades operacionais, tais como tempo morto, produção de produtos distintos (A e B) durante cinco bateladas consecutivas, incrustações na parede do reator, variações na temperatura do meio ambiente, variação do volume reacional, cinéticas variáveis com o tempo e com a batelada, entre outras.

Neste trabalho, a estrutura de estimação e controle foi testada no referido reator de polimerização através da técnica de simulação computacional, cujo modelo matemático do processo foi desenvolvido e validado com dados operacionais pelos referidos autores, de modo que este modelo pode ser considerado como representativo do comportamento dinâmico da planta real. Dessa forma, o modelo matemático do reator de polimerização foi utilizado neste trabalho para substituir a planta piloto real na tarefa de avaliar a estratégia proposta. Os dados referentes aos produtos denominados A e B, conforme apresentados no artigo

original, a estrutura de controle e o processo são apresentados no Anexo 1.

Outros aspectos importantes são a incrustação de material nas paredes do reator, a injeção de monômero no meio reacional após o início do aquecimento, a sequência de corridas sem a limpeza total do equipamento, a fabricação de produtos diferentes, o fator de impureza que varia aleatoriamente entre as corridas (embora seja considerado constante durante uma mesma batelada) e a temperatura ambiente que é muito diferente no verão e no inverno.

2.1.1. Configuração do Reator

O reator apresentado por Chylla e Haase (1993) é um tanque agitado típico, que possui uma jaqueta para troca térmica através da circulação do fluido refrigerante (água) que preenche todo o compartimento destinado ao líquido. O volume interno do reator foi projetado para operar com um meio reacional cujo volume varia ao longo do processo. O reator é ilustrado na Figura 1e os dados referentes à sua estrutura física estão apresentados na Tabela 5, no Anexo 1.

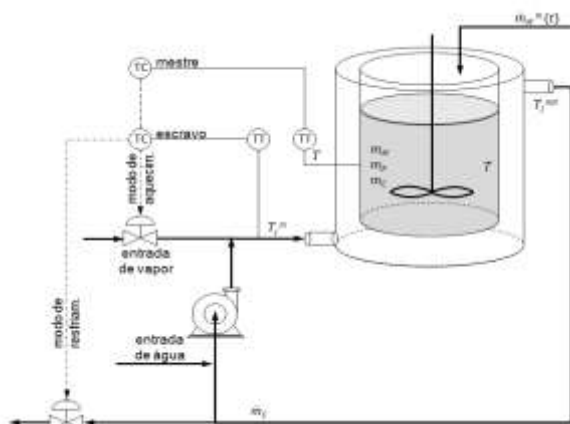


Figura 1: Reator de polimerização.

Para cada batelada, o reator é carregado com uma pré-carga (água e sólidos) que se encontra a uma temperatura constante definida pela temperatura ambiente e que varia significativamente nos meses de inverno e de verão. Posteriormente, a temperatura da mistura reacional inicial é elevada até a temperatura de reação e somente quando este *setpoint* é atingido é que o monômero é adicionado e a reação de polimerização tem início. A reação é conduzida durante um determinado

período de tempo, definido a priori, até que todo o monômero seja consumido.

2.1.2. Modelo Matemático do Reator

O modelo cinético proposto no artigo original não descreve a composição química dos reagentes nem a do produto, tampouco as distribuições de pesos moleculares, tamanhos de partícula, ou mecanismo de iniciação. Como o objetivo do trabalho é descrever a dinâmica da reação de polimerização, um modelo cinético simplificado com base no consumo global do monômero foi utilizado por Chylla e Haase (1993) no artigo original. Este modelo descreve de modo satisfatório a conversão do monômero e as equações que descrevem o balanço de massa no reator são descritas a seguir:

$$\frac{dn_M}{dt} = F_M - Rp \quad (1)$$

$$F_M = \frac{\dot{m}_M}{MW_M} \quad (2)$$

$$Rp = i(kn_M) \quad (3)$$

$$k = k_0 e^{\left[\frac{-6.400}{(T+460)}\right]} \mu^{0,4} \quad (4)$$

onde:

\dot{m}_M = vazão mássica de alimentação de monômero;

F_M = vazão molar de monômeros no reator;

n_M = número de moles de monômeros no reator;

Rp = taxa de polimerização;

MW_M = peso molecular da mistura de monômero;

i = fator de impureza;

k = constante cinética de primeira ordem;

k_0 = fator pré-exponencial;

T = temperatura de reator;

μ = viscosidade da batelada.

O fator de impureza assume um valor aleatório entre 0,8 e 1,2 para qualquer que seja a batelada. Este artifício é um modo de atribuir ao modelo, de maneira simples, as flutuações aparentes na cinética da reação causadas por possíveis impurezas presentes em cada batelada. A equação (4) mostra a influência da viscosidade da batelada sobre a constante cinética, modelando o efeito gel.

A reação de polimerização em reatores descontínuos possui características muito particulares que devem ser consideradas na

análise para o desenvolvimento do sistema de controle de processo. A viscosidade da massa reacional possui modelos empíricos para os produtos A e B, que são apresentadas por Chylla e Haase (1993). Ao se processar a mistura reacional é observado o aumento da viscosidade no reator, que é uma função da fração de sólidos presente na mistura. As equações (5) e (6) são correlações para a viscosidade do produto A e do produto B, respectivamente, que foram determinadas empiricamente a partir de dados experimentais. As equações que descrevem a fração de sólidos no meio reacional, a temperatura de reação e a conversão são apresentadas a seguir:

$$\mu_A = 0,052e^{[16,4f]} 10^{[2,3(A-1,563)]} \quad (5)$$

$$\mu_B = 0,032e^{[19,1f]} 10^{[2,3(A-1,563)]} \quad (6)$$

$$A = \frac{1000}{(T+460)} \quad (7)$$

$$f = \frac{\text{sólidos}(t)}{\text{peso da batelada}(t)} \quad (8)$$

$$f = \frac{S(t)}{m_R(t)} \quad (9)$$

$$S(t) = S(0) + x(t) \cdot M_{MT}(t) \quad (10)$$

$$m_R(t) = S(t) + \dots \quad (11)$$

$$[1 - x(t)] \cdot M_{MT}(t) + W(0) \quad (11)$$

$$x(t) = \frac{N_{MT}(t) - n_{MT}(t)}{N_{MT}(t)} \quad (12)$$

onde:

μ_i = viscosidade do produto;

f = fração de sólidos;

T = temperatura de reator/reação (também denominado por T_R);

$S(t)$ = massa de sólidos no reator função do tempo;

M_{MT} = número de moles totais de monômeros adicionados no reator;

N_{MT} = massa total de monômeros adicionados no reator;

W = massa de água constante durante a reação;

$x(t)$ = conversão em qualquer instante;

A equação abaixo completa o balanço de massa no reator:

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{1}{N_{MT}(t)} \cdot [Rp(t) - x(t) \cdot F_{NM}(t)]$$

2.1.3. Transferência de Calor

Visando incorporar a influência da viscosidade do meio no balanço energético do reator, o coeficiente de transferência global de calor (U) foi modelado de modo a descrever a queda drástica que ocorre neste parâmetro durante a batelada, uma vez que o coeficiente do filme de transferência de calor (h) formado entre o meio reacional e a parede do reator é uma função da viscosidade. Admite-se ainda que o coeficiente global seja também uma função das incrustações que ocorrem na parede do reator, medida pelo parâmetro ($1/h_f$), que é determinado com base no número de operações realizadas previamente. Tanto h quanto $1/h_f$ são obtidos empiricamente e fornecidos no artigo original de Chylla e Haase (1993). Portanto, as equações relacionadas à transferência de calor durante o processo de polimerização são dadas por esses autores como segue:

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h} + \frac{1}{h_f}} \quad (14)$$

$$h = 143,4 \cdot e^{-5,13 \cdot 10^{-3} \mu_{wall}} \quad (15)$$

$$\mu_{wall} = \mu(T_{wall}) \quad (16)$$

$$T_{wall} = \frac{T + \bar{T}_J}{2} \quad (17)$$

onde:

T_{wall} = temperatura da parede do reator;

\bar{T}_J = temperatura média da jaqueta;

U = coeficiente global de transferência de calor;

h = coeficiente do filme de transferência de calor (BTU/h.ft².°F);

$1/h_f$ = fator de incrustação (h.ft².°F/BTU).

2.1.4. Balanço de Energia no Reator

A formulação para o balanço de energia do reator reflete as contribuições do meio reacional (Rp , C_R , m_R , U e A), cujos valores podem ser determinados através da resolução das equações do balanço de massa a partir das condições operacionais do processo (C_{PM} , m_M e T_{amb}), além das propriedades do sistema, tais como ΔH_p e UA_{loss} , cujos valores são especificados ou conhecidos a priori. (13)

Para o balanço de energia, o termo entálpico deve considerar os três componentes, monômero, polímero e água:

$$\frac{d(\sum_i m_i C_{p_i} T)}{dt} = \dot{m}_M C_{p_M} (T_{amb} - T) + Q_R - UA(T - \bar{T}_j) - UA_{loss}(T - T_{amb}) \quad (18)$$

A equação anterior pode ser reescrita da forma:

$$m_R C_R \frac{dT}{dt} = \dot{m}_M C_{p_M} (T_{amb} - T) + Q_R - UA(T - \bar{T}_j) - UA_{loss}(T - T_{amb}) \quad (19)$$

onde:

m_i = massa do componente i ;
 m_R = massa do meio reacional;
 C_{p_i} = calor específico do componente i ;
 C_R = calor específico médio dos componentes do meio reacional;
 C_{p_M} = calor específico do monômero;
 Q_R = calor de reação, definido: $Rp(-\Delta H_p)$;
 Rp = taxa de polimerização;
 ΔH_p = calor de polimerização;
 UA_{loss} = taxa de troca de calor para o ambiente por unidade de temperatura;
 T_{amb} = temperatura ambiente;
 A = área de transferência de calor na jaqueta.

