

Imp. pl.
Out/92

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

^{mt}
ESTRATÉGIAS DE CONTROLE E OPERAÇÃO
DE
REATORES CSTR

por Vandoel Pedro Barbosa Júnior^{mt}

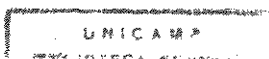
Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho^t

Tese apresentada a Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre.

Campinas - São Paulo - Brasil

1992

6514759



Esta versão corresponde à redação final da Tese de Mestrado defendida por Vandoel Pedro Barbosa Júnior e aprovada pela banca examinadora em 15 de dezembro de 1992.



Rubens Maciel Filho

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO "DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS"


ESTRATÉGIAS DE CONTROLE E OPERAÇÃO DE REATORES CSTR


Autor Vandoel Pedro Barbosa Jr

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

Aprovado por:


Prof. Dr. Rubens Maciel Filho
Orientador


Prof.^ª Dr.^ª Maria Regina Wolf Maciel


Prof.^ª Dr.^ª Sandra Cristina dos Santos Rocha

Campinas - SP - Brasil
14/12/92

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

B234e Barbosa Junior, Vandoel Pedro
 Estratégias de controle de operação de reatores
 CSTR / Vandoel Pedro Barbosa Junior.--Campinas, SP:
 [s.n.], 1995.

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

 1. Controle de processos químicos. 2. Otimização
 matemática. 3. Reatores químicos. 4. Estimativa de
 parâmetro. I. Maciel Filho, Rubens. II. Universidade
 Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química.
 III. Título.

O mais importante e bonito, do mundo, é isto: que as pessoas não estão sempre iguais, ainda não foram terminadas - mas que elas vão sempre mudando.

Aos meus pais
Vandoel
e Sebastiana
e irmãos
Noides,
Flávio Geones e
Joaquim Pedro.

Agradecimentos

Ao professor Rubens Maciel Filho, pela orientação, incentivo e amizade no cumprimento do projeto proposto.

Aos colegas Amilcar Stingham, Ernesto Ferreira Jr., Luis Stragevitch, Marcelo Cardoso, Osvaldir Taranto e Vânia de Fátima Rodrigues pelo auxílio na confecção desta tese.

À CAPES pelo suporte financeiro, na forma de bolsa de estudos.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Colocação do Problema	1
1.2	Objetivos da Tese	2
1.3	Organização da Tese	3
2	Revisão da Literatura	4
2.1	Comportamento Dinâmico	4
2.2	Controle	9
2.3	Conclusões	12
3	Análise Dinâmica	13
3.1	Descrição do Sistema	13
3.2	Modelo do Processo	15
3.3	Estruturas de Controle	17
3.4	Resultados e Discussões	23
3.5	Conclusões	39
4	Obtenção de "Set-point" Ótimos para Controle	40
4.1	Teoria de Otimização	41
4.2	Abordagem de Solução	45
4.3	Aplicação do Método de Solução	52
4.4	Resultados e Discussões	59
4.4.1	Reator CSTR	59
4.4.2	Reator Batelada	66
4.5	Conclusões	68
5	Controle Ótimo	69
5.1	Aspéctos Teóricos	69
5.2	Método de Solução	72
5.3	Controle Ótimo aplicado a Reatores CSTR	75
5.3.1	Para uma Reação $A \rightarrow B$	75
5.3.2	Para uma Reação $A \rightarrow B \rightarrow C$	88

5.4	Resultados e Discussões	91
5.4.1	Resultados	91
5.4.1.1	Referentes a Reação $A \rightarrow B$	91
5.4.1.2	Referentes a Reação $A \rightarrow B \rightarrow B$	96
5.4.2	Discussões	99
5.4.2.1	Referentes a Reação $A \rightarrow B$ usando o Método no Estado Original	99
5.4.2.2	Referentes a Reação $A \rightarrow B$ usando o Método com mudanças no Estado Estacionário	106
5.4.2.3	Referentes a Reação $A \rightarrow B \rightarrow C$ usando o Método no Estado Original	110
5.4.2.4	Referentes a Reação $A \rightarrow B \rightarrow C$ usando o Método com mudanças no Estado Estacionário	117
5.4.2.5	Discussões Gerais	124
5.5	Conclusões	130
6	Controle de Retroalimentação com Algoritmo Modificado	132
6.1	Modelo Matemático Empregado	133
6.2	Controle por Retroalimentação	133
6.3	Algoritmo Modificado	136
6.4	Performance do Controlador	138
6.4.1	Método dos Intervalos	138
6.4.1.1	Perturbação Degrau Positiva	139
6.4.1.2	Perturbação Degrau Negativa	145
6.4.1.3	Controle com mudança de "Set-point" ..	153
6.4.1.4	Perturbação Senoidal	156
6.4.2	Método de Ziegler-Nichous	159
6.5	Discussões	162
6.6	Conclusões	163
7	Conclusões e Sugestões	164
7.1	Conclusões	164
7.2	Sugestões para Trabalhos Futuros	165

Referências Bibliográficas	166
Apêndices	171
A Dados do Reator CSTR em Condições Nominais de Operação	171
B Linearização	173
C Definição de Matrizes	175
D Tipos de Controlador	176
E Método de Obtenção de Parâmetros do Controlador	178
"Abstract"	179

Lista de Figuras

3.1	Sistema (Reator Tanque Contínuo Agitado - CSTR)	14
3.2	Temperatura em função das variáveis de entrada.	25
3.3	Temperatura em função das variáveis de entrada.	26
3.4	Temperatura em função das variáveis de entrada.	27
3.5	Temperatura em função das variáveis de entrada.	28
3.6	Temperatura em função das variáveis de entrada.	29
3.9	Temperatura em função do tempo e da vazão de entrada..	30
3.10	Temperatura em função do tempo e da conc. de entrada..	31
3.11	Temperatura em função do tempo e da temper. de ent. ..	32
3.12	Perfis de concentração de A e B com o tempo.	35
3.13	Perfis de concentração de A e B com o tempo.	35
3.14	Perfis de concentração de A e B com o tempo.	36
3.15	Perfil de concentração de B com o tempo.	36
3.16	Perfil de concentração de B com o tempo.....	37
3.17	Perfil de concentração de B com o tempo.	37
3.18	Perfil de concentração de B com o tempo.	38
3.19	Perfil de concentração de B com o tempo.	38
4.1	Diagrama de blocos para o algoritmo de otimização	58
4.2	Perfis de concentração de A e B no tempo	62
4.3	Perfil de temperatura no tempo	62
4.4	Perfis de concentração de A e B no tempo	63
4.5	Perfil de temperatura no tempo	63
4.6	Perfil de vazão do fluido refrigerante no tempo	64
4.7	Perfis de concentração de A e B no tempo	64
4.8	Perfil de temperatura contra o tempo	65
4.9	Perfil de vazão do fluido refrigerante no tempo.....	65
4.10	Perfis de concentração de A e B para o reator batelada	67
4.11	Perfil de temperatura para o reator batelada	67
5.1	Comportamento dos ganhos do controlador	92
5.2	Comportamento das variáveis em estrutura multivariável	101
5.3	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	103

5.4	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	104
5.5	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	104
5.6	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	105
5.7	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	107
5.8	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	108
5.9	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	109
5.10	Comportamento das variáveis em estrutura multivariável	111
5.11	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	113
5.12	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	114
5.13	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	115
5.14	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	116
5.15	Comportamento das variáveis em estrutura multivariável	118
5.16	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	120
5.17	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	121
5.18	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	122
5.19	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	123
5.20	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	125
5.21	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	126
5.22	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	126
5.23	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	127
5.24	Comportamento das variáveis em estrutura univariável .	128
6.1	Processo em: (a) malha aberta e (b) malha fechada. ..	134
6.2	Diagrama do algoritmo: controle Método dos Intervalos.	137
6.3	Variação da temperatura de entrada no tempo.....	140
6.4	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	141
6.5	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	142
6.6	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	143
6.7	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	144
6.8	Variação da temperatura de entrada no tempo.	146
6.9	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	147
6.10	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	148
6.11	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	144
6.12	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	150
6.13	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	151

6.14	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	152
6.15	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	154
6.16	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	155
6.17	Variação da temperatura de entrada no tempo.....	156
6.18	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	157
6.19	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	158
6.20	Comportamento da temperatura n Método de Z-N.	154
6.21	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	160
6.22	Comportamento das variáveis e ganho do controlador. ..	161
D1	Resposta de um sistema para vários tipos de controle .	177

Lista de Tabelas

5.1	Valores das variáveis de estado no estado estacionário para a reação 1 ($A \rightarrow B$) e reação 2 ($A \rightarrow B \rightarrow C$).	93
5.2	Valores dos parâmetros de ajuste referentes a primeira parte dos resultados.	94
5.3(a)	Valores dos parâmetros de ajuste referentes a segunda parte dos resultados.	95
5.3(b)	Valores das variáveis de estado no estado estacionário referentes a segunda parte dos resultados.	95
5.4	Valores dos parâmetros de ajuste referentes a terceira parte dos resultados.	96
5.5(a)	Valores dos parâmetros de ajuste referentes à quarta parte dos resultados.	97
5.5(b)	Valores das variáveis de estado no estado estacionário referentes a quarta parte dos resultados.	98
5.6	Valores dos parâmetros de ajuste para estruturas de controle univariáveis.	98

Relação de Variáveis

A : área de transferência de calor, ft^2
 C_A : concentração do reagente A, mol/ft^3
 C_B : concentração do produto B, mol/ft^3
 C_p : calor específico do fluido de processo, $BTU/lbmol.R$
 E_i : energia de ativação, BTU/mol
 F : vazão volumétrica do reator, ft^3/h
 ΔH_i : calor de reação, BTU/mol
 k_i : constantes cinéticas, h^{-1}
 K : matriz de ganhos do controlador
 R : constante dos gases, $BTU/mol.R$
 S : matriz de variáveis de Riccati
 t : tempo, h
 t_r : tempo de reação, h
 T : temperatura do reator, R
 U : vetor ou vetor de variáveis manipuladas
 U : coeficiente global de transferência de calor, $BTU/h.ft^2.R$
 V : volume do reator, ft^3
 V_j : volume da camisa de refrigeração, ft^3
 X : vetor de Variáveis de Estado
 α : parâmetros de ajustes, passo de otimização
 α_i : fator de frequência da reação, h^{-1}
 β : parâmetros de Ajuste
 λ : multiplicadores de Lagrange
 ρ : densidade, lbm/ft^3

Subscritos

$_i$: significa a etapa da reação consecutiva (1 ou 2)
 $_j$: significa fluido refrigerante
 $_s$: significa variáveis no estado estacionário inicial
 $_o$: significa condições de entrada dos reagentes.

Resumo

O controle de processos químicos é um fator determinante para o bom desempenho de toda a planta. No entanto, o seu sucesso vai depender do desenvolvimento de estruturas de controle adequadas.

Neste trabalho foram propostas e investigadas várias estruturas de controle com o objetivo de obter o controle de reatores químicos "off-line" e "on-line". Para tanto foram utilizadas técnicas de controle não convencionais.

O sistema considerado é um reator tanque contínuo agitado (CSTR) não isotérmico para reações químicas do tipo $A \rightarrow B$ ou $A \rightarrow B \rightarrow C$ (consideradas exotérmicas, irreversíveis e com cinéticas de primeira ordem), onde pretende-se maximizar o produto B. O estudo deste tipo de sistema tem relevância para muitos processos na indústria química e em processos biotecnológicos.

Embora o sistema seja de parâmetros concentrados, o fato de ser multivariável e ter um modelo matemático determinístico não linear, leva-o a ter um comportamento dinâmico complexo.

Um estudo dinâmico abrangente do sistema, para perturbações múltiplas nas variáveis de entrada, foi realizado. A metodologia proposta para analisar tais efeitos mostrou-se conveniente na definição de futuras políticas de controle e de operação.

Feita a análise dinâmica do sistema iniciou-se os estudos de otimização através de um procedimento visando a definição de "set-point" para operação ótima do reator, estratégias e implementação de algoritmos de controle. Em seguida a teoria de Controle Ótimo foi aplicada no controle do reator, levando a resultados satisfatórios, para diferentes estruturas de controle.

Face a importância do ajuste de parâmetros de controle em projetos de controladores, realizou-se, nesta tese, a avaliação de uma técnica de ajuste de parâmetros para controle automático usando um algoritmo modificado. Os resultados demonstram sua viabilidade de utilização em tempo real e mostra que técnicas de controle clássico devem ser testadas antes de fazer o projeto do controlador, baseado nos princípios de controle avançado.

Capítulo 1

Introdução

O controle de processos químicos é um fator determinante para o bom desempenho de toda a planta. No entanto, o seu sucesso vai depender do desenvolvimento de uma estrutura de controle adequada.

Neste trabalho serão propostas e investigadas várias estratégias de controle com o objetivo de obter-se o controle de reatores tanque agitado, para reações químicas exotérmicas, irreversíveis e com cinética de primeira ordem, embora os resultados possam ser utilizados para qualquer tipo de cinética. O estudo deste tipo de processos tem relevância para muitos processos na indústria química e em processos biotecnológicos.

1.1. Colocação do Problema

Muitos dos processos químicos refletem as transformações de massa e energia devido as várias reações químicas que ocorrem, na maioria dos casos simultaneamente, e que levam a diversos produtos. Normalmente, deseja-se maximizar a obtenção de um ou mais produtos em relação aos outros, tidos como secundários, que devem ser minimizados. Para que isto ocorra é necessário encontrar as condições ótimas de operação que forneçam o máximo do produto desejado.

O problema colocado acima pode ser estudado sobre um sistema admitido como sendo uma planta, uma unidade ou um equipamento onde desenvolve-se uma etapa específica do processo químico.

Neste trabalho considera-se como sistema um reator tanque agitado contínuo (CSTR) não isotérmico em que ocorre uma reação química do tipo $A \rightarrow B$ ou $A \rightarrow B \rightarrow C$. As reações são exotérmicas,

irreversíveis e com cinéticas de primeira ordem, para as quais pretende-se maximizar o produto B.

Assumindo o reator operado em condições de mistura perfeita, o modelo matemático determinístico do mesmo é obtido através de um balanço de massa para os componentes da reação e um balanço de energia para o fluido de processo bem como para o fluido refrigerante que circula na jaqueta que reveste o reator. A suposição de mistura perfeita no reator qualifica o sistema como um sistema agregado ("Lumped System").

Embora os sistemas de parâmetros agregados seja mais simples do que sistemas de parâmetros distribuídos, no que se refere ao comportamento dinâmico e no tratamento matemático, a não linearidade do modelo (devido principalmente a reação química) e a interação entre as variáveis (sistema é multivariável) tornam o comportamento dinâmico do sistema não óbvio.

Apesar da relativa simplicidade, o sistema (CSTR) é muito importante para a indústria química e também em processos biotecnológicos. Além do mais pode também ser tratado como um protótipo para sistemas mais complicados (sistemas distribuídos e plantas químicas).

1.2. Objetivos da Tese

Os objetivos do trabalho são divididos em quatro etapas, a saber:

1. fazer uma análise do comportamento dinâmico do reator realizando variações isoladas e simultâneas nas variáveis de entrada para permitir uma definição e estudo de performance de estruturas de controle.
2. definição e proposição de procedimentos para estratégia de controle ótimo via a obtenção de "set-points" ótimo para controle.
3. controlar o reator utilizando teoria de controle ótimo para

diferentes tipos de reações químicas.

4. comparação de técnicas de obtenção de parâmetros de controle convencionais e não convencionais.

1.3. Organização da Tese

Um levantamento bibliográfico de trabalhos correlatos é feito no capítulo 2. Com isso é possível ter-se um quadro geral do estado da arte dos assuntos considerados nesta tese.

No capítulo 3 é realizada a análise do comportamento dinâmico do reator. As perturbações no sistema ocorrem de maneira simultânea através das variáveis de entrada. A análise é feita por meio de diagramas tridimensionais construídos com uma variável de saída e duas variáveis de entrada.

Em seguida é feita a análise da conversão do reagente A, para uma reação $A \rightarrow B \rightarrow C$, quando variam-se simultaneamente as variáveis de entrada, usando três tipos de perturbação: degrau, rampa e cíclica.

Para fins de controle, no capítulo 4 procura-se - usando teoria de otimização - obter um "set-point" ótimo para a temperatura do reator que maximize um produto desejado.

No capítulo 5 a teoria de controle ótimo é aplicada no reator CSTR para duas reações químicas diferentes.

Finalmente no capítulo 6 são aplicadas e comparadas técnicas, convencionais e não convencionais, de obtenção de parâmetros de controle.

Por último são apresentadas as conclusões e sugestões.

Capítulo 2

Revisão da Literatura

Neste capítulo é exposto, de maneira sucinta, diversas abordagens relacionadas aos temas tratados na tese, encontradas na literatura.

Devido as variedades dos assuntos em questão, a exposição é dividida em duas partes. A primeira parte é referente a trabalhos que abordam apenas análise do comportamento dinâmico de reatores CSTR, enquanto a segunda parte faz uma abordagem de assuntos relacionados a controle (envolvendo o tratamento de controle separadamente ou acompanhado de análise dinâmica e/ou otimização).

2.1. Comportamento dinâmico

Inúmeros trabalhos - teóricos e experimentais - tem mostrado que operações periódicas em reatores químicos podem conduzir a uma melhor conversão, seletividade e sensibilidade paramétrica.

Usando um modelo idealizado, Horn (1967,1968) mostrou que mudanças muito rápidas (operações periódicas) nas variáveis de processo como a temperatura de entrada dos reatores tanques contínuo agitado resultam em melhores performances do que aquelas obtidas em estados estacionários ótimos.

Na prática, no entanto, verifica-se que a rapidez destas mudanças são limitadas pela resistência a transferência de calor e massa. Em seu trabalho sobre operações cíclicas em sistemas químicos, Bayley (1971) considerou o efeito destas resistências na operação periódica ótima de reatores químicos. Ele mostrou que usando teoria de controle periódico "bang-bang" há um período ótimo de operação da variável manipulada (vazão do fluido refrigerante)

que fornece a melhor performance do reator.

O mesmo reator químico investigado por Bayley, operado sob controle periódico, foi usado para testar a técnica de controle adaptativo desenvolvida por Eliçabe *et al.* (1986). Concluiu-se que, embora o método adaptativo exija um esforço de controle relativamente maior, uma melhor performance é obtida.

Kerrekidis *et al.* (1986) estudaram a resposta de um CSTR com uma reação do tipo $A \rightarrow B$, para perturbações periódicas na temperatura do fluido refrigerante. A amplitude e a frequência das oscilações foram usadas como parâmetros de controle. O restante das condições de operação foram escolhidas de forma que o sistema, operando sem nenhuma perturbação, mantivesse uma oscilação estável. Aumentando-se o valor da amplitude da variável perturbada, o comportamento das variáveis de saída do sistema torna-se caótico envolvendo a coexistência de múltiplos períodos, quase-períodos, períodos dobrados e bifurcação global. Investigou-se, numericamente, diversas destas características, principalmente a bifurcação global. Para isto, utilizou-se de vários algoritmos baseados em métodos de tentativa e erro na obtenção dos valores das condições iniciais, e algoritmos apropriados para obter estes valores através de simulação. Estes algoritmos parecem ser ferramentas indispensáveis na sistemática de estudos de reatores operados periodicamente.

As características qualitativas descobertas para o CSTR operado periodicamente foram comparadas com resultados de modelos de sistemas conhecidos, e diversas questões foram propostas como objetos de pesquisas do comportamento de reatores operados periodicamente sob uma ampla classe de variáveis.

Kubickova *etal.* (1987) descrevem um algoritmo numérico para simulação do modelo de um biodigestor anaeróbico, com uma reação exotérmica e de primeira ordem, sob operação periódica. O algoritmo permite uma análise da existência de múltiplos estados estacionários em reatores operados periodicamente.

Hoffmann e Schädlich (1986) estudaram a influência da ordem da reação e da mudança total do número de moles na conversão da reação em reatores operados periodicamente.

O comportamento periódico das respostas foi obtido através de perturbações cíclicas do tipo "bang-bang" na concentração de alimentação do reator. Os autores constataram que:

. As variações na conversão dos reagentes dependem essencialmente da ordem total da reação.

. Uma reação com um decréscimo do número total de moles aumenta a faixa para melhores conversões.

. Parâmetros como a constante da taxa da reação e o valor médio do período na concentração de entrada não exercem grande influência na conversão da reação em reatores operados periodicamente, se a cinética é homogênea.

O comportamento dinâmico de reatores químicos acoplados, operados de forma oscilatória como em estado estacionário, tem sido investigados em diversos trabalhos.

Bar-Eli *et al.* (1984,1985) estudaram diversos exemplos de CSTRs acoplados em que ambos tem comportamento oscilatórios, quando não acoplados. Notaram a existência de regiões nos valores dos parâmetros de acoplamento, onde o sistema inteiro tem uma estabilidade não uniforme dos estados estacionários.

Um importante estudo numérico sobre dinâmica de CSTRs não isotérmicos acoplados foi desenvolvido por Mankin e Hudson (1986). Os reatores, acoplados entre si através da transferência de calor e massa, foram alimentadas em paralelo e com uma reação única (irreversível e exotérmica). A escolha dos parâmetros foi feita de modo que os reatores tivessem uma operação oscilatória quando não acoplados. Os resultados mostraram que usando transferência de massa no acoplamento de reatores (idênticos) não isotérmicos operados continuamente de forma oscilatória, podem produzir estados estacionários não uniformes, ciclos limites e caos. Em reatores acoplados apenas por transferência de calor, observa-se que bifurcações, comportamentos quase-periódicos e caóticos podem

ocorrer desde que os reatores não sejam idênticos.

A dinâmica de uma reação exotérmica e uma endotérmica compondo uma reação consecutiva foi analisada por Kahlert (1981). Usando o coeficiente de transferência de calor como um parâmetro de bifurcação verifica-se que, após um regime oscilatório periódico, o sistema é conduzido a oscilações não periódicas. Chemburkar *et al.* (1987) compararam os resultados obtidos por Kahlert com resultados obtidos para o caso de uma reação consecutiva exotérmica.

A multiplicidade de estados estacionários de sistemas formado por uma única reação química tem sido extensivamente estudada e entendida. Entretanto, a maioria dos problemas práticos (devido a multiplicidade) são encontrados em sistemas onde diversas reações químicas ocorrem simultaneamente.

Baseado na teoria da singularidade, Balaketaiah e Luss (1982) apresentam uma técnica matemática capaz de determinar as características de um sistema de parâmetros agregados composto por diversas reações químicas. A técnica é aplicada para um sistema composto de um número mínimo arbitrário de reações químicas exotérmicas em paralelo, com energias de ativação iguais, ocorrendo em um CSTR.

Os resultados obtidos ilustram que a teoria de singularidade é uma eficiente e sistemática ferramenta para averiguar a solução do número máximo de estados estacionários em sistemas de parâmetros agregados para um conjunto de reações químicas simultâneas e determinação das regiões do espaço paramétrico correspondente a estas soluções. Os autores mostram também que o uso combinado das teorias de singularidade e bifurcação é capaz de determinar algumas importantes propriedades locais e globais do sistema.

Em outro trabalho, Balaketaiah e Luss, 1982b, apresentaram um critério de predição das condições exatas, sob as quais existe um único estado estacionário, para qualquer número de Damkolher em um sistema de duas reações químicas (consecutivas ou paralelas). Eles

ainda descrevem uma técnica para a determinação exata do conjunto de números de Damkolher, para o qual a multiplicidade pode ocorrer, e examina os vários tipos de regiões de multiplicidade.

Chemburkar *et al.* (1986) realizaram um estudo de sensibilidade paramétrica de um reator tanque contínuo agitado e mostraram que o critério de sensibilidade desenvolvido no contexto de explosão térmica e reatores tubulares pode ser aplicado no caso de um CSTR para uma reação exotérmica, irreversível e de ordem n . Uma região de sensibilidade paramétrica generalizada é identificada, onde a temperatura do reator é sensível a qualquer combinação de parâmetros de entrada.

Uma série de investigações, relacionando as regiões de sensibilidade paramétrica e a multiplicidade de estados estacionários, conduziu os pesquisadores à identificação de um intervalo de operação das variáveis que forneça um único estado estacionário, qualquer que seja o valor do número de Damkohler.

Rumschitzki e Feinberg (1988) e Leib (1988) analisaram o comportamento dinâmico através da teoria proposta por Feinberg (1987,1988). Esta teoria procura relacionar a possibilidade de multiplicidade de estados estacionários a estrutura do sistema de reações. O trabalho dos autores consiste em aplicar e discutir, em reatores homogêneos e heterogêneos, as teorias denominadas "Teoria de Deficiência Zero" e "Teoria de Deficiência Um".

Observa-se que a maioria dos trabalhos publicados sobre análise dinâmica de reatores são classificados conforme a bifurcação de ciclos limites e multiplicidade de estados estacionários, e esta classificação varia com o número de Damkohler.

Uppal *et al.* (1976) investigaram o comportamento de CSTR utilizando como parâmetro de análise o tempo de residência do reator. Constataram que a evolução dos múltiplos estados estacionários e dos ciclos limites são muito mais estranhos do que

quando varia o número de Damkohler. No entanto o tempo de residência é um parâmetro fácil de manipular experimentalmente.

Em casos de reações exotérmicas, por critérios de estabilidade, é necessário calcular os limites de operação segura. Com base nisto, Hugo e Steinbach (1986) estudaram o cálculo da temperatura limite do fluido refrigerante (acima da qual o reator não tem uma operação segura) para uma mesma reação ocorrendo em dois tipos de reatores: reator tanque contínuo agitado (CSTR) e reator batelada agitado (SBR).

Os resultados mostraram que, para uma reação $A + B \rightarrow C$ nas mesmas condições, o SBR é mais crítico do que o CSTR.

Quando uma simples reação exotérmica é feita em sistemas abertos, saltos descontínuos entre estados estacionários (partida e extinção) podem ocorrer em resposta a uma variação contínua de parâmetros de controle (tais como temperatura de entrada e tempo de residência).

A dinâmica destes saltos, para uma reação química no interior de um CSTR operado adiabaticamente, foi investigada por Gray e Kordylewski (1985) através do tempo de partida do reator e o tempo de decaimento de pequenas perturbações para o estado estacionário. Posteriormente, os autores estudaram os mesmos problemas para um CSTR não adiabático.

2.2. Controle

Significantes benefícios econômicos podem ser obtidos da operação ótima de reatores semi-batelada, sempre que se tem uma reação química complexa. Para conseguir esses benefícios é necessário uma estratégia de controle ótimo para suprir, além da falta de detalhes cinéticos, a variedade de processos batelada e ao mesmo tempo fazer uso dos dados coletados durante a operação do

processo.

Filippi *et al.* (1986) introduziram um novo tipo de abordagem da sistemática de desenvolvimento de sistemas reacionais aproximados, que é a base do modelo do reator. O método consiste em reduzir os sistemas reacionais complexos de parâmetros cinéticos desconhecidos a sistemas menores. O modelo originário destes sistemas reduzidos é denominado "Tendency Models" ou modelo simplificado.

O método foi testado em um sistema reacional de cinética conhecida em detalhes. Os resultados do modelo simplificado foram comparado aos do modelo sem simplificações e demonstraram que o "Tendency Models" é suficiente para representar o comportamento global do sistema reacional complexo.

Devido ao modelo simplificado consistir de um número menor de equações do que o modelo complexo, o tempo computacional para o cálculo de otimização e controle é menor e o algoritmo de implementação em tempo real será mais efetivo.

Muitos dos problemas práticos que ocorrem em sistemas químicos são problemas de controle singular. O reator tanque contínuo agitado é um desses problemas.

Yeo *et al.* (1987) investigaram a aplicação do método quase-linearizado na solução de problemas singulares e em problemas de otimização dinâmica de sistemas químicos.

O algoritmo modificado (ϵ - α)quase-linearizado foi aplicado na solução de um problema de controle singular de um CSTR isotérmico em que a variável manipulada é a vazão de fluido refrigerante.

Posteriormente, aplicou-se o algoritmo para problemas de controle ótimo do mesmo reator com limites impostos na variável manipulada. Os pesquisadores mostraram que o algoritmo de quase-linearização modificado é satisfatório quando usado na solução de problemas de controle singular e que é uma técnica promissora na solução de problemas de controle ótimo de sistemas químicos.

Wu e Cheng (1986) apresentaram o controle de um reator tanque

contínuo agitado multivariável e não linear, via "modelo móvel". A reação química dentro do reator é exotérmica. Uma função objetivo é incluída no algoritmo, tornando-o controle ótimo. Na equação do modelo que descreve o balanço de energia do reator são consideradas duas correntes de fluidos escoando na jaqueta do reator, uma refrigerante e outra de aquecimento.

As duas correntes de calor foram usadas para manipular a concentração e a temperatura do reator. Verificou-se que é possível controlar o CSTR em torno de um estado estacionário, e que a variação simultânea das correntes de resfriamento e aquecimento deve ser evitada.

Tsiligiannis e Svoronos (1988) mostraram a utilidade do "Interactor" (matriz de interação) no "design" de controladores multivariável. A matriz de interação é oriunda de operações matemáticas envolvendo a matriz função de transferência em transformadas Z (transformação discreta).

Primeiro a matriz (de interação) é usada para classificar o processo com várias variáveis de entrada e várias variáveis de saída. Em seguida todos os controladores admissíveis são parametrizados, via matriz de interação, e é mostrado que a inversa da matriz de interação é a matriz de transferência de malha fechada ótima para várias performances medidas. O melhor desacoplador do controlador é obtido usando a matriz de interação.

Uma nova abordagem, relacionando variáveis termodinâmicas extensivas do processo ao comportamento dinâmico, foi levantada por Georgakis (1986). Tais relações são desenvolvidas pelo uso de variáveis extensivas como energia e massa contida em um conjunto de unidades ou balanço de massa e energia de um processo unitário ou, para reatores, através do conceito de taxa de reação.

Utilizando os resultados, propôs-se um procedimento para projetos de estruturas de controle de processos que sejam multivariável e/ou não linear. O método foi aplicado para um CSTR isotérmico e um adiabático.

2.3. Conclusão

Muitos dos trabalhos sobre comportamento dinâmico e controle de reatores ainda são feitos separadamente de forma que a dinâmica do sistema não é totalmente explorada em benefício de se atingir controladores mais simples e eficientes. No entanto, pode ser verificada uma preocupação nos trabalhos mais recentes em fazer estudos de análise dinâmica, controle e otimização de maneira simultânea.

Deve ser registrado a preocupação de diversos autores em detectar a existência do caos matemático nos trabalhos que envolvem o modelamento numérico de processos químicos através de computadores. A existência deste tipo de problema deve ser considerada no projeto de controlador de processo.

Há um crescente interesse em estudar o uso de técnicas de controle avançado sobre problemas de controle de reatores químicos. Isto deve-se principalmente ao fato de que em alguns casos, devido ao pobre conhecimento do comportamento dinâmico do sistema, algoritmos de controle baseados na teoria clássica são descartados. Existe portanto a necessidade de fazer um extensivo estudo do comportamento dinâmico e assim definir estratégias adequadas que devem ser tratadas com algoritmos relativamente simples antes de serem descartados.

Para tanto é essencial o desenvolvimento de modelos matemáticos representativos e de um estudo dinâmico compreensivo, como é considerado no capítulo 3.

Capítulo 3

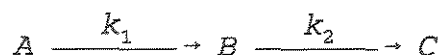
Análise Dinâmica

Neste capítulo é desenvolvido um modelo matemático usando na análise do comportamento dinâmico de um reator CSTR não isotérmico para uma reação química do tipo $A \rightarrow B \rightarrow C$. A reação estudada é exotérmica, irreversível e com cinética de primeira ordem, onde pretende-se maximizar a produção do componente B. O sistema é de parâmetros agregados e embora mais simples do que sistemas distribuídos necessita de um estudo dinâmico rigoroso, pois o fato de ser um modelo não linear torna o seu comportamento dinâmico não óbvio quando perturba-se o sistema através de suas variáveis de entrada de forma isolada e, sobretudo, quando a perturbação nas variáveis é simultânea.

O reator é representado por um modelo determinístico que sofre perturbações de vários tipos nas variáveis de entrada, inclusive com diversas combinações.

3.1. Descrição do Sistema

O sistema físico considerado neste trabalho é um reator tanque agitado operado de forma contínua agitado, mostrado na figura 3.1, no qual ocorre uma reação química do tipo



sendo A o reagente, B o produto desejado, k_1 e k_2 as constantes das taxas das reações de $A \rightarrow B$ e $B \rightarrow C$, respectivamente.

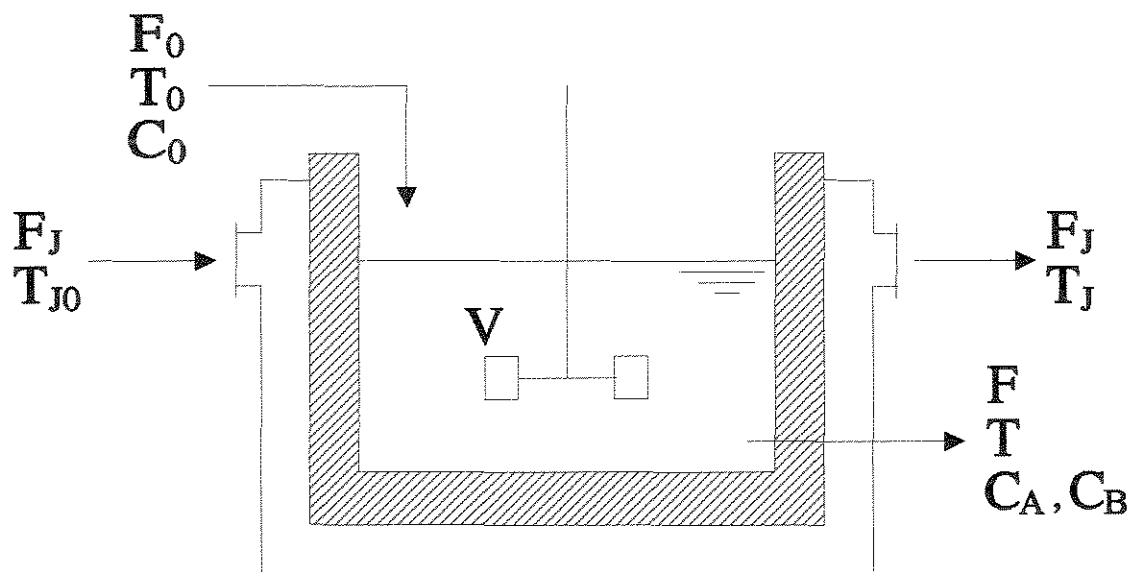


Figura 3.1. Sistema (Reator Tanque Contínuo Agitado - CSTR)

Embora a abordagem aqui apresentada possa ser aplicada para qualquer reação química, os resultados numéricos apresentados são para uma reação exotérmica, irreversível e de primeira ordem. Os valores dos dados em condições nominais de operação estão no apêndice A.

Examinando o processo, a seguinte divisão pode ser feita:

variáveis de entrada

concentração de entrada, C_{A0}

vazão de entrada, F_0

temperatura de entrada, T_0

vazão do fluido refrigerante, F_J

temperatura de entrada do fluido refrigerante, T_{J0}

variáveis de saídaconcentração de A, C_A concentração de B, C_B

temperatura do reator, T

vazão de saída do reator, F

temperatura de saída do fluido refrigerante, T_s

A descrição feita acima caracteriza um sistema multivariável e as não linearidades surgem das reações químicas. O estudo deste tipo de sistema tem relevância para muitos processos na indústria química e em processos biotecnológicos. A maneira pela qual o reator é constituído e quando operado em condições de que mistura perfeita é uma consideração razoável, estas características qualificam o processo como sendo de parâmetros concentrados ("lumped system").

Apesar da relativa simplicidade, quando comparado com sistemas de parâmetros distribuídos, especialmente no que se refere ao comportamento dinâmico e no tratamento matemático, as não linearidades introduzidas pela reação química e interação entre as variáveis leva o problema de otimização e controle do sistema a ser não trivial requerendo o uso de técnicas específicas.

3.2. O Modelo do Processo

As equações do modelo, oriundas de balanços de massa e energia, podem ser escritas como:

$$\frac{VdC_A}{dt} = F(C_{Ao} - C_A) - Vk_1C_A \quad C_A(0) = C_{As} \quad (3.1)$$

$$\frac{VdC_B}{dt} = F(C_{Bo} - C_B) + Vk_1C_A - Vk_2C_B \quad C_B(0) = C_{Bs} \quad (3.2)$$

$$\frac{VdT}{dt} = F(T_o - T) - \frac{\Delta H_1 V k_1 C_A}{\rho C_p} - \frac{\Delta H_2 V k_2 C_B}{\rho C_p} - \frac{UA(T - T_J)}{\rho C_p} \quad T(0) = T_s \quad (3.3)$$

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{F_J(T_{Jo} - T_J)}{V_J} + \frac{UA(T - T_J)}{\rho_J V_J C_{pJ}} \quad T_J(0) = T_{JS} \quad (3.4)$$

sendo

$$k_1 = \alpha_1 \exp(-E_1/RT)$$

$$k_2 = \alpha_2 \exp(-E_2/RT)$$

onde: A é a área de transferência de calor, C_i é a concentração da espécie i, C_p é o calor específico (subscrito J significa refrigerante), E_i é a energia de ativação da reação i, F é a vazão volumétrica (subscrito o significa alimentação), F_J é a vazão volumétrica do fluido refrigerante, ΔH_i é o calor de reação para a reação i, t é o tempo, T é a temperatura da reação, T_J é o temperatura do fluido refrigerante, U é o coeficiente global de transferência de calor, V é o volume do reator, α_i é o fator de frequência para a reação i e ρ é a densidade.