2.1.5. Balanço de Energia na Jaqueta

A formulação para o balanço de energia da jaqueta leva em conta as contribuições do meio reacional, U e A , cujos valores podem ser determinados através da resolução das equações do balanço de massa; pelos aspectos construtivos do equipamento, wc_J , e pelas condições operacionais do processo, F_W e C_{p_W} , cujos valores são especificados ou conhecidos *a priori*.

A equação da temperatura de saída da jaqueta leva em consideração a temperatura média da jaqueta, a temperatura do meio reacional e ainda o comportamento da temperatura de entrada na jaqueta pelo fluido de arrefecimento:

$$wc_J \frac{dT_J^{out}(t)}{dt} = F_W C_{p_W} (T_J^{in}(t - \theta_1) - T_J^{out}(t)) + UA(T - \bar{T}_j) \quad (20)$$

$$\bar{T}_j = \frac{T_J^{out} + T_J^{in}}{2} \quad (21)$$

A temperatura de entrada na jaqueta (T_J^{in}) é dada pela ação de controle e tem o comportamento dinâmico definido por:

$$\frac{dT_J^{in}(t)}{dt} = \frac{dT_J^{out}(t - \theta_2)}{dt} + \frac{T_J^{out}(t - \theta_2) - T_J^{in}(t)}{\tau_p} + \frac{K_p(t)}{\tau_p} \quad (22)$$

A expressão para o ganho do processo é dada por:

$$K_p = \begin{cases} 0,8(30)^{\left(\frac{-c(t)}{50}\right)}(T_{inlet} - T_j^{in}); & 0 \leq c(t) \leq 49 \\ 0; & c(t) = 50 \\ 0,15(30)^{\left(\frac{-c(t)}{50} - 2\right)}(T_{st} - T_j^{in}); & 51 \leq c(t) \leq 100 \end{cases} \quad (23)$$

onde:

wc_J = produto da massa do fluido de arrefecimento na jaqueta e seu calor específico;
 F_W = vazão mássica do fluido de arrefecimento na jaqueta;
 C_{p_W} = calor específico do fluido de arrefecimento na jaqueta;
 θ_1 = tempo morto para a jaqueta;
 θ_2 = tempo morto para o circuito de arrefecimento;
 τ_p = constante de tempo;
 K_p = ganho do processo;
 T_{inlet} = temp. entrada do fluido refrig.;
 T_{st} = temp. entrada do vapor;
 $c(t)$ = saída do controlador.

2.1.6. Sistema de Controle

O sistema de controle utilizado para a temperatura do reator é implementado a partir de uma estrutura em cascata. A malha externa (controle mestre) ajusta o valor de referência para a temperatura do fluido refrigerante no circuito de refrigeração. Esta referência é então utilizada pela malha interna (controle escravo) no sentido de estabelecer a temperatura requerida. Cada uma das malhas externas usa, originalmente, um controlador PID (Chylla e Haase, 1993). No entanto, no presente trabalho em ambas as malhas serão utilizados controladores PI, conforme sugerem os trabalhos de Graichen *et al.* (2006), Beyer *et al.* (2008) e Vasanthi *et al.* (2011).

Os modelos para os controladores PI das malhas mestra e escrava, já em suas formas discretas, são dados por:

Controlador Mestre:

$$T_{jiset(k)} = T_{jiset(k-1)} + Kp_M \cdot (e_{Mk} - e_{Mk-1}) + \frac{h \cdot \sum_1^{k-1} e_{Mn}}{\tau_{IM}} \quad (24)$$

Controlador Escravo:

$$C_{(k)} = C_{(k-1)} + Kp_S \cdot (e_{S_k} - e_{S_{k-1}}) + \frac{h \cdot \sum_1^{k-1} e_{S_n}}{\tau_I} \quad (25)$$

onde:

T_{jisset} = saída do controlador mestre e setpoint do controlador escravo;

C = saída do controlador escravo;

e_i = erro do sub-índice i ;

$/_n$ = n -ésimo ponto;

$/_k$ = k -ésimo ponto;

$/_M$ = mestre;

$/_S$ = escravo;

h = tempo de amostragem

Kp_i = ganho do controlador do sub-índice i ;

τ_I = constante de tempo da ação integral;

Os parâmetros τ_p e τ_I são ajustados empiricamente de modo a garantir suavidade e rapidez nas respostas de ambas as temperaturas. A literatura mostra diversas técnicas de ajuste de controladores e malhas, no entanto, neste trabalho esses parâmetros foram ajustados por tentativa e erros.

2.2. Estrutura de Estimação com Filtro de Kalman

2.2.1. Modelos para o Filtro de Kalman

Para o problema de estimação com base no Filtro de Kalman ou Filtro de Kalman Estendido, a formulação geral parte do conjunto de equações diferenciais que descreve a dinâmica do sistema considerando os estados determinísticos e estocásticos, seja para um modelo linear (FK), seja para um modelo linearizado localmente a partir da última estimativa disponível (FKE). O sistema de equações para os estados determinísticos (índice “d”) e estocásticos (índice “s”) poderia ser expresso pela equação diferencial, sendo esta, já na forma linearizada, onde \underline{A} corresponde aos termos determinísticos, \underline{B} corresponde aos termos estocásticos e \underline{d} corresponde ao vetor dos termos independentes, os vetores \underline{x}^d e \underline{x}^s correspondem aos estados determinísticos e estocásticos, respectivamente:

$$\frac{d\underline{x}^d}{dt} = \underline{A}(t) \cdot \underline{x}^d(t) + \underline{B}(t) \cdot \underline{x}^s(t) + \underline{d}(t) \quad (26)$$

Após discretização para o instante $t_k = k \cdot h$, tem-se:

$$\underline{x}_{k+1}^d = \underline{\Phi}_{\underline{k}} \cdot \underline{x}_k^d + \underline{\Theta}_{\underline{k}} \cdot \underline{x}_k^s + \underline{\varphi}_{\underline{k}} + \underline{\omega}_k^d \quad (27)$$

onde:

$$\underline{\Phi}_{\underline{k}} = e^{\left[\underline{A}(t_k)h \right]} \quad (28)$$

$$\underline{\Theta}_{\underline{k}} = \underline{A}^{-1}(t_k) \cdot \left(\underline{\Phi}_{\underline{k}} - \underline{I}_{\underline{k}} \right) \cdot \underline{B}(t_k) \quad (29)$$

$$\underline{\varphi}_{\underline{k}} = \underline{A}^{-1}(t_k) \cdot \left(\underline{\Phi}_{\underline{k}} - \underline{I}_{\underline{k}} \right) \cdot \underline{d}(t_k) \quad (30)$$

Se a dinâmica dos estados estocásticos for considerada como tipicamente de passo aleatório, segue a formulação:

$$\underline{x}_{k+1}^s = \underline{x}_k^s + \underline{\omega}_k^s \quad (31)$$

Um modelo dinâmico global para a estimação conjunta dos estados determinísticos e estocásticos pode ser expressa por:

$$\underline{x}_{k+1} = \underline{\Omega}_{\underline{k}} \cdot \underline{x}_k + \underline{\Psi}_{\underline{k}} + \underline{\omega}_k \quad (32)$$

onde:

$$\underline{x}_k = \left[\underline{x}_k^d \quad \underline{x}_k^s \right]^T \quad (33)$$

$$\underline{\Psi}_{\underline{k}} = \left[\underline{\varphi}_{\underline{k}} \quad \underline{0} \right]^T \quad (34)$$

$$\underline{\omega}_k = \left[\underline{\omega}_k^d \quad \underline{\omega}_k^s \right]^T \quad (35)$$

$$\underline{\Omega}_{\underline{k}} = \begin{bmatrix} \underline{\Phi}_{\underline{k}} & \underline{\Theta}_{\underline{k}} \\ \underline{0} & \underline{I}_{\underline{k}} \end{bmatrix} \quad (36)$$

As variáveis de saída podem ser expressas como funções lineares dos estados já contemplando seus respectivos ruídos, considerando-os gaussianos:

$$\underline{y}_{k+1} = \underline{H} \cdot \underline{x}_{k+1} + \underline{v}_{k+1} \quad (37)$$

Diversos trabalhos têm utilizado o FK como uma estratégia de controle. Os modelos usados para o FK aqui apresentados tiveram como base as referências Jazwinski (1970), MacGregor (1986), Almeida (1997), MacGregor e Clarke-Pringle (1997) e Santos (2005).

2.2.2. Formulação dos Modelos para os Balanços de Energia

A formulação da estratégia utilizada na estimativa dos parâmetros desejados (Q_R e UA) é descrita a seguir. Para tanto, é apresentada a modelagem para o balanço de energia simplificado que foi utilizado na estrutura do Filtro de Kalman, sob a perspectiva de avaliar a influência de alguns aspectos assumidos na construção dos modelos para o filtro.

2.2.2.1. Balanço de Energia: Hipótese da Média da Temperatura da Jaqueta

Nesse trabalho utilizou-se uma abordagem que não considera a dinâmica da jaqueta, de tal forma que as temperaturas de entrada e saída apresentam valores diferentes. Portanto, adotou-se o seguinte sistema de equações diferenciais para o modelo:

$$\frac{dT_R(t)}{dt} = \frac{1}{m_R(t)C_{R}(t)} \left[\begin{array}{l} [\dot{m}_M(t)C_{pM}(T_{amb} - T_R(t)) + \\ Q_R(t) - UA(t)(T_R(t) - \bar{T}_J(t))] \\ -UA_{loss}(T_R(t) - T_{amb}) \end{array} \right] \quad (38)$$

$$\frac{dT_J(t)}{dt} = \frac{1}{wc_J} \left[\begin{array}{l} F_W C_{pW} (T_{JI}(t) - T_J(t)) \\ +UA(t)(T_R(t) - \bar{T}_J(t)) \end{array} \right] \quad (39)$$

$$\bar{T}_J(t) = \frac{T_{JI}(t) + T_J(t)}{2} \quad (40)$$

Feita a linearização para cada instante $t_k = k.h$, chega-se a:

$$\underline{x}^d(t) = [T_R(t) T_J(t)]^T \quad (41)$$

$$\underline{x}^s(t) = [UA(t) Q_R(t)]^T \quad (42)$$

Considerando que o mesmo ponto de linearização e discretização é utilizado para o algoritmo que está sendo proposto, $\underline{A}(t) = \underline{A}(t_k) = \underline{A}$, segue que:

$$\underline{A} = \left[\begin{array}{cc} \frac{-(\dot{m}_M C_{pM} + UA + UA_{loss})}{m_R C_R} & \frac{UA/2}{m_R C_R} \\ \frac{UA}{wc_J} & \frac{-(UA/2 + F_W C_{pW})}{wc_J} \end{array} \right] \quad (43)$$

$$\underline{B} = \left[\begin{array}{cc} \frac{(T_J - T_{JI})/2}{m_R C_R} & \frac{1}{m_R C_R} \\ T_R - (T_J - T_{JI})/2 & 0 \end{array} \right] \quad (44)$$

$$\underline{d} = \left[\begin{array}{c} \frac{(T_R - T_J/2)UA + (\dot{m}_M C_{pM} + UA_{loss})T_{amb}}{m_R C_R} \\ \frac{F_W C_{pW} T_{JI} - (T_R - (T_R - T_J/2))UA}{wc_J} \end{array} \right] \quad (45)$$

Os estados determinísticos são medidos para efeito do filtro de Kalman. Dessa forma, consideram-se apenas as temperaturas do reator e da jaqueta e com isso pode-se representar o modelo da medida por:

$$\underline{H} = \left[\begin{array}{ccc} 1 & 00 & 0 \\ 0 & 10 & 0 \end{array} \right] \quad (46)$$

2.2.2.2. Cálculo da Conversão

A conversão pode ser calculada analiticamente pela integração da equação (13). Desse modo, desenvolveu-se um modelo para o cálculo da conversão (x):

$$x(k+1) = x(k)e^{-\pi_1 h} + \frac{\pi_2}{\pi_1}(1 - e^{-\pi_1 h})$$

onde:

$$\pi_1 = \frac{F_{NM}}{N_{MT}} \quad (48)$$

$$\pi_2 = -Rp = \frac{-Q_R}{(-\Delta H_P)} \quad (49)$$

2.2.3. Estrutura para os Modelos Estocásticos

Em seu trabalho, MacGregor (1986) destaca que o objetivo da estimação é a reconstituição de Q_R e U . No presente trabalho estimam-se Q_R e UA , pois o volume total do meio varia ao longo da reação o que faz com que a área de troca térmica seja dependente da cinética. Há alternativas para se utilizar as estruturas de estimação, dentre as quais se podem citar: passo aleatório (*random walk*), rampa aleatória (*random ramp*), modelo exponencial e modelos híbridos. No entanto, a estrutura utilizada neste trabalho foi o caminho aleatório (*random walk*). Santos (2005) apresentou um estudo mais aprofundado para as

estruturas de estimação supracitadas, não se verificando a necessidade de utilizar as demais.

Aplicando o modelo de passo aleatório para o valor de Q_R e UA tem-se:

$$Q_{R(k+1)} = Q_{R(k)} + \omega_p \quad (50)$$

$$UA_{(k+1)} = UA_{(k)} + \omega_p \quad (51)$$

Nessas equações, ω_p representa um processo de ruído branco que descreve a natureza estocástica do parâmetro a ele associado (x , Q_R , UA). Esse modelo assume que o parâmetro em questão não possui variação determinística. Essa consideração é aceitável, pois todos os erros relacionados ao processo (erro de medição, erro de transmissão, atrasos do processo, flutuação da variável etc.) são atribuídos às variáveis Q_R e UA (x é calculado a partir do Q_R e não entra na estrutura de controle, apenas no monitoramento), dessa forma, essas variáveis “perdem” seu sentido físico e assumem comportamento estocástico.

2.3. Estrutura do Controlador Feedforward

Apresenta-se a seguir como o controlador *feedforward* proposto neste trabalho foi implementado no sistema de controle do processo de polimerização. Basicamente, substituiu-se o controlador mestre PI da estrutura original pelo controlador *feedforward* baseado nas estimções do FKE e no balanço de energia simplificado do processo, conforme ilustrado na Figura 2.

Vale destacar que as poucas variáveis de processo necessárias para a implementação da estratégia de controle proposta estão disponíveis e são facilmente obtidas industrialmente.

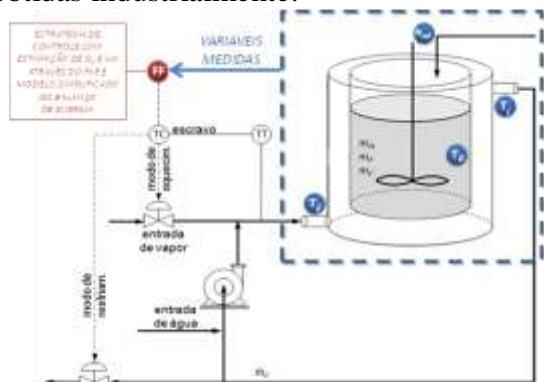


Figura 2: Estrutura do controlador *feedforward*.

As variáveis medidas utilizadas nesta abordagem são a temperatura de entrada da jaqueta (T_{JI}), a temperatura de saída da jaqueta (T_J), a temperatura de reação (T_R) e a quantidade de monômeros adicionada no reator (Nm_T). Essas informações são os dados de entrada na estrutura do Filtro de Kalman Estendido (FKE) e na estrutura do controlador *feedforward*. O FKE utiliza as variáveis medidas e, através de modelos simplificados do balanço de energia para o reator e para a jaqueta, estima as variáveis de estado Q_R e UA , que são fornecidas para o controlador.

O controlador *feedforward* utiliza as variáveis medidas disponíveis do processo e as variáveis estimadas pelo FKE para atualizar os modelos simplificados dos balanços de energia do reator e da jaqueta (os mesmos modelos utilizados na estrutura de estimação do FKE). Com isso, o controlador *feedforward* fornece para o controlador escravo PI o valor desejado para T_{JI} . A estrutura da estratégia de estimação e controle, na forma de diagrama de blocos, é ilustrada na Figura 3.

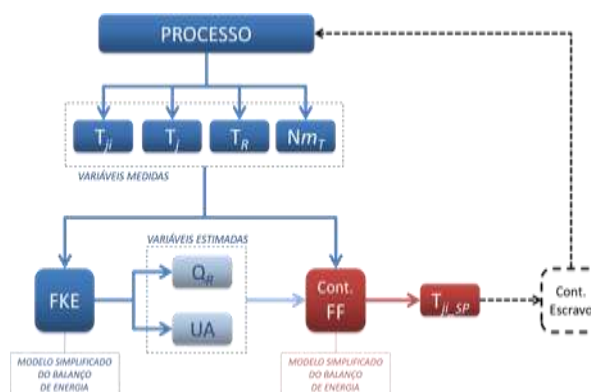


Figura 3: Diagrama de blocos da estratégia de estimação e controle.