Estas equações são válidas para o caso da consideração de mistura perfeita ser aplicável. Apesar delas serem uma idealização, muitos processos industriais podem ser representados por este tipo de modelo.

Para as propriedades físicas do fluido de processo e do fluido refrigerante foram levantadas correlações (Weast, 1986) que fornecem os valores destas propriedades dentro de uma faixa de variação da temperatura. Considerou-se como mistura reacional um fluido com as mesmas propriedades físicas da água e como fluido refrigerante o sal fundido. A variação destas propriedades físicas obedecem as seguintes correlações:

$$\rho = (1,54*10^{-8}T^3 - 5,88*10^{-6}T^2 + 1,93*10^{-5}T + 0,9998) * 62,4$$

$$C_p = -3,64*10^{-8}T^3 + 8,88*10^{-6}T^2 - 0,000525*T + 1,00663$$

$$\rho_J = (-1,774*10^{-15}T_J^3 - 9,522*10^{-9}T_J^2 - 0,000234*T_J + 0,9137) * 62,4$$

$$C_{pJ} = 9,776*10^{-11}T_J^3 - 3,325*10^{-8}T_J^2 - 6,351*10^{-5}T_J + 0,275$$

As equações 3.1-3.4 formam um sistema de equações diferenciais ordinárias de parâmetros concentrados, as quais são resolvidas numericamente por um algoritmo de integração do tipo Runge-Kutta de quarta ordem. As equações 3.1 e 3.2 referem-se ao balanço de massa para os componentes A e B, enquanto as equações 3.3 e 3.4 são os balanços energéticos para o fluido de processo e fluido refrigerante, respectivamente. O volume do reator é constante e não é considerada a variação da temperatura na parede do reator.

3.3. Estruturas de Controle

Na busca de possíveis estruturas de controle observa-se que o sistema descrito é multivariável, pois tem várias variáveis de entrada e várias variáveis de saída. Estas variáveis podem ser classificadas como:

variáveis manipuladas

concentração de entrada, C_{A0}

vazão de entrada, F_0

temperatura de entrada, T_0

vazão do fluido refrigerante, F_r

temperatura de entrada do fluido refrigerante, T_{r0}

variáveis controladas

concentração de A, C_A

concentração de B, C_B

temperatura do reator, T

temperatura de saída do fluido refrigerante, T_r

Embora o sistema usado neste trabalho seja um sistema agregado, a multivariabilidade associada a não linearidade do modelo produz um comportamento não óbvio nas variáveis de saída quando uma das variáveis de entrada sofre perturbação e, sobretudo, quando as variáveis de entrada são perturbadas simultaneamente.

Na tentativa de conhecer o comportamento das variáveis de saída do sistema, fêz-se uma série de simulações do modelo do reator com perturbações simultâneas nas variáveis de entrada, usando, inclusive, mais de um tipo de perturbação.

Os tipos de perturbações nas variáveis de entrada mais interessantes para análise dinâmica são:

1 - Degrau: são funções que mudam instantaneamente de um nível para outro, permanecendo constante.

Exemplo: degrau unitário

$$u(t) = 1 \quad \text{para } t > 0$$

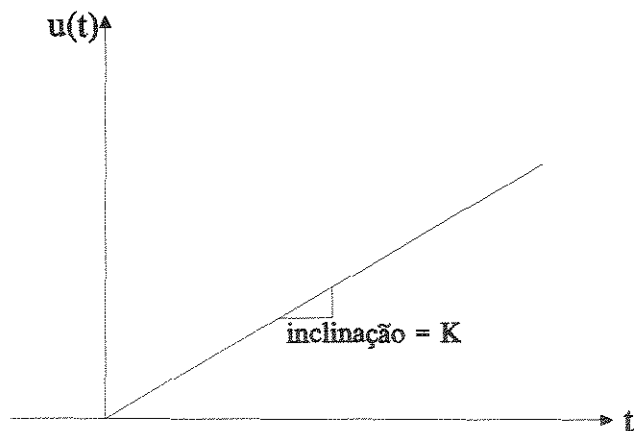
$$u(t) = 0 \quad \text{para } t \leq 0$$



2 - Rampa: são funções que mudam linearmente com o tempo.

Exemplo: $u(t) = Kt$

onde K é uma constante.

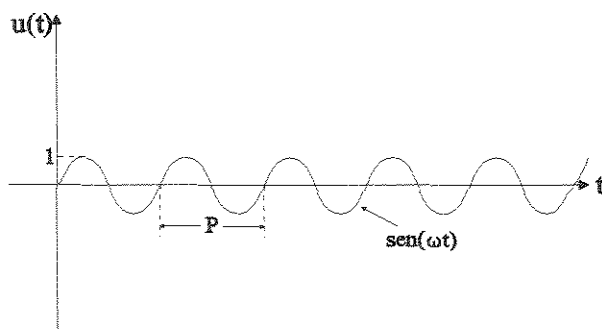


3 - Cíclica: são funções em forma de ondas.

Exemplo: função senoidal com amplitude unitária.

$$u(t) = \text{sen}(\omega t)$$

onde $\omega = 2\pi/P$ (radianos/tempo)



O trabalho de análise do comportamento dinâmico do reator esta dividido em duas partes.

Na primeira parte a análise foi feita utilizando-se de diagramas tridimensionais para avaliar as variáveis de saída do processo. A única variável de saída utilizada para análise foi a temperatura do reator (T) no estado estacionário, porque a mesma possui uma relação direta com a concentração do produto desejado (C_B), e, na prática, T é mais facilmente medida do que C_B . As perturbações foram feitas de forma simultânea, utilizando-se todas as combinações possíveis entre as cinco variáveis de entrada, sempre fixando umas e variando outras ou variando todas. Chamando as cinco variáveis de entrada de u_1 , u_2 , u_3 , u_4 e u_5 , segue-se alguns exemplos de como funciona a sistemática de perturbações simultânea:

exemplo	variáveis de entrada perturbadas	variáveis de entrada fixas
1	u_1, u_2	u_3, u_4, u_5
2	u_1, u_3	u_2, u_4, u_5
3	u_1, u_2, u_3	u_4, u_5
4	u_1, u_2, u_4	u_3, u_5
5	u_1, u_2, u_3, u_4	u_5
6	u_1, u_2, u_3, u_5	u_4
7	u_1, u_2, u_3, u_4, u_5	-

Nos diagramas tridimensionais gráfica-se sempre no eixo vertical a variável de saída e nos outros dois eixos as duas variáveis de entrada perturbadas. Há também diagramas tridimensionais que mostram a evolução do comportamento da variável de saída T no tempo, para perturbações simultâneas nas variáveis de entrada.

Na segunda parte, a análise do comportamento dinâmico é feita, utilizando gráficos bidimensionais, e visa permitir a análise do comportamento das variáveis de saída quando faz-se perturbações simultâneas nas variáveis de entrada, usando combinações de três diferentes tipos de perturbações: degrau, rampa e cíclica. As variáveis de saída utilizadas para análise foram a concentração do reagente C_A e/ou concentração do produto C_B , já que o objetivo normalmente é maximizar C_B e minimizar C_A . Para as perturbações nas variáveis de entrada, usando os três tipos de perturbação, foram feitas todas as combinações possíveis para três variáveis de entrada do reator (C_{A0}, F_0 e T_0) além de combinações envolvendo também as variáveis de entrada do fluido refrigerante (F_J e T_{J0}).

O objetivo deste estudo é verificar qual o comportamento do processo frente a diferentes tipos de perturbações, uma vez que este tipo de trabalho geralmente é feito considerando apenas perturbações do tipo degrau.

Segue abaixo alguns exemplos de como funciona a sistemática das combinações simultâneas dos três tipos de perturbações.

Fazendo: D - perturbação degrau
 R - perturbação rampa
 C - perturbação cíclica

exemplo	variáveis de entrada perturbada	tipo de perturbação
1	F_o	C
	C_o	C
	T_o	C
2	F_o	R
	C_o	D
	T_o	C
3	F_o	C
	C_o	R
	T_o	D
4	F_o	C
	C_o	C
	T_o	R
	T_{Jo}	C
5	F_o	C
	C_o	C
	T_o	D
	F_J	C

3.4. Resultados e Discussões

Primeira parte: análise de perturbações de graus simultâneas via curvas de superfície.

Como já colocado anteriormente, o sistema em questão apresenta um comportamento dinâmico complexo. Procura-se com a análise dos diagramas tridimensionais, comprovar e entender melhor este tipo de comportamento. A figura 3.2 mostra como varia a temperatura do reator no estado estacionário quando varia-se simultaneamente duas variáveis (temperatura e vazão de entrada). Esta variação é linear para qualquer das duas variáveis de entrada e que a temperatura do reator sofre uma influência muito maior das mudanças na temperatura de entrada do que na vazão de entrada. Estas observações são verificadas sempre que varia-se simultaneamente duas variáveis de entrada sendo uma delas a temperatura de entrada (T_0).

Nota-se através da exploração de todas as combinações possíveis, variando duas variáveis de entrada, que a variável de entrada que mais influencia a temperatura do reator é a temperatura de entrada, seguida da temperatura de entrada do fluido refrigerante. A vazão do fluido refrigerante e a vazão de entrada têm aparentemente a mesma influência, enquanto que a concentração de entrada é a que menos influencia a temperatura do reator. Estas afirmações foram feitas baseadas em todos os diagramas que envolvam variação em duas variáveis de entrada, como por exemplo a figura 3.3, que mostra a variação simultânea da temperatura e da concentração de entrada. Pode ser visto que a variação da concentração de entrada praticamente não muda o valor da temperatura do reator, frente às mudanças ocorridas quando varia-se a temperatura de entrada.

Nos casos de perturbação em três variáveis de entrada, as curvas de superfície fornecem informações importantes, por exemplo a figura 3.4, onde um eixo horizontal mostra a variação da

temperatura de entrada do fluido refrigerante e o outro a variação da vazão de entrada que varia conjuntamente com a vazão de fluido refrigerante. Observa-se que para T_{j0} mais baixos as variações de F_0 e F_j formam uma curva que apresenta um ponto máximo, e a medida que T_{j0} aumenta esta curva vai mudando até formar um ponto de mínimo para T_{j0} mais altas.

Para muitos casos de variação simultânea em duas variáveis de entrada, a variável de saída T sofre uma mudança linear com a variação destas variáveis. No entanto, quando aumenta o número de variáveis de entrada perturbadas simultaneamente, a dependência da variável de saída com estas variações deixa de ser linear. Geralmente, o comportamento desta dependência é mais complexo quanto maior for o número de variáveis de entrada perturbadas simultaneamente. Isto pode ser observado nas figuras 3.5 (para cada valor diferente da concentração de entrada, a temperatura e a vazão de entrada variam conjuntamente) e 3.6 (para cada valor diferente da temperatura de entrada do fluido refrigerante varia-se conjuntamente a concentração de entrada, a temperatura de entrada e a vazão de fluido refrigerante).

Algumas curvas de superfície mostram a evolução da temperatura do reator no domínio do tempo quando perturba-se simultaneamente as variáveis de entrada. As figuras 3.7, 3.8 e 3.9 mostram a temperatura do reator quando faz-se perturbações degraus positivos simultaneamente na vazão, concentração e temperatura de entrada. Em todas as figuras nota-se o aumento da temperatura do reator para qualquer incremento das três variáveis de entrada. Entretanto o aumento da temperatura do reator é mais efetivo quando incrementa-se a temperatura de entrada, pois a relação é praticamente linear (figura 3.9). A figura 3.8 mostra que o aumento da temperatura do reator pode não ser tão efetiva com o incremento da concentração de entrada, pois há faixas de valores da concentração de entrada em que seu incremento não muda o valor da temperatura do reator. Estas curvas de superfície são muito importantes na elaboração de estruturas de controle, pois permitem constatar que certas

variáveis de entrada, como a concentração, não são muito indicadas para serem variáveis manipuladas. Isto é, sua mudança não implica em mudanças sensíveis da variável de saída.

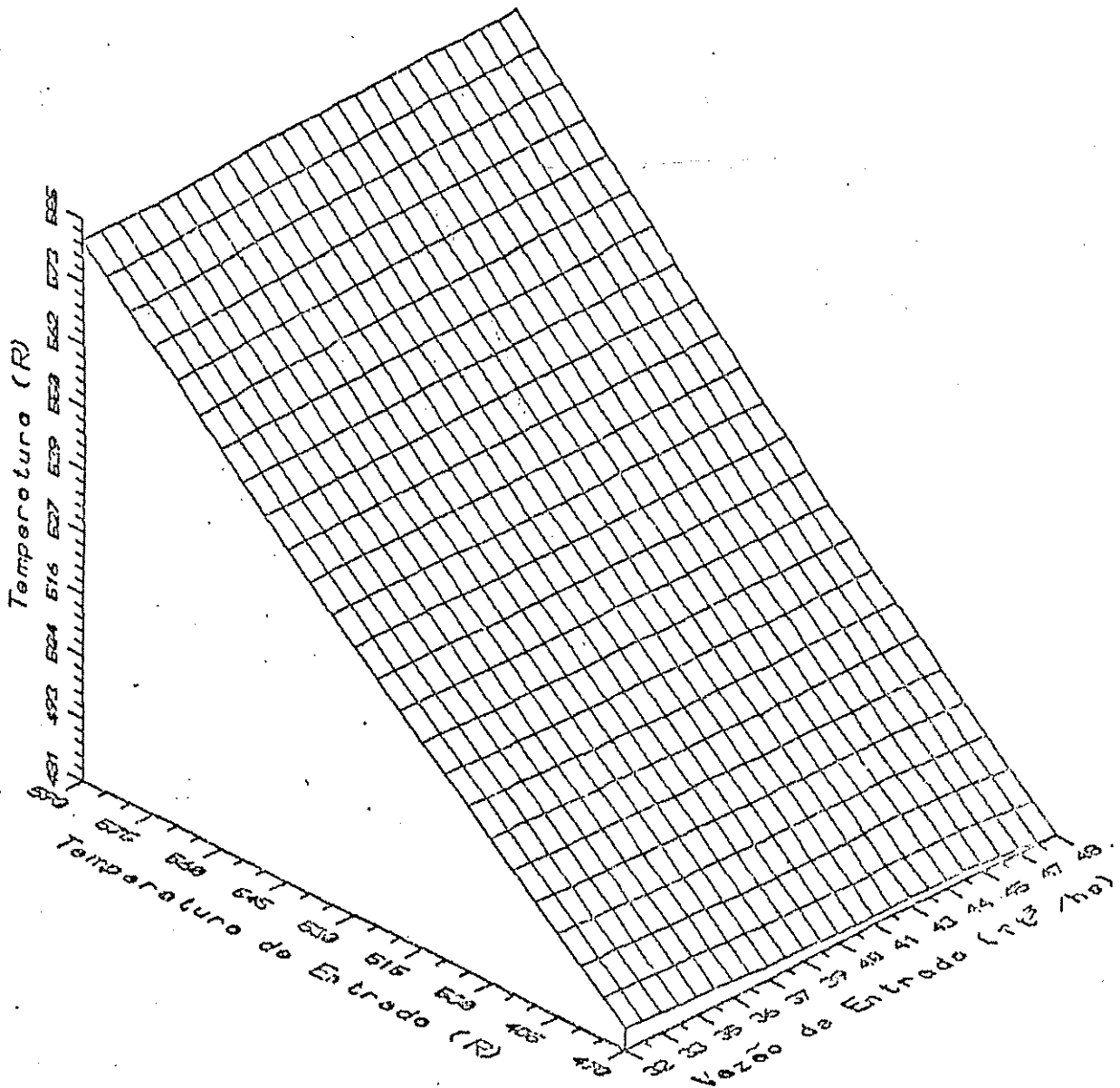


Figura 3.2. Distribuição da temperatura em função da temperatura de entrada e vazão de entrada.

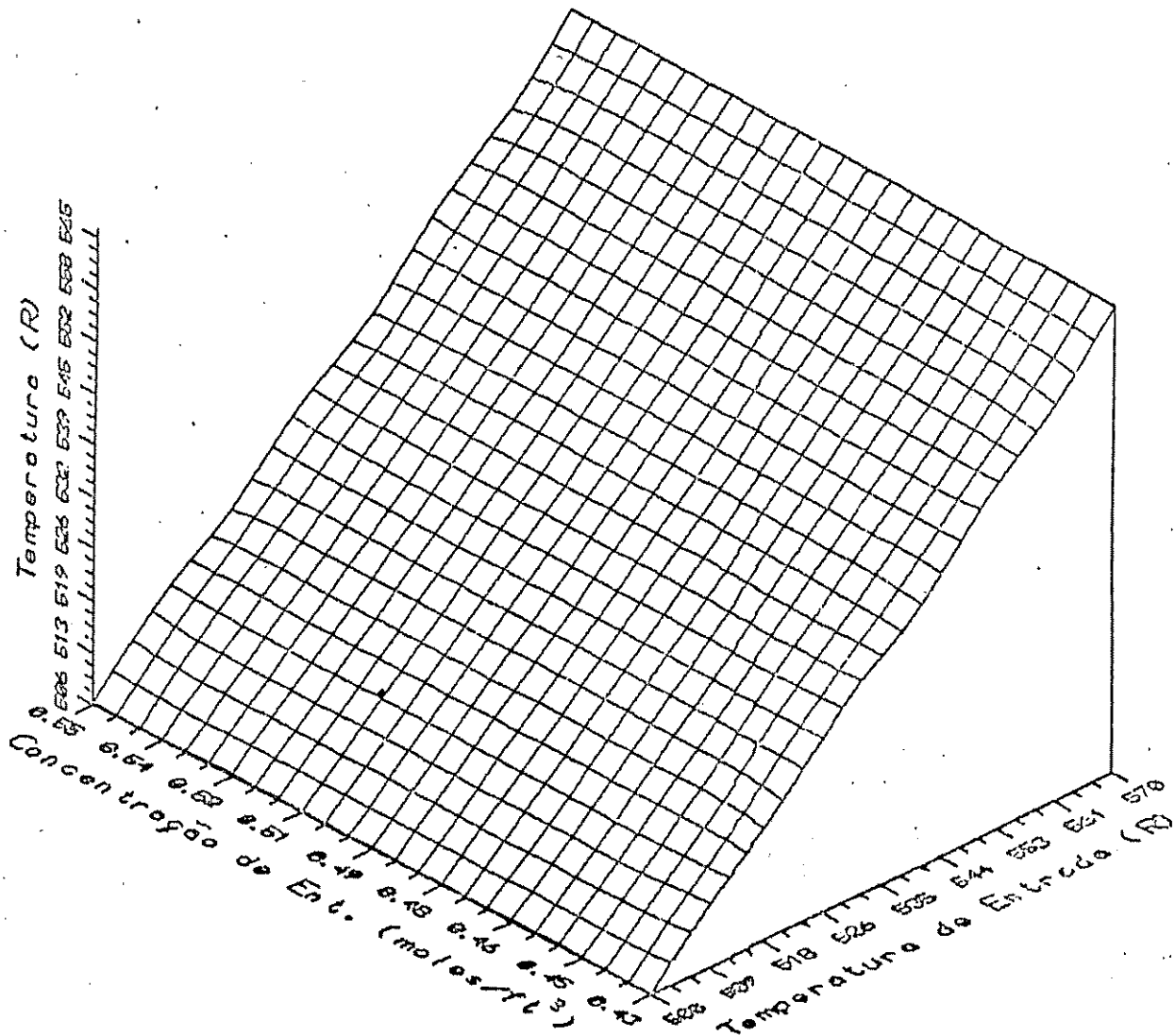


Figura 3.3. Distribuição da temperatura em função da concentração de entrada e temperatura de entrada.

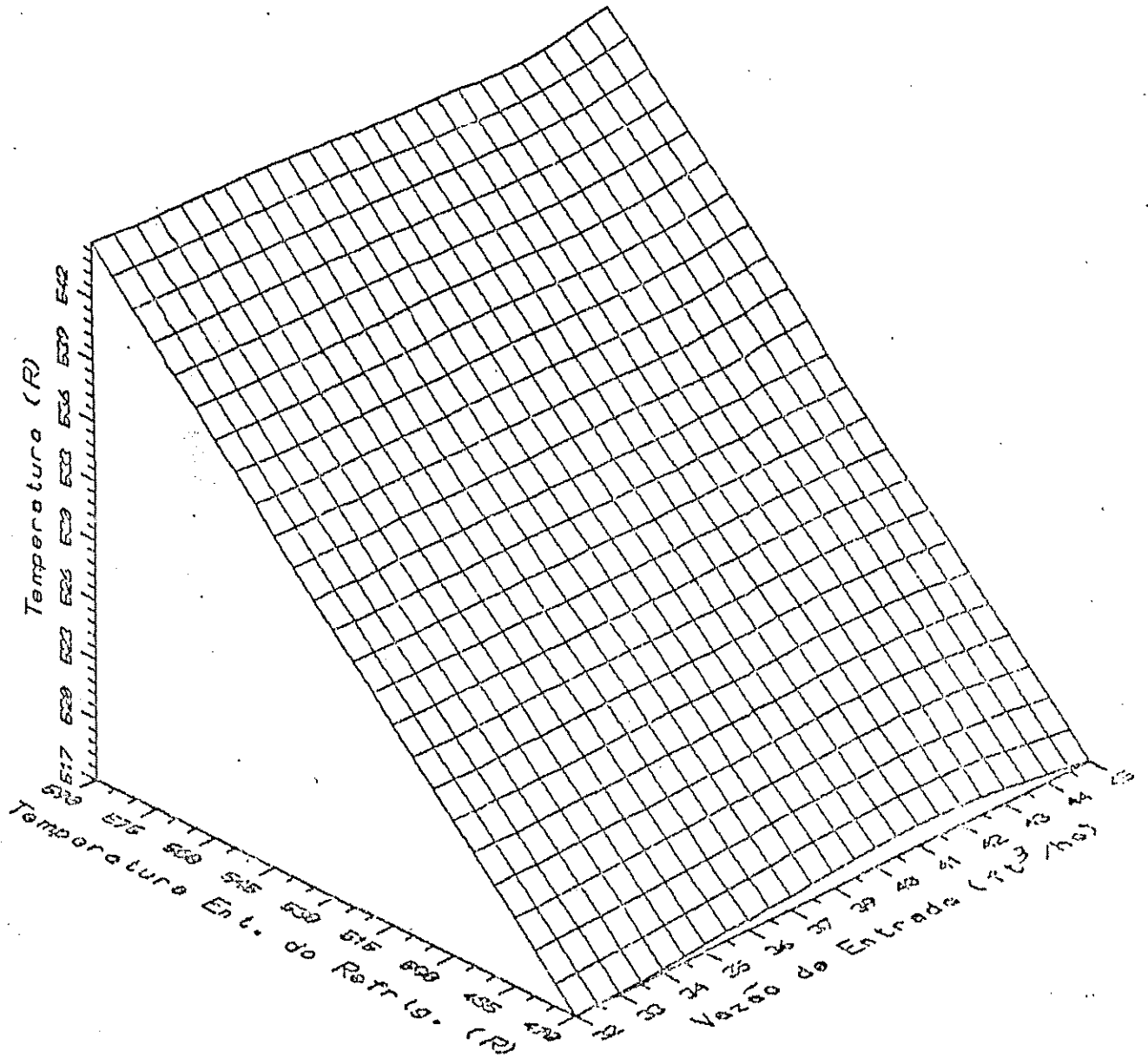


Figura 3.4. Distribuição da temperatura em função da temperatura de entrada do fluido refrigerante e da vazão de entrada variando conjuntamente com a vazão de fluido refrigerante.

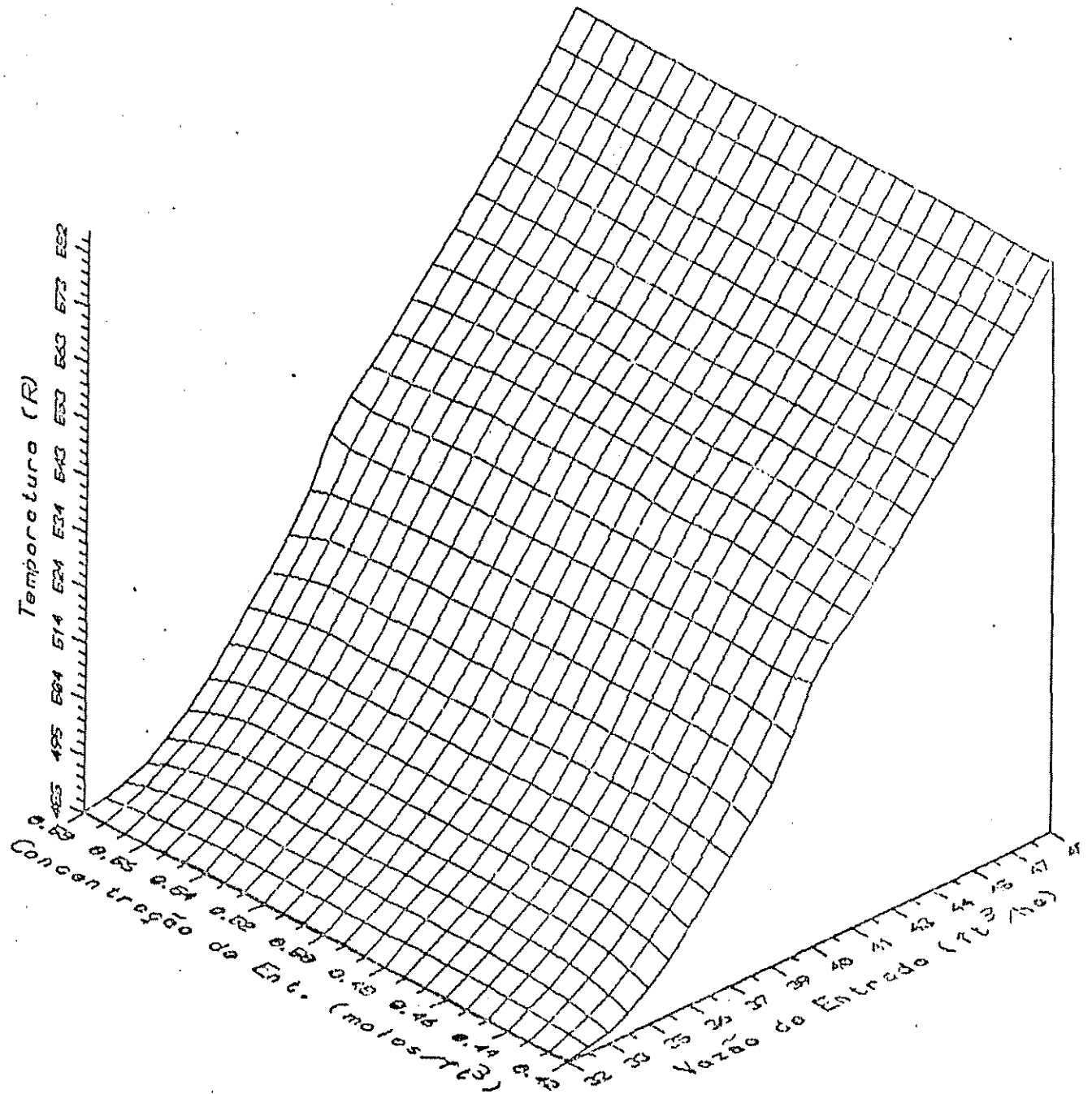


Figura 3.5. Distribuição da temperatura em função da concentração de entrada e da vazão de entrada variando conjuntamente com a temperatura de entrada .

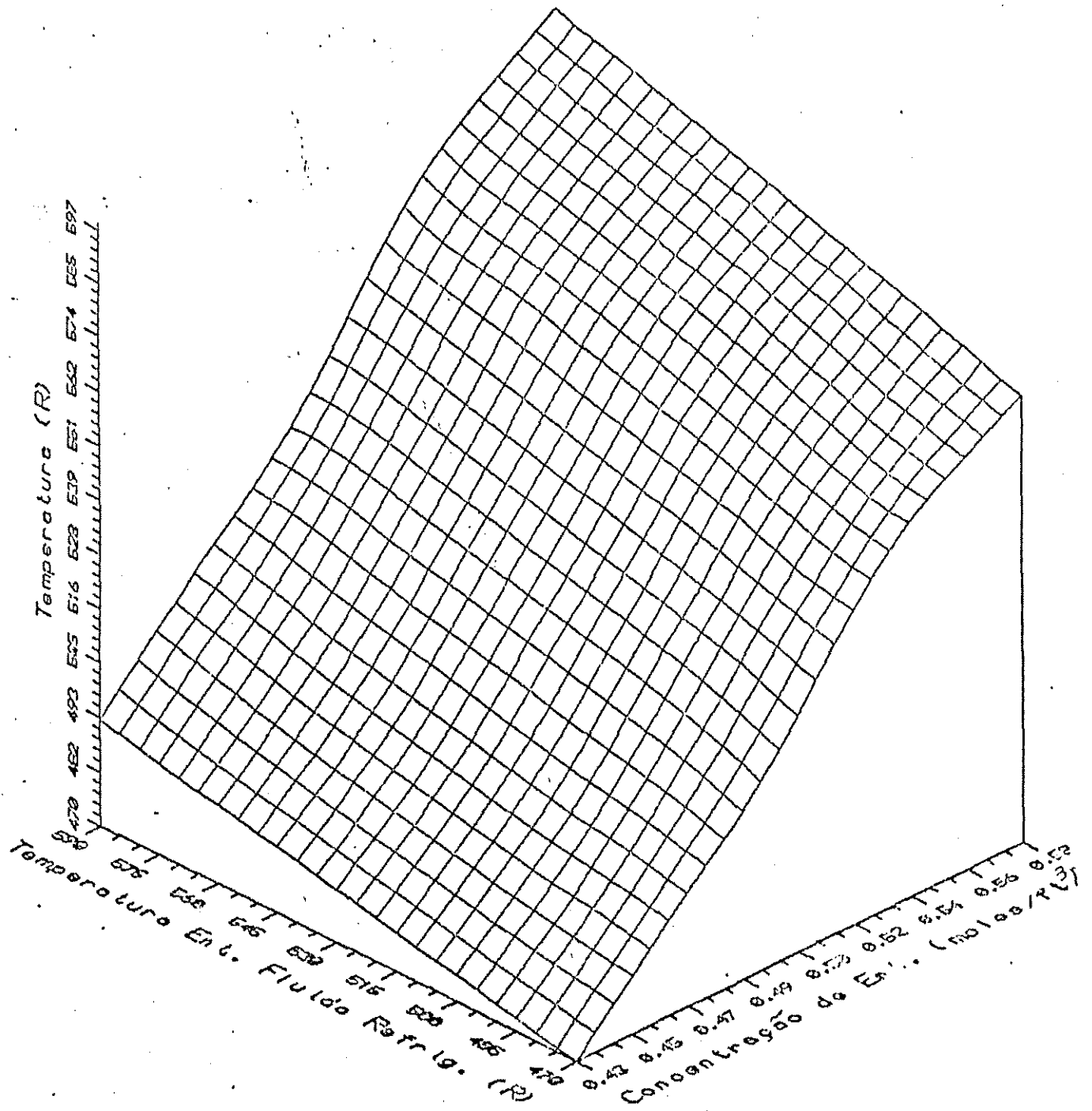


Figura 3.6. Distribuição da temperatura em função da temperatura de entrada do fluido refrigerante e concentração de entrada variando conjuntamente com a temperatura de entrada e vazão do fluido refrigerante .

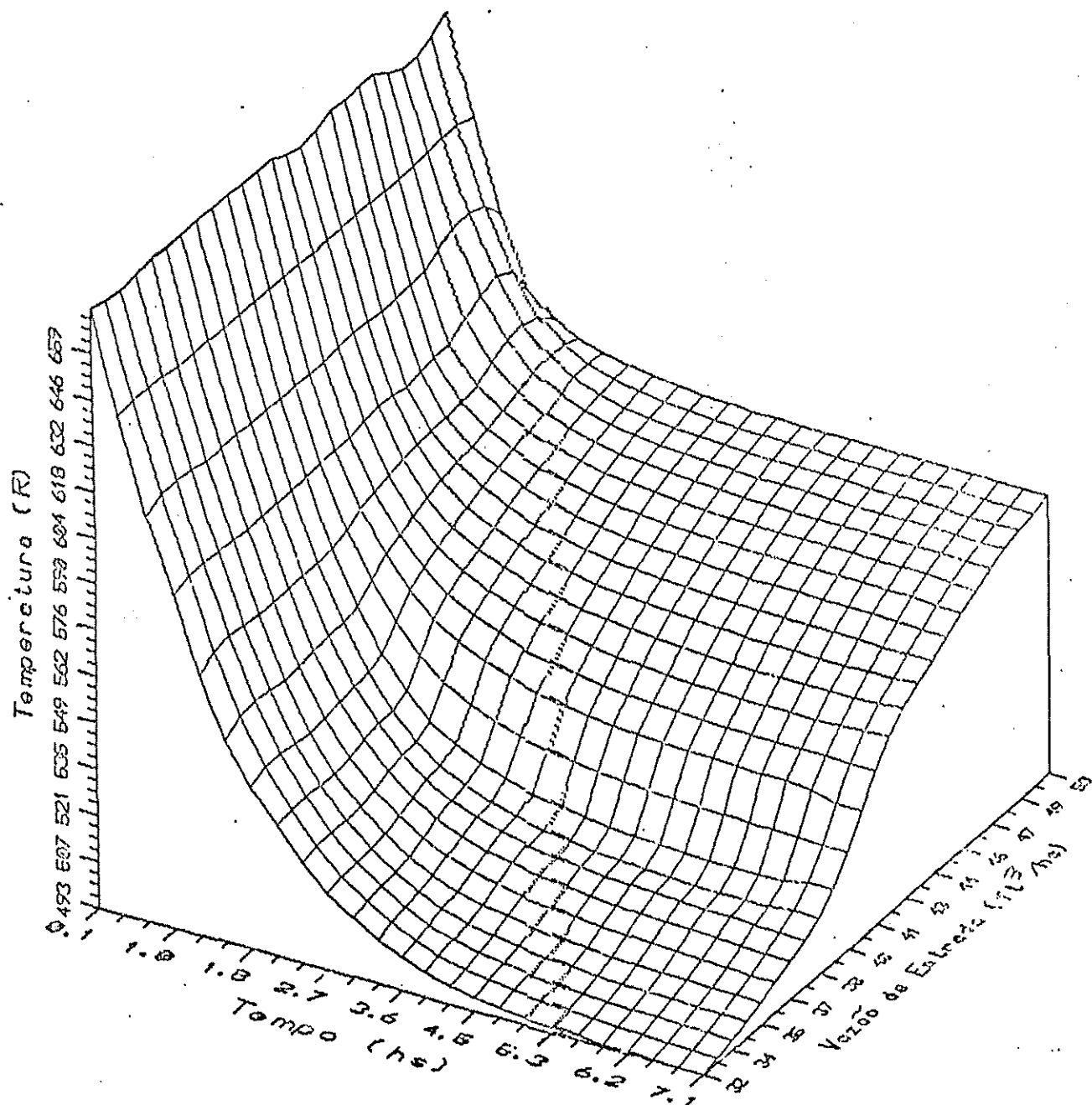


Figura 3.7. Distribuição da temperatura em função do tempo e da vazão de entrada.