2.3.1. Modelo para o Balanço de Energia no Reator

Fazendo a manipulação adequada nos termos do modelo do balanço de energia no reator, obtém-se:

$$\frac{dT_R(t)}{dt} = \frac{1}{m_R(t)C_{R(t)}} \left[\begin{aligned} & \dot{m}_M(t)C_{pM}(T_{amb} - T_R(t)) \\ & + Q_R(t) - UA(t)(T_R(t) - \bar{T}_J(t)) \\ & - UA_{loss}(T_R(t) - T_{amb}) \end{aligned} \right] \quad (52)$$

Considerando Q_R e UA constantes no intervalo de integração, h , obtém-se:

$$\frac{dT_R}{dt} = -\frac{1}{m_R C_R} (\dot{m}_M C_{p_M} + UA + UA_{loss}) T_R + \frac{UA}{m_R C_R} \bar{T}_J + \frac{1}{m_R C_R} (\dot{m}_M C_{p_M} + UA_{loss}) T_{amb} + \frac{Q_R}{m_R C_R} \quad (53)$$

onde:

$$\frac{dT_R(t)}{dt} + f_{R1} T_R(t) = f_{R2} \bar{T}_J(t) + f_{R3} \quad (54)$$

Chega-se, portanto, a uma equação diferencial ordinária linear de 1ª ordem, que após ser discretizada e devidamente manipulada, pode-se obter a seguinte solução:

$$\bar{T}_J(k) = \frac{T_R(k+1) - \left[T_R(k)(e^{-f_{R1}h}) + \frac{f_{R3}}{f_{R1}}(1-e^{-f_{R1}h}) \right]}{\frac{f_{R2}}{f_{R1}}(1-e^{-f_{R1}h})} \quad (55)$$

onde:

$$\bar{T}_J(k) = \bar{T}_{J_ref} \quad (56)$$

$$T_R(k+1) = T_{R_SET} \quad (57)$$

Para Q_R e UA constantes em k , T_{R_SET} é o valor do *setpoint* da reação e \bar{T}_{J_ref} é o valor de referência para temperatura média da jaqueta.

2.3.2. Modelo para o Balanço de Energia na Jaqueta

O modelo simplificado do balanço de energia da jaqueta deverá ser usado na estrutura do controlador.

$$\frac{dT_J(t)}{dt} = \frac{1}{w_{cJ}} \left[F_W C_{p_W} (T_{JI}(t) - T_J(t)) + UA(t) (T_R(t) - \bar{T}_J(t)) \right] \quad (58)$$

Fazendo a manipulação nos termos do modelo do balanço de energia na jaqueta e considerando Q_R e UA constantes no intervalo de integração, h , obtém-se:

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{F_W C_{p_W}}{w_{cJ}} T_{JI} - \frac{F_W C_{p_W}}{w_{cJ}} T_J + \frac{UA}{w_{cJ}} T_R - \frac{UA}{w_{cJ}} \bar{T}_J \quad (59)$$

que pode ser escrita de forma simplificada como:

$$\frac{dT_J}{dt} + f_{J1} T_J = f_{J2} T_{JI} + f_{J3} T_R + f_{J4} \bar{T}_J \quad (60)$$

Portanto, considerando Q_R e UA constantes no intervalo de integração h , chega-se a:

$$\frac{d\bar{T}_J}{dt} = \frac{F_W C_{p_W}}{w_{cJ}} T_{JI} - \left(\frac{F_W C_{p_W}}{w_{cJ}} + \frac{1}{2} \frac{UA}{w_{cJ}} \right) \bar{T}_J + \frac{1}{2} \frac{UA}{w_{cJ}} T_R \quad (61)$$

A equação acima é uma equação diferencial ordinária linear de 1ª ordem, que após ser discretizada e adequadamente manipulada, pode ser escrita da forma:

$$\frac{d\bar{T}_J}{dt} + f_{JM1} \bar{T}_J = f_{JM2} T_R + f_{JM3} T_{JI} \quad (62)$$

cuja solução é:

$$T_{JI}(k) = \frac{\left[2 + \frac{f_{J4}}{f_{J1}}(1-e^{-f_{J1}h}) \right] \bar{T}_{J_ref}}{\left[1 + \frac{f_{J2}}{f_{J1}}(1-e^{-f_{J1}h}) \right]} - \frac{\left[T_J(k)(e^{-f_{J1}h}) + T_R(k) \frac{f_{J3}}{f_{J1}}(1-e^{-f_{J1}h}) \right]}{\left[1 + \frac{f_{J2}}{f_{J1}}(1-e^{-f_{J1}h}) \right]} \quad (63)$$

onde:

$$T_{JI}(k) = T_{JI_SET} \quad (64)$$

Para Q_R e UA constantes em k , T_{JI_SET} é o valor determinado do *setpoint* para o controle de T_{JI} pela malha escrava.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Todas as estratégias concebidas para atender aos objetivos desse trabalho foram baseadas na estimação de parâmetros a partir do Filtro de Kalman Estendido (FKE). As variáveis T_R e T_J foram consideradas como sendo os únicos estados determinísticos e disponíveis a cada tempo de amostragem, uma vez que as temperaturas de reação e as de entrada e saída da jaqueta são facilmente mensuráveis na prática. As variáveis Q_R e UA foram consideradas estados estocásticos e não modeladas, visto que na prática são variáveis que não são medidas, mas que podem ser estimadas e, portanto, utilizadas

na estratégia de controle proposta. As variáveis como F_w , T_{amb} , UA_{loss} , bem como Cr , Cp_w , Cp_m e Wcj , são assumidas como sendo constantes. Todos os valores dos parâmetros operacionais e das variáveis deste processo foram obtidos do artigo original de Chylla e Haase (1993).

Os ajustes dos parâmetros dos controladores e dos estimadores foram obtidos por tentativa e erro, visto que o resultado foi considerado satisfatório após diversas tentativas de ajuste.

Todos os resultados obtidos estão expressos em unidades inglesas, pois se decidiu adotar o sistema de unidades do artigo original de Chylla e Haase (1993). Uma das razões para essa escolha foi facilitar a comparação dos resultados obtidos neste trabalho com os resultados de grande parte da literatura que trata desse estudo de caso.

3.1. Simulação do Processo com Controlador Mestre *Feedforward* Baseado na Estimação de Parâmetros em Tempo Real

Apresentam-se a seguir os resultados da implementação da estratégia de controle baseada na estimação simultânea e em tempo real do calor de reação (Q_R) e do produto entre o coeficiente de transferência de calor e a área de troca térmica (UA) utilizando o Filtro de Kalman Estendido. Equações simplificadas do balanço de energia foram utilizadas nas estruturas do FKE e do controlador *feedforward*, que atua como controlador mestre em uma malha em cascata.

3.1.1. Desempenho do controlador de temperatura para os produtos A e B

Como um dos objetivos desse trabalho é que o sistema de controle seja aplicável a processos multipropósitos, foi feita a avaliação do desempenho do controlador de temperatura através da simulação de polimerização dos produtos A e B com a implementação da estratégia de controle baseada na estimação de estados em tempo real.

O controlador *feedforward* utiliza as estimativas de Q_R e UA fornecidas pelo FKE e as medidas de temperaturas da jaqueta (T_J) e da reação (T_R) nos modelos simplificados do balanço de energia para determinar o

novo setpoint (T_{Jin}) para o controlador escravo (PI) em uma malha em cascata.

O processo estocástico que foi utilizado na estrutura do filtro de Kalman utilizou a técnica do passo aleatório (*random walk*). Os modelos utilizados no FKE e no controlador desconsideram várias informações específicas do processo, tais como o tipo de produto e informações sobre o equipamento, tornando a estratégia generalista e robusta, uma vez que pode ser aplicada a diversos processos, mesmo diante de cenários adversos. Os dados utilizados para a simulação do produto A encontram-se na Tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros para simulação com o produto A.

ITEM	Valores
Clima	Verão
Temp. Reação	180°F
Tempo de controle	0,1 min
Q_R (inicial)	0
UA (inicial)	80
Controlador	FF TJ
Batelada	n° 1
$K_{P(\text{escravo})}$	7
$\tau_{I(\text{escravo})}$	11
$W_{(\text{aquec.})}$	[10 ⁻¹ ; 10 ⁻² ; 10 ⁻²]
$Ni_{(\text{aquec.})}$	[0,0; 0,1]
$W_{(\text{reação})}$	[10 ⁻³ ; 10 ⁻² ; 10 ⁻² ; 1]
$Ni_{(\text{reação})}$	[0,00; 0,02]

Optou-se por fazer duas simulações para o produto B pelo fato da sua dinâmica ser mais complexa, em razão de uma dupla alimentação em instantes e durações distintas, intercalada por uma parada, onde a reação se processa apenas com os monômeros residuais presentes no meio. Os dados utilizados para a simulação do produto B encontram-se na Tabela 2.

Tabela 2 – Parâmetros para simulação com o produto B.

ITEM	SIMULAÇÃO	
	B1.IN.TJ.30	B5.VE.TJ.30
Clima	Inverno	Verão
Temp. Reação	176°F	176°F
Tempo de controle	0,1 min	0,1 min
$Q_R(\text{inicial})$	0	0
$U_A(\text{inicial})$	30	30
Controlador	FF TJ	FF TJ
Batelada	n° 1	n° 5
$K_{P(\text{escravo})}$	7	7
$\tau_{I(\text{escravo})}$	11	11
$W_{(\text{aquec.})}$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$	$[10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-2}]$
$Ni_{(\text{aquec.})}$	[0,0; 0,1]	[0,0; 0,1]
$W_{(\text{reação})}$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$	$[10^{-3}; 10^{-2}; 10^{-2}; 1]$
$Ni_{(\text{reação})}$	[0,00; 0,02]	[0,00; 0,02]

3.1.1.1. Resultados para o Produto A

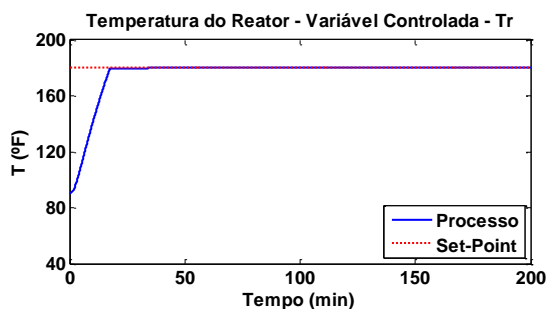


Figura 4: Temperatura do reator.

O regime de alimentação de monômero para o produto A é ilustrado na Figura 6 e a dinâmica das ações de controle, representada pela abertura da válvula (variável manipulada), é apresentada na Figura 7. Vale destacar que a válvula atua de duas formas, tanto para aquecimento quanto para resfriamento do meio reacional (*split-range control*). Assim, entre 0 e 49% de abertura, ocorre a alimentação de água de refrigeração, entre 51 e 100% alimenta-se vapor e em 50% a válvula permanece fechada, conforme mostrado na equação de ganho.

Verifica-se, através da Figura 7, que o comportamento da variável manipulada é coerente com o esperado, visto que no início

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para o seguinte caso: Produto A, batelada1, realizada no verão, com controlador mestre *feedforward* (FF) com modelo para T_r , e estimação dos parâmetros com o valor inicial de U_A de 80 BTU/min °F. Esta simulação foi codificada da forma “PA-B1-VE-FFTJ-80”.

A Figura 4apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 5, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite imposto de ± 1 °F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint*.

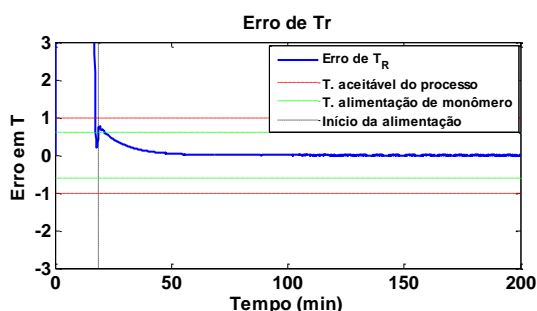


Figura 5: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint*.

da batelada a válvula abre 100% para preencher a jaqueta com vapor de modo a elevar a temperatura do meio reacional, que está à temperatura ambiente, até o valor do *setpoint*. Quando a temperatura do meio reacional se aproxima do *setpoint*, a válvula diminui a vazão de vapor. Após a temperatura desejada ser atingida, é iniciada a alimentação de monômero e, como a reação é exotérmica e fornece calor para o meio, a válvula reduz ainda mais a alimentação de vapor e fica atuando em torno de 50% para manter a temperatura reacional. É importante destacar que mesmo no início e no término da alimentação de monômero a válvula não executa movimentos bruscos.

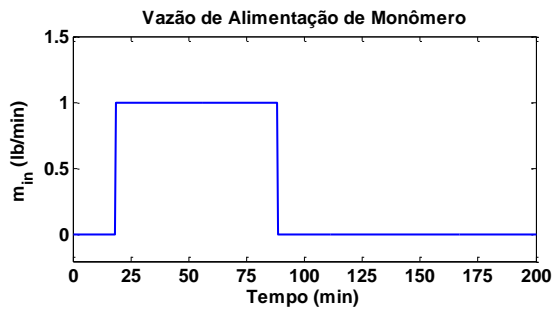


Figura 6: Dinâmica de alimentação do monômero.

É preciso destacar que essa estrutura de controle é baseada em um modelo do processo e seu comportamento reflete o que o próprio modelo determina como *setpoint*. Além disso, é importante lembrar que os modelos utilizados nesta proposta são bastante simplificados, tanto para a estimação quanto para o controlador, o que significa que não carregam informações características deste processo como os tempos mortos, além de considerarem constantes alguns parâmetros que na verdade variam. Apesar disso, os gráficos anteriores mostram que a estratégia proposta proporcionou um controle efetivo da temperatura de reação e que após o período inicial, a válvula se estabilizou próximo de 50%, mesmo patamar de operação da válvula do controlador PI do artigo original, mostrando coerência entre os resultados.

A Figura 8 apresenta o comportamento do calor de reação (Q_R) ao longo da batelada 1. Pode-se perceber que antes da alimentação de monômero (29 min.) não há liberação de calor, pois não há reação, fato que mostra coerência da modelagem proposta. No início da alimentação de monômero tem início a liberação de calor pela reação e o perfil da curva ilustra a dinâmica do processo exotérmico de reação. Ao término da adição do monômero (99 min.) a taxa de calor converge para zero à medida que a concentração de monômero diminui no meio reacional, o que também mostra a coerência da modelagem para o balanço de massa e energia.

Pode-se verificar que o FKE foi capaz de estimar adequadamente o comportamento dessa variável. Percebe-se que mesmo nos instantes de entrada e saída de monômero (29 e 99 min.) o FKE foi capaz de acompanhar o comportamento dinâmico da variável.

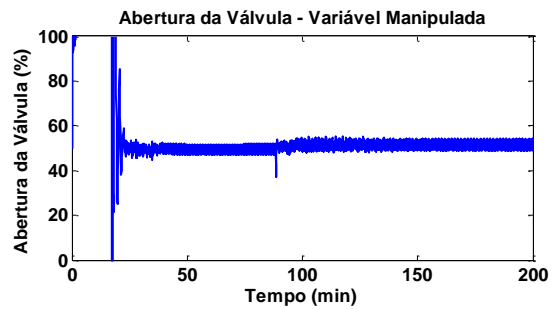


Figura 7: Dinâmica da válvula manipulada pelo controlador escravo.

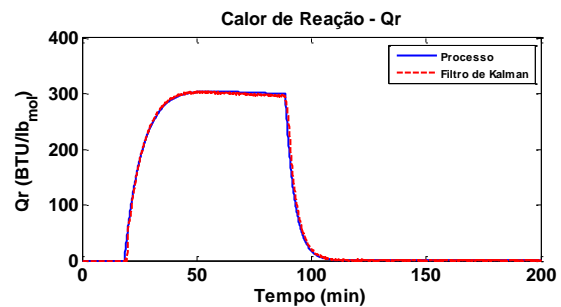


Figura 8: Evolução do calor de reação.

A Figura 9 apresenta o comportamento do produto entre o coeficiente global de transferência de calor e área de troca térmica (UA) ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que também para UA , o FKE foi capaz de estimar adequadamente o comportamento da variável. Um fator complicador para essa estimação é o fato de não se conhecer o valor inicial de UA , diferentemente do Q_R , cujo valor inicial é bem conhecido, uma vez que na ausência de reação assume valor 0 (zero). Ainda assim verifica-se que o filtro convergiu para o valor real da variável (cerca de 20 min.). Outro fato relevante é que mesmo nos instantes de entrada e saída de monômero (29 e 99 min.) o FKE conseguiu acompanhar o comportamento dinâmico da variável.

A conversão do polímero é uma função do calor de reação, portanto, é esperado que com a boa estimação de Q_R , a conversão apresente um comportamento igualmente adequado. Nota-se, pela Figura 10, que a conversão teve boa estimação, o que proporcionou o monitoramento do processo em termos de avanço da reação em tempo real. A possibilidade de monitorar o processo é outra contribuição que essa estratégia proporcionou no desenvolvimento desse trabalho.

É possível verificar que a conversão só se inicia com a entrada do monômero (29 min.). Com o andamento da reação nota-se que a conversão converge assintoticamente até que se encerra a adição de monômero (99 min.). Nesse momento, com a ausência da alimentação de monômero, a reação se completa com o

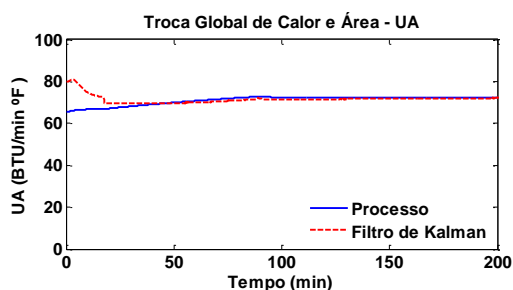


Figura 9: Coef. global transf. calor e área.

Vale destacar que o calor de reação é fundamental na estratégia de controle proposta, uma vez que será estimado – juntamente com o produto entre o coeficiente global de transferência de calor e a área de troca térmica (UA) – pelo Filtro de Kalman Estendido (FKE) através dos modelos simplificados do balanço de energia. Esses estados serão fornecidos para o algoritmo do novo controlador mestre *feedforward* para determinação do *setpoint* da malha escrava através dos mesmos modelos simplificados do balanço de energia utilizados pelo FKE.

Ressalta-se que o coeficiente global de transferência de calor é variável por conta da dinâmica de aquecimento e de problemas de incrustação na superfície de troca térmica e a área de troca térmica também varia devido ao aumento do volume reacional ao longo da batelada.