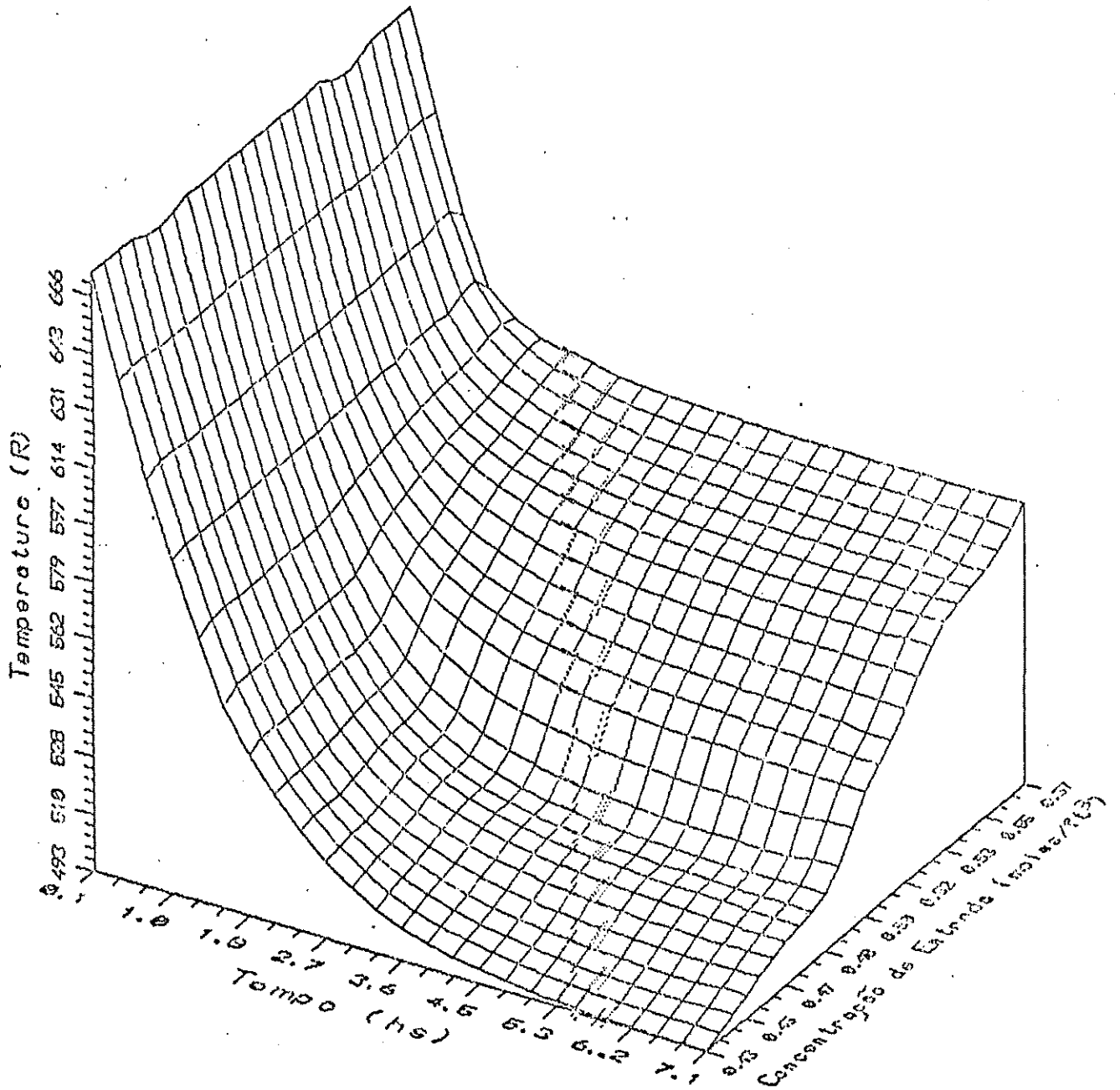


Figura 3.8. Distribuição da temperatura em função do tempo e da concentração de entrada.

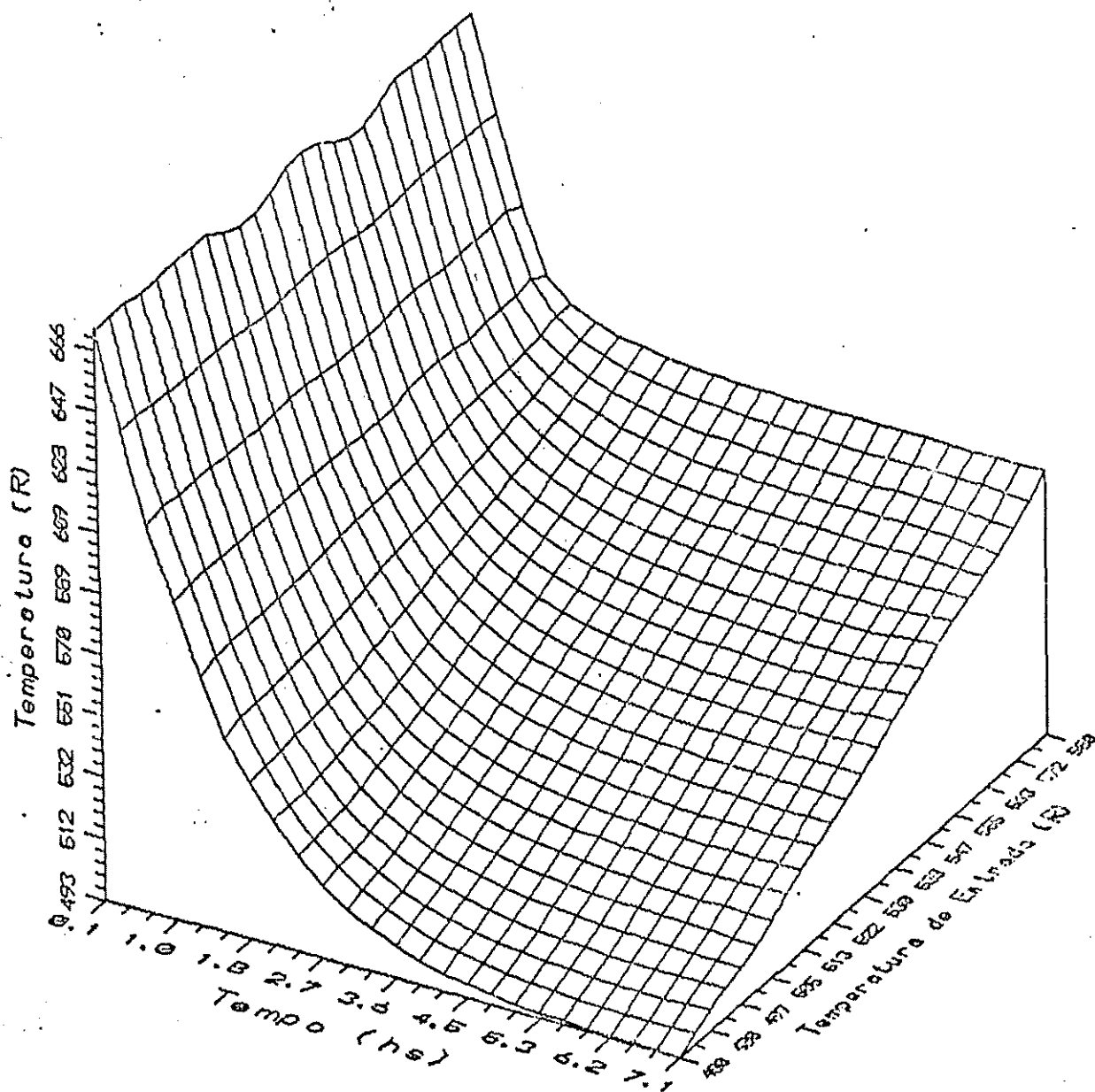


Figura 3.9. Distribuição da temperatura em função do tempo e da temperatura de entrada.

Segunda parte: análise de diferentes tipos de perturbações via curvas bidimensionais

Este tipo de análise permite observar as vantagens de se usar diferentes tipos de perturbações em diferentes variáveis de entrada, de forma simultânea.

Deve ser ressaltado que sistemas com perturbações cíclicas, além de representar melhor os sistemas reais, tem sido fonte de diversas investigações sobre caos matemático. Embora este tratamento não é feito nesta tese, é escopo para outros trabalhos.

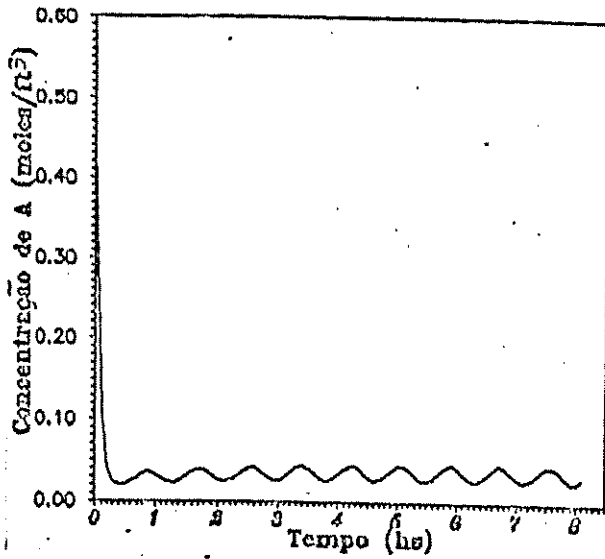
Verifica-se que a combinação de diferentes tipos de perturbações nas variações simultâneas das variáveis de entrada, fornecem perfis de concentração de A e B diferentes. Por exemplo, a figura 3.10 mostra que a combinação de perturbações do tipo degrau positivo para a concentração de entrada, cíclica para a temperatura de entrada e rampa positiva para a vazão de entrada, leva a uma formação maior do produto desejado B para um menor consumo do reagente A quando comparado a uma segunda combinação de perturbações do tipo cíclica para a concentração de entrada, rampa positiva para temperatura de entrada e degrau positivo para a vazão de entrada, mostrada na figura 3.11.

Mudando o tipo de perturbação na vazão de entrada de rampa positiva para cíclica, aumenta-se a formação do produto B no estado estacionário. Isto é mostrado pela figura 3.12 (onde tem-se perturbação degrau positivo para a concentração de entrada e cíclica para a temperatura e vazão de entrada) quando comparada com a figura 3.10 (perturbação degrau positivo para a concentração de entrada, cíclica para a temperatura de entrada e rampa positiva para a vazão de entrada).

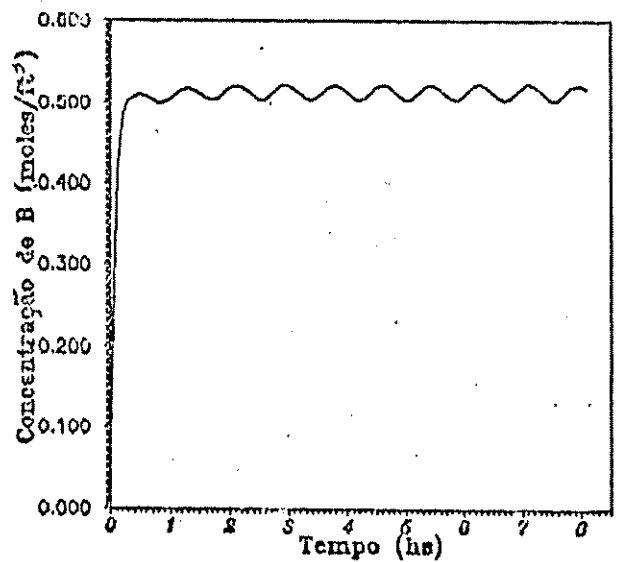
A figura 3.13 mostra que o perfil do produto B formado apresenta um ponto de máximo (no início da reação) e depois cai acentuadamente, quando são feitas perturbações do tipo cíclica na concentração de entrada, cíclica na temperatura de entrada e rampa positiva na vazão de entrada. Quando, nesta mesma combinação de

pertubações, muda-se a perturbação da temperatura de entrada, de cíclica para degrau positivo, verifica-se que a formação do produto B no estado estacionário aumenta, mas ainda permanece uma região (ponto) de concentração máxima no início da reação (figura 3.14). Trocando ainda, na mesma combinação, a perturbação da temperatura de entrada para uma perturbação rampa positiva, mantém-se a mesma formação do produto no estado estacionário, sem, no entanto, formar a região de máximo no início da curva, como mostra a figura 3.15.

Nota-se que perturbações cíclicas na temperatura de entrada do fluido refrigerante e na vazão de fluido refrigerante, provocam uma menor formação do produto B no início da reação, sendo que no regime estacionário os perfis de concentração do produto B são iguais. Isto é comprovado comparando, por exemplo, a figura 3.16 (onde tem-se uma perturbação cíclica na concentração de entrada, degrau na temperatura de entrada, cíclica na vazão e na temperatura de entrada do fluido refrigerante) com a figura 3.17 (onde não há perturbação na temperatura de entrada do fluido refrigerante, permanecendo - para concentração, temperatura e vazão de entrada - as mesmas perturbações feitas na combinação da figura 3.16). Estas comparações, embora simples, motivam saber qual as perturbações em processos simulados representam melhor os distúrbios naturais nos processos práticos.

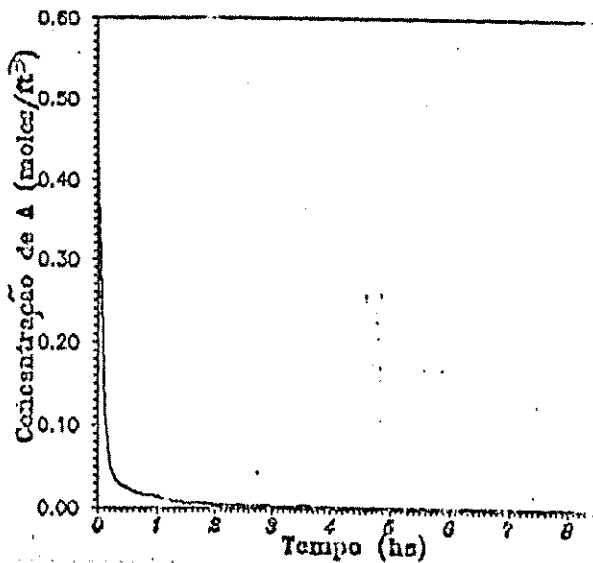


(a)

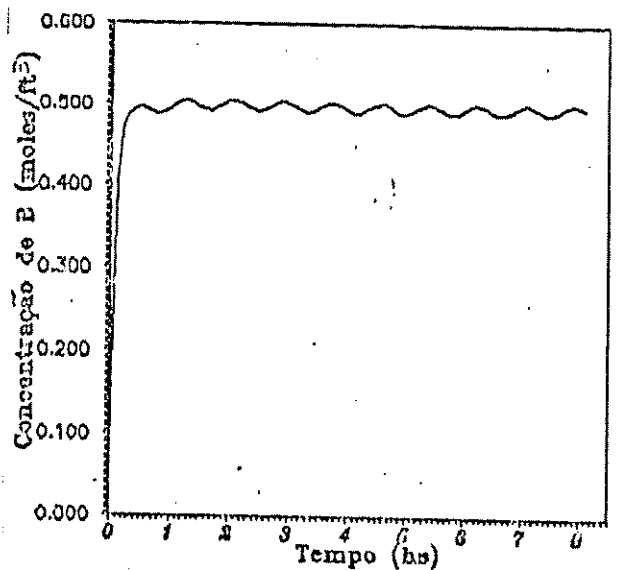


(b)

Figura 3.10. Perfis de concentração de A e B, no tempo, para uma perturbação degrau na concentração de entrada, cíclica na temperatura de entrada e rampa na vazão de entrada.



(a)



(b)

Figura 3.11. Perfis de concentração de A e B, no tempo, para uma perturbação cíclica na concentração de entrada, rampa na temperatura de entrada e degrau na vazão de entrada.

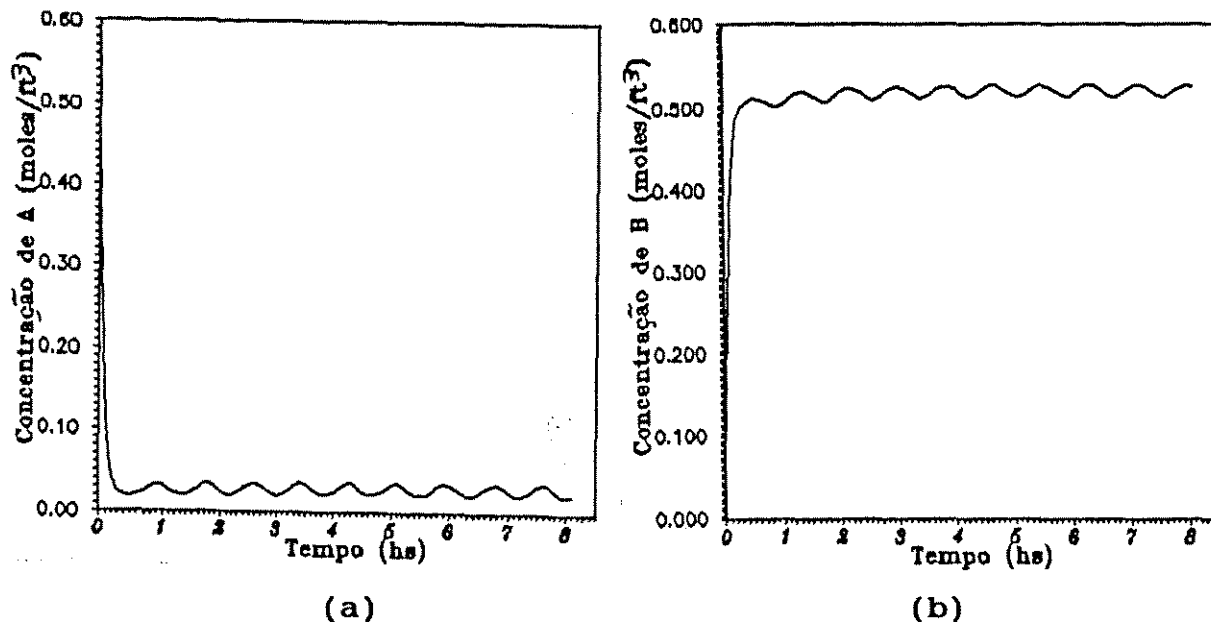


Figura 3.12. Perfis de concentração de A e B, no tempo, para uma perturbação degrau na concentração de entrada, cíclica na temperatura de entrada e cíclica na vazão de entrada.

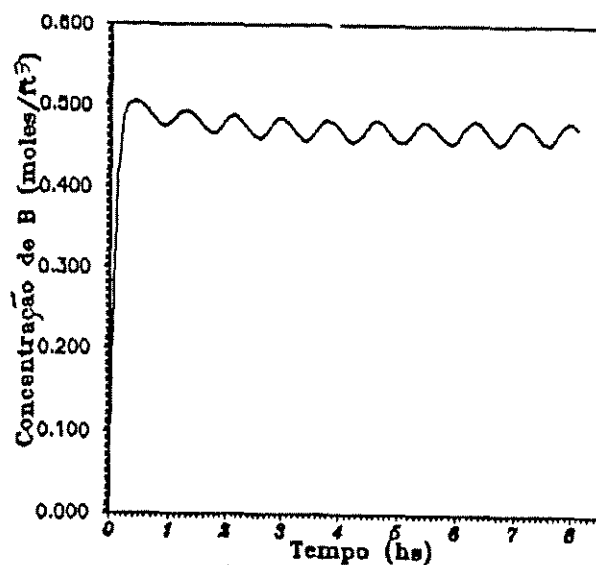


Figura 3.13. Perfil de concentração de B, no tempo, para uma perturbação cíclica na concentração de entrada, cíclica na temperatura de entrada e rampa na vazão de entrada.

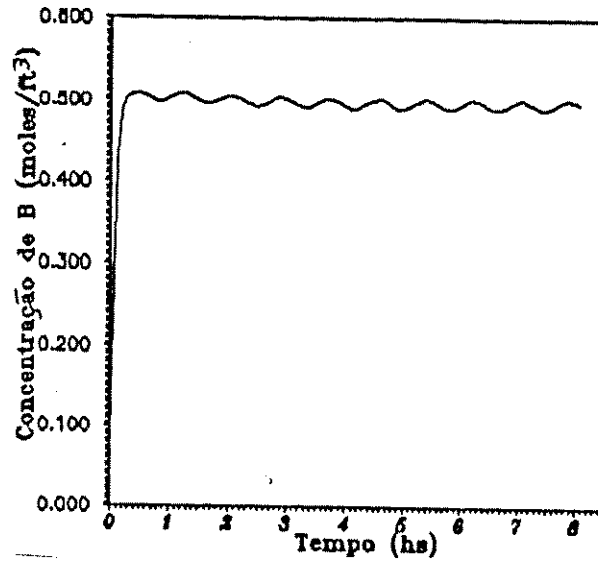


Figura 3.14. Perfil de concentração de B, no tempo, para uma perturbação cíclica na concentração de entrada, degrau na temperatura de entrada e rampa na vazão de entrada.

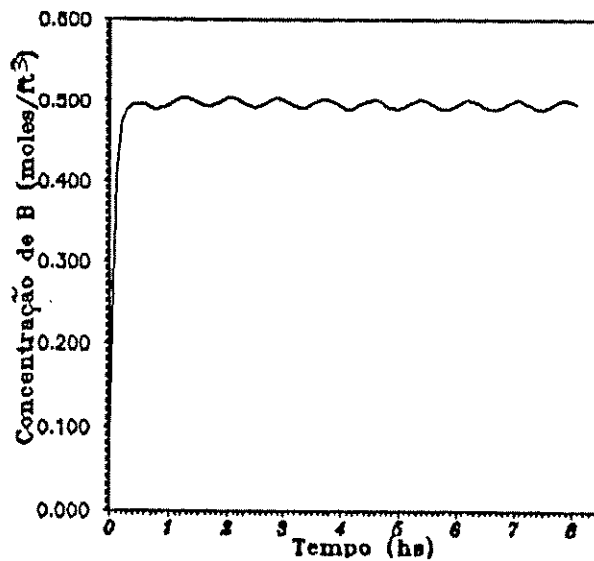


Figura 3.15. Perfil de concentração de B, no tempo, para uma perturbação na concentração de entrada, rampa na temperatura de entrada e rampa na vazão de entrada.

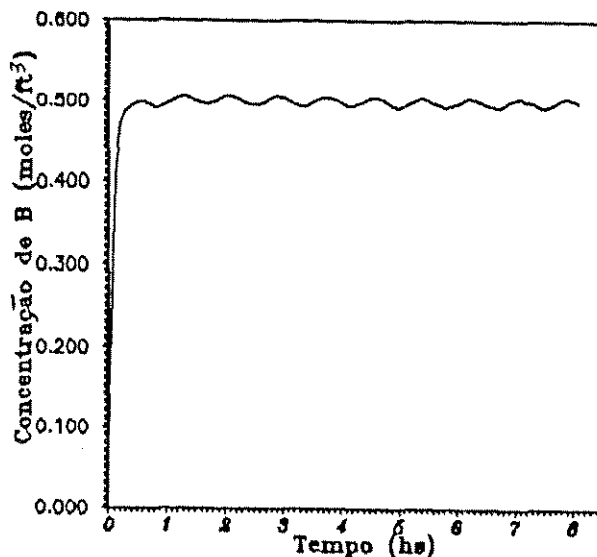


Figura 3.16. Perfil de concentração de B, no tempo, para uma perturbação cíclica na concentração de entrada, degrau na temperatura de entrada, cíclica na vazão de entrada e cíclica na temperatura do fluido refrigerante.

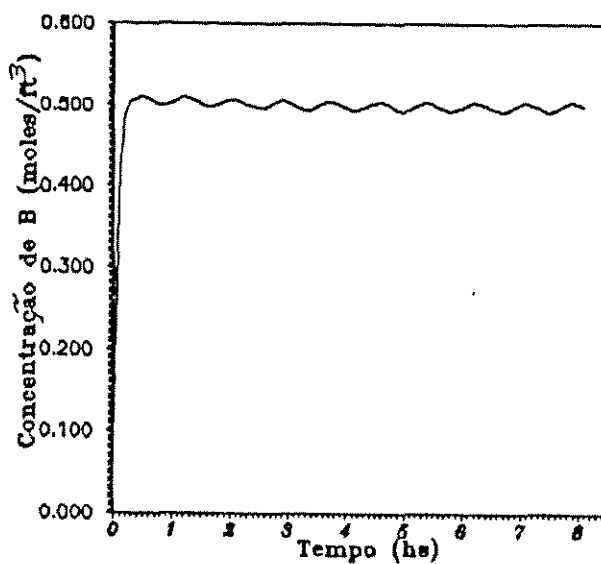


Figura 3.17. Perfil de concentração de B, no tempo, para uma perturbação cíclica na concentração de entrada, degrau na temperatura de entrada e cíclica na vazão de entrada.

3.5. Conclusões

A utilização de diagramas tridimensionais para a análise de resposta de sistemas multivariável e não linear, para variação simultânea nas variáveis de entrada, permite uma avaliação tendenciosa do comportamento dinâmico do reator.

A metodologia proposta para analisar o efeito de perturbações simultâneas nas variáveis de entrada, é conveniente para definir futuras estruturas de controle e política operacional que permita o reator CSTR operar em condições ótimas.

A operação cíclica em algumas variáveis de entrada pode oferecer benefícios para a conversão e seletividade no reator.

Com as informações sobre o comportamento dinâmico obtidas neste capítulo assim como com o modelo apresentado serão abordados, nos próximos capítulos, aspectos relativos a definição de "set-point" para operação ótima do reator (haja visto, nas curvas de superfície, que esta variável de saída é representativa do processo), estratégias e implementação de algoritmos de controle.

Capítulo 4

Obtenção de "Set-points" Ótimos para Controle

A maioria dos processos químicos têm como etapa principal transformações de massa e energia devida a várias reações químicas que ocorrem simultaneamente, e que levam à formação de diversos produtos. Normalmente, deseja-se maximizar a obtenção de um ou mais produtos enquanto que, necessariamente, outros devem ser minimizados. Isso significa encontrar condições ótimas de operação do processo que forneça o máximo de um produto em particular, uma vez que o equipamento já esteja projetado ("Retrofit").

Desta forma um dos problemas mais importantes, pertinentes a performance operacional de plantas químicas, é a avaliação do perfil de temperatura ótimo no sistema reacional. Isto consiste em encontrar um perfil de temperatura em função do tempo, com vistas a maximizar a produção de um produto desejado em relação aos produtos secundários. Este problema de otimização pode ser classificado como sendo "Otimização Dinâmica com Restrições não Lineares". Devido a solução destes problemas envolver muitas características práticas e teóricas, é interessante entender os possíveis problemas na implementação de programação não linear em processos químicos.

Como a variável controlada (temperatura do reator) é uma função ótima no tempo, as condições necessárias para um mínimo ou máximo na função objetivo podem ser desenvolvidas usando a teoria dos Multiplicadores de Lagrange (Jenson e Jeffreys, 1977). Esta teoria é empregada no método de otimização denominado de "Princípio Máximo de Pountryagin", para obter o perfil de temperatura ótimo.

Este capítulo considera este método para desenvolvimento de um procedimento aplicável para uma reação consecutiva $A \rightarrow B \rightarrow C$, com vistas a maximizar B. A reação considerada é exotérmica,

irreversível e de primeira ordem. O método é testado em dois tipos de reatores (batelada e contínuo).

Os modelos utilizados são modelos de equações que consideram apenas o balanço de massa dos componentes A e B. Implícito está portanto um projeto e um procedimento de operação que levem à isotermicidade do reator. Os elementos básicos da técnica de otimização, usada neste problema, são a função objetivo a ser maximizada (função que fornece a formação do produto intermediário B) e as restrições de igualdade (equações diferenciais ordinárias para os componentes A e B). Esta técnica não associa restrições de desigualdades ou limites operacionais das variáveis. É escopo empregar técnicas de otimização em tempo real baseada e Programação Quadrática como a "Successive Quadratic Programming" (SQP) para resolver este tipo de problema.

Neste capítulo será apresentado um procedimento para obter um perfil ótimo de temperatura em função do tempo, de forma a maximizar a produção de B na saída do reator, quando houver uma perturbação na variável de entrada C_{A0} .

4.1. Teoria de Otimização

Em problemas de otimização deseja-se maximizar ou minimizar uma função, denominada Função Objetivo.

Na formulação do problema surgem as restrições, que são funções envolvendo as variáveis relacionadas a função objetivo.

Basicamente, as restrições são devidas a:

- . leis físicas da natureza
- . limitações econômicas
- . limitações operacionais
- . outros fatores

A função objetivo pode ser linear ou não linear. As restrições podem estar na forma de equações algébricas de igualdade e desigualdade, equações diferenciais ordinárias e limites inferiores e superiores impostos nas variáveis (Edgar e Himmelblau, 1989).

O problema de otimização tratado neste trabalho é de otimização dinâmica não linear com restrições não lineares, que pode ser classificado como um problema de programação não linear.

As quatro principais maneiras de solucionar o problema de programação não linear com restrições, conforme Edgar e Himmelblau, são:

- 1 método Multiplicador de Lagrange
- 2 método de Linearização Iterativa
- 3 Programação Quadrática Iterativa
- 4 métodos de função "Penalty"

Uma maneira muito conveniente para solucionar o problema considerado neste trabalho é o "método Multiplicador de Lagrange", que é abordado, de uma forma genérica, a seguir.

Considere o problema envolvendo duas variáveis e uma restrição de igualdade.

O problema pode ser formulado da seguinte forma:

- minimizar a função

$$f(x_1, x_2) \quad (4.1)$$

sujeita a

$$h(x_1, x_2) = C \quad (C \text{ é constante})$$

isto é

$$h(x_1, x_2) - C = 0 \quad (4.2)$$

Para o caso da otimização com restrições é necessário que as duas condições seguintes sejam consideradas simultaneamente:

$$df = 0 = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 \quad (4.3)$$

$$dh = 0 = \frac{\partial h}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial h}{\partial x_2} dx_2 \quad (4.4)$$

Se $f(x_1, x_2)$ fosse uma função sem restrições, ambas derivadas parciais seriam zero ($\frac{\partial f}{\partial x_1} = 0$ e $\frac{\partial f}{\partial x_2} = 0$) no ponto ótimo. No

entanto, x_1 e x_2 sofrem restrições (dx_1 e dx_2 não são independentes), não podendo, portanto, atribuir zero às derivadas parciais de $f(x)$. Entretanto, $f(x)$ deve ser um extremo no ponto ótimo, $df(x) = 0$. A segunda condição, $dh(x) = 0$, existe porque as restrições $h(x_1, x_2)$ foram assumidas serem iguais a uma constante.

As equações 4.3 e 4.4 mostram que dx_1 e dx_2 são perturbações diferenciais do ponto ótimo x_1^* e x_2^* . Reescrevendo-as na forma de duas equações em duas variáveis desconhecidas tem-se

$$a_{11}dx_1 + a_{12}dx_2 = 0 \quad (4.5)$$

$$a_{21}dx_1 + a_{22}dx_2 = 0 \quad (4.6)$$

Devido ao lado direito de ambas as equações ser zero, a solução trivial ($dx_1 = dx_2 = 0$) ou não-trivial (não-única) pode ser escolhida. Para a solução não trivial existir o determinante da matriz (a_{ij}) deve ser zero, ou seja

$$a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} = 0 \quad (4.7)$$

Expressando esta condição acima na forma

$$\frac{a_{11}}{a_{21}} = \frac{a_{12}}{a_{22}} \quad \text{OU} \quad \frac{a_{11}}{a_{12}} = \frac{a_{21}}{a_{22}} \quad (4.8)$$

chega-se a

$$a_{11} = \omega a_{21} \quad \text{e} \quad a_{12} = \omega a_{22} \quad (4.9)$$

onde ω (denominado de Multiplicador de Lagrange) é um parâmetro que expressa as derivadas parciais de $f(\mathbf{x})$ e $h(\mathbf{x})$. Fazendo uma adição na função objetivo tem-se uma nova definição, denominada Lagrangeana, escrita como

$$L(\mathbf{x}, \omega) = f(\mathbf{x}) + \omega h(\mathbf{x}) \quad (4.10)$$

Esta nova equação pode ser escrita na seguinte forma (para duas variáveis x_1 e x_2):

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} + \omega \frac{\partial h}{\partial x_1} = \frac{\partial L}{\partial x_1} = 0 \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} + \omega \frac{\partial h}{\partial x_2} = \frac{\partial L}{\partial x_2} = 0 \quad (4.12)$$

As expressões 4.11 e 4.12 descrevem o ótimo, não tendo a inclusão explícita do efeito das restrições. Entretanto, na adição das condições necessárias para uma restrição ótima, a seguinte equação deve ser garantida:

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}, \omega)}{\partial \omega} = h(\mathbf{x}) = 0 \quad (4.13)$$

Assim, o procedimento usando os Multiplicadores de Lagrange para encontrar um ponto ótimo requer que a variável adicional w seja definida, assim como o Lagrangeano.

A teoria de Multiplicadores de Lagrange pode ser estendida para problemas de otimização com restrições envolvendo mais de duas variáveis (Edgar e Himmelblaw, 1989).

4.2. Abordagem de Solução

Considera-se o seguinte modelo de equações para representar as reações químicas que ocorrem em reatores batelada ou contínuos, tendo um tempo de residência t_r :

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n, T) \quad (4.14)$$

e uma função objetivo a ser otimizada do tipo:

$$I = \int_0^{t_r} f_0(x_1, x_2, \dots, x_n, T) \quad (4.15)$$

A solução deste conjunto de equações permite obter o perfil de temperatura ótimo para o tempo variando de 0 a t_r .

O método de solução empregado baseia-se naquele proposto por Katz (Katz, 1960), e o seguinte algoritmo de cálculo pode ser formulado (Jenson, 1977):

Assume-se x_0 , um componente hipotético, tal que

$$\frac{dx_0}{dt} = f_0 \quad x_0 = 0 \quad (4.16)$$

Introduz-se, por definição, as variáveis Multiplicadores de Lagrange no tempo, dadas como:

$$J = \int_0^{t_f} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i dt \quad (4.17)$$

com as seguintes condições:

$$\text{Para } t = t_f \quad \lambda_0 = 1$$

$$\text{Para } t = t_f \quad \lambda_i = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n$$

Integrando a equação 4.17, tem-se:

$$J = \sum_{i=0}^n \lambda_i x_i \Big|_{t=t_f} - \sum_{i=0}^n \lambda_i x_i \Big|_{t=0} = 0 - \sum_{i=0}^n \lambda_i(0) x_i(0) \quad (4.18)$$

ou com as equações 4.15 e 4.16, a equação 4.18 torna-se:

$$J - I = - \sum_{i=0}^n \lambda_i(0) x_i(0) = \text{constante} \quad (4.19)$$

(J - I) é uma constante para qualquer conjunto específico de condições iniciais em problemas de reação. Entretanto a maximização de J irá maximizar I, e aqui propõe-se maximizar J.

Aplica-se uma perturbação na temperatura, em qualquer t, do tipo

$$\delta T = T_* - T_i = \epsilon \phi(t) \quad (4.20)$$

de forma que uma correspondente variação nas composições do tipo

$$\delta x_i = x_i^* - x_i = \epsilon \mu_i(t) \quad (4.21)$$

ocorra, onde ϵ é uma constante pequena, $\phi(t)$ e $\mu_i(t)$ são funções contínuas do tempo. A variação em J será δJ e

$$\delta J = \epsilon \int_0^{t_f} \frac{d}{dt} \sum_{i=0}^n \lambda_i \mu_i dt \quad (4.22)$$

desde que os Multiplicadores sejam independentes da temperatura. Das equações 4.14, 4.20 e 4.21 chega-se a

$$\frac{dx_i^*}{dt} = \frac{dx_i}{dt} + \epsilon \frac{d\mu_i}{dt} = \epsilon \sum_{j=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \mu_j + \epsilon \frac{\partial f_i}{\partial T} \phi + f_i \quad (4.23)$$

Por expansão de $f_i[(x_j + \epsilon \mu_j) \dots (T + \epsilon \phi)]$ usando o teorema de Taylor (Apêndice B) e tomando somente os primeiros termos da equação 4.23 obtém-se

$$\frac{d\mu_i}{dt} = \sum_{j=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \mu_j + \frac{\partial f_i}{\partial T} \phi \quad (4.24)$$

Expandindo a equação 4.22, tem-se

$$\begin{aligned}
\delta J &= \epsilon \int_0^{t_f} \frac{d}{dt} (\lambda_0 \mu_0 + \lambda_1 \mu_1 + \dots + \lambda_n \mu_n) dt \\
&= \epsilon \int_0^{t_f} [(\lambda_0 \frac{d\mu_0}{dt} + \mu_0 \frac{d\lambda_0}{dt}) + \dots + (\lambda_n \frac{d\mu_n}{dt} + \mu_n \frac{d\lambda_n}{dt})] dt \\
\therefore \\
\delta J &= \epsilon \int_0^{t_f} (\sum_{i=0}^n \lambda_i \frac{d\mu_i}{dt} + \sum_{i=0}^n \mu_i \frac{d\lambda_i}{dt}) dt
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Substituindo a equação 4.24 em 4.25 resulta em

$$\delta J = \epsilon \int_0^{t_f} [\sum_{j=0}^n \sum_{i=0}^n \lambda_i \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \mu_j + \phi \sum_{i=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial T} \lambda_i + \sum_{i=0}^n \mu_i \frac{d\lambda_i}{dt}] dt \tag{4.26}$$

Restringindo os Multiplicadores λ_i para as funções que satisfazem o conjunto de equações diferenciais acopladas (eq. 4.14), obtém-se a seguinte relação - que é a definição de condição de contorno para operadores de Lagrange -

$$\frac{d\lambda_j}{dt} = - \sum_{i=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \lambda_i \tag{4.27}$$

Substituindo a condição de contorno acima na eq. 4.26, chega-se a:

$$\delta J = \epsilon \int_0^{t_f} \phi (\sum_{i=0}^n \lambda_i \frac{\partial f_i}{\partial T}) dt = 0 \tag{4.28}$$

Desde que $\delta J = 0$ para toda função arbitrária ϕ , conclui-se que

$$\sum_{i=0}^n \lambda_i \frac{\partial f_i}{\partial T} = 0 \quad 0 \leq t \leq t_f \quad (4.28)$$

e resulta que o perfil de temperatura, que é necessário para que a integral

$$I = \int_0^{t_f} f_0 dt \quad (4.30)$$

seja máxima, é aquele que satisfaz a equação 4.29, onde λ_i são definidos para os componentes da reação x_i pelas equações

$$\frac{d\lambda_j}{dt} = - \sum_{i=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \lambda_j \quad (4.31)$$

que são conhecidas como as "Funções Adjuntas" do problema para as condições de contorno

$$x_i = \text{conhecidas para } i = 1, 2, 3, \dots, n$$

$$x_0 = 0$$

$$\lambda_0 = 1$$

$$\lambda_i = 0 \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \dots, n$$

A equação 4.29 e as funções adjuntas são necessárias, mas não suficientes para a função objetivo ser ótima. Supõe-se que haja um número de raízes possíveis na equação 4.29, sendo então possíveis diversas temperaturas ótimas em intervalos de tempo específicos durante o curso da reação. Alternativamente, na equação 4.29 é possível que as restrições da temperatura da reação previnam a operação do processo no ótimo verdadeiro. Em tais casos, a melhor escolha da temperatura pode ser feita através do uso do chamado "Princípio Máximo de Poutryagin", o qual pode ser colocado como a

seguir.