O interesse no comportamento de UA e não apenas em U é porque a área de troca térmica varia, como dito anteriormente, em função da dinâmica do meio reacional. Logo, seu cálculo depende de informações específicas dos reagentes e produtos e isso não atende ao principal objetivo desse trabalho, que é utilizar modelos simplificados e generalistas sem considerar características específicas dos reagentes ou do processo. Dessa forma, o produto UA é estimado através do FKE e utilizado, assim como o calor de reação (Q_R), na estratégia de controle proposta neste trabalho.

monômero residual do meio reacional. Por este motivo observa-se essa descontinuidade na curva exatamente no instante de 99 minutos, onde a conversão acelera e a reação termina, indicando que todo o monômero foi consumido. Esse comportamento também mostra total coerência entre o modelo proposto e o balanço de massa.

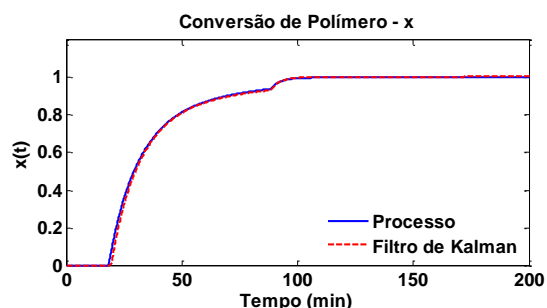


Figura 10: Conversão do polímero.

3.1.1.2. Resultados para o Produto B

Apresentam-se a seguir os resultados da simulação para os seguintes casos: Produto B, bateladas 1 e 5 (para ilustrar a influência da incrustação), realizadas respectivamente no inverno e verão (para ilustrar a influência das mudanças climáticas), com controlador mestre *feedforward* (FF) utilizando o modelo para T_j . A estimação dos parâmetros é inerente ao controle nesse caso e o valor inicial para UA foi de 30 BTU/min $^{\circ}$ F para ambos os casos. Estas simulações foram codificadas nas formas “B1.IN.TJ.30” e “B5.VE.TJ.30”, respectivamente.

Simulação B1.IN.TJ.30:

A Figura 11 apresenta o comportamento da temperatura do reator de polimerização ao longo da batelada 1. Pode-se verificar que a estrutura de controle implementada para este processo também foi capaz de controlar adequadamente o processo, fato que pode ser confirmado através do resultado apresentado na Figura 12, que mostra que a temperatura de reação não ultrapassou o limite permitido de $\pm 1^{\circ}$ F durante a reação e, sobretudo, convergiu para o valor do *setpoint*. Esse resultado mostra o bom desempenho do controlador, pois a temperatura não oscilou com o término da adição de monômero (82 min.) e tampouco com o segundo ciclo de alimentação (característico do produto B) com início em 112 minutos e término em 152 minutos.

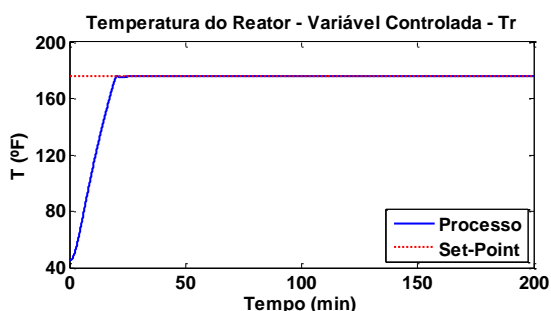


Figura 11: Temperatura do reator.

Conforme ilustrado na Figura 13, no início da batelada a válvula de controle apresentou um comportamento dinâmico bastante peculiar. É preciso destacar que essa estrutura é baseada em um modelo do processo e seu comportamento reflete o que o próprio modelo determina como *setpoint*. Além disso, é importante lembrar que os modelos utilizados nesta proposta são bastante simplificados, tanto para a estimação quanto para o controlador, o que significa que não incorporam as informações características deste processo, tais como os tempos mortos, além de considerarem constantes alguns parâmetros que na verdade variam. Apesar disso, os gráficos anteriores de temperatura mostram que o comportamento da válvula proporcionou um controle mais efetivo da temperatura de reação e que após o período inicial a válvula se estabilizou próximo de 50%, resultado semelhante ao observado em outros trabalhos citados ao longo do texto, mostrando coerência entre os resultados.

O comportamento dinâmico da taxa de liberação de calor é apresentado na Figura 14. No início da alimentação de monômero tem início a liberação do calor de reação e o perfil da curva está relacionado à própria dinâmica do processo. Ao término da adição do monômero (82 min.) a taxa de calor liberada diminui na medida em que a concentração de monômero diminui no meio reacional. Quando é iniciada nova adição de monômeros (112 min.) o calor de reação volta a subir, indicando liberação de energia em razão da reação de polimerização, conforme ocorreria anteriormente e ao cessar a nova adição (152 min.) observa-se que o calor de reação cai tendendo a 0 (zero), o que indica que todo o monômero foi

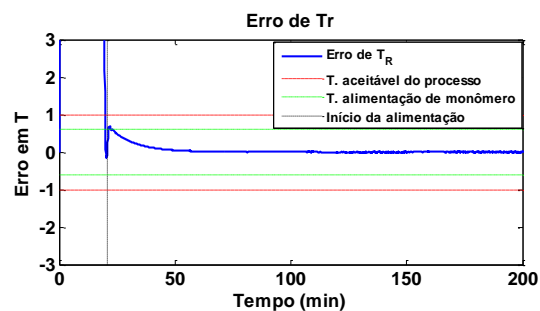


Figura 12: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint*.

consumido. Isso também mostra a coerência dos modelos propostos para o balanço de massa e energia. Deve-se verificar que nesse processo o calor de reação apresenta um comportamento mais “complexo” de subidas e descidas sequenciais, o que exige bastante perícia no ajuste do filtro para que a estimação acompanhe esse comportamento oscilatório. Destaca-se, mais uma vez, a boa estimação desta variável (Figura 14), mesmo frente ao comportamento oscilatório do perfil do calor de reação decorrente da estratégia de alimentação de monômero, que representa uma dificuldade maior para a estimação. Há também um pequeno atraso da estimação no início da adição de monômero, mas que os resultados globais mostraram não ter influenciado significativamente o desempenho do controle da temperatura da reação.

A análise do comportamento de *UA*, ilustrado na Figura 15, mostra que durante o período de aquecimento do reator há um aumento desta variável até que se atinja a temperatura de *setpoint*, onde o mesmo fica invariante no tempo. Isso é esperado, pois com temperatura constante a troca térmica também se mantém constante uma vez que sem reação a área de troca térmica não varia. Esse mesmo comportamento ocorre após o término de monômero no meio reacional, onde se observa que *UA* permanece constante. Durante o período de adição de monômero há um aumento de *UA*, que não pode ser explicado apenas observando-se o respectivo gráfico. A boa estimação da variável *UA* pode ser visualizada através da Figura 15.

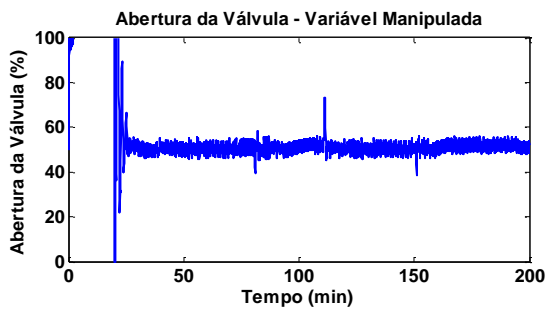


Figura 13: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo.

A conversão do polímero ao longo do tempo da batelada pode ser visualizada com auxílio da Figura 16, onde é possível verificar o seu início com a entrada de monômero. Com o andamento da reação, nota-se que a conversão converge assintoticamente para o máximo, até que se encerra a adição de monômero.

Nesse momento, com a ausência da alimentação de monômeros, a reação se dá apenas com os monômeros residuais que ainda permanecem no meio reacional. Devido a isto, observa-se essa descontinuidade na curva exatamente no instante de 82 minutos, onde a conversão

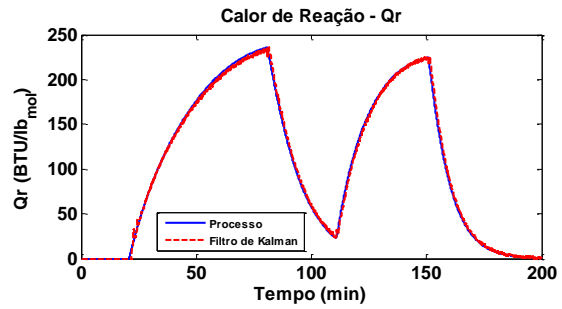


Figura 14: Evolução do calor de reação.

acelera até que nova adição de monômeros ocorre (112 min.), fazendo com que a relação produto/reagente caia inicialmente. É possível notar que a conversão volta a subir próximo de 120 minutos, até que em 152 minutos encerra-se a adição de monômeros e verifica-se a conversão completa, indicando que todo o monômero reagiu. Este comportamento mostra total coerência do modelo proposto para o balanço de massa, onde a conversão do polímero apresentou o comportamento esperado. Nota-se, pela Figura 16, a estimação bastante precisa desta variável.