A função Hamiltoniana H expressa na forma

$$H = f_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i f_i \quad (4.32)$$

deve ser máxima para que o valor de uma variável independente forneça uma função objetivo máxima. Por outro lado, o Hamiltoniano deve ser mínimo se a função objetivo for mínima.

Considerando a somatória no Hamiltoniano, faz-se a derivada

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n \lambda_i f_i = \sum_{i=1}^n \lambda_i \frac{df_i}{dt} + \sum_{i=1}^n f_i \frac{d\lambda_i}{dt} \quad (4.33)$$

onde

$$\frac{df_i}{dt} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} + \frac{\partial f_i}{\partial T} \frac{dT}{dt} \quad (4.34)$$

Introduzindo a equação 4.34 na equação 4.33, tem-se

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n \lambda_i f_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \frac{\partial f_i}{\partial T} \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^n \frac{dx_i}{dt} \frac{d\lambda_i}{dt}$$

onde

$$f_i = \frac{dx_i}{dt}$$

A introdução das equações 4.27 e 4.29 na equação 4.35 resulta em

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n \lambda_i f_i = 0 \quad (4.36)$$

A integração da equação 4.36 leva a

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i f_i = \text{constante} \quad (4.37)$$

e desde que f_0 também seja uma constante no ponto ótimo, o Hamiltoniano também o será.

4.3. Aplicação do Método de Solução

É mostrado abaixo o método de otimização aplicado ao modelo do reator CSTR isotérmico, considerando mistura perfeita.

As equações do modelo válidas em qualquer ponto do reator isotérmico são

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V}(C_{A0} - C_A) - k_1 C_A = f_1 \quad (4.38)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{F}{V}(C_{B0} - C_B) + k_1 C_A - k_2 C_B = f_2 \quad (4.39)$$

Como reator é isotérmico, o balanço de energia será escrito de uma forma modificada (ver equação 4.57) de forma a fornecer as informações necessárias para manter o reator sob esta condição de operação. As constantes cinéticas da taxa da reação variam com a temperatura conforme a Lei de Arrhenius.

Como o objetivo é maximizar a produção do componente B, então $C_B(t_f)$ deve ser máximo ao longo do tempo em todo o reator. A função objetivo torna-se

$$I = C_B(t_f) - C_B(0) = \int_0^{t_f} \frac{dC_B}{dt} dt = f_2 dt \quad (4.40)$$

onde t_f é o tempo de simulação da reação.

As funções adjuntas, a seguir, surgem da equação 4.31:

$$\frac{d\lambda_j}{dt} = - \sum_{i=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \lambda_i \quad (4.41)$$

ou

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = - \frac{\partial f_0}{\partial C_A} - \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_j}{\partial C_A} \lambda_j \quad (4.42)$$

e

$$\frac{d\lambda_2}{dt} = - \frac{\partial f_0}{\partial C_B} - \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_j}{\partial C_B} \lambda_j \quad (4.43)$$

onde, neste problema, $f_0(C_A, C_B, T) = f_2$. As derivadas parciais envolvidas nas equações acima são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial C_A} &= k_1 & ; & & \frac{\partial f_1}{\partial C_A} \lambda_1 &= - \left(\frac{F}{V} + k_1 \right) \lambda_1 & ; & & \frac{\partial f_2}{\partial C_A} \lambda_2 &= k_1 \lambda_2 \\ \frac{\partial f_0}{\partial C_B} &= - \left(\frac{F}{V} + k_2 \right) & ; & & \frac{\partial f_1}{\partial C_B} \lambda_1 &= 0 & ; & & \frac{\partial f_2}{\partial C_B} \lambda_2 &= - \left(\frac{F}{V} + k_2 \right) \lambda_2 \end{aligned}$$

que substituídas nas equações 4.42 e 4.43, levam a

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = \left(\frac{F}{V} + k_1 \right) \lambda_1 - (1 + \lambda_2) k_1 \quad (4.44)$$

$$\frac{d\lambda_2}{dt} = \left(\frac{F}{V} + k_2 \right) (1 + \lambda_2) \quad (4.45)$$

A aplicação da técnica permite definir uma temperatura que maximize o Hamiltoniano (H):

$$H = f_0 + \sum_{i=1}^n f_i \lambda_i \quad (4.46)$$

Derivando H em relação a temperatura, chega-se a:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial T} + \frac{\partial}{\partial T} \sum_{i=1}^n f_i \lambda_i \quad (4.49)$$

onde

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{\partial k_1}{\partial T} C_A - \frac{\partial k_2}{\partial T} C_B \quad (4.48)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{k_{10} C_A E_1}{RT^2} \exp(-E_1/RT) - \frac{k_{20} C_B E_2}{RT^2} \exp(-E_2/RT) \quad (4.49)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial T} \lambda_1 = - \frac{k_{10} C_A E_1 \lambda_1}{RT^2} \exp(-E_1/RT) \quad (4.50)$$

Com uma expressão similar para $\frac{\partial f_2}{\partial T} \lambda_2$, chega-se a:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{1}{RT^2} [1 + \lambda_2 - \lambda_1) k_1 C_A E_1 - (1 + \lambda_2) k_2 C_B E_2] \quad (4.51)$$

e fazendo $\bar{\lambda}_2 = \lambda_2 + 1$, as equações do problema de otimização podem ser colocadas como:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V}(C_{A0} - C_A) - k_1 C_A \quad (4.52)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{F}{V}(C_{B0} - C_B) + k_1 C_A - k_2 C_B \quad (4.53)$$

$$\frac{d\lambda_1}{dt} = \left(\frac{F}{V} + k_1\right)\lambda_1 - k_2 \bar{\lambda}_2 \quad (4.54)$$

$$\frac{d\lambda_2}{dt} = \left(\frac{F}{V} + k_2\right)\bar{\lambda}_2 \quad (4.55)$$

tendo as seguintes condições iniciais e finais:

$$\begin{array}{lll} C_A = C_{As} = 0,416, & C_B = C_{Bs} = 0,0836 & \text{para } t = 0 \\ \lambda_1 = 0, & \lambda_2 = 1 & \text{para } t = t_f \end{array}$$

O perfil ótimo de temperatura ao longo do tempo deve maximizar o Hamiltoniano ou satisfazer a derivada:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{1}{RT^2} [(\bar{\lambda}_2 - \lambda_1)k_1 C_A E_1 - \bar{\lambda}_2 k_2 C_B E_2] \quad (4.56)$$

Há diversas formas para resolver o sistema de equações acima. A forma proposta e utilizada neste trabalho é ilustrada no diagrama

de fluxos mostrado na figura 4.1. Um algoritmo de cálculo baseado no método Runge-Kutta de quarta ordem é usado duas vezes, onde são integradas as equações 4.52 e 4.53 de 0 a t_x , e novamente as equações 4.54 e 4.55 de t_x a 0. Este procedimento de cálculo com integração em direções opostas é característica inerente deste método de otimização e requer cuidados na escolha do algoritmo de solução, assim como o passo de integração. Estes perfis são armazenados para então sim serem usadas pelo método a cada valor de t para ajustar a temperatura com o incremento do gradiente do Hamiltoniano, através da relação:

$$T_{NEW} = T_{OLD} + \alpha \frac{\partial H}{\partial T} \quad (4.57)$$

onde α é um valor escalar arbitrário denominado "Passo de Otimização". Evidentemente, se o valor em torno de H é encontrado, dH/dT será zero e o perfil de temperatura ótimo terá sido encontrado.

A relação seguinte fornece o comportamento da variável manipulada vazão de fluido refrigerante, que surge de uma equação diferencial ordinária oriunda do balanço energético para o fluido refrigerante,

$$F_J = \frac{UA(T - T_J)}{\rho_J C_{PJ}(T_{J0} - T_J)} \quad (4.58)$$

sendo Q_c o calor liberado pela reação química dado por

$$Q_C = \Delta H_1 k_1 C_A + \Delta H_2 k_2 C_B \quad (4.59)$$

onde ΔH_1 e ΔH_2 são os calores da reação.

Os seguintes valores foram usados na simulação do programa montado com base na figura 4.1 para obter os perfis de temperatura ótimos, concentrações de A e B e vazão de fluido refrigerante com o tempo

$$C_{A0} = 0,5 \text{ mol/ft}^3$$

$$k_{10} = 1,30 \times 10^{13} \text{ h}^{-1}$$

$$k_{20} = 2,88 \times 10^9 \text{ h}^{-1}$$

$$t_f = 8 \text{ h}$$

$$C_{B0} = 0,0 \text{ mol/ft}^3$$

$$E_1 = 35000 \text{ BTU/mol}$$

$$E_2 = 33000 \text{ BTU/mol}$$

$$\alpha = 0,2 \times 10^1$$

Inicialmente assumiu-se o perfil de temperatura igual a 550 R, valor este obtido através de simulação.

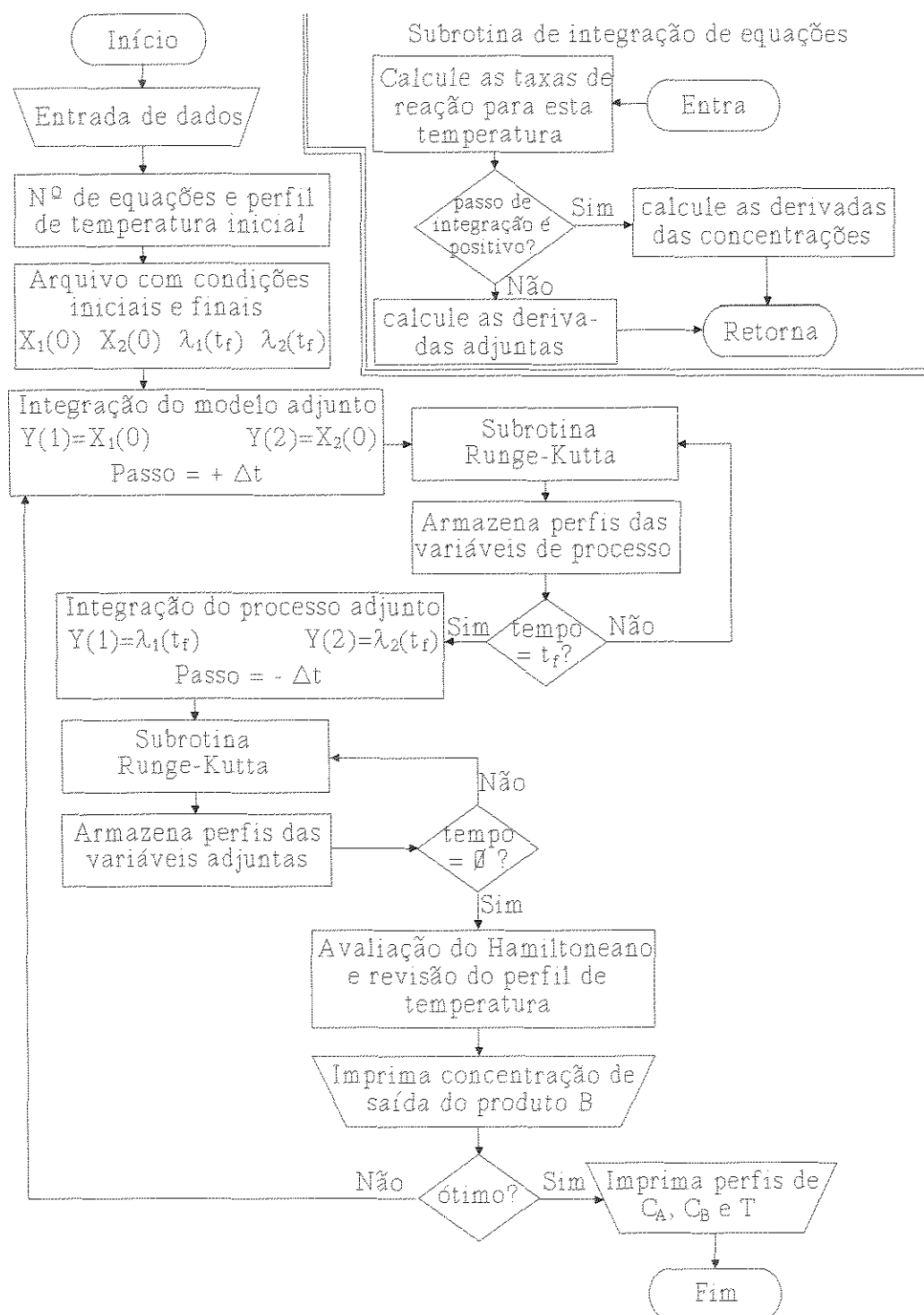


Figura 4.1. Diagrama de blocos para o algoritmo de otimização

4.4. Resultados e Discussões

4.4.1. Reator CSTR

Os resultados apresentados neste item referem-se a aplicação do método a reatores contínuos descrita no item 4.4. São mostrados resultados para três casos. O que difere um caso do outro é a temperatura limite que o reator pode atingir (T_{MAX}).

Conforme já citado no objetivo deste capítulo, a idéia é, usando o método, manter a formação do produto B, se possível, no mesmo "set-point" quando for feita uma perturbação na variável de entrada C_{Ao} , manipulando a vazão do fluido refrigerante. A escolha dessa variável como manipulada é devida a sua importância industrial e a facilidade de implementação na prática. No entanto, verificou-se por uma série de restrições que o método não oferece bons resultados quando usado em reatores contínuos. Deve ser ressaltado que o projeto do reator e a definição das condições de operação são tais que o sistema opera em zonas de instabilidades. Isto pode ser obtido com significantes diferenças na geração e remoção de calor do processo.

Constatou-se que o método tende a bons resultados de convergência somente quando usa-se um perfil de temperatura inicial igual a 550 R (valor da temperatura no estado estacionário), para um tempo de simulação da reação maior ou igual a oito horas. Quando este tempo é menor, o método diverge.

Verifica-se que certos cuidados devem ser tomados com a estimativa inicial do perfil de temperatura. Se o valor da estimativa inicial for menor que o valor da temperatura no estado estacionário, dificilmente o método convergirá, salvo se um tempo de simulação da reação bem maior do que oito horas for utilizado. Isto em termos práticos significa dizer que o reator requer um tempo excessivamente longo para atingir as condições desejadas. Estas observações foram também verificadas por Ponnuswamy (1984), em tese de doutorado sobre controle de reatores de polimerização

batelada.

As figuras 4.2 e 4.3 mostram o comportamento das variáveis quando não se impõe um limite para a temperatura do reator. A figura 4.3 mostra a máxima temperatura permitida no reator no início da reação ($T = 765 \text{ R}$) sem que as constantes da taxa assumam valores incompatíveis com a prática. A figura 4.2 mostra que a concentração do produto B (variável controlada) não atinge o "set-point", no qual deseja-se controlar. Para que a variável C_B atinja o "set-point" desejado, é necessário que se imponha um limite máximo para a temperatura do reator. Com isso, o perfil de temperatura no final do tempo de reação vai aumentando até que o valor de C_B alcance o valor do "set-point". Isto mostra que o procedimento proposto é importante para a definição de políticas operacionais e de controle.

Fêz-se um estudo de vários casos procurando um valor adequado para o limite imposto na temperatura do reator, e verificando-se que, no decorrer da reação, para valores mais altos e próximos da temperatura máxima permitida ($T_{\text{MAX}} = 765 \text{ R}$, figura 4.3), as constantes cinéticas assumem valores muito altos, incompatíveis com a reação química. Resultados satisfatórios foram obtidos utilizando temperaturas limites na faixa entre 600 e 650 R.

A figura 4.5 mostra o perfil de temperatura quando utiliza-se um valor limite para a temperatura do reator igual a 650 R. O comportamento das variáveis de concentração C_A e C_B está mostrado na figura 4.4, bem como o comportamento da variável manipulada F_J está mostrado na figura 4.6.

A figura 4.8 mostra o perfil de temperatura quando utiliza-se um valor limite para a temperatura do reator igual a 600 R. O comportamento das variáveis de concentração C_A e C_B , e a variável manipulada F_J estão mostrados nas figuras 4.7 e 4.9, respectivamente.

Comparando as figuras 4.4 e 4.5 com 4.7 e 4.8, respectivamente, observa-se que mantendo a temperatura do reator no limite máximo igual a 650 R o regime estacionário será atingido ligeiramente mais rápido na variável controlada C_B . O procedimento

proposto é portanto útil para avaliar as possibilidades de operação nas várias condições de entrada do reator. A aplicação desta técnica também pode ser estendida para definição de políticas de "start-up" e "shut-down".

Na equação 4.57, que fornece o perfil de temperatura ótimo, aparece o parâmetro escalar α (Passo de Otimização), que corresponde ao tamanho do passo de procura do ponto ótimo. Na literatura (Ray, 1981) existem algoritmos para obter um valor inicial para α . No entanto, estes algoritmos são para casos de modelos de processos lineares. Como o modelo do processo usado neste trabalho não é linear, a tentativa de aplicar um destes algoritmos para obter uma estimativa inicial de α não alcançou êxito. Dessa forma, para descobrir qual o melhor valor de α a ser usado, fez-se várias simulações do algoritmo de otimização com diversos valores de α , para obter o valor α mais adequado.

Diante da falta de convergência do método aplicado a reatores contínuos, aplicado para a reação química nas condições específicas desta tese, decidiu-se empregar o método (para a mesma reação química) em um reator batelada, uma vez que este método aplicado a este tipo de reator com uma cinética específica (Jenson e Jefreys, 1977) apresenta excelentes resultados de convergência.

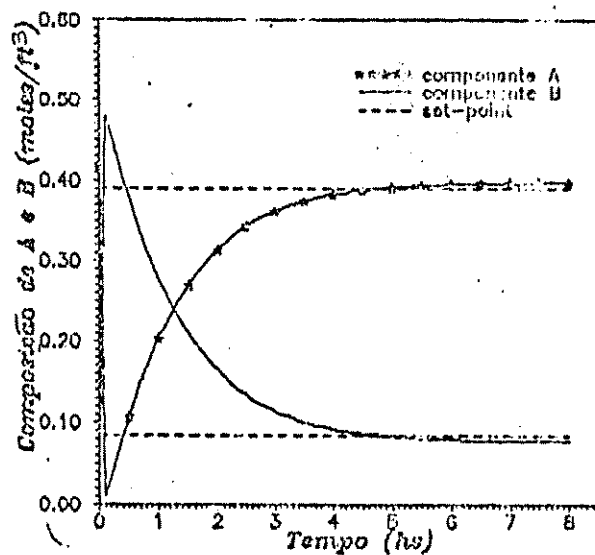


Figura 4.2. Perfis de concentração de A e B no tempo.

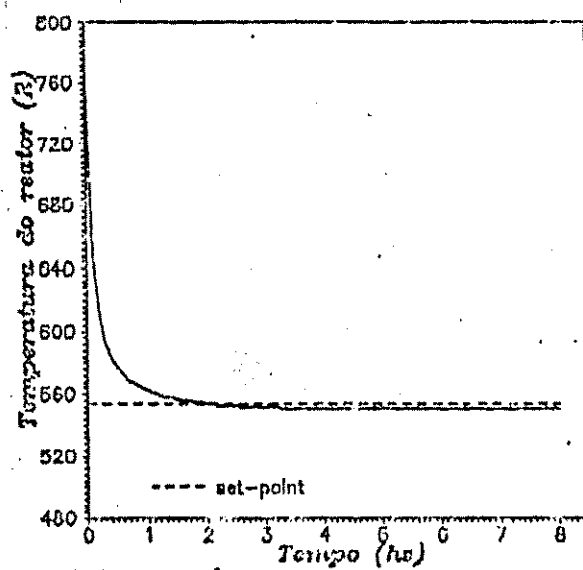


Figura 4.3. Perfil de temperatura no tempo.

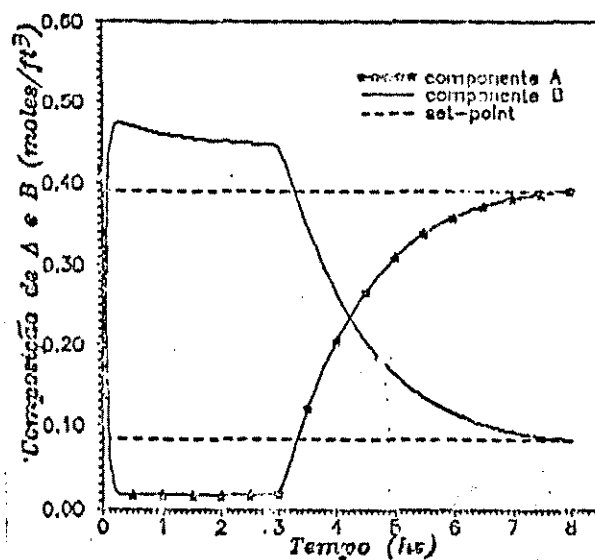


Figura 4.4. Perfis de concentração de A e B no tempo.

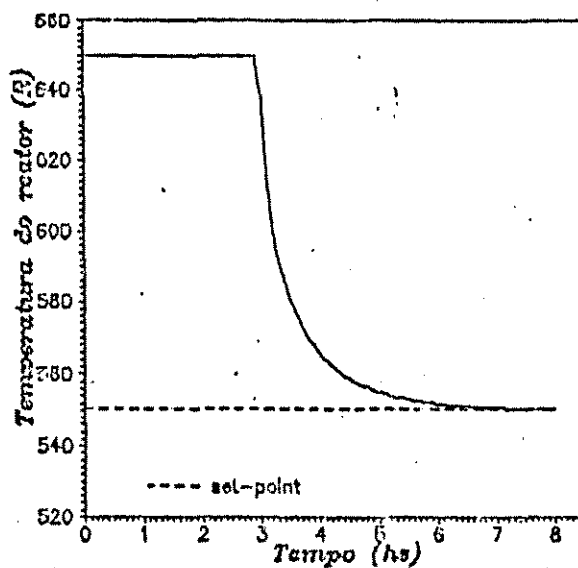


Figura 4.5. Perfil de temperatura no tempo.

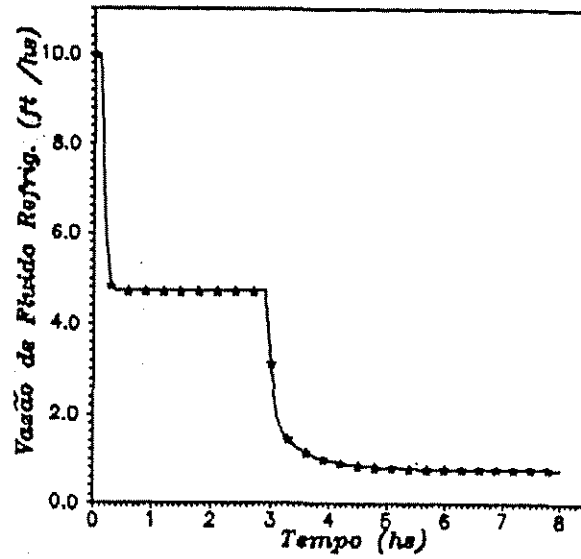


Figura 4.6. Perfil de vazão do fluido refrigerante no tempo.

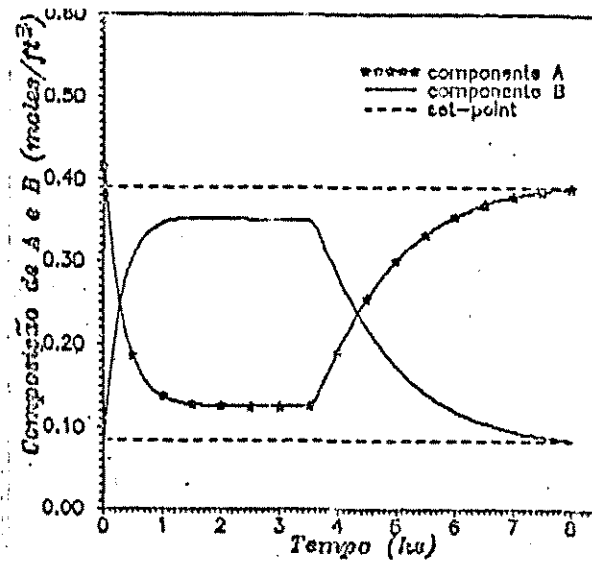


Figura 4.7. Perfis de concentração de A e B no tempo.

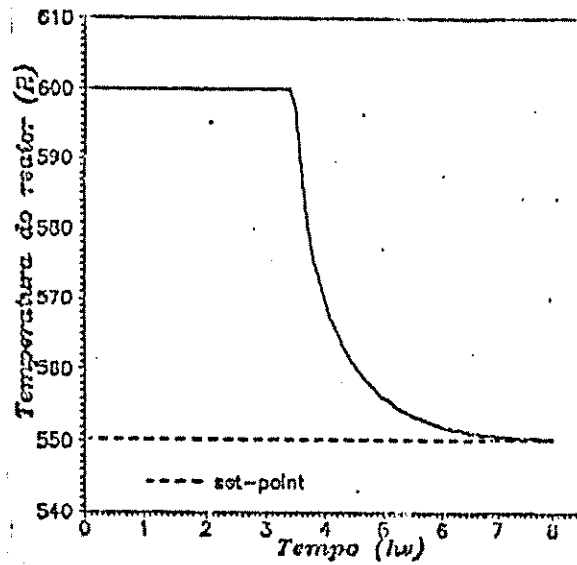


Figura 4.8. Perfil de temperatura no tempo.

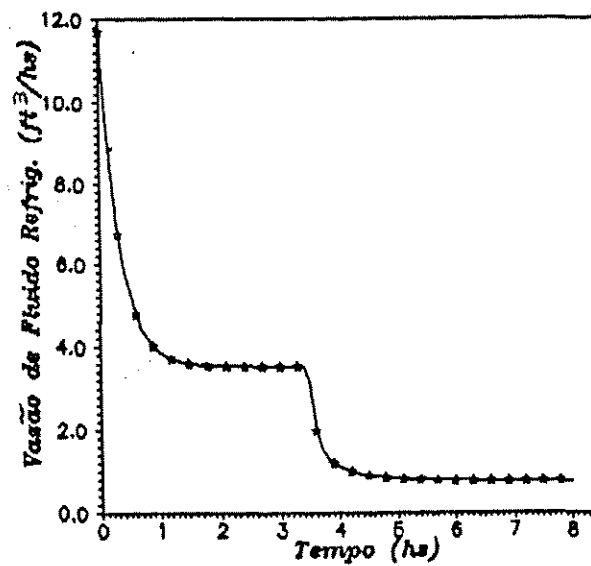


Figura 4.9. Perfil de vazão de fluido refrigerante no tempo.

4.4.2. Reator batelada

A sistemática de aplicação do método em reatores batelada é idêntica a aplicação para reatores contínuos (mostrada no item 4.4). A diferença que existe é quanto ao modelo de equações que descreve o processo e suas condições iniciais.

O modelo de equações para o reator batelada pode ser escrito como:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \quad C_A(0) = 1 \quad (4.61)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B \quad C_B(0) = 0 \quad (4.62)$$

Pretende-se com este caso estudo, avaliar a performance do procedimento proposto para reatores operados em batelada, os quais são muito importantes na indústria química e correlatas (exemplo: fermentadores) e comparar com os reatores operados continuamente.

As figuras 4.10 e 4.11 mostram o comportamento das variáveis de saída quando impõe-se um valor limite para a temperatura do reator igual a 600 R.

As observações quanto ao tamanho do passo α são as mesmas feitas para reatores contínuos.

Verifica-se, para reatores batelada, que embora as figuras mostrem resultados para um tempo de reação igual a oito horas, o método apresenta melhores resultados de convergência para qualquer tempo de reação, generalização que não pode ser feita para reatores contínuos. Verificou-se, também, que a convergência do método é muito mais sensível do que para reatores contínuos.

Para uma maior confiabilidade, em termos de convergência, para gerar "set-point" ótimos é necessário um maior investigação do mesmo para outras condições de operação bem como outras cinéticas.

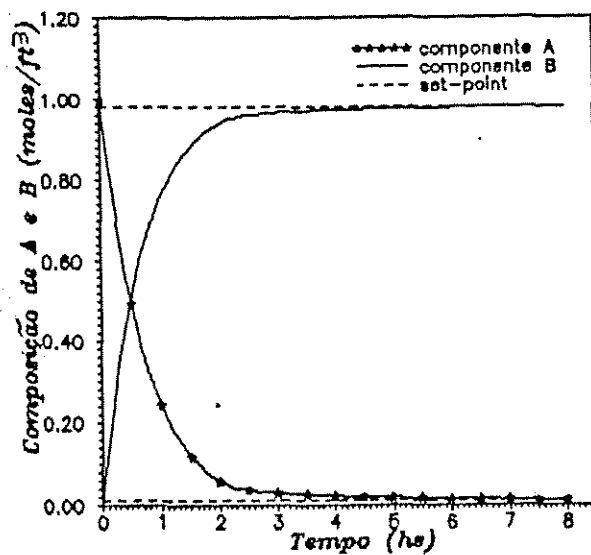


Figura 4.10. Perfis de concentração de A e B, no tempo, em um reator batelada.

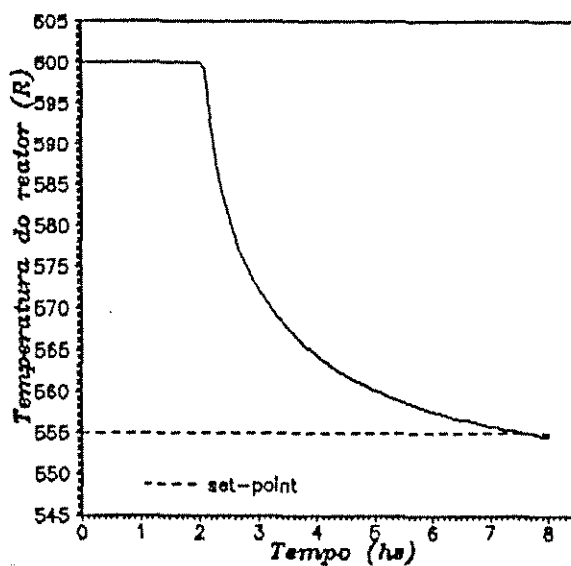


Figura 4.11. Perfil de temperatura, no tempo, em um reator batelada.

4.5. Conclusões

O procedimento desenvolvido e aplicado neste capítulo é útil para avaliar as possibilidades de operação à várias condições de entrada e definir futuras políticas operacionais e de controle do reator.

Embora os resultados de convergência para os casos aqui estudados tenham sido bastante restritos, o método deve ser investigado para outras condições cinéticas e de operação podendo levar a resultados de convergência mais abrangentes.

A etapa de definição de políticas operacionais e de proposição de estruturas de controle viáveis que permitam um controle adequado do sistema é de extrema importância para a avaliação da performance do sistema quando operado sob restrições. Estas restrições, se uma performance ótima for desejada podem ser obtidas através de conceitos da Teoria do Controle Ótimo que será considerado no próximo capítulo.

Capítulo 5

Controle Ótimo

Neste capítulo a teoria de controle ótimo, via o método Problema Quadrático Linear (PQL), é aplicada em reatores tanque contínuo agitado não isotérmico. O reator é o mesmo descrito no item 3.2, para dois tipos de reações químicas: $A \rightarrow B$ e $A \rightarrow B \rightarrow C$.

O método é aplicado sobre cinco estruturas de controle "feedback", sendo quatro univariáveis e uma multivariável, para cada tipo reação química em curso no reator.

O procedimento baseado no PQL é desenvolvido sobre o modelo matemático linearizado nas condições de estado estacionário do reator e, quando aplicado em sua forma original, possui características de controladores proporcionais.

É efetuada uma mudança no estado de referência (estado estacionário) do modelo linearizado e melhores resultados são alcançados.

5.1. Aspectos Teóricos

Controle ótimo é um procedimento que pode ser aplicado para a regulação de um processo, baseado na especificação do problema formulado como um problema de otimização. Do ponto de vista de atuação no sistema, pode ser implementado na forma de controle do tipo "feedback". Assim, para manter a formação de um produto desejado, faz-se da manipulação de uma ou mais variáveis de entrada através de ganhos referentes a todas as variáveis de estado.

Inicialmente, neste estudo a discussão sobre a teoria do controle ótimo considera o sistema como sendo operado em malha aberta.

De uma maneira geral a classe de problemas aqui tratados pode

ser representada pelo modelo de equações diferenciais não linear escrito como

$$\frac{dX(t)}{dt} = f(X(t), U(t)) \quad 0 \leq t \leq t_f \quad (5.1)$$

onde $X(t)$ é um vetor de dimensão n das variáveis de estado e $U(t)$ é um vetor de dimensão m das variáveis manipuladas. Pretende-se variar de maneira ótima as variáveis manipuladas para otimizar as variáveis de estado.

As condições iniciais e de saída dependem da natureza física do problema e em algumas situações podem tornar-se restrições muito significantes, de forma que para resolução do problema podem ser usadas as condições iniciais ou finais.

Em determinados casos, requer-se que somente alguns componentes de X estejam em condições iniciais e outros em condições finais.

Alternativamente, pode-se desejar que algumas condições de transversalidade

$$\varphi(X(t_f)) = 0 \quad (5.2)$$

sejam satisfeitas no tempo final. Isto significa que melhor que condições finais dadas, pode-se usar algumas relações entre os estados finais.

Com o objetivo de alcançar um controle que seja ótimo, elabora-se uma função objetivo do tipo

$$I[U(t)] = G(X(t_f)) + \int_0^{t_f} F(X, U) dt \quad (5.3)$$

a ser maximizada ou minimizada. A equação 5.3 é suficientemente

geral e tem aplicação em uma ampla classe de problemas práticos (Ray, 1981).

Para os casos considerados neste trabalho, as concentrações químicas, bem como as temperaturas da reação e do fluido refrigerante são as variáveis de estado. Por outro lado, a vazão, a concentração e a temperatura de entrada, além da temperatura de entrada e vazão do fluido refrigerante são variáveis manipuladas.

Para os reatores químicos, o primeiro termo da equação 5.3 pode assumir a seguinte forma:

$$G(X(t_f)) = [X(t_f) - X_s]^T [X(t_f) - X_s] \quad (5.4)$$

onde X_s é um vetor que contém o valor das variáveis de estado finais.

Uma forma alternativa para o segundo termo é utilizar uma função objetivo que force X atingir um desejado valor final. Por exemplo a minimização de

$$\int_0^{t_f} (X - X_s) dt \quad (5.5)$$

força X a aproximar X_s em um tempo mais curto possível.

Em alguns problemas de controle ótimo surgem as restrições expressas na forma

$$g(X, U) \leq 0 \quad (5.6)$$

$$h(X, U) = 0 \quad (5.7)$$

que exigem técnicas complexas de resolução. Entretanto a maioria dos problemas práticos referentes à Engenharia Química apresentam

restrições da forma

$$U_* \leq U \leq U^* \quad (5.8)$$

que correspondem a uma restrição superior e inferior para cada variável manipulada, associada com restrições físicas de operação ou segurança.

As condições ótimas para otimização, relativas ao controle ótimo, para um sistema concentrado são apresentadas em teoria de otimização (Ray, 1981).

5.2. Método de Solução

No método de solução, enquadrou-se o problema como um problema clássico especial em teoria de controle ótimo, O Problema Quadrático Linear, o qual conduz para uma norma de controle "feedback" em estado ótimo. O método pode ser colocado da seguinte forma:

Assume-se que o modelo de estado X possa ser representado pela equação diferencial linear

$$\frac{dX}{dt} = AX + BU \quad X(t_0) = X_0 \quad (5.9)$$

que é necessária para controlar o sistema em um "set-point", sem excessiva ação de controle.

A função objetiva quadrática é definida como

$$I = \frac{1}{2} X_T^T S_f X|_{t_f} + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} (X^T F X + U^T E U) dt \quad (4.10)$$

onde $A(t)$ e $B(t)$ são matrizes do modelo, S_f e $F(t)$ são matrizes simétricas e positivas semidefinidas, e $E(t)$ é uma matriz simétrica positiva definida. (Para a definição de matrizes, ver Apêndice C) Aplicando a teoria de controle ótimo no presente problema, obtém-se o Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2} (X^T F X + U^T E U) + \lambda^T (A X + B U) \quad (5.11)$$

com as condições

$$\lambda^T = - \frac{\partial H}{\partial X} \quad \lambda(t_f) = S_f X(t_f) \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial H}{\partial U} = 0 \quad (5.13)$$

Assim, a equação 5.13, torna-se

$$E U + B^T \lambda = 0 \quad (5.14)$$

ou

$$U = - E^{-1} B^T \lambda \quad (5.15)$$

as equações 5.9 e 5.12 tornam-se

$$\dot{X} = A X - B E^{-1} B^T \lambda \quad X(t_0) = X_0 \quad (5.16)$$

$$\dot{\lambda} = -FX - A^T\lambda \quad \lambda(t_f) = S_f X(t_f) \quad (5.17)$$

A solução das equações 5.16 e 5.17 pode ser convenientemente representada pela forma

$$\lambda(t) = S(t)X(t) \quad (5.18)$$

denominada de Transformação de Riccati, onde $S(t)$ é uma matriz $n \times n$ positiva definida e simétrica. Substituindo a equação 5.18 em 5.16 e 5.17, tem-se

$$\dot{X} = AX - BE^{-1}B^T SX \quad (5.19)$$

$$(\dot{S}X + S\dot{X}) = -FX - A^T SX \quad (5.20)$$

Por outro lado, a eliminação de X pela substituição de 5.19 em 5.20, produz

$$(\dot{S} + SA + A^T S - SBE^{-1}B^T S + F)X(t) = 0 \quad (5.21)$$

Para a equação 5.21 ser válida para todos $X(t)$ diferentes de zero, a matriz de coeficientes de $X(t)$ deve ser zero. Isto leva à equação

de Riccati a ser escrita como

$$\frac{dS}{dt} = -SA - A^T S + SBE^{-1}B^T S - F \quad S(t_f) = S_f \quad (5.22)$$

para $S(t)$. A condição de contorno em S surge diretamente de uma

comparação das equações 5.18 e 5.12.

Através da equação (5.19), obtém-se a Norma de Controle Feedback

$$U(t) = K(t)X(t) \quad (5.23)$$

onde

$$K(t) = E^{-1}B^T S(t) \quad (5.24)$$

representa a variação do ganho do controlador "feedback" proporcional, que controla o modelo da equação 5.9, minimizando a função objetivo da equação 5.10. O ganho $K(t)$ é determinado "off line", pois não depende de $X(t)$ ou $U(t)$, embora possa também ser calculado "on line" de maneira adaptativa (Maciel Filho, 1989).

Se $t_f \rightarrow \infty$, com A , B , F e E constantes, $S(t)$ torna-se constante e pela solução de

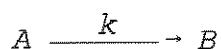
$$-SA - A^T S + SBE^{-1}B^T S - F = 0 \quad (5.25)$$

$K(t)$ é também constante. Neste caso o controlador é um controlador proporcional de ganho constante.

5.3. Controle Ótimo aplicado a Reatores CSTR

5.3.1. Para uma Reação $A \rightarrow B$.

Considera-se o reator CSTR não isotérmico para a reação química



onde a constante cinética da taxa de reação é dada por

$$k = \alpha \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$$

As equações do modelo para este sistema, considerando que não haja variação do volume do reator, assumem a forma

$$\begin{aligned} \frac{VdC_A}{dt} &= F(C_{Ao} - C_A) - VkC_A & C_A(0) &= C_{As} \\ \frac{VdC_B}{dt} &= F(C_{Bo} - C_B) + VkC_A & C_B(0) &= C_{Bs} \\ \frac{VdT}{dt} &= F(T_o - T) - \frac{\Delta HVkC_A}{\rho C_p} - \frac{UA(T - T_J)}{\rho C_p} & T(0) &= T_s \\ \frac{dT_J}{dt} &= \frac{F_J(T_{Jo} - T_J)}{V_J} + \frac{UA(T - T_J)}{\rho_J V_J C_{PJ}} & T_J(0) &= T_{Js} \end{aligned} \quad (5.26)$$

O controle é aplicado com o objetivo de, uma vez perturbado o sistema (por exemplo, devido à fuga das condições nominais de operação ou distúrbâncias externas), manter a concentração do produto B no mesmo estado estacionário C_{Bs} , ou o mais próximo possível do mesmo, através da manipulação das variáveis de entrada F_o , C_{Ao} , T_o , T_{Jo} e/ou F_J .

A técnica de controle ótimo exige que o número de variáveis manipuláveis seja menor ou igual ao número de equações do modelo. Foi escolhido neste trabalho perturbar o sistema através da variável de entrada C_{Ao} , e controlá-lo através da manipulação das variáveis de entrada F_o , T_o , T_{Jo} e F_J de forma simultânea ou isolada. Esta escolha tem importância prática uma vez que são comuns os casos de alterações na concentração de entrada. Além do mais, o sistema é facilmente aplicável para o caso de alteração em outras variáveis de entrada.

Pela importância que possíveis interações entre as variáveis manipuláveis podem causar no sistema (ver capítulo 3) é interessante entender o método de solução para a estrutura de controle multivariável, ou seja, aquele que para uma perturbação em C_{Ao} (e que permanece constante após a perturbação) manipula-se várias variáveis de entrada para controlar o sistema ao redor de um "set-point" desejado. Para este caso (caso 1) tem-se

Caso 1 - estrutura de controle multivariável

Variável perturbada: C_{Ao}

Variáveis manipuladas: F_o , T_o , T_{Jo} , F_J

O modelo das equações 5.26, como a maioria dos modelos pertinentes a reatores químicos, é não linear. No entanto, uma grande parte das técnicas de controle existentes trabalha com modelos lineares, o que requer a linearização das equações do modelo antes de aplicação do algoritmo de controle ótimo. O método utilizado neste trabalho para a linearização baseia-se na expansão em série de Taylor com truncamento no segundo termo (ver apêndice B). Outras técnicas são ainda possíveis de serem utilizadas, por exemplo MVL, (Maciel Filho, 1989). Porém, para os propósitos deste trabalho, a técnica considerada é adequada.

O método, em sua forma original, é linearizado sobre o estado de referência tomado como sendo o estado estacionário. É feito também, como tentativa de obter uma melhor performance de controle, mudanças no valor do estado estacionário sobre o qual o método é linearizado.

O modelo, resultante da linearização, transforma-se em

$$\begin{aligned}
\frac{dC_A}{dt} &= \frac{F_S}{V} C_{Ao} - \left(\frac{F_S}{V} + k_S \right) C_A + \frac{Ek_S C_{AS}}{RT_S^2} T + \frac{C_{AoS} - C_{AS}}{V} F \\
\frac{dC_B}{dt} &= k_S C_A - \frac{F_S}{V} C_B - \frac{Ek_S C_{AS}}{RT_S^2} T + \frac{C_{BoS} - C_{BS}}{V} F \\
\frac{dT}{dt} &= - \frac{\Delta H k_S}{\rho C_P} C_A + \left(\frac{F_S}{V} + \frac{\Delta H k_S E C_{AS}}{\rho C_P R T_S^2} - \frac{UA}{\rho C_P V} \right) T + \frac{k_S}{V} T_o + \frac{T_{oS} - T_S}{V} F + \frac{UA}{\rho C_P V} \\
\frac{dT_J}{dt} &= \frac{UA}{\rho_J C_{PJ} V_J} T - \left(\frac{F_{JS}}{V_J} + \frac{UA}{\rho_J C_{PJ} V_J} \right) T_J + \frac{F_{JS}}{V_J} T_{Jo} + \frac{T_{JoS} - T_{JS}}{V_J} F_J
\end{aligned}
\tag{5.27}$$

Adimensionalizando as variáveis do modelo por

$$\begin{aligned}
t' &= \frac{F}{V} t ; \quad X_1 = \frac{C_A}{C_{AS}} ; \quad X_2 = \frac{C_B}{C_{AS}} ; \quad X_3 = \frac{T}{T_S} ; \quad X_4 = \frac{T_J}{T_S} \\
U_1 &= \frac{F}{F_{JS}} ; \quad U_2 = \frac{T_o}{T_S} ; \quad U_3 = \frac{T_{Jo}}{T_S} ; \quad U_4 = \frac{F_J}{F_{JS}}
\end{aligned}$$

que, juntamente com a definição das constantes

$$\begin{aligned}
D_{A1} &= \frac{Vk_S}{F} ; \quad \gamma_1 = \frac{E}{RT_S} ; \quad A_1 = - \frac{\Delta H k_S V C_{AS}}{\rho C_P T_S F} ; \quad A_3 = \frac{C_{BS}}{C_{AS}} \\
B_1 &= \frac{C_{AS}}{\rho C_P T_S} ; \quad B_2 = \frac{C_{BS}}{\rho C_P T_S} ; \quad B_3 = \frac{UA}{\rho C_P V} ; \quad C_1 = \frac{UAV}{F \rho_J C_{PJ} V_J} \\
C_2 &= \frac{F_J V}{F V_J} ; \quad C_3 = \frac{V F_{JS} (T_{JoS} - T_{JS})}{F V_J T_S} ; \quad D_1 = \frac{(C_{AoS} - C_{AS}) F_{JS}}{F_S} \\
D_2 &= \frac{(C_{BoS} - C_{BS}) F_{JS}}{F_S} ; \quad D_3 = \frac{(T_{oS} - T_S) F_{JS}}{F_S} ; \quad D_4 = \frac{F_{JS} V T_S}{F_S V_J} \\
D_5 &= \frac{(T_{JoS} - T_{JS}) V F_{JS}}{V_J F_S T_S}
\end{aligned}$$

leva as equações do modelo a serem escritas na forma

$$\begin{aligned}
\frac{dX_1}{dt} &= - (1 + D_{A1}) X_1 + \gamma_1 D_{A1} X_3 + D_1 U_1 \\
\frac{dX_2}{dt} &= D_{A1} X_1 - X_2 - D_{A1} \gamma_1 X_3 + D_2 U_1 \\
\frac{dX_3}{dt} &= -D_{A1} B_1 X_1 - (1 + A_1 \gamma_1 + B_3) X_3 + B_3 X_4 + D_3 U_1 + U_2 \\
\frac{dX_4}{dt} &= C_1 X_3 - (C_1 + C_2) X_4 + D_4 U_3 + D_5 U_4
\end{aligned} \tag{5.28}$$

A função objetivo pode ser expressa como

$$\begin{aligned}
I = \frac{1}{2} \int_0^{tf} [&(X_1 - X_{1S})^2 + \alpha_1 (X_2 - X_{2S})^2 + \alpha_2 (X_3 - X_{3S})^2 + \alpha_3 (X_4 - X_{4S})^2 \\
&+ \beta_1 (U_1 - U_{1S})^2 + \beta_2 (U_2 - U_{2S})^2 + \beta_3 (U_3 - U_{3S})^2 + \beta_4 (U_4 - U_{4S})^2]
\end{aligned} \tag{5.29}$$

onde X_{1S} , X_{2S} , X_{3S} , X_{4S} , U_{1S} , U_{2S} , U_{3S} e U_{4S} satisfazem as equações no estado estacionário, de forma que

$$\begin{aligned}
0 &= - (1 + D_{A1}) X_1 + \gamma_1 D_{A1} X_3 + D_1 U_1 \\
0 &= D_{A1} X_1 - X_2 - D_{A1} \gamma_1 X_3 + D_2 U_1 \\
0 &= -D_{A1} B_1 X_1 - (1 + A_1 \gamma_1 + B_3) X_3 + B_3 X_4 + D_3 U_1 + U_2 \\
0 &= C_1 X_3 - (C_1 + C_2) X_4 + D_4 U_3 + D_5 U_4
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Por definição de variáveis desvios, como sendo

$$\begin{aligned}
\bar{X}_1 &= X_1 - X_{1S} \\
\bar{X}_2 &= X_2 - X_{2S} \\
\bar{X}_3 &= X_3 - X_{3S} \\
\bar{X}_4 &= X_4 - X_{4S} \\
\bar{U}_1 &= U_1 - U_{1S} \\
\bar{U}_2 &= U_2 - U_{2S} \\
\bar{U}_3 &= U_3 - U_{3S} \\
\bar{U}_4 &= U_4 - U_{4S}
\end{aligned}
\tag{5.31}$$

tem-se finalmente o modelo, escrito em termos dessas variáveis, como

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{X}_1}{dt} &= - (1 + D_{A1})\bar{X}_1 + \gamma_1 D_{A1}\bar{X}_3 + D_1\bar{U}_1 \\
\frac{d\bar{X}_2}{dt} &= D_{A1}\bar{X}_1 - \bar{X}_2 - D_{A1}\gamma_1\bar{X}_3 + D_2\bar{U}_1 \\
\frac{d\bar{X}_3}{dt} &= -D_{A1}B_1\bar{X}_1 - (1 + A_1\gamma_1 + B_3)\bar{X}_3 + B_3\bar{X}_4 + D_3\bar{U}_1 + \bar{U}_2 \\
\frac{d\bar{X}_4}{dt} &= C_1\bar{X}_3 - (C_1 + C_2)\bar{X}_4 + D_4\bar{U}_3 + D_5\bar{U}_4
\end{aligned}
\tag{5.32}$$

com a função objetivo, a ser minimizada, dada por:

$$I = \frac{1}{2} \int_0^{tf} [\bar{X}_1^2 + \alpha_1\bar{X}_2^2 + \alpha_2\bar{X}_3^2 + \alpha_3\bar{X}_4^2 + \beta_1\bar{U}_1^2 + \beta_2\bar{U}_2^2 + \beta_3\bar{U}_3^2 + \beta_4\bar{U}_4^2]
\tag{5.33}$$

Assim, a solução pode então ser obtida das equações 5.22, 5.23 e 5.24, nas quais

$$\begin{aligned}
 A &= \begin{bmatrix} -(1 + D_{A1}) & 0 & \gamma_1 D_{A1} & 0 \\ D_{A1} & -1 & -\gamma_1 D_{A1} & 0 \\ -D_{A1B_1} & 0 & -(1 + \gamma_1 A_1 + B_3) & B_3 \\ 0 & 0 & C_1 & -(C_1 + C_2) \end{bmatrix} \\
 B &= \begin{bmatrix} D_1 & 0 & 0 & 0 \\ D_2 & 0 & 0 & 0 \\ D_3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_4 & D_5 \end{bmatrix} \\
 F &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_3 \end{bmatrix} \\
 F &= \begin{bmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta_4 \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

fazendo

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} \end{bmatrix} \tag{5.35}$$

a solução é dada pelas seguintes equações diferenciais (denominado de Modelo dos Ganhos"):

$$\begin{aligned}
\dot{S}_{11} &= (2(1 + D_{A1}) + Z_{11})S_{11} - (2D_{A1} - Z_{12})S_{12} \\
&\quad + (2D_{A1}B_1 + Z_{13})S_{13} + Z_{14}S_{14} - 1 \quad S_{11}(tf) = 0 \\
\dot{S}_{12} &= (2 + D_{A1} + Z_{11})S_{12} - (D_{A1} - Z_{12})S_{22} \\
&\quad + (D_{A1}B_1 + Z_{13})S_{13} + Z_{14}S_{24} \quad S_{12}(tf) = 0 \\
\dot{S}_{13} &= -\gamma_1 D_{A1} S_{11} + D_{A1} \gamma_1 S_{12} + (A_1 \gamma_1 + B_3 + D_{A1} \\
&\quad + Z_{11})S_{13} - C_1 S_{14} - (D_{A1} - Z_{12})S_{23} + (D_{A1} A_1 B_1 + \\
&\quad Z_{13})S_{33} + Z_{14}S_{34} \quad S_{13}(0) = 0 \\
\dot{S}_{14} &= -B_3 S_{13} + (C_2 + C_1 + 1 + D_{A1} + Z_{11})S_{14} - (D_{A1} \\
&\quad - Z_{12})S_{24} + (D_{A1} B_1 + Z_{13})S_{34} + Z_{14}S_{44} \quad S_{14}(0) = 0 \\
\dot{S}_{22} &= (2 + Z_{22})S_{22} + Z_{24}S_{34} + Z_{12}S_{12} + Z_{23}S_{23} \\
&\quad + Z_{23}S_{33} - \alpha_1 \quad S_{22}(0) = 0 \\
\dot{S}_{23} &= -D_{A1} \gamma_1 S_{12} + D_{A1} \gamma_1 S_{22} + (2 + A_1 \gamma_1 + B_3 + Z_{22})S_{23} \\
&\quad - C_1 S_{24} + Z_{21}S_{13} + Z_{23}S_{33} + Z_{24}S_{34} \quad S_{23}(0) = 0 \\
\dot{S}_{24} &= -B_3 S_{23} + (1 + C_1 + C_2 + Z_{22})S_{24} \\
&\quad + Z_{21}S_{14} + Z_{23}S_{34} + Z_{24}S_{44} \quad S_{24} = 0 \\
\dot{S}_{33} &= -(2\gamma_1 D_{A1} - Z_{31})S_{13} + (2D_{A1} \gamma_1 + Z_{32})S_{23} + (2(1 \\
&\quad + A_1 \gamma_1 + B_3 + Z_{33})S_{33} - (C_1 - Z_{34})S_{34} - \alpha_2 \quad S_{33} = 0 \\
\dot{S}_{34} &= -2B_3 S_{33} + (C_2 + C_1 + 1 + A_1 \gamma_1 + B_3 + Z_{33})S_{34} - \\
&\quad (\gamma_1 D_{A1} - Z_{31})S_{14} + \gamma_1 D_{A1} + Z_{32})S_{24} - (C_1 - Z_{34})S_{44} \quad S_{34} = 0 \\
\dot{S}_{44} &= Z_{14}S_{14} + Z_{42}S_{24} - (2B_3 - Z_{34})S_{34} \\
&\quad + (2(C_1 + C_2) + Z_{44})S_{44} - \alpha_3 \quad S_{44} = 0
\end{aligned} \tag{5.36}$$

onde

$$\begin{aligned}
Z_{11} &= \frac{(D_1 S_{11} + D_2 S_{12} + D_3 S_{13}) D_1}{\beta_1} \\
Z_{12} &= \frac{(D_1 S_{11} + D_2 S_{12} + D_3 S_{13}) D_2}{\beta_1} \\
Z_{13} &= \frac{(D_1 S_{11} + D_2 S_{12} + D_3 S_{13}) D_3}{\beta_1} + \frac{S_{13}}{\beta_2} \\
Z_{14} &= \frac{D_4^2 S_{14}}{\beta_3} + \frac{D_5^2 S_{14}}{\beta_4} \\
Z_{21} &= \frac{(D_1 S_{12} + D_2 S_{22} + D_3 S_{23}) D_1}{\beta_1} \\
Z_{22} &= \frac{(D_1 S_{12} + D_2 S_{22} + D_3 S_{23}) D_2}{\beta_1} \\
Z_{23} &= \frac{(D_1 S_{12} + D_2 S_{22} + D_3 S_{23}) D_3}{\beta_1} + \frac{S_{23}}{\beta_2} \\
Z_{24} &= \frac{D_4^2 S_{24}}{\beta_3} + \frac{D_5^2 S_{24}}{\beta_4} \\
Z_{31} &= \frac{(D_1 S_{13} + D_2 S_{23} + D_3 S_{33}) D_1}{\beta_1} \\
Z_{32} &= \frac{(D_1 S_{13} + D_2 S_{23} + D_3 S_{33}) D_2}{\beta_1} \\
Z_{33} &= \frac{(D_1 S_{13} + D_2 S_{23} + D_3 S_{33}) D_3}{\beta_1} + \frac{S_{33}}{\beta_2} \\
Z_{34} &= \frac{D_4^2 S_{34}}{\beta_3} + \frac{D_5^2 S_{34}}{\beta_4} \\
Z_{41} &= \frac{(D_1 S_{14} + D_2 S_{24} + D_3 S_{34}) D_1}{\beta_1} \\
Z_{42} &= \frac{(D_1 S_{14} + D_2 S_{24} + D_3 S_{34}) D_2}{\beta_1} \\
Z_{43} &= \frac{(D_1 S_{14} + D_2 S_{24} + D_3 S_{34}) D_3}{\beta_1} + \frac{S_{34}}{\beta_2} \\
Z_{44} &= \frac{D_4^2 S_{44}}{\beta_3} + \frac{D_5^2 S_{44}}{\beta_4}
\end{aligned} \tag{5.37}$$

de modo que tem-se finalmente os elementos da matriz dos ganhos do controlador,

$$\begin{aligned}
K_{11} &= \frac{D_1 S_{11} + D_2 S_{12} + D_3 S_{13}}{\beta_1} \\
K_{12} &= \frac{D_1 S_{12} + D_2 S_{22} + D_3 S_{23}}{\beta_1} \\
K_{13} &= \frac{D_1 S_{13} + D_2 S_{23} + D_3 S_{33}}{\beta_1} \\
K_{14} &= \frac{D_1 S_{14} + D_2 S_{24} + D_3 S_{34}}{\beta_1} \\
K_{21} &= \frac{S_{13}}{\beta_2} \\
K_{22} &= \frac{S_{23}}{\beta_2} \\
K_{23} &= \frac{S_{33}}{\beta_2} \\
K_{24} &= \frac{S_{34}}{\beta_2} \\
K_{31} &= \frac{D_4 S_{14}}{\beta_3} \\
K_{32} &= \frac{D_4 S_{24}}{\beta_3} \\
K_{33} &= \frac{D_4 S_{34}}{\beta_3} \\
K_{34} &= \frac{D_4 S_{44}}{\beta_3} \\
K_{41} &= \frac{D_5 S_{14}}{\beta_4} \\
K_{42} &= \frac{D_5 S_{24}}{\beta_4} \\
K_{43} &= \frac{D_5 S_{34}}{\beta_4} \\
K_{44} &= \frac{D_5 S_{44}}{\beta_4}
\end{aligned} \tag{5.38}$$

utilizados nos cálculos das variáveis manipuladas na forma

$$\begin{aligned}
U_1 &= U_{1S} - [K_{11}(X_1 - X_{1S}) + K_{12}(X_2 - X_{2S}) + K_{13}(X_3 - X_{3S}) + K_{14}(X_4 - X_{4S})] \\
U_2 &= U_{2S} - [K_{21}(X_1 - X_{1S}) + K_{22}(X_2 - X_{2S}) + K_{23}(X_3 - X_{3S}) + K_{24}(X_4 - X_{4S})] \\
U_3 &= U_{3S} - [K_{31}(X_1 - X_{1S}) + K_{32}(X_2 - X_{2S}) + K_{33}(X_3 - X_{3S}) + K_{34}(X_4 - X_{4S})] \\
U_4 &= U_{4S} - [K_{41}(X_1 - X_{1S}) + K_{42}(X_2 - X_{2S}) + K_{43}(X_3 - X_{3S}) + K_{44}(X_4 - X_{4S})]
\end{aligned}$$

(5.39)

Aplicando o mesmo procedimento de solução para os outros casos univariáveis, manipula-se apenas uma variável mantendo as outras fixas, chega-se aos elementos (não nulos) da matriz de ganhos do controlador para cada caso.

Caso 2 - estrutura de controle univariável

Variável perturbada: $C_{\lambda 0}$

Variável manipulada: F_j

com os elementos (não nulos) da matriz de ganhos sendo dados por

$$\begin{aligned}
K_{41} &= \frac{D_5 S_{14}}{\beta_4} \\
K_{42} &= \frac{D_5 S_{24}}{\beta_4} \\
K_{43} &= \frac{D_5 S_{34}}{\beta_4} \\
K_{44} &= \frac{D_5 S_{44}}{\beta_4}
\end{aligned} \tag{5.40}$$

utilizados no cálculo da variável manipulada, na forma

$$U_4 = U_{4S} - [K_{41}(X_1 - X_{1S}) + K_{42}(X_2 - X_{2S}) + K_{43}(X_3 - X_{3S}) + K_{44}(X_4 - X_{4S})] \tag{5.41}$$

Caso 3 - estrutura de controle univariável

Variável perturbada: C_{A0}

Variável manipulada: T_0

onde os elementos da matriz de ganhos são

$$\begin{aligned} K_{21} &= \frac{S_{13}}{\beta_2} \\ K_{22} &= \frac{S_{23}}{\beta_2} \\ K_{23} &= \frac{S_{33}}{\beta_2} \\ K_{24} &= \frac{S_{34}}{\beta_2} \end{aligned} \tag{5.42}$$

para o cálculo da variável manipulada, dada por

$$U_2 = U_{2S} - [K_{21}(X_1 - X_{1S}) + K_{22}(X_2 - X_{2S}) + K_{23}(X_3 - X_{3S}) + K_{24}(X_4 - X_{4S})] \tag{5.43}$$

Caso 4 - estrutura de controle univariável

Variável perturbada: C_{A0}

Variável manipulada: T_{J0}

cujo elementos da matriz de ganhos são

$$\begin{aligned}
 K_{31} &= \frac{D_4 S_{14}}{\beta_3} \\
 K_{32} &= \frac{D_4 S_{24}}{\beta_3} \\
 K_{33} &= \frac{D_4 S_{34}}{\beta_3} \\
 K_{34} &= \frac{D_4 S_{44}}{\beta_3}
 \end{aligned}
 \tag{5.46}$$

usados no cálculo da variável manipulada, por:

$$U_3 = U_{3S} - [K_{31}(X_1 - X_{1S}) + K_{32}(X_2 - X_{2S}) + K_{33}(X_3 - X_{3S}) + K_{34}(X_4 - X_{4S})]
 \tag{5.45}$$

Caso 5 - estrutura de controle univariável

Variável perturbada: C_{Ao}

Variável manipulada: F_o

onde os elementos da matriz de ganhos são:

$$\begin{aligned}
 K_{11} &= \frac{D_1 S_{11} + D_2 S_{12} + D_3 S_{13}}{\beta_1} \\
 K_{12} &= \frac{D_1 S_{12} + D_2 S_{22} + D_3 S_{23}}{\beta_1} \\
 K_{13} &= \frac{D_1 S_{13} + D_2 S_{23} + D_3 S_{33}}{\beta_1} \\
 K_{14} &= \frac{D_1 S_{14} + D_2 S_{24} + D_3 S_{34}}{\beta_1}
 \end{aligned}
 \tag{5.46}$$

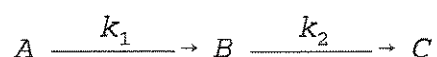
e utilizados no cálculo da variável manipulada, da seguinte forma:

$$U_1 = U_{1s} - [K_{11}(X_1 - X_{1s}) + K_{12}(X_2 - X_{2s}) + K_{13}(X_3 - X_{3s}) + K_{14}(X_4 - X_{4s})]$$

(5.47)

5.3.2. Para uma Reação $A \rightarrow B \rightarrow C$

Considera-se agora o reator contínuo CSTR não isotérmico para a reação química



onde as constantes cinéticas da reação são dadas pela equação de Arrhenius.

O esquema reacional considerado, típico de processos industriais, é exotérmico, sendo necessário um rígido controle das condições no reator para maximizar a conversão do produto desejado, evitando o desenvolvimento da reação para produtos não desejados. Para isto ser possível, o reator deve possuir resfriamento externo por meio de uma camisa através da qual circula um fluido refrigerante com temperatura de entrada controlada.

As equações do modelo para este sistema podem ser escritas como

$$\begin{aligned}
\frac{VdC_A}{dt} &= F(C_{Ao} - C_A) - Vk_1 C_A & C_A(0) &= C_{As} \\
\frac{VdC_B}{dt} &= F(C_{Bo} - C_B) + Vk_1 C_A - Vk_2 C_B & C_B(0) &= C_{Bs} \\
\frac{VdT}{dt} &= F(T_o - T) - \frac{\Delta h_1 Vk_1 C_A}{\rho C_p} - \frac{\Delta H_2 Vk_2 C_B}{\rho C_p} - \frac{UA(T - T_J)}{\rho C_p} & T(0) &= T_s \\
\frac{dT_J}{dt} &= \frac{F_J(T_{Jo} - T_J)}{V_J} + \frac{UA(T - T_J)}{\rho_J V_J C_{PJ}} & T_J(0) &= T_{JS}
\end{aligned}$$

(5.48)

que é claramente um sistema multivariável.

A sistemática de aplicação do método para o modelo 5.48 é rigorosamente a mesma aplicada no item 5.4.1.

No caso presente aparecem novas constantes além das apresentadas no item anterior. São elas:

$$D_{A2} = \frac{Vk_2 S}{F}, \quad A_2 = \frac{-\Delta H_2 k_2 S VC_{BS}}{\rho C_p T_s F}, \quad \gamma_2 = \frac{E_B}{RT_s}$$

de forma que com essas novas constantes, obtém-se as matrizes de coeficientes

$$A = \begin{bmatrix} -(1 + D_{A1}) & 0 & \gamma_1 D_{A1} & 0 \\ D_{A1} & -(1 + D_{A2}) & D_{A2} \gamma_2 A_3 - \gamma_1 D_{A1} & 0 \\ -D_{A1} B_1 & -D_{A2} B_2 & -(1 + \gamma_1 A_1 + A_2 \gamma_2 + B_3) & B_3 \\ 0 & 0 & C_1 & -(C_1 + C_2) \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} D_1 & 0 & 0 & 0 \\ D_2 & 0 & 0 & 0 \\ D_3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_4 & D_5 \end{bmatrix}$$

$$F = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_3 \end{bmatrix}$$

$$F = \begin{bmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta_4 \end{bmatrix}$$

(5.49)

A exemplo do item 5.4.1 tem-se o método aplicado para cinco casos (6 a 10). Os casos mudam conforme as estruturas de controle. A matriz de ganhos e o cálculo das variáveis manipuladas são similares ao item 5.4.1.

caso 6 - estrutura de controle multivariável

Variável perturbada: C_{A0}

Variáveis manipuladas: F_0, T_0, T_{J0}, F_J

caso 7 - estrutura de controle univariável

Variável perturbada: C_{A0}

Variável manipulada: F_J

caso 8 - estrutura de controle univariável

Variável perturbada: C_{Ao}

Variável manipulada: T_o

caso 9 - estrutura de controle univariável

Variável perturbada: C_{Ao}

Variável manipulada: T_{Jo}

caso 10 - estrutura de controle univariável

Variável perturbada: C_{Ao}

Variável manipulada: F_o

A seguir é apresentado e discutido a performance das várias estruturas de controle.

5.4. Resultados e Discussões

5.4.1. Resultados

Os resultados estão divididos em quatro partes.

1ª e 2ª partes: resultados referentes a reação reação 1 ($A \rightarrow B$)

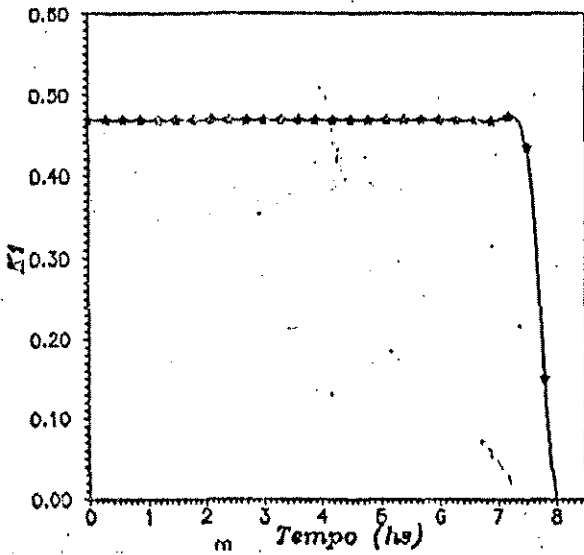
3ª e 4ª partes: resultados referentes a reação reação 2 ($A \rightarrow B \rightarrow C$)

5.4.1.1. Referentes a Reação $A \rightarrow B$

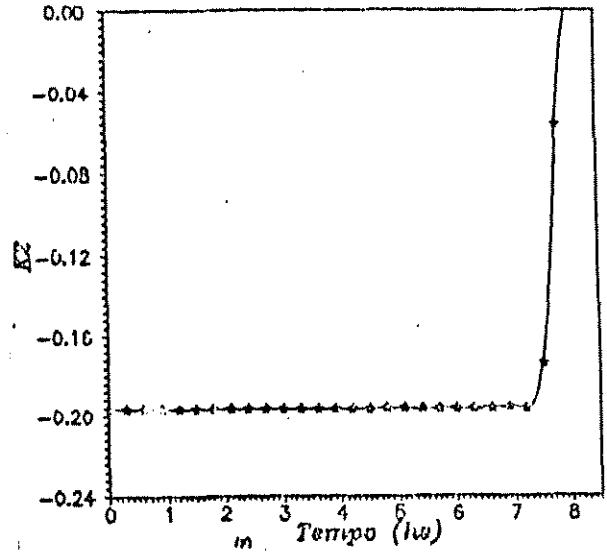
Os dados operacionais das condições nominais usados nas simu-

lações estão contidos no Apêndice A:

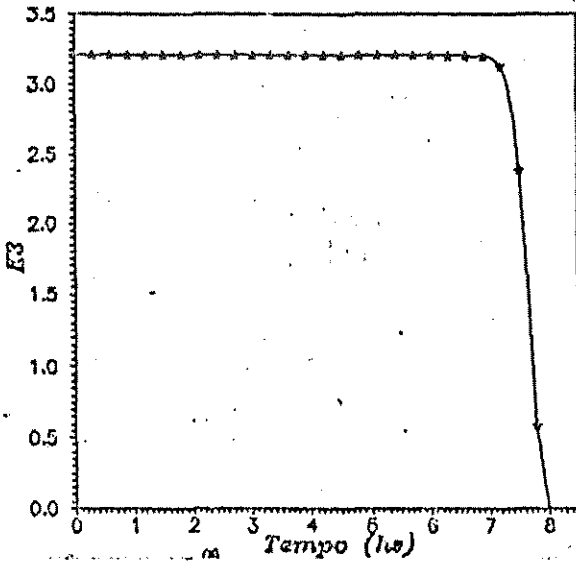
O comportamento dos ganhos, para qualquer estrutura de controle usada, é semelhante aos mostrados na figura 5.1.



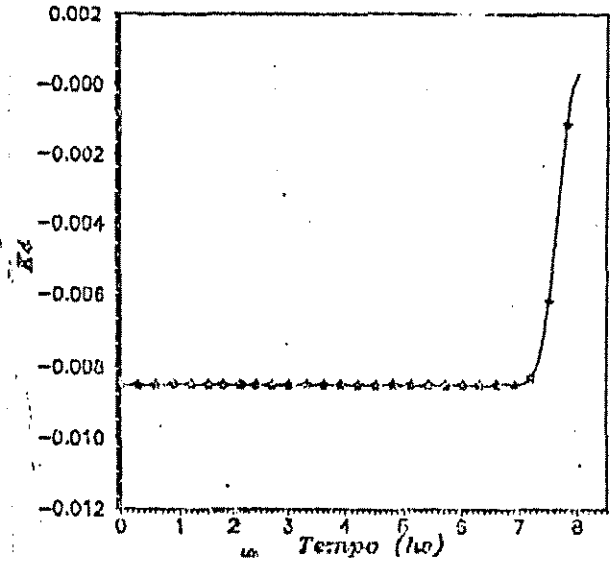
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.1. Comportamento dos elementos da matriz de ganhos do controlador para uma estrutura de controle univariável.

Optou-se, para um melhor acompanhamento do leitor, por mostrar nas simulações feitas, além das curvas das variáveis controlada e manipulada, o comportamento das outras variáveis de estado, como temperatura do reator e concentração do reagente A.

Constatou-se que em todas as simulações a curva da temperatura do fluido refrigerante contra o tempo é idêntica à curva da temperatura do reator. Por esta razão, a figura mostrando a variação da temperatura do fluido refrigerante é apresentada em poucos casos.

1ª parte Resultados correspondentes à aplicação do método na forma original, isto é, os valores das variáveis de estado no estado estacionário usadas na Equação de Riccati (modelo dos ganhos) são os mesmos usados no modelo que descreve o sistema e estão relacionados na tabela 5.1 (reação 1).

A combinação de parâmetros usados estão mostrados na tabela 5.2, enquanto as figuras 5.2 a 5.6 mostram os resultados referentes a cada caso.

Tabela 5.1 - Valores das variáveis de estado no estado estacionário para a reação 1 (A → B) e reação 2 (A → B → C)

Reação	Variáveis de Estado no Estado Estacionário			
	C_{As}	C_{Bs}	T_s	T_{Js}
1	0,245	0,254	600	594,6
2	0,416	0,0836	550	550

Tabela 5.2 - Valores dos parâmetros de ajuste referentes a primeira parte dos resultados.

caso	Parâmetros de Ajuste						
	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	β_4
1	0,5	1	1	1	1	1	1
2	10 ₄	1	1	1			
3	1	1	1	10 ⁻³			
4	1	1	1	10 ⁻³			
5	0,65	1	1	3			

2ª parte Resultados correspondentes a aplicação do método com mudanças, ou seja, os valores das variáveis de estado no estado estacionário usados no modelo dos ganhos são diferentes dos usados no modelo que descreve o sistema.

Os valores dos parâmetros de ajuste e das variáveis de estado no estado estacionário estão relacionados nas tabelas 5.3.

As figuras 5.7 a 5.9 mostram as respostas referentes a esta etapa.

Tabela 5.3(a) Valores dos parâmetros de ajuste referentes a segunda parte dos resultados.

caso	Parâmetros de Ajuste						
	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	β_4
1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	0,1			
3	1	1	1	0,026			
4	1	1	1	0,16			
5	0,65	1	1	3			

Tabela 5.3(b) Valores das Variáveis de Estado no Estado Estacionário referentes a segunda parte dos resultados.

caso	Variáveis de Estado no Estado Estacionário			
	C_{AS}	C_{BS}	T_s	T_{JS}
6	0,22	0,28	620	594,6
7	0,22	0,28	613	594,6
8	0,22	0,28	616	594,6
9	0,22	0,28	617	594,6
10	0,245	0,3	600	594,6

5.4.1.2. Referentes a Reação $A \rightarrow B \rightarrow C$.

3ª parte Resultados correspondentes a aplicação do método na forma original. Isto é, os valores das variáveis de estado no estado estacionário usadas no modelo dos ganhos são os mesmos usados no modelo que descreve o sistema e estão relacionados na tabela 5.1 (reação 2).