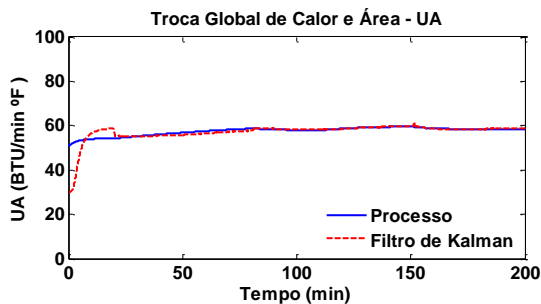


Figura 15: Coeficiente global de transferência de calor e área.

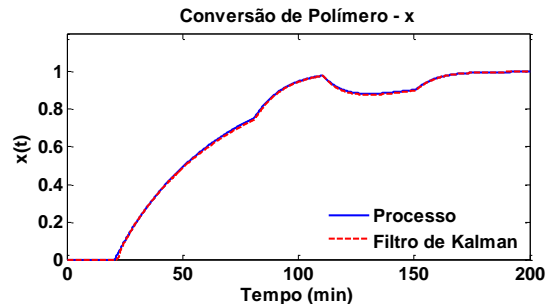


Figura 16: Conversão do polímero.

Simulação B5.VE.TJ.30:

Outros aspectos relevantes apontados no artigo original de Chylla e Haase (1993), é que o processo passa por sucessivas bateladas ininterruptas e está sujeito a variações climáticas (inverno/verão). As sucessivas bateladas fazem com que haja impregnação de material nas paredes do reator, o que influencia drasticamente o coeficiente global de transferência de calor (U). Na medida em que as bateladas ocorrem, mais material é depositado, dificultando a troca térmica entre a parede do reator e o meio reacional, fazendo com

que o coeficiente de transferência global caia a cada batelada. Isso, de fato, é um problema, pois o controle de temperatura se dá exatamente pela troca térmica entre reator e jaqueta. Por outro lado, a variação climática altera as temperaturas inicial e ambiente, o que pode influenciar a ação de controle.

As figuras a seguir descrevem o resultado dessa simulação e atestam que a estratégia de estimação e controle proposta neste trabalho foi robusta o suficiente para lidar com os problemas de incrustação e de

mudança climática apresentados por esse processo de polimerização.

A partir da Figura 17 até a Figura 22 pode-se verificar que o comportamento de

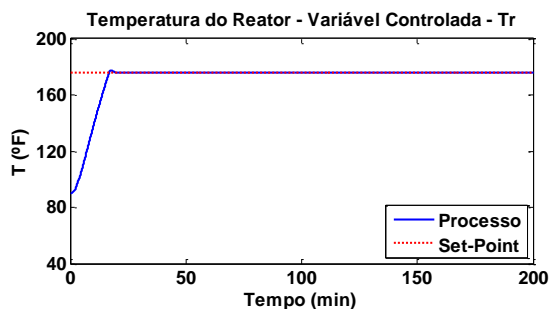


Figura 17: Temperatura do reator (B5.VE.TJ.30).

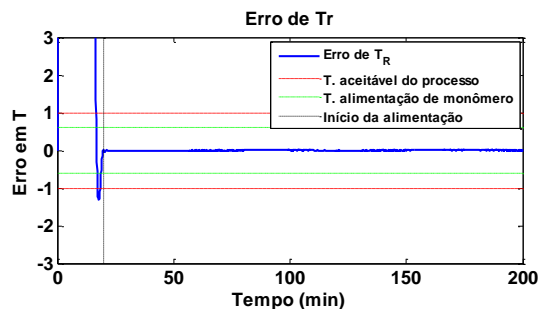


Figura 18: Erro da temperatura do reator em relação ao *setpoint*(B5.VE.TJ.30).

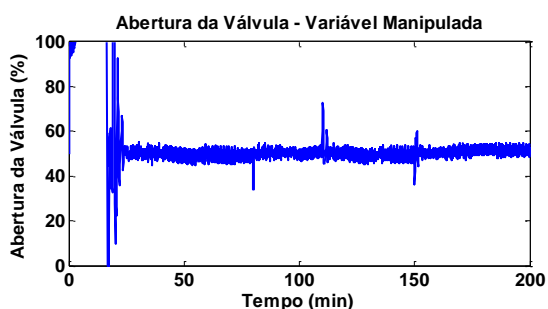


Figura 19: Dinâmica da válvula manipulada pelo cont. escravo(B5.VE.TJ.30).

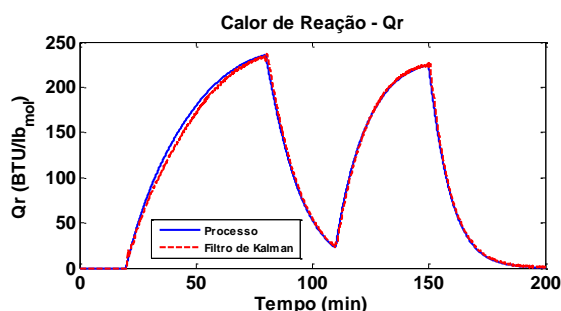


Figura 20: Evolução do calor de reação (B5.VE.TJ.30).

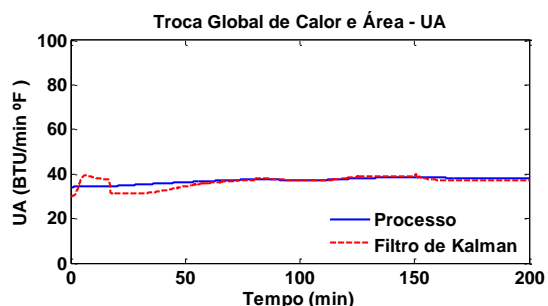


Figura 21: Coef. global de transferência de calor e área (PB-B5-VE-FFTJ-30).

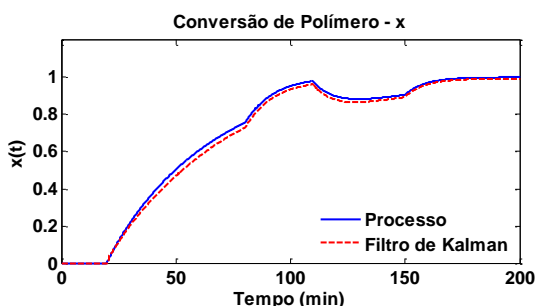


Figura 22: Conversão do polímero (PB-B5-VE-FFTJ-30).

Destaca-se a mudança da temperatura inicial do reator na Figura 17, em razão da mudança climática. Na Figura 18 apresenta-se o controle efetivo da temperatura do processo de polimerização, visto que o erro não excede o limite permitido. Verifica-se também que há certo “descolamento” das curvas do calor de reação (Q_R) e, conseqüentemente, da conversão (x), além do fato do coeficiente global de transferência de calor e área (UA) ter diminuído. Essas três mudanças são explicadas pelo aumento do fator de incrustação causado pelo aumento do número de bateladas, visto que a incrustação

interfere na troca térmica do meio com a jaqueta, nas leituras de temperatura e, conseqüentemente, dificultam a estimação dos respectivos parâmetros.

3.1.1.3. Considerações sobre a estimação de Q_R e UA

Analisando os resultados obtidos com as estimções feitas pelo filtro de Kalman para Q_R , UA e conversão (x), verifica-se que todos estão bastante consistentes quando comparados com os resultados da simulação do modelo de Chylla e Haase (1993). Os gráficos de Q_R , UA e conversão (x) mostram pequenos erros entre os valores estimados

pelo FKE e os valores reais determinados pelo modelo fenomenológico validado pelos autores e apresentado no artigo original. Já era esperado que houvesse maior dificuldade de estimar UA em relação a Q_R x (que é função direta do Q_R) nos instantes iniciais em que as temperaturas não tivessem convergido ao valor de reação, uma vez que na modelagem, UA aparece tanto na equação do balanço de energia do reator quanto na da jaqueta. Portanto, UA sofre mais influência dos erros associados aos dois modelos. Por outro lado, Q_R só aparece no balanço de energia do reator e, dessa forma, sofre influência apenas do erro associado a esse modelo.

Outro ponto importante a se destacar é que Q_R e UA precisam de valores iniciais para a simulação. Determinar o valor inicial de Q_R é relativamente simples, uma vez que não havendo reação, a condição inicial para esta variável é zero. Porém, determinar o valor inicial de UA não é uma tarefa trivial. Avaliando o trabalho de Almeida (1997), há um tópico específico para determinação de condições iniciais através da estimação de parâmetros em tempo real. Utilizando a fase de aquecimento para o produto A no verão e para as bateladas de número 1 e 5, obteve-se como resultados 67 BTU/min.°F.ft² para a primeira corrida e 42 BTU/min.°F.ft² para a última. Cabe ressaltar que Almeida (1997) parte de valores iniciais arbitrários para a fase de aquecimento (30 e 100 BTU/min.°F.ft², respectivamente).

No presente trabalho, a fase de aquecimento já está integrada em toda a simulação e, nesse sentido, a estimativa inicial de UA (30 BTU/min.°F.ft²) para a fase de aquecimento fez com que a estimação em tempo real através do uso do FKE terminasse a fase de aquecimento em um valor mais adequado para o UA da fase de reação. Note-se, que os resultados finais foram consistentes e é possível mudar a estimativa inicial para verificar se há independência da ação de controle em relação à estimativa inicial (não apresentado nesse trabalho).