A combinação de parâmetros de ajuste, usados em cada caso, estão mostrados na tabela 5.4, enquanto as respostas estão graficadas nas figuras 5.10 a 5.14.

Tabela 5.4 Valores dos Parâmetros de Ajuste referentes a terceira parte dos resultados.

caso	Parâmetros de Ajuste						
	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	β_4
6	2	1	1	1	1	1	1
7	1	1	1	1			
8	1	1	1	10^3			
9	85	1	1	1			
10	18,5	1	1	1			

4ª parte resultados correspondentes a aplicação do método (de obtenção dos ganhos) com mudanças, isto é, os valores das variáveis de estado no estado estacionário usados no modelo dos ganhos são diferentes dos usados no modelo que descreve o sistema.

As tabelas 5.5(a) e 5.5(b) mostram os valores dos parâmetros de ajuste e das variáveis de estado no estado estacionário, respectivamente, usados em cada caso. Como feito anteriormente, são apresentados (na forma de gráficos, figuras 5.15 a 5.19) os resultados da aplicação de várias estruturas de controle sobre o sistema.

Tabela 5.5(a) Valores dos Parâmetros de Ajuste referentes a quarta parte dos resultados.

caso	Parâmetros de Ajuste						
	α_1	α_2	α_3	β_1	β_2	β_3	β_4
6	18	1	1	10_5	10^5	255	10^5
7	1	1	1	0,00031			
8	0,35	1	1	1			
9	1	1	1	0,237			
10	19,5	1	1	1			

Tabela 5.5(b) Valores das Variáveis de Estado no Estado Estacionário referentes a quarta parte dos resultados.

caso	Variáveis de Estado no Estado Estacionário.			
	C_{AS}	C_{BS}	T_s	T_{JS}
6	0,42	0,083	600	550
7	0,42	0,083	570	550
8	0,42	0,083	560	550
9	0,42	0,083	530	550
10	0,42	0,083	555	550

Tabela 5.6 Valores dos Parâmetros de Ajuste para estruturas de controle univariável.

linha	Parâmetros de Ajuste			
	α_1	α_2	α_3	β
1	10_4	1	1	1
2	10^4	1	1	1
3	10^4	1	1	1

5.4.2. Discussões

Como descrito anteriormente, as variáveis operacionais importantes possíveis de sofrerem perturbações são F_o , C_{Ao} , T_o , T_{Jo} e F_J . No entanto, com o objetivo de verificar a eficiência das várias estruturas de controle do sistema, padronizou-se perturbar o sistema através de uma única variável em todos os casos. A variável escolhida para ser perturbada foi a concentração de entrada do componente A (C_{Ao}), pois trata-se de uma situação bastante comum nos processos industriais. Optou-se por perturbação do tipo degrau de 10%, por ser uma perturbação adequada para os objetivos deste trabalho sendo que alterações em torno de 10% no valor de C_{Ao} podem ser frequentes.

Na elaboração do modelo para a reação $A \rightarrow B$ a equação do balanço de massa para o componente B foi empregada para fins de controle. Isto porque, além de ser a equação da variável controlada, o número de equações de estado deve ser igual ao número de variáveis manipuladas. O número de variáveis manipuladas passa a ser quatro (F_o , T_o , T_{Jo} e F_J), pois sendo C_{Ao} foi escolhida como a variável perturbada, deve ser fixa após a perturbação.

Em ambos os esquemas reacionais estudados ($A \rightarrow B$ e $A \rightarrow B \rightarrow C$), visa-se a maximização do produto B, sendo então C_B a variável controlada.

5.4.2.1. Referentes a Reação $A \rightarrow B$, usando o Método no Estado Original

O conjunto de figuras 5.2 mostra que não é possível controlar o sistema manipulando várias variáveis de entrada. As variáveis manipuladas atingem valores que excedem os limites operacionais, fazendo com que as variáveis de saída assumam comportamentos que não caminham para um estado estacionário.

Os conjuntos de figuras 5.3, 5.4 e 5.5 mostram que é possível controlar o sistema com "off-set", fazendo a manipulação isolada em

casos univariáveis, manipulando F_j ou T_o ou T_{j_o} . Observando as variáveis manipuladas em cada caso verifica-se, através das figuras 5.4(b) e 5.5(b), que a variação na variável manipulada T_{j_o} é menor que na variável manipulada T_o .

O conjunto de figuras 5.6 mostra que o caso de estrutura de controle univariável, onde manipula-se a vazão de entrada, é praticamente impossível controlar o sistema. Estas figuras mostram o comportamento das variáveis para a melhor combinação de parâmetros de ajuste.

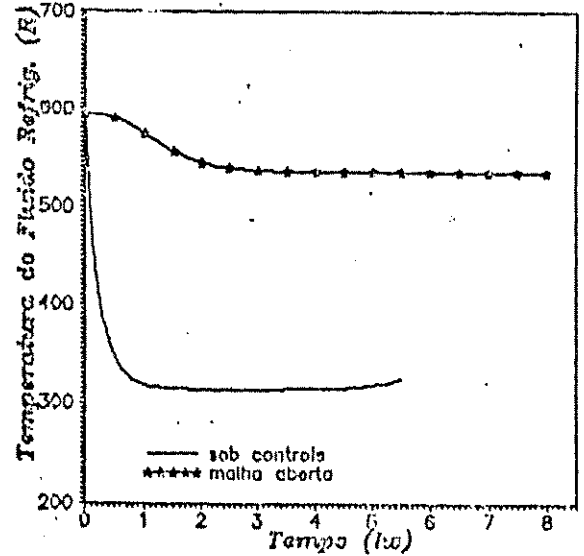
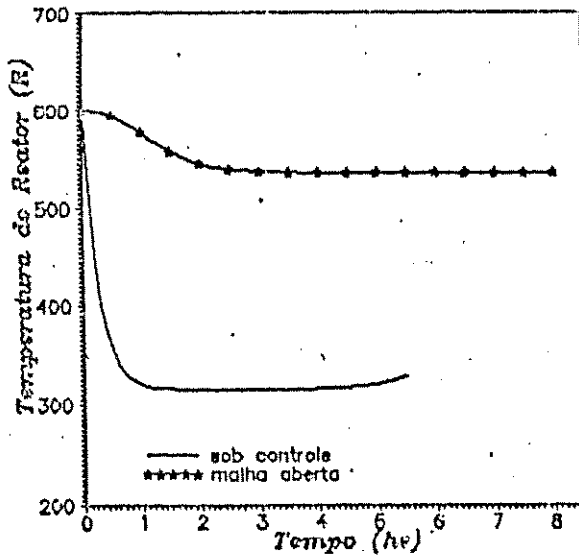
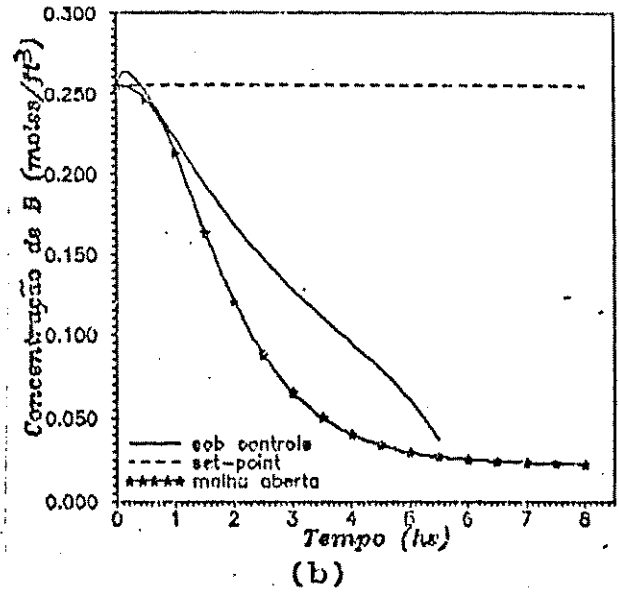
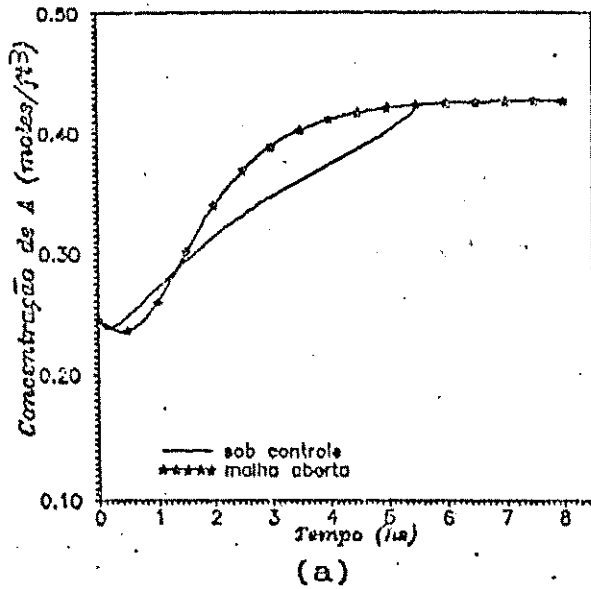


Figura 5.2. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura controle multivariável: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura, (d) temperatura do refrigerante, (e) vazão de entrada, (f) vazão do refrigerante, (g) temperatura de entrada e (h) temperatura de entrada do refrigerante.

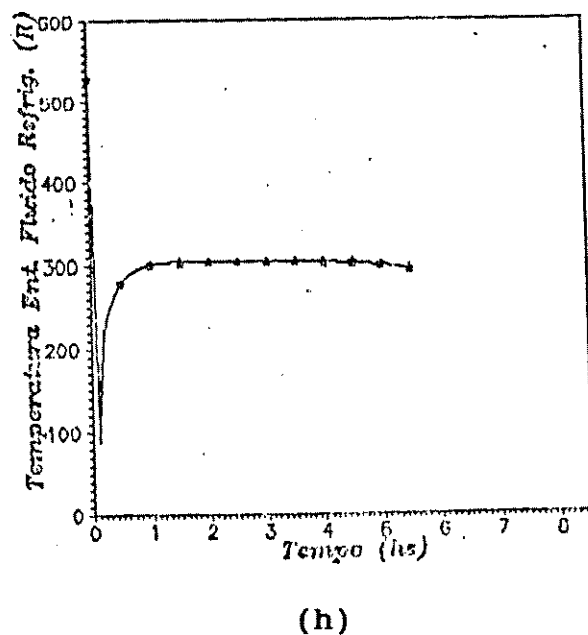
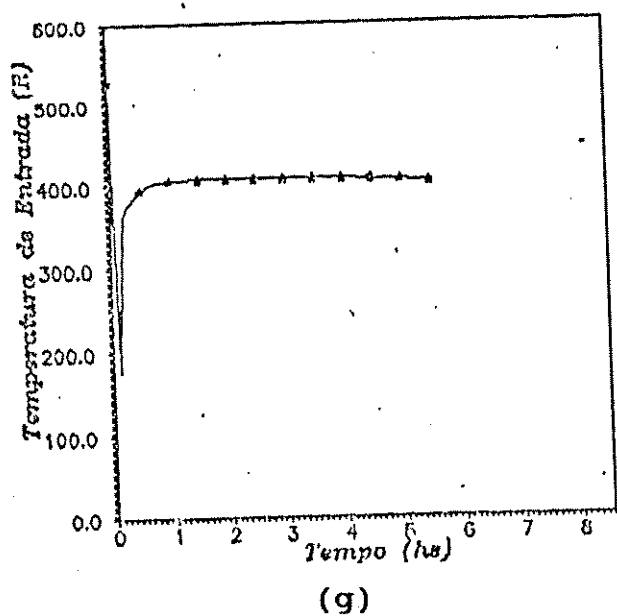
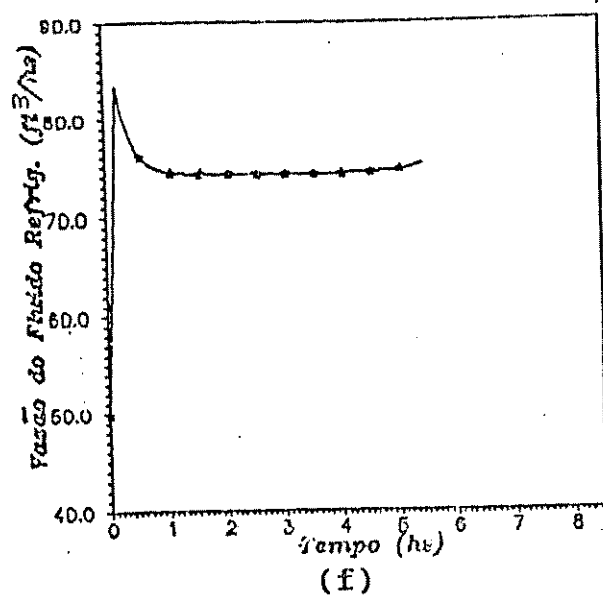
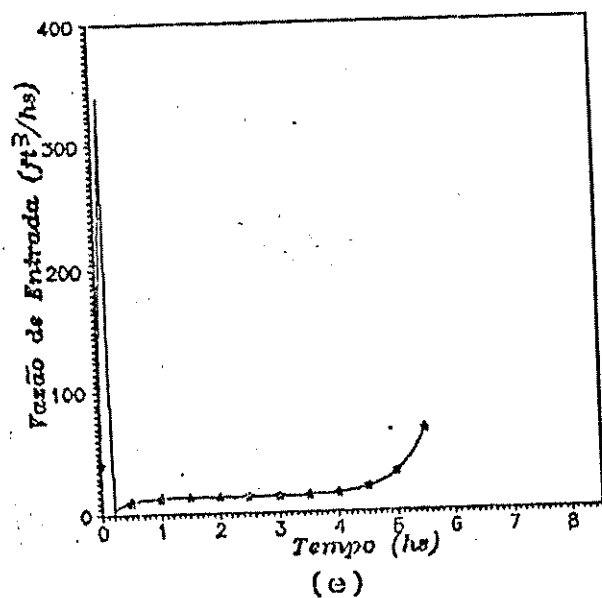
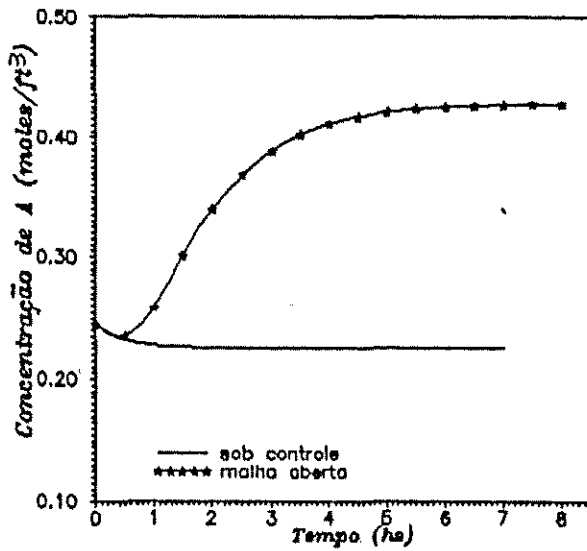
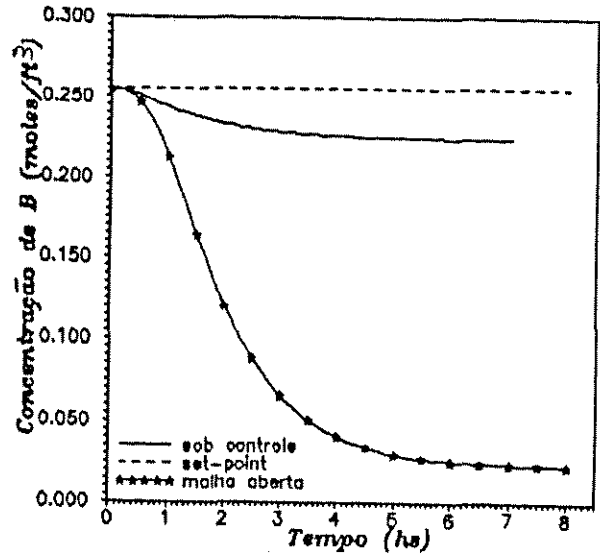


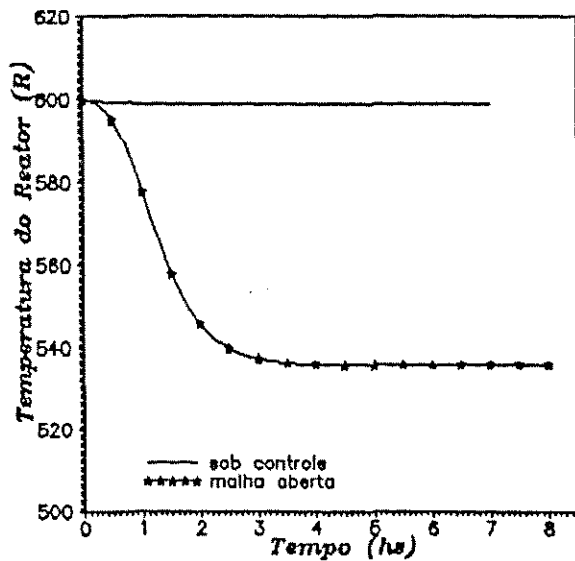
Figura 5.2. (continuação)



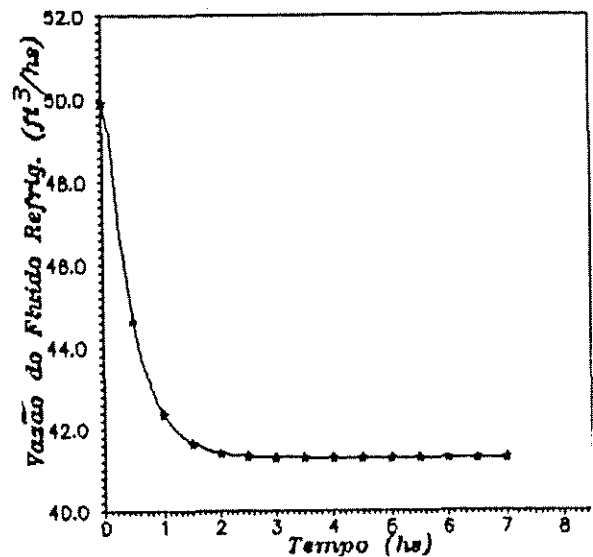
(a)



(b)

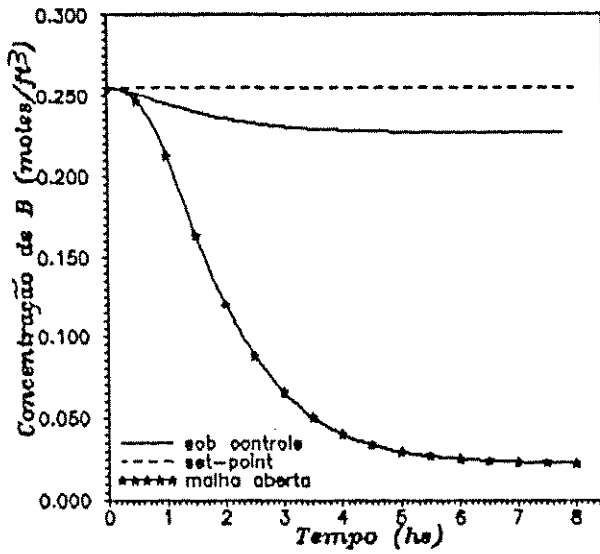


(c)

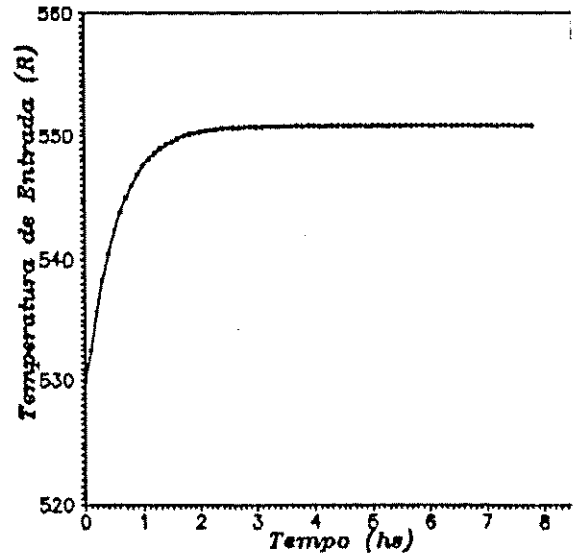


(d)

Figura 5.3. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle univariável baseada na manipulação da vazão de fluido refrigerante: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) vazão do refrigerante - variável manipulada - .

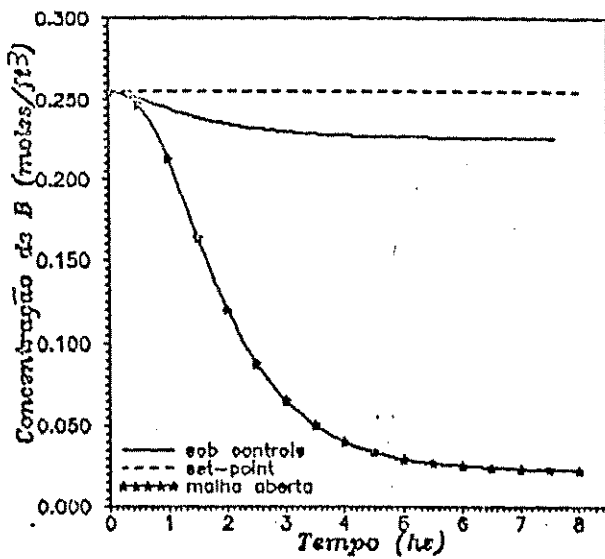


(a)

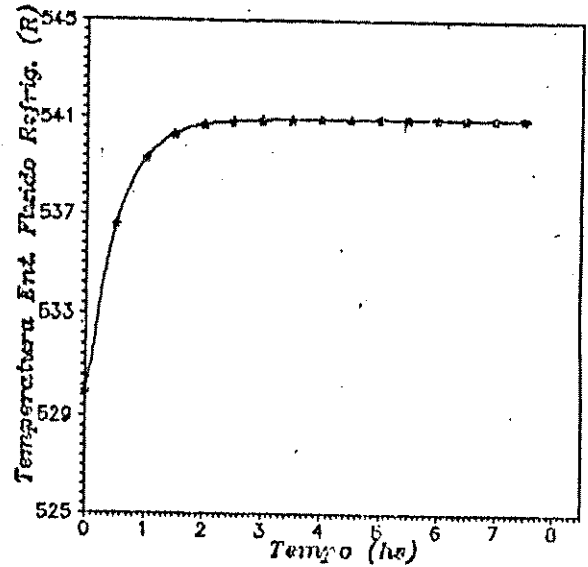


(b)

Figura 5.4. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle univariável baseada na manipulação da temperatura de entrada: (a) concentração de B, (b) temperatura de entrada



(a)



(b)

Figura 5.5. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle univariável baseada na manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante: (a) concentração de B, (b) temperatura do fluido refrigerante - variável manipulada -.

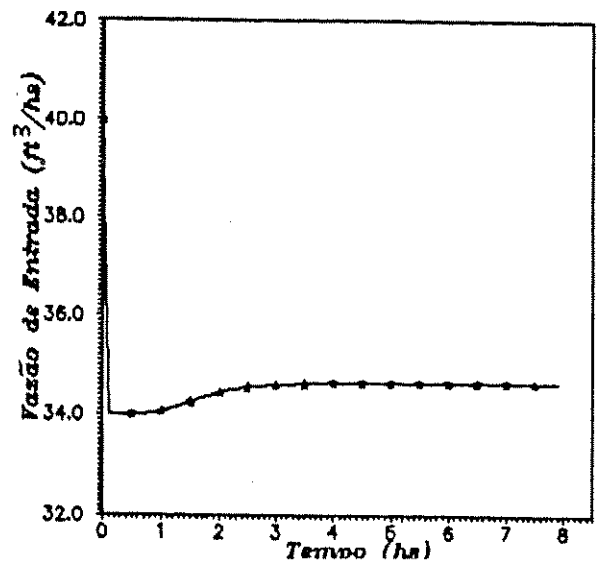
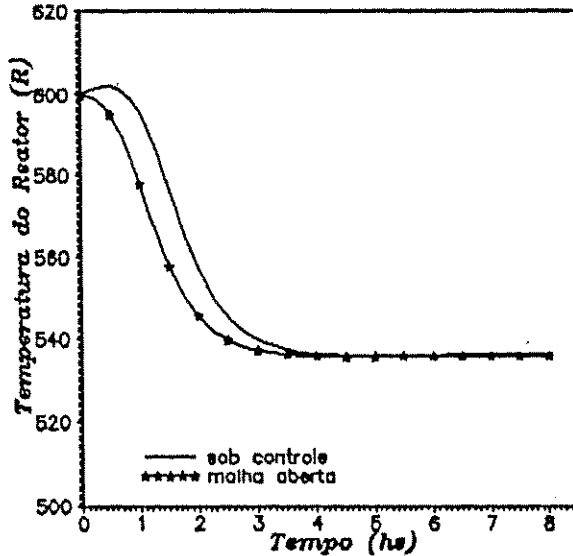
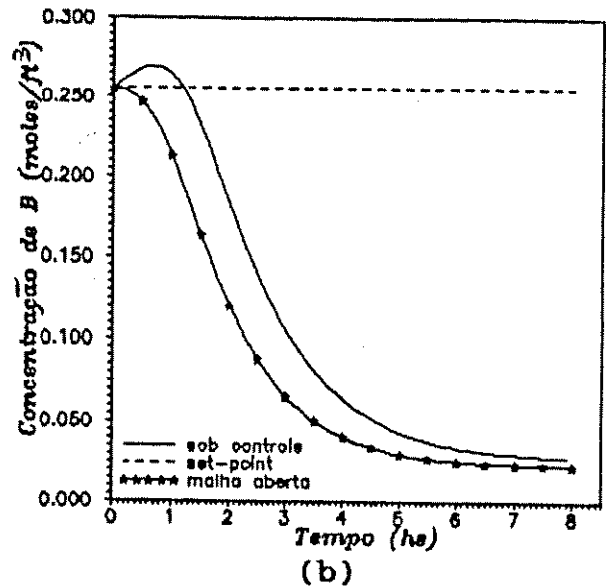
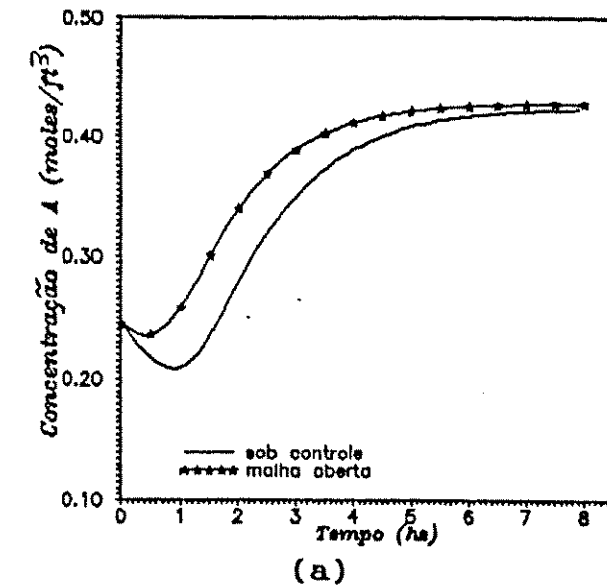


Figura 5.6. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura do controle univariável baseada na manipulação da vazão de entrada: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) vazão de entrada - variável manipulada -

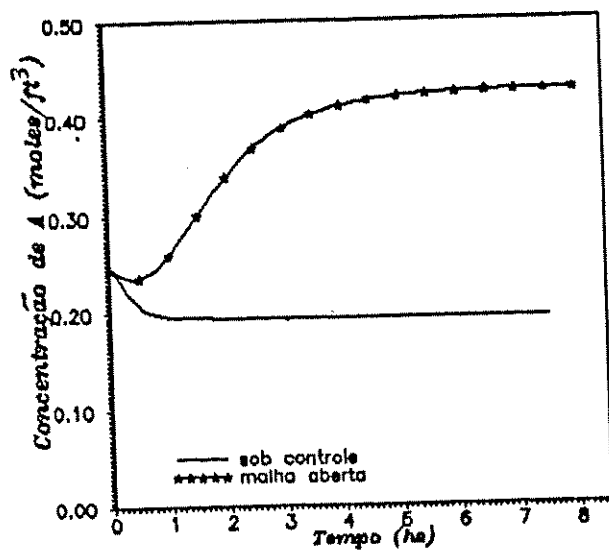
5.4.2.2. Referentes a Reação $A \rightarrow B$ usando o Método com mudanças no Estado Estacionário.

Para os casos de estruturas de controle multivariável e univariável, manipulando-se a vazão de entrada, a mudança dos valores das variáveis de estado no estado estacionário usados no modelo dos ganhos não contribui em nada para a ação de controle. O comportamento das variáveis de saída é o mesmo daqueles mostrados nos conjuntos de figuras 5.6 e 5.2.

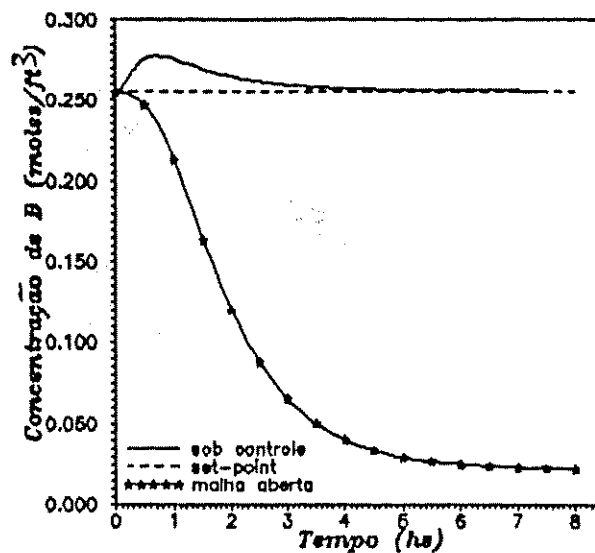
Para os casos univariáveis, manipulando-se F_j ou T_o ou T_{j_o} , consegue-se controlar a variável controlada C_b no estado estacionário original, isto é, sem "off-set". Entretanto deve-se levar em consideração a inversão da resposta em malha fechada pois a variável controlada pode sair de uma faixa de operação segura. Observa-se que tanto a variável controlada C_b como as variáveis manipuladas assumem um comportamento oscilatório até atingir o estado estacionário, como mostram os conjuntos de figuras 5.7, 5.8 e 5.9. Comparando os conjuntos de figuras 5.8 e 5.9, verifica-se que quando manipula-se T_{j_o} o sistema leva um tempo maior para atingir o estado estacionário, mas a variação nas amplitudes das oscilações é menor do que quando manipula-se T_o .

A comparação feita aqui e no item 5.2.1 entre as variáveis manipuláveis T_o e T_{j_o} sugere que entre as duas T_{j_o} pode ser escolhida como a variável manipulada, pois necessita de uma menor variação para efetuar o controle. Outra possível vantagem do ponto de vista prático é que normalmente é mais fácil atingir as condições térmicas adequadas no fluido refrigerante do que no fluido de processo.

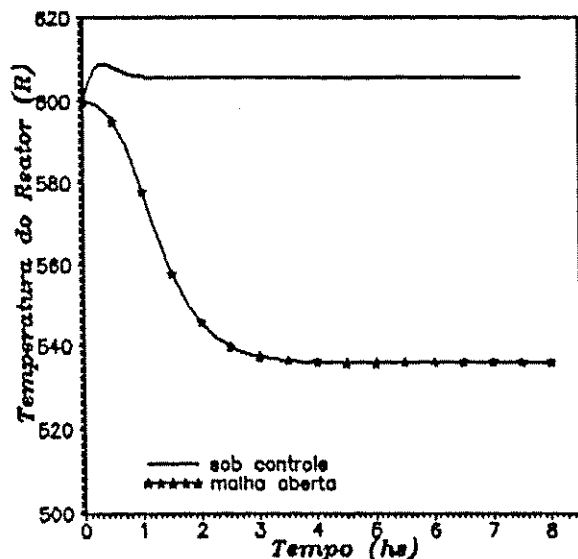
Nas condições aqui estudadas, a manipulação das vazões de entrada tanto do reagente como do refrigerante, não é possível controlar o sistema quando perturba-se a concentração de entrada dos reagentes.



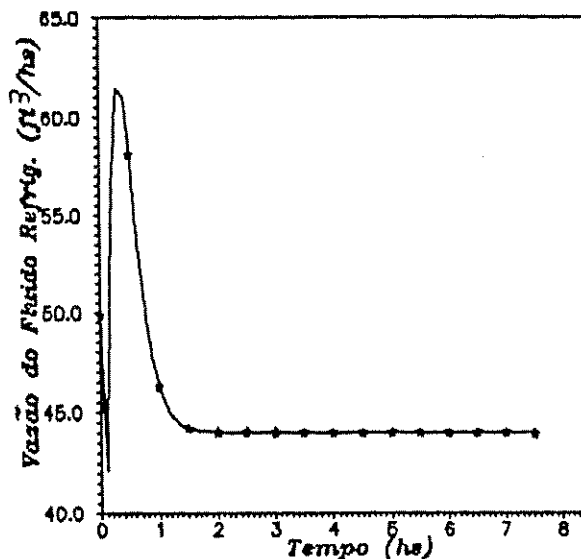
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.7. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle univariável baseada na manipulação da vazão de fluido refrigerante: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) vazão de fluido refrigerante.

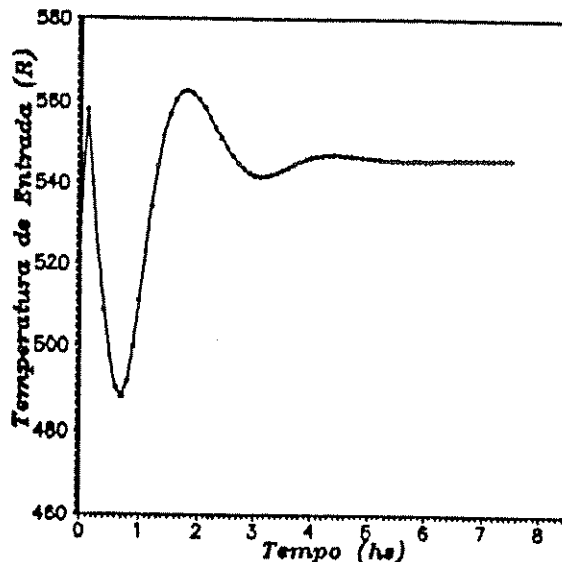
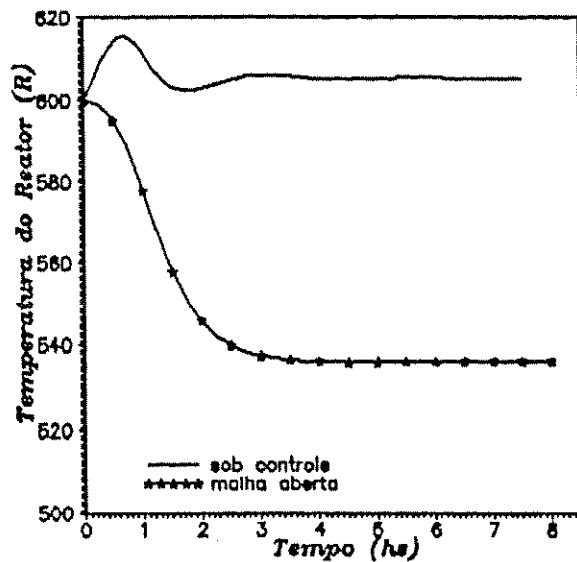
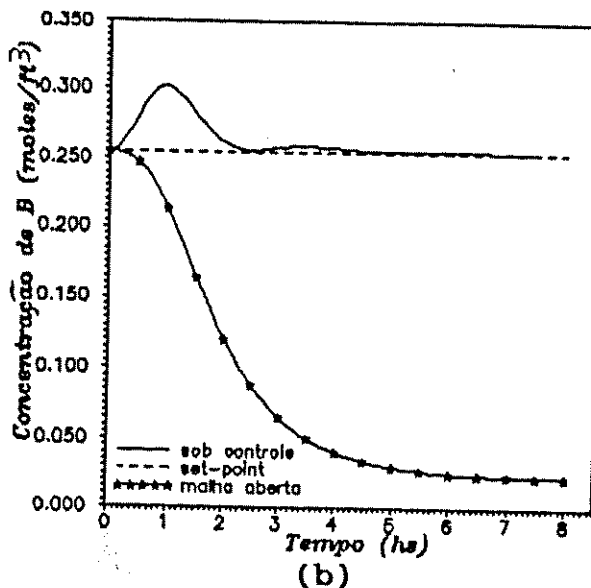
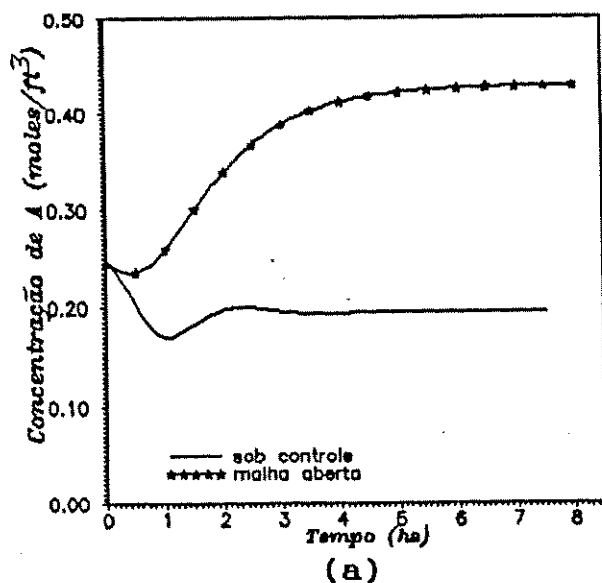


Figura 5.8. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle baseada na manipulação da temperatura de entrada: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) temperatura de entrada - variável manipulada.

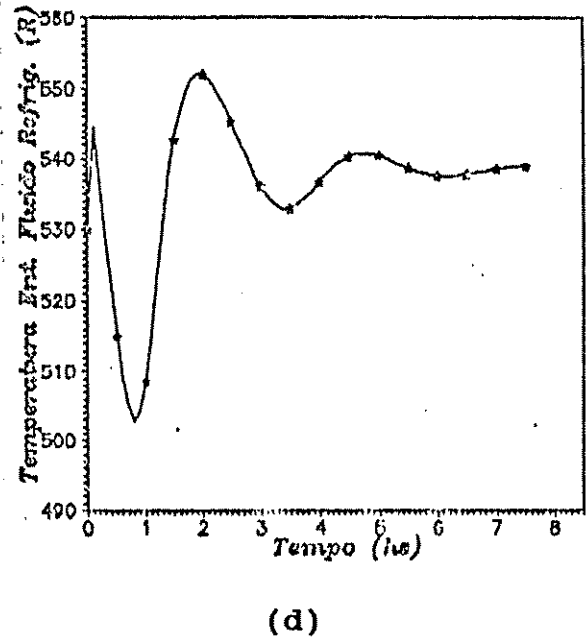
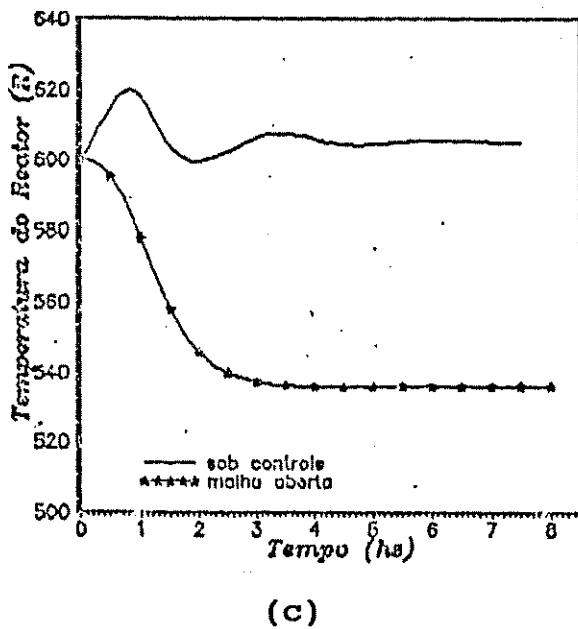
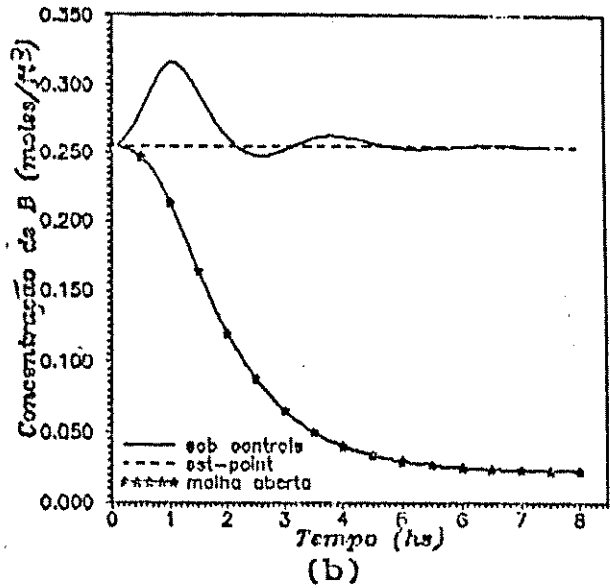
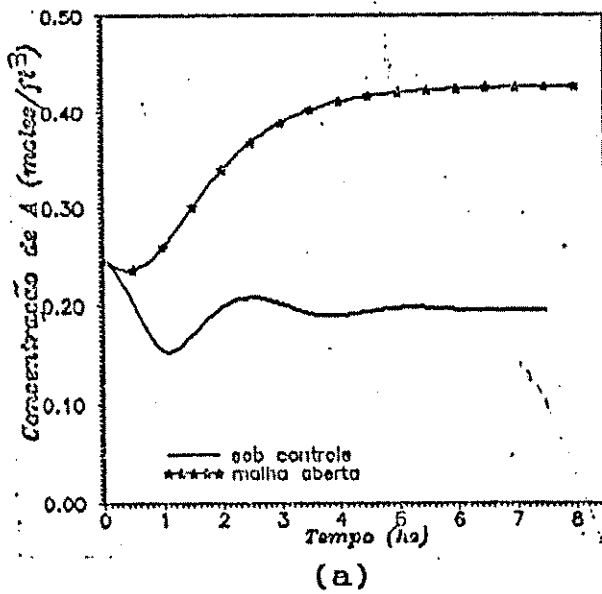


Figura 5.9. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle baseada na manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) temperatura de entrada do fluido refrigerante - variável manipulada -.

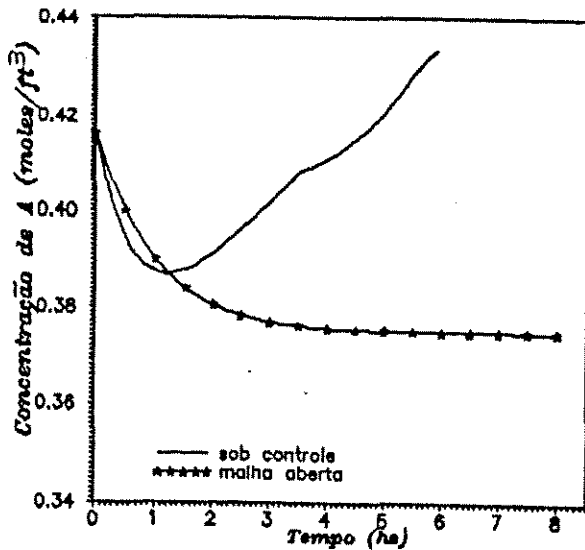
5.4.2.3. Referentes a Reação $A \rightarrow B \rightarrow C$ usando Método no Estado Original.

O conjunto de figuras 5.10 mostra a impossibilidade de controlar o sistema manipulando simultaneamente várias variáveis de entrada (F_o , T_o , T_{j0} e F_j). Como no caso da reação $A \rightarrow B$, as variáveis manipuladas atingem valores que excedem os limites operacionais, fazendo com que as variáveis de saída assumam valores indesejados. As figuras citadas mostram o comportamento das variáveis para a melhor combinação de parâmetros ajustáveis.

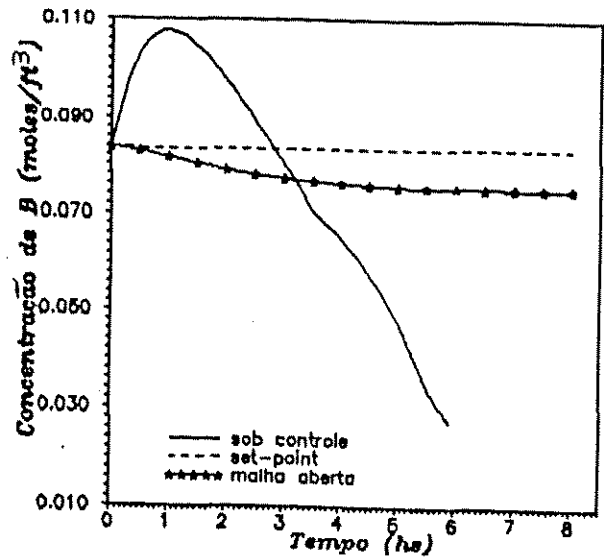
Os conjuntos de figuras 5.12 e 5.11 mostram que as variáveis de saída são insensíveis ao ajuste de parâmetros quando, em estruturas de controle univariáveis, manipula-se a vazão do fluido refrigerante ou a temperatura de entrada. Ou seja, para qualquer valor que os parâmetros de ajuste assumam, as variáveis manipuladas não sofrem alteração e consequentemente as variáveis de saída também não.

O conjunto de figuras 5.13 mostra que em estruturas de controle univariáveis, manipulando-se a temperatura de entrada do fluido refrigerante, não é possível controlar o sistema. No entanto, a variável controlada C_b assume um comportamento cíclico em torno do estado estacionário, o qual pretende-se alcançar com o controle.

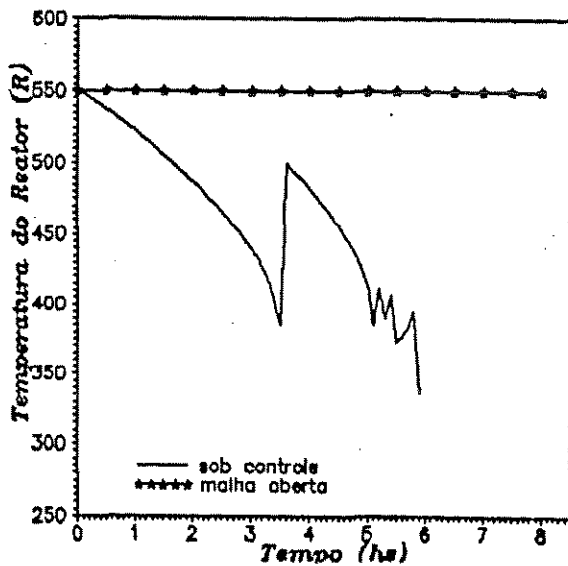
O conjunto de figuras 5.14 mostra que em estruturas de controle univariáveis, para esta reação, a única maneira de controlar o sistema, embora com "off-set", é através da manipulação da vazão de entrada. As figuras citadas mostram o controle da variável controlada C_b alcançado com a melhor combinação de parâmetros de ajuste possível. Este resultado é bastante promissor, uma vez que, como já mencionado anteriormente, estruturas de controle baseadas na manipulação de vazões são industrialmente convenientes.



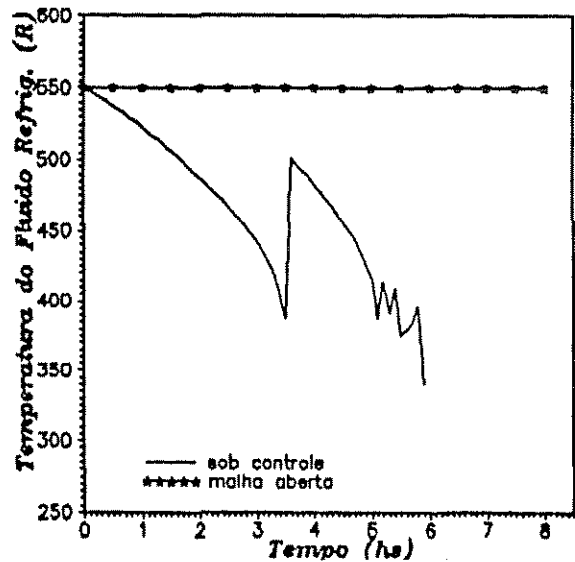
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.10. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle multivariável: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura, (d) temperatura do fluido refrigerante, (e) vazão de entrada, (f) vazão de fluido refrigerante, (g) temperatura de entrada, (h) temperatura de entrada do fluido refrigerante.

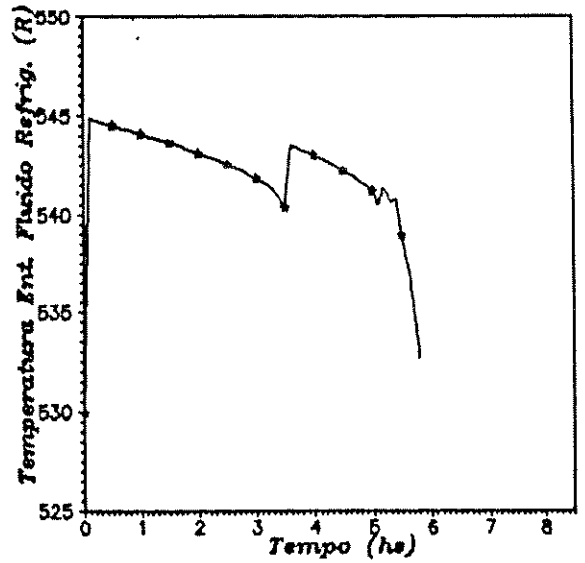
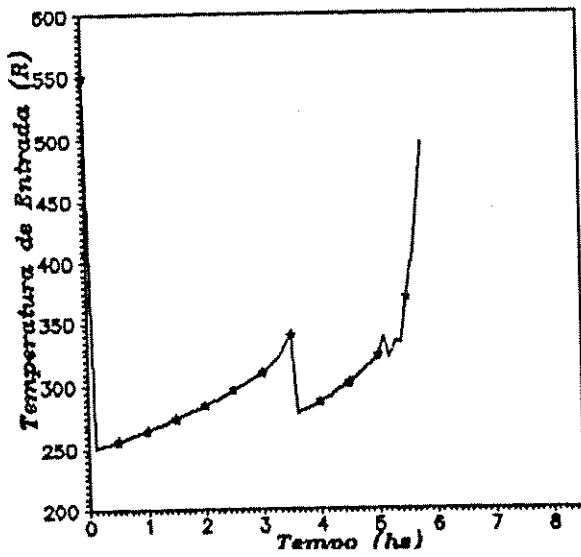
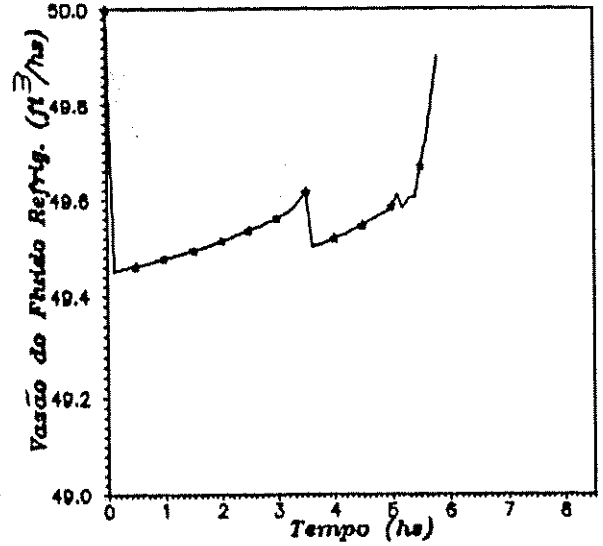
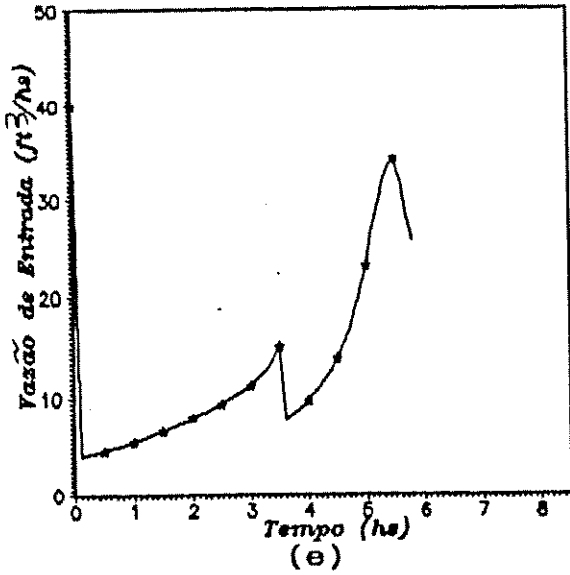


Figura 5.10. (continuação)

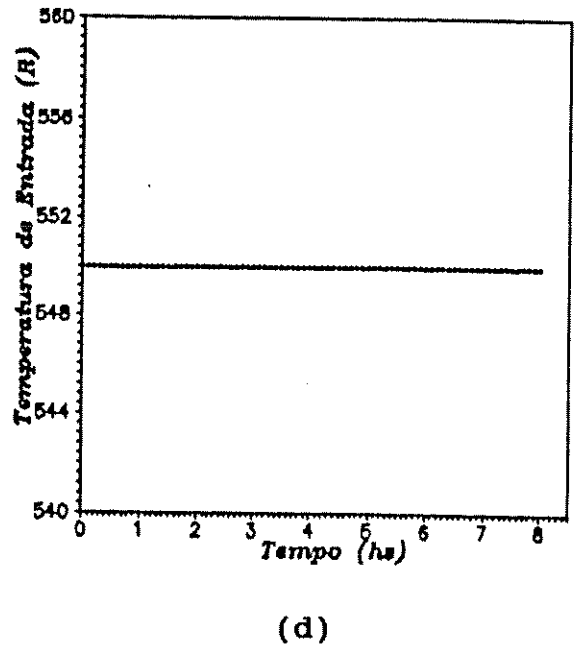
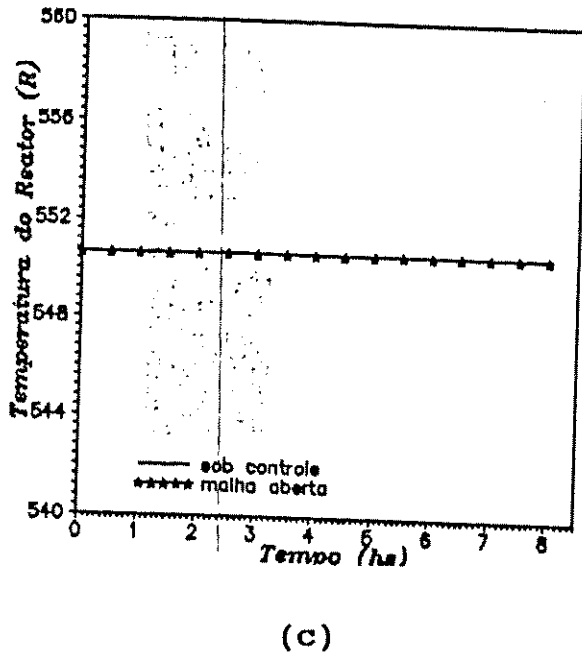
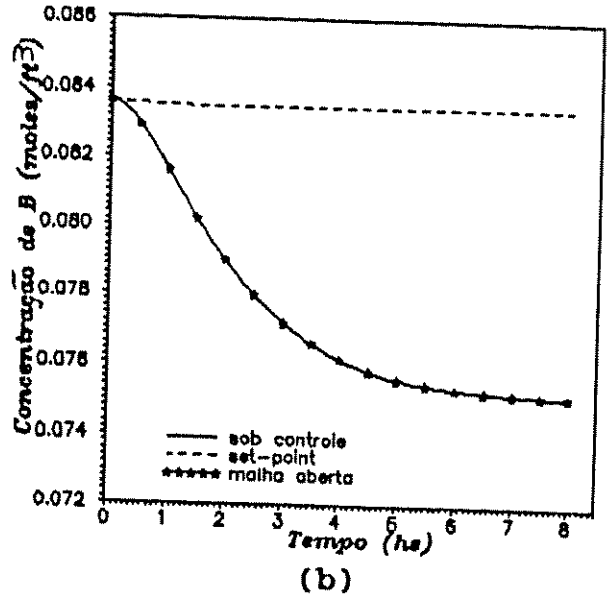
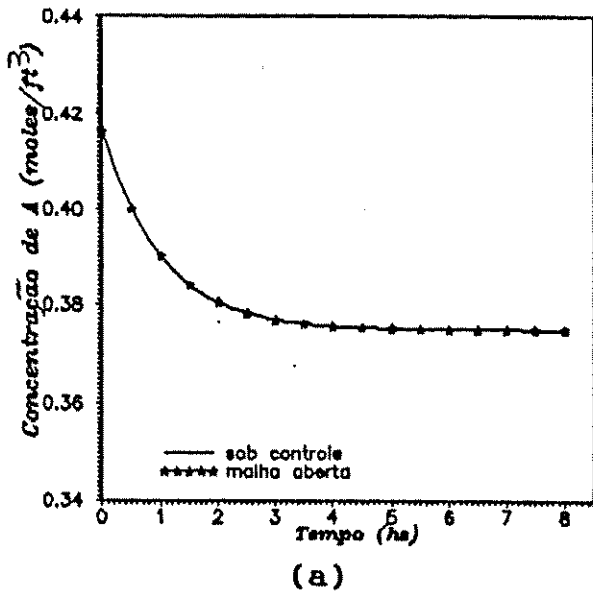
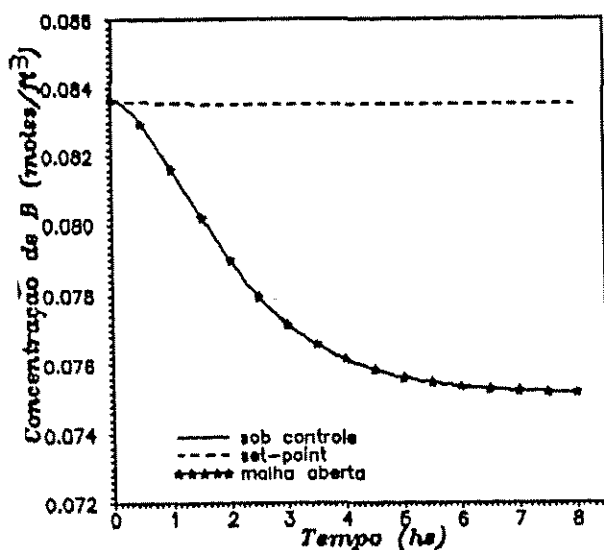
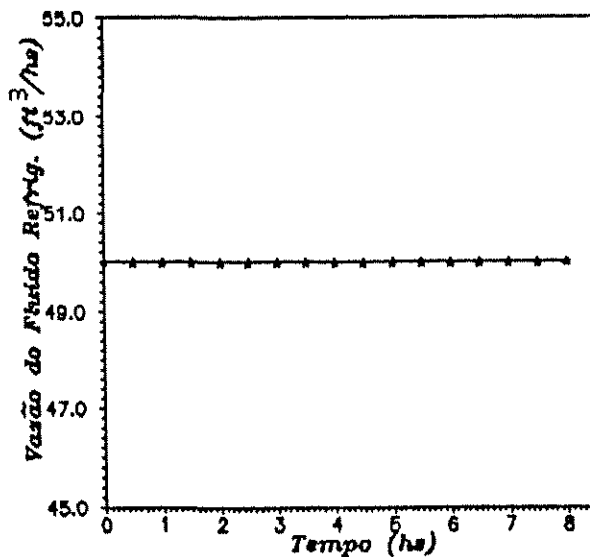


Figura 5.11. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle baseada na manipulação da temperatura de entrada: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) temperatura de entrada - variável manipulada - .



(a)



(b)

Figura 5.12. Comportamento das variáveis, no tempo para estrutura de controle baseada na manipulação da vazão de fluido refrigerante: (a) concentração de B, (b) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada -.

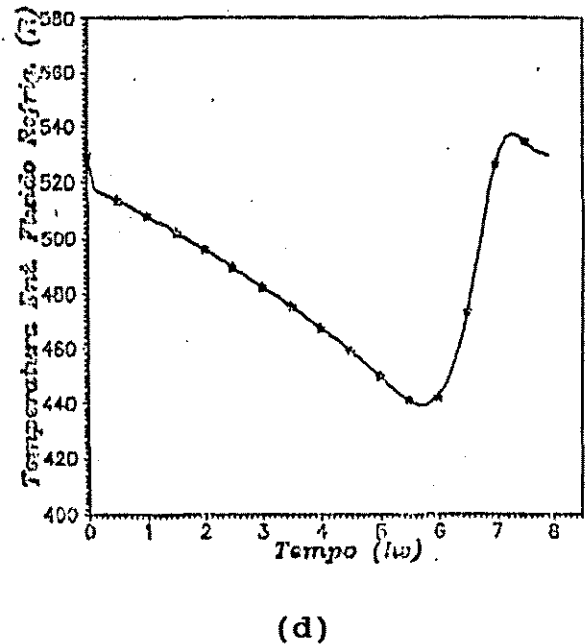
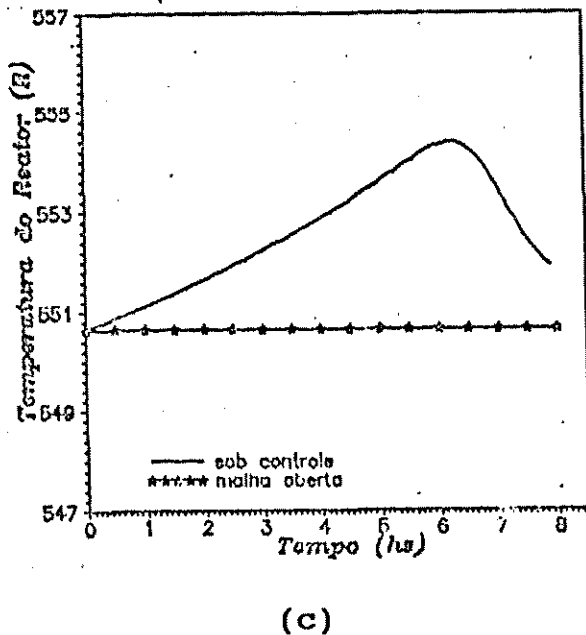
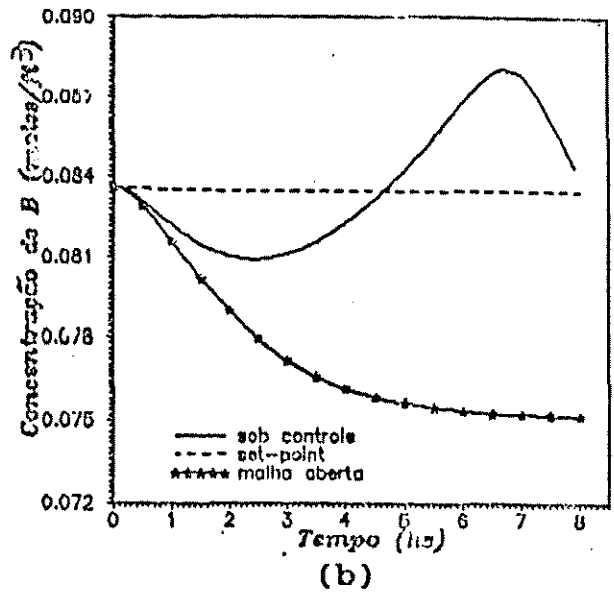
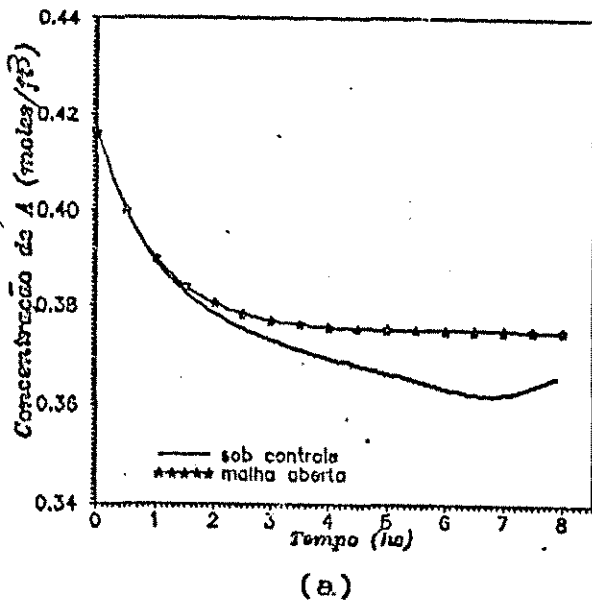
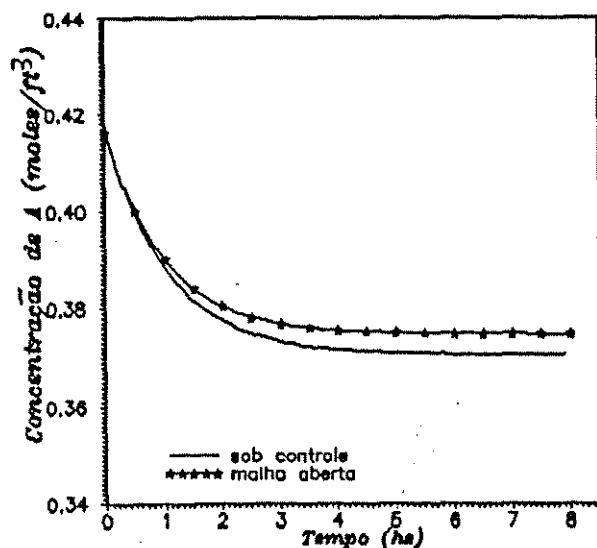
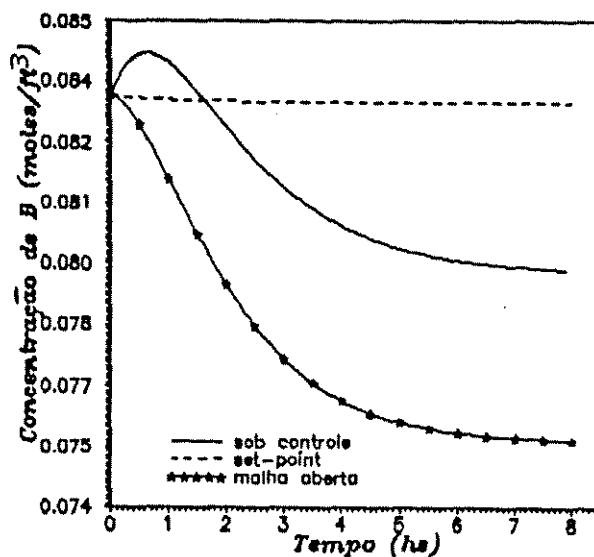


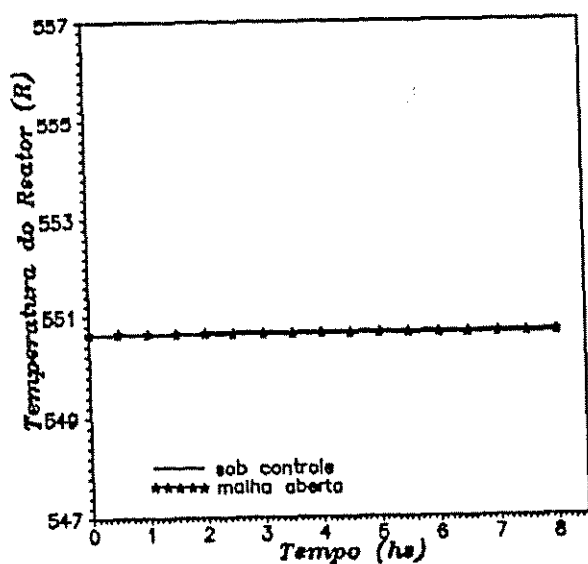
Figura 5.13. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle baseada na manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) temperatura de entrada do fluido refrigerante - variável manipulada -.



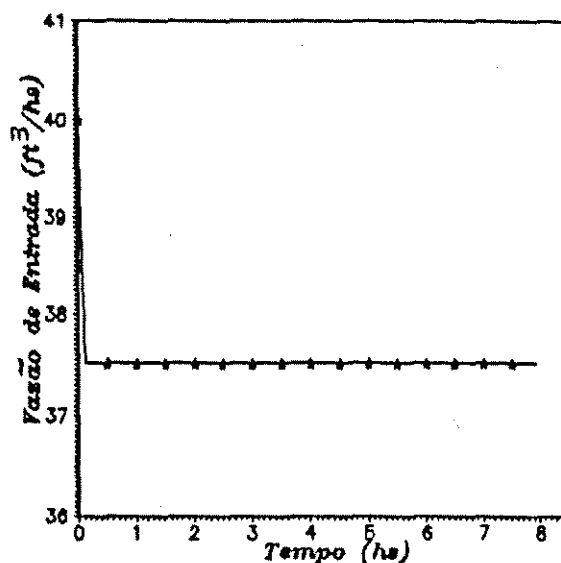
(a)



(b)



(c)



(d)

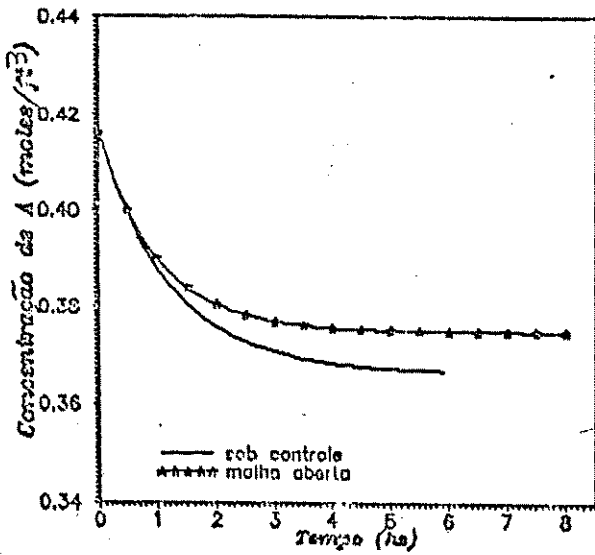
Figura 5.14. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura do controle univariável baseada na manipulação da vazão de entrada: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) vazão de entrada - variável manipulada -.

5.5.2.4. Referentes a Reação $A \rightarrow B \rightarrow C$ usando o Método com mudanças no Estado Estacionário.

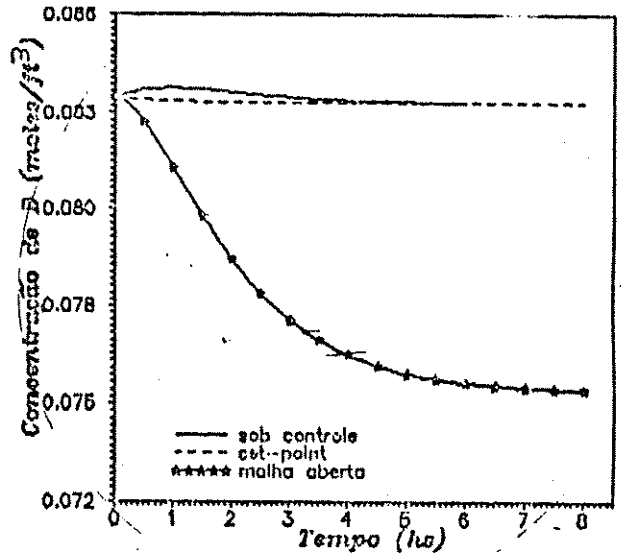
Através dos conjuntos de figuras 5.15, 5.16, 5.17, e 5.19 nota-se que, embora com os parâmetros de ajuste empregados não seja alcançado um controle rápido e preciso, é possível trazer a variável de uma faixa de operação em malha aberta para as proximidades do "set point" desejado. Isto mostra que, com um ajuste mais fino dos parâmetros, um controle satisfatório do sistema pode ser alcançado, para casos univariável ou multivariável. Cuidado especial deve ser tomado com a inversão na malha de resposta.

No entanto, quando manipula-se, em caso univariável, a temperatura de entrada do fluido refrigerante, observa-se (figura 5.18) que não há inversão na curva C_b versus t , comuns aos outros casos, além de controlar o sistema de maneira satisfatória.

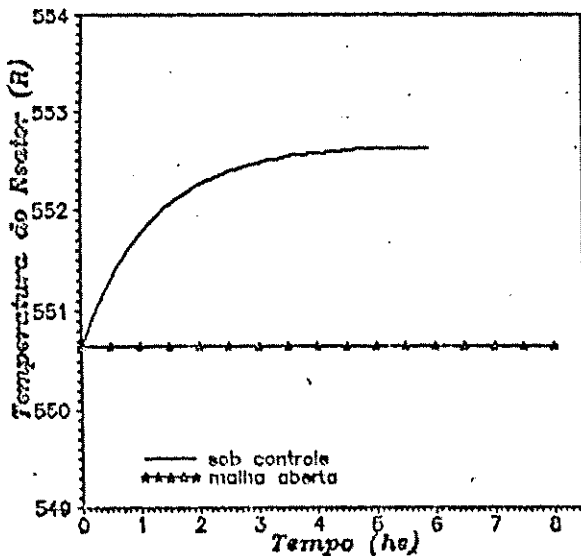
Para o caso da vazão de entrada do reagente sabe-se que é uma variável facilmente manipulada, a exemplo da vazão do fluido refrigerante e embora não seja tão atraente quanto esta última por afetar a produção do sistema, pode ser uma alternativa bastante interessante. A figura 5.19(b) mostra como o comportamento desta variável permite o controle do sistema, praticamente sem "off-set". O conjunto de figuras 5.19 mostra o comportamento das variáveis de saída e da variável manipulada. Convém ressaltar que apesar do bom desempenho desta estrutura no controle de reatores tipo tanque contínuo (sistema agregado), ela pode causar problemas de resposta inversa em sistemas distribuídos (por exemplo, reatores de tipo leito fixo) como mostrado por McGreavy e Maciel Filho (1992).