Nas estratégias concebidas a partir do uso das estimativas do filtro de Kalman, as variáveis T_R e T_J foram consideradas como estados determinísticos e disponíveis a cada tempo de amostragem, uma vez que as

temperaturas de reação e da jaqueta são facilmente medidas na prática. Os parâmetros Q_R e UA foram considerados como estados estocásticos, já que na prática são variáveis que não são medidas. As variáveis como F_w , T_{amb} , UA_{loss} bem como, C_R , C_{pw} , W_{cj} , são assumidas como sendo constantes. Todos os valores dos parâmetros operacionais e variáveis de processo foram utilizados conforme dados do artigo original (Chylla e Haase, 1993).

4. CONCLUSÕES

A estratégia de estimação e controle desenvolvida nesse trabalho mostrou ser eficiente e robusta para diversas situações distintas e potencialmente adversas para sistemas de controle manter a variável controlada (Tr) dentro da faixa de trabalho desejada. As simulações foram feitas para diferentes produtos (polímeros A e B), variações na temperatura ambiente (verão e inverno), mudanças do meio reacional (fator de incrustação, mudança de calor específico, etc.) e ainda assim as estratégias de estimação e controle propostas neste trabalho apresentaram bons resultados.

Os modelos bastante simplificados (apenas duas equações) que foram utilizados neste trabalho para representar os balanços de energia do reator e da jaqueta foram adequados para a estimação dos parâmetros UA e Q_r . A simplicidade desses modelos torna elementar a determinação analítica da matriz Jacobiana quando comparada a outras propostas descritas na literatura que utilizam 4, 5 ou 6 equações para os modelos utilizados para a estimação.

O controle do processo de polimerização foi feito com base na estimação em tempo real de parâmetros UA e Q_r através do próprio balanço de energia. Porém, os modelos dos balanços de energia foram extremamente simplificados, eliminando-se informações originalmente necessárias como constantes de tempo, tempos mortos, área de reação etc., o que tornou a estratégia bastante simples, robusta, prática e generalista, uma vez que o uso desses modelos simplificados na estratégia de controle proposta dispensa várias informações dependentes dos reagentes ou de características específicas do processo.

Os resultados encontrados com as simulações na implementação do controle com estimativas em tempo real, mostraram que a modelagem proposta por Chylla e Haase (1993) é consistente e não carece das correções observadas em algumas referências. Esse entendimento é importante, uma vez que muitos trabalhos têm obtido bons resultados através da manipulação de algumas considerações, que pelos resultados alcançados aqui mostram ser desnecessárias.

A estimativa de parâmetros em tempo real através do uso do Filtro de Kalman Estendido para fins de controle de reatores de polimerização mostrou-se uma alternativa viável para aplicações multipropósito, onde não se dispõe de muitas informações do processo (reagentes, produtos, parâmetros de processo, etc.).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALMEIDA, A. Balanço de energia em tempo real para o monitoramento e controle de reatores de polimerização não-contínuos. Tese, COPPE/UFRJ. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 1997.

BEYER, M.; GROTE, W.; REINIG, G. Adaptive exact linearization control of batch polymerization reactors using a Sigma-Point Kalman Filter. *Journal of Process Control*, v. 18, p. 663–675, 2008.

BINDER, T.; Cruse, A.; CRUZ-VILLAR, C.A., MARQUARDT, W. Dynamic optimization using a wavelet based adaptive control vector parameterization strategy. *Computers & Chemical Engineering*, v. 24, p. 1201 – 1207, 2000.

BOUHENCHIR, H.; CABASSUD, M.; LE LANN, M. V.; CASAMATTA, G. A general simulation model and a heating: cooling strategy to improve controllability of batch reactors. *Institution of Chemical Engineers*, v. 79, parte A, p. 641 – 654, 2001.

CHUI, C. K.; CHEN, G. *Kalman Filtering with Real-Time Applications*. Springer, 4th edition, 2009.

CHYLLA, R. W.; HAASE, D. R. Temperature control of semi batch

polymerization reactors. *Computers Chem. Engng.*, v. 17, n. 3, p. 257-264, 1993.

CHYLLA, R. W.; HAASE, D. R. Temperature control of semi batch polymerization reactors. *Computers Chem. Engng.*, v. 17, n. 12, p. 1213, 1993b.

GRAICHEN, K.; HAGENMEYER, V.; ZEITZ, M. Feedforward control with online parameter estimation applied to the Chylla–Haase reactor benchmark. *Journal of Process Control*, v. 16, p. 733–745, 2006.

GRAICHEN, K.; HAGENMEYER, V.; ZEITZ, M. Design of adaptive feedforward control under input constraints for a benchmark CSTR based on a BVP solver. *Comp. and Chem. Engng*, v. 33, p. 473–483, 2009.

Haykin, S. *Kalman Filtering and Neural Networks*. John Wiley & Sons, 2001.

HELBIG, A.; ABEL, O.; M'HAMDI, A.; MARQUARDT, W. Analysis and nonlinear model predictive control of the Chylla-Haase benchmark problem. *Proc. UKACC International Conference Control*, p. 1172 – 1177, 1996.

JAZWINSKI, A.H. *Stochastic Processes and Filtering Theory*. Academic Press, INC., 1970.

MACGREGOR, J.F. On-line reactor energy balances via Kalman filtering. *Proc. IFAC, PRP6, Automation*, p. 27 – 31, 1986.

MACGREGOR, J.F.; CLARKE-PRINGLE, T. Nonlinear adaptive temperature control of multi-product, semi-batch polymerization reactors. *Computers Chem. Engng*, v. 21, n. 12, p. 1395-1409, 1997.

MACGREGOR, J.F.; FLORES-CERRILLO, J. Latent variable MPC for trajectory tracking in batch processes. *Journal of Process Control*, v. 15, p. 651–663, 2005.

Ng, C.W.; HUSSAIN, M.A. Hybrid neuronal network: prior knowledge model in temperature control of a semi-batch

polymerization process. Chem. Engineering and Processing, v. 43, p. 559 – 570, 2004.

ODIAN, G. Principles of Polymerization. New Jersey: John Wiley, 4th ed., 2004.

SANTOS, P.F.A. Balanço de energia em tempo real para um reator de polimerização: estratégias alternativas para o filtro de Kalman. Dissertação. PPGEQ, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 2005.

SCHULER, H.; SCHMIDT, C.U. Calorimetric-state estimators for chemical reactor diagnosis and control. Review of methods and applications. Chem. Engng. Sci., v. 47, n. 4, p. 899 – 915, 1992.

SIMON, D. Optimal State Estimation: Kalman, H_∞ , and Nonlinear Approaches. Hoboken: John Wiley, 2006.

VASANTHI, D.; PRANAVAMOORTHY, B.; PAPPA, N. Design of a self-tuning regulator for temperature control of a polymerization reactor. ISA Transactions, V. 51, N. 1, pp. 22-29, 2012.

ANEXO 1: Informações sobre os produtos e o reator.

Tabela 3 – Dados para o produto A.

PRODUTO A		
ITENS	VALOR	UNIDADE
k_0	3.300	1/min
H_p	30.160	BTU/lbmol
M_{WM}	104	lb/lbmol
Com	0,4	BTU/lb °F
C_{pW}	1,0	BTU/lb °F
C_{pS}	0,8	BTU/lb °F
ρ_m	0,90	-
ρ_w	1,00	-
ρ_s	1,04	-
$S(0)$	119,0	lb
Fração de sólidos	0,208	-
Fração de água	0,792	-
Fração de monômero	0,000	-
TR	180	°F

Tabela 4 – Dados para o produto B.

PRODUTO B		
ITENS	VALOR	UNIDADE
k_0	1.200	1/min
H_p	28.200	BTU/lbmol
M_{WM}	106	lb/lbmol
Com	0,4	BTU/lb °F
C_{pW}	1,0	BTU/lb °F
C_{pS}	0,8	BTU/lb °F
ρ_m	0,90	-
ρ_w	1,00	-
ρ_s	1,04	-
$S(0)$	93,3	lb
Fração de sólidos	0,204	-
Fração de água	0,796	-
Fração de monômero	0,000	-
TR	176	°F

Tabela 5 – Dados do Reator.

REATOR		
ITENS	VALOR	UNIDADE

Diâmetro do reator	19,5	in
Altura	21,0	in
Volume de trabalho	30,0	gal
Volume da jaqueta	5,7	gal
Área do fundo da jaq.	1,8	ft ²
Área lateral da jaq.	5,23 x alt.	ft ²
Temp. água inverno	42,0	°F
Temp. água verão	70,0	°F
T_{amb} (inverno)	45,0	°F
T_{amb} (verão)	90,0	°F
UA_{loss}	10,74	BTU/h°F
W_{cj}	47,3	BTU/h°F
F_w	124,5	lbs/min
C_{pw}	1,00	BTU/lb°F
θ_1	0,38	min
θ_2	0,25	min
τ_p	0,67	min
τ_c	0,55	min