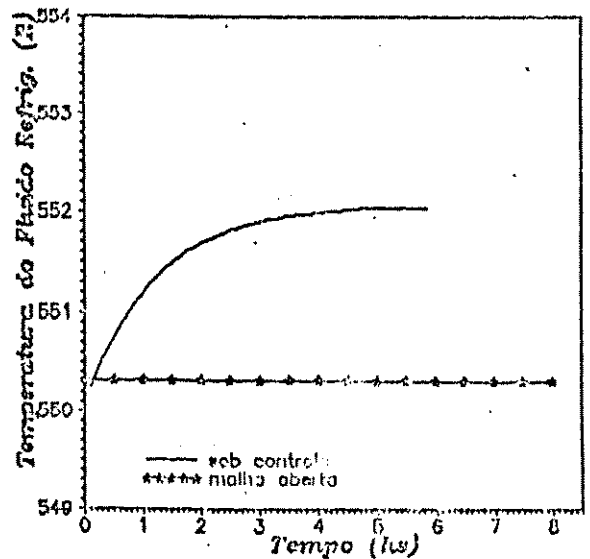
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.15. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle multivariável: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura, (d) temperatura do fluido refrigerante, (e) vazão de entrada, (f) vazão de fluido refrigerante, (g) temperatura de entrada, (h) temperatura de entrada do fluido refrigerante.

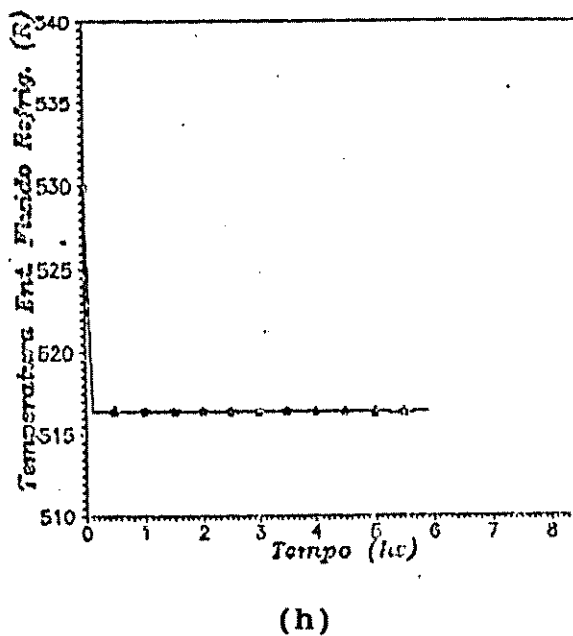
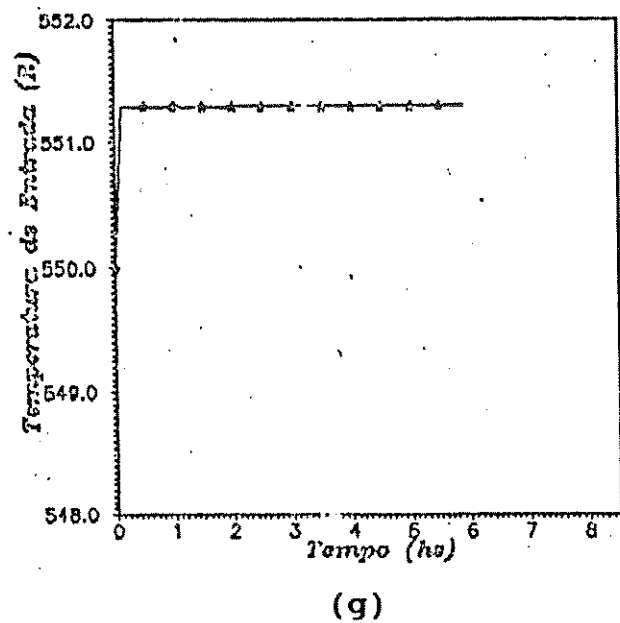
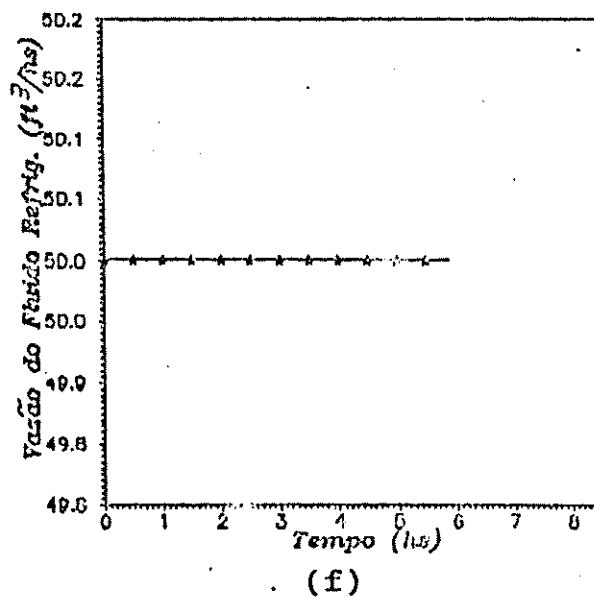
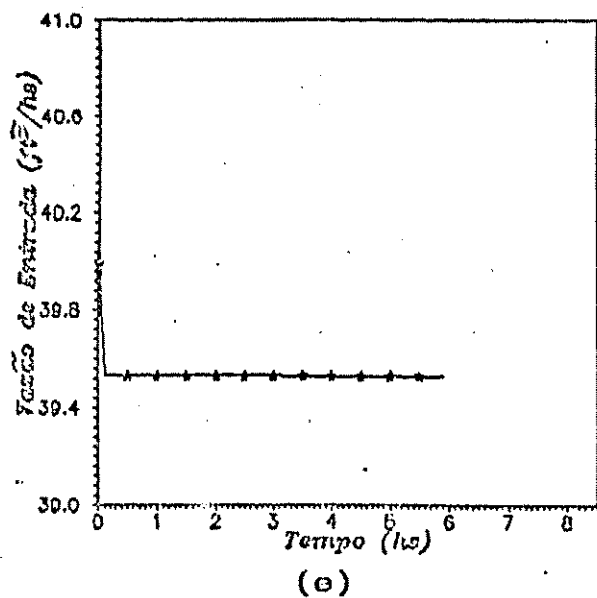
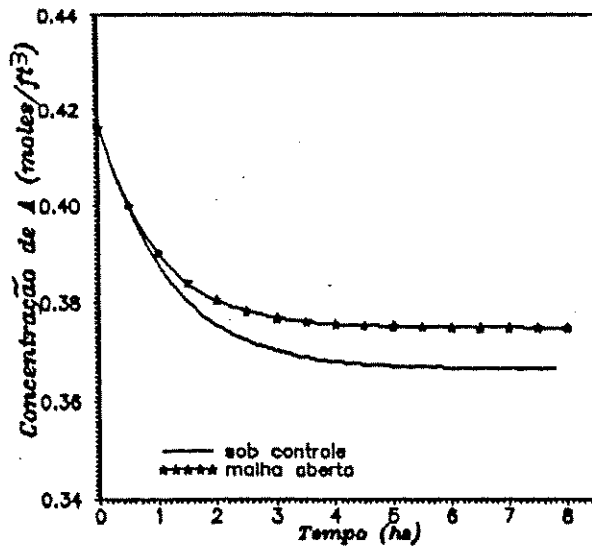
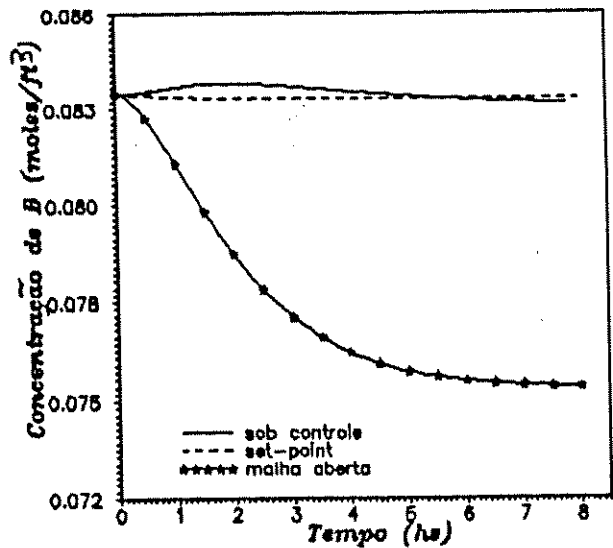


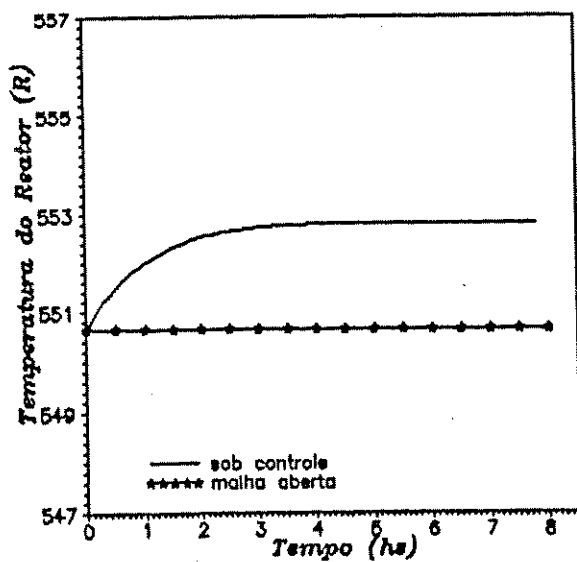
Figura 5.15. (continuação)



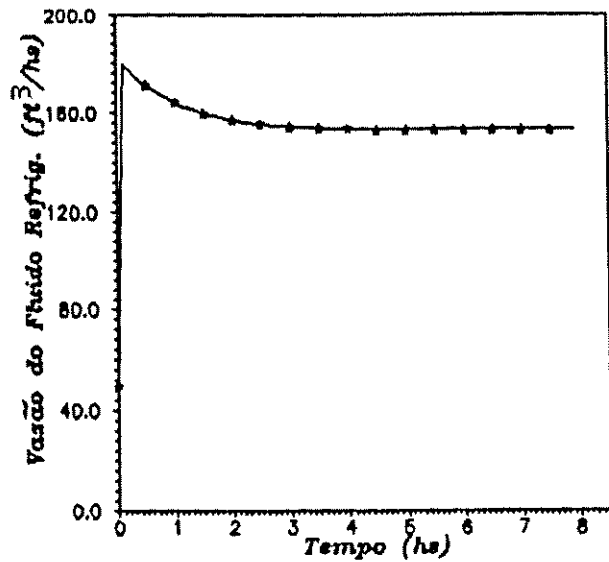
(a)



(b)

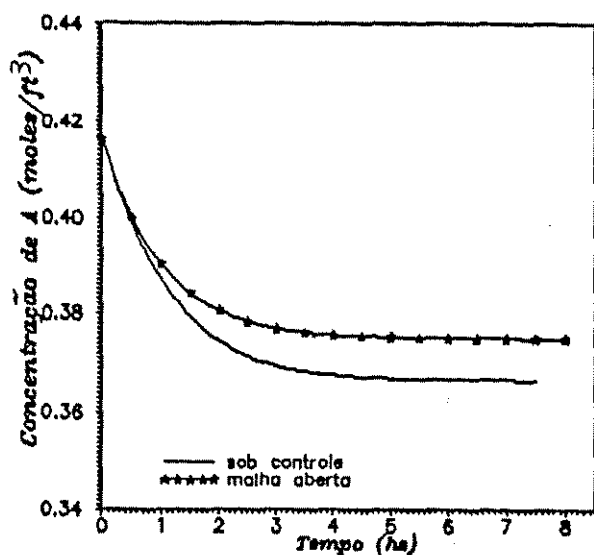


(c)

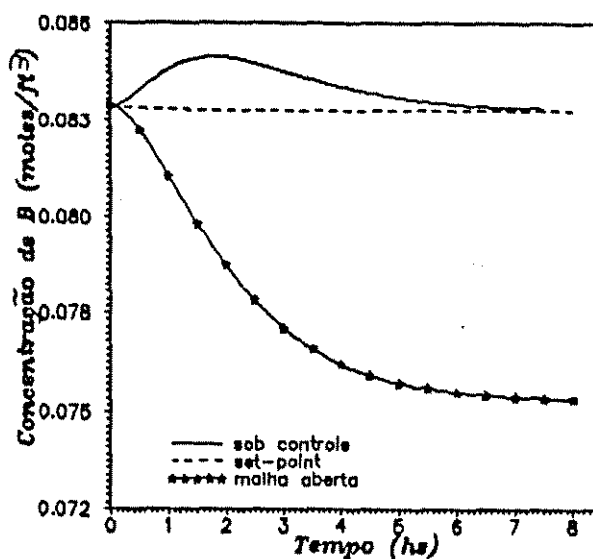


(d)

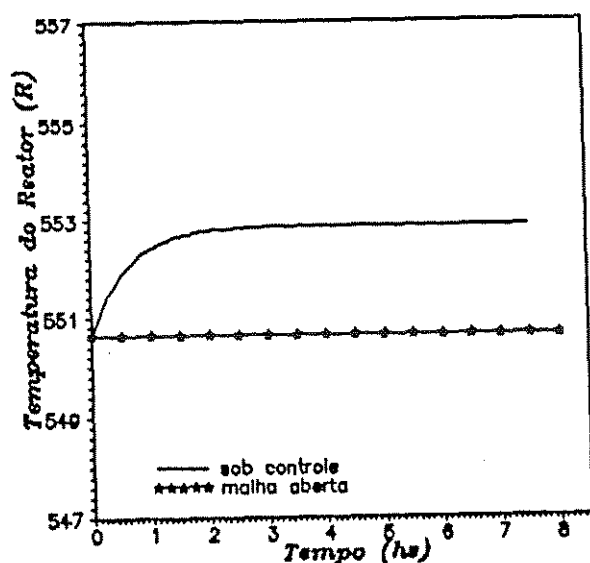
Figura 5.16. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle univariável baseada na manipulação da vazão de fluido refrigerante: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) vazão de fluido refrigerante.



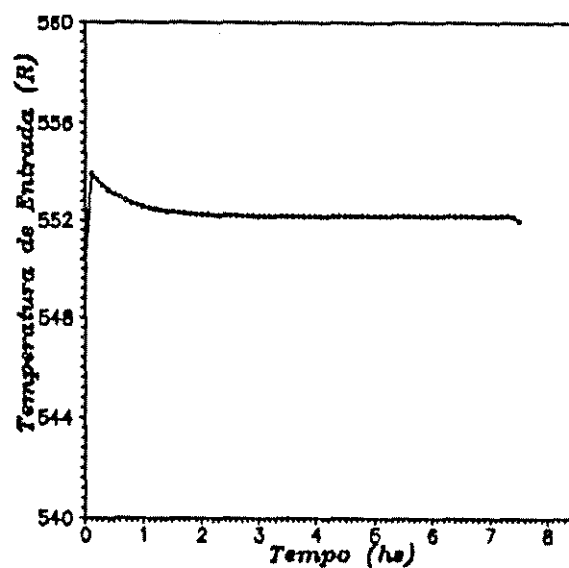
(a)



(b)

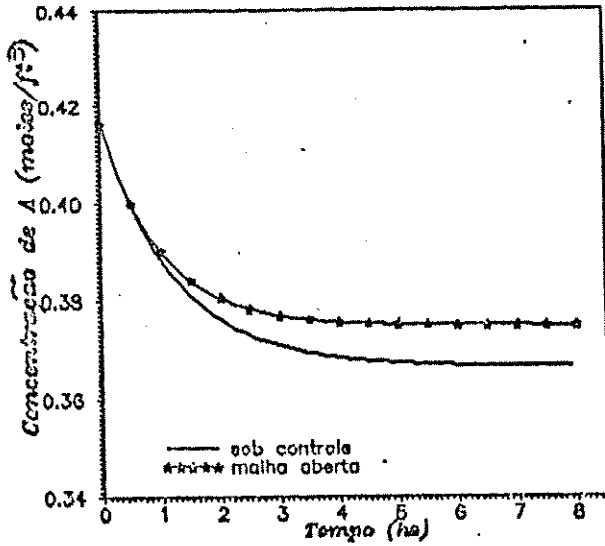


(c)

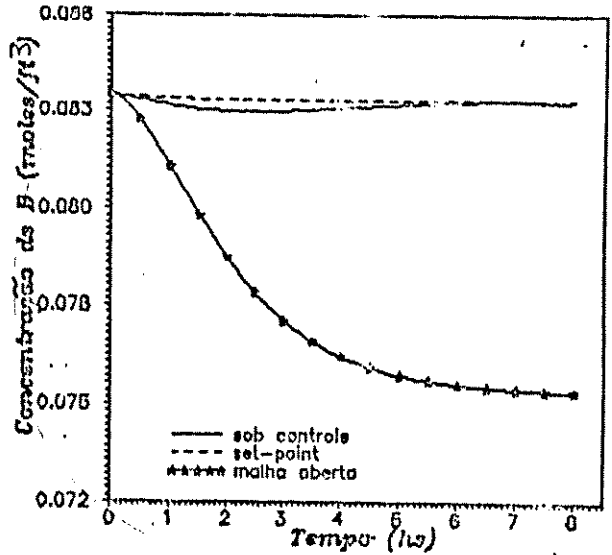


(d)

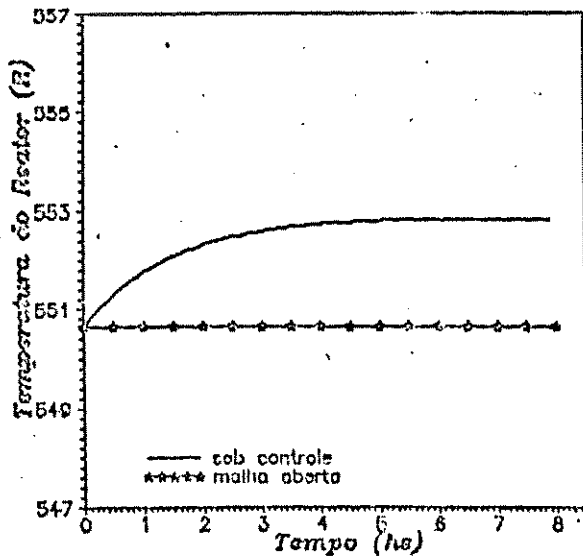
Figura 5.17. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle baseada na manipulação da temperatura de entrada: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) temperatura de entrada.



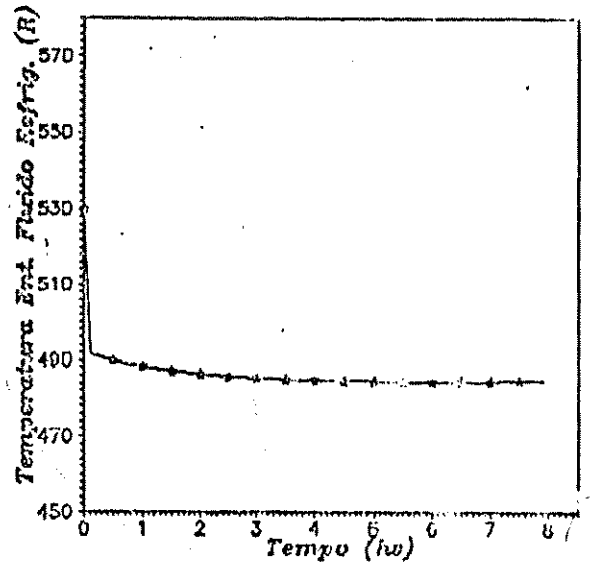
(a)



(b)

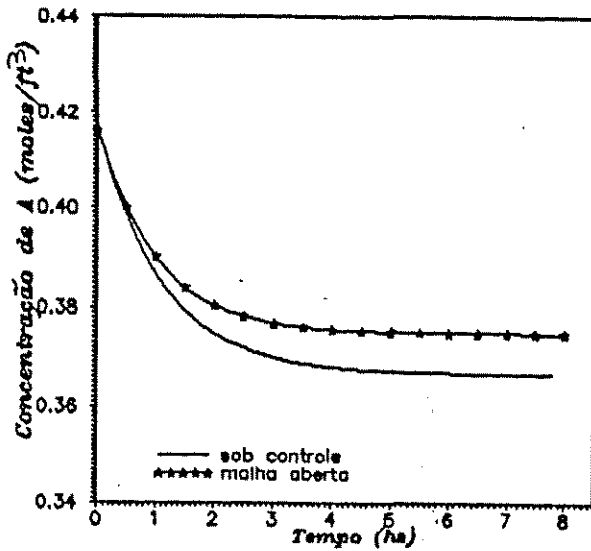


(c)

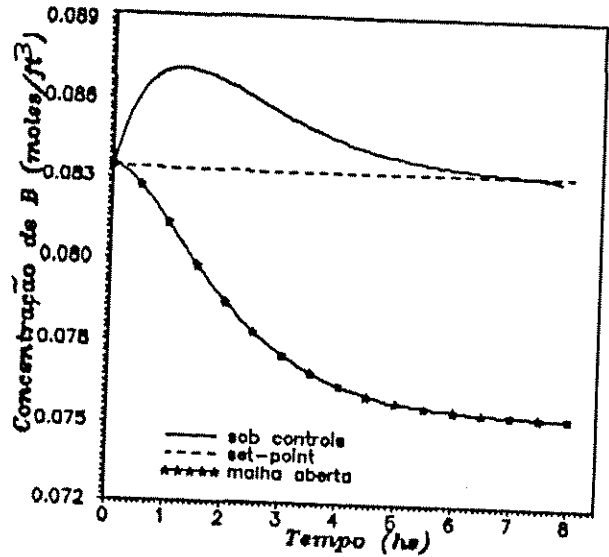


(d)

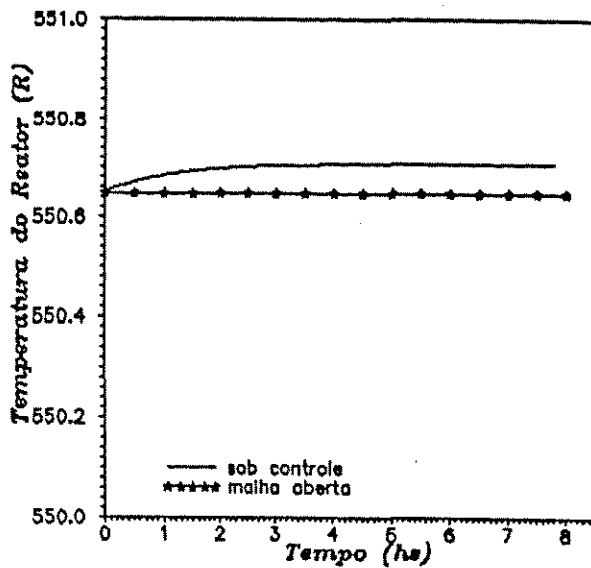
5.18 Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura de controle baseada na manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) temperatura de entrada do fluido refrigerante



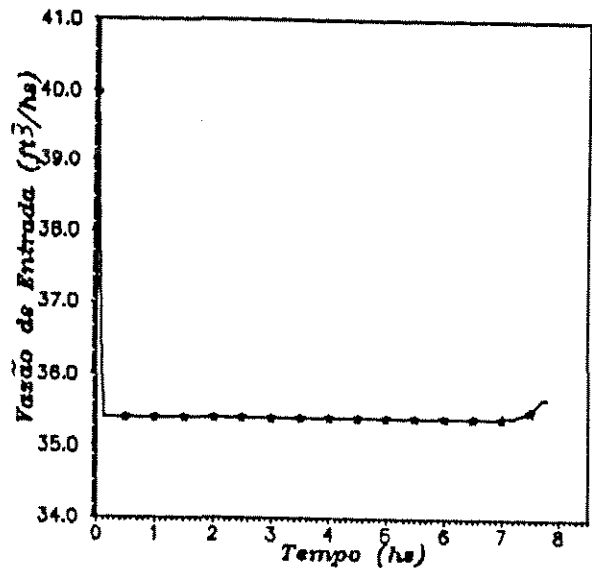
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.19. Comportamento das variáveis, no tempo, para a estrutura do controle univariável baseada na manipulação da vazão de entrada: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) vazão de entrada - variável manipulada -.

5.4.2.5. Discussões Gerais

Observa-se durante a aplicação do método em sua forma original para a reação $A \rightarrow B$ em caso univariável, manipulando-se a vazão do fluido refrigerante, que quando consegue-se efetivar o controle sobre o sistema, esse se dá sempre com a presença de um "off-set" na variável controlada C_B . Verifica-se que isso acontece independentemente da variável perturbada e da magnitude da perturbação feita. O conjunto de figuras 5.20, 5.21 e 5.22 mostra isso. A figura 5.20 mostra uma perturbação de 2% em C_{A0} quando comparada com as figuras 5.21 originadas de uma perturbação de 10% em C_{A0} e também com relação às figuras 5.22 que mostram uma perturbação de 6% em T_0 . Nos 3 casos aparece o "off-set" na curva C_B versus t . A tabela 5.6 mostra a combinação de parâmetros de ajuste para os três casos.

Para a reação $A \rightarrow B$, caso univariável manipulando-se a vazão de entrada dos reagentes, não obteve-se controle usando o método na forma original ou com mudanças nas variáveis de estado no estado estacionário. Isto é também verdade para perturbações na temperatura de entrada, manipulando-se a vazão de entrada dos reagentes. O conjunto de figuras 5.23 mostra o caso quando perturba-se a temperatura de entrada e aplica-se o método na forma original. O conjunto de figuras 5.24 mostra o caso quando usa-se o método com mudanças.

O conjunto de figuras 5.10 mostra um sistema quando não se consegue o controle. As variáveis manipuladas excedem os limites operacionais, fazendo com que as variáveis de saída (estado) caminham para valores indesejáveis.

Observa-se que a aplicação do método na forma original sempre produz ganhos constantes ao longo do tempo e produz um controle da variável controlada com "off-set" (o que pode ser visto no conjunto de figuras 5.3), e isso caracteriza controladores proporcionais. O controle é aqui chamado de controle ótimo proporcional.

Os dois parágrafos acima colocam dois problemas quando

aplica-se o método na forma original - problemas de "off-set" e limites operacionais - que são eliminados na maioria das vezes pela mudança dos valores das variáveis de estado no estado estacionário, usados no modelo dos ganhos que fornece os ganhos usados nos cálculos das variáveis manipuladas. O conjunto de figuras 5.10 apresenta o problema de limites operacionais, os quais são eliminados com as mudanças citadas no método, como mostra o conjunto de figuras 5.15.

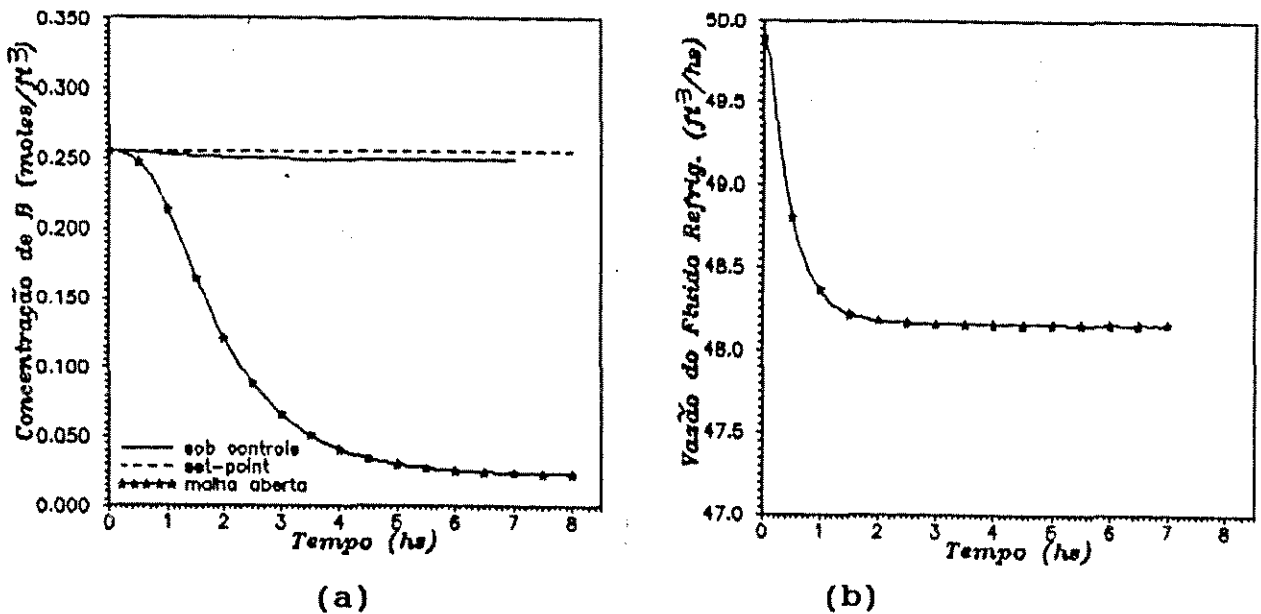
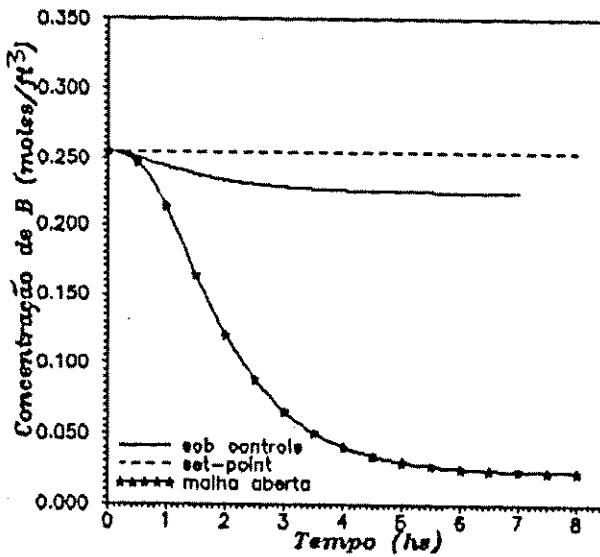
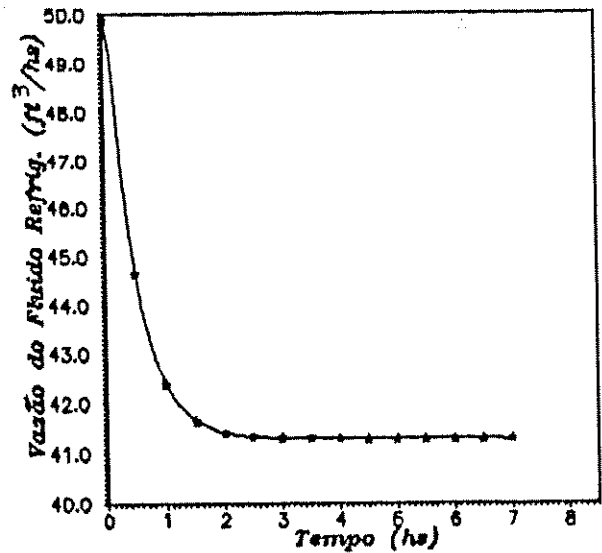


Figura 5.20. Comportamento, no tempo, das variáveis controlada e manipulada para uma estrutura de controle univariável baseada na manipulação da vazão de fluido refrigerante: (a) variável controlada - concentração de B - e (b) variável manipulada - vazão de fluido refrigerante -.

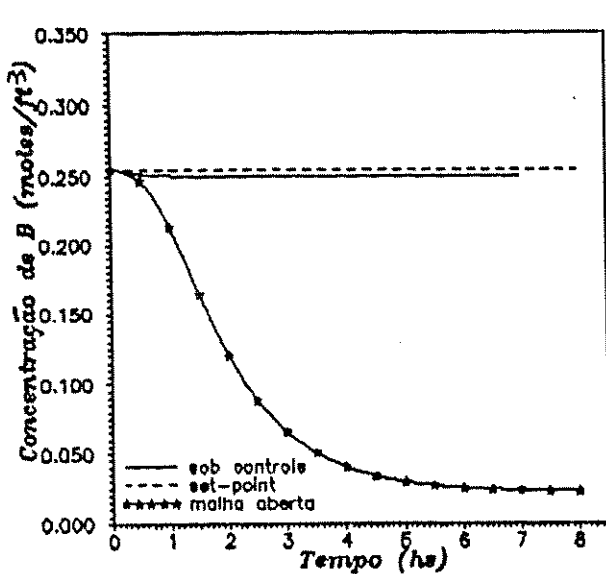


(a)

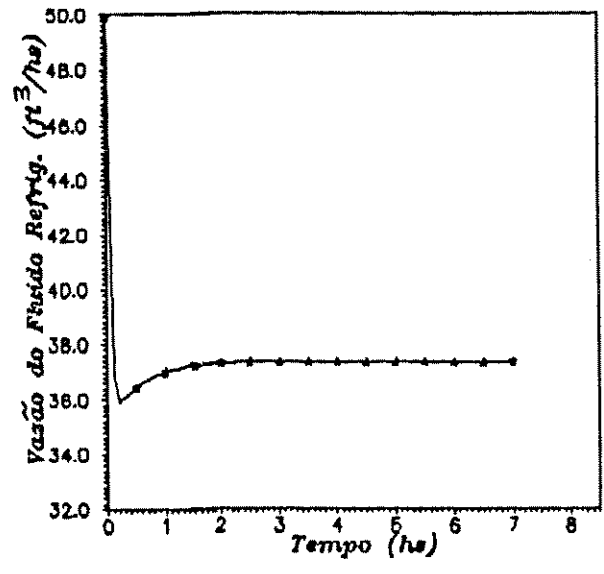


(b)

Figura 5.21. Comportamento, no tempo, das variáveis controlada e manipulada para uma estrutura de controle univariável baseada na manipulação da vazão do refrigerante: (a) variável controlada - concentração de B - e (b) vazão de fluido refrigerante -.

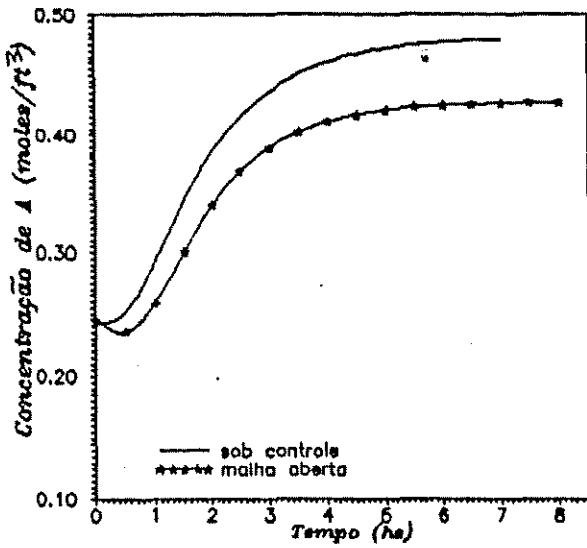


(a)

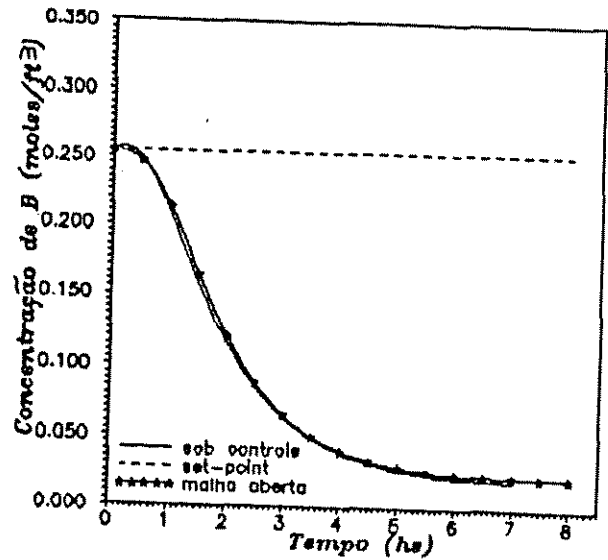


(b)

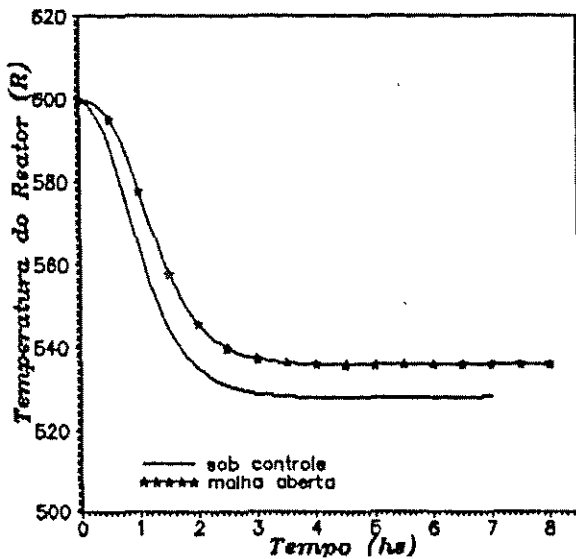
Figura 5.22. Comportamento, no tempo, das variáveis controlada e manipulada para uma estrutura de controle univariável baseada na manipulação da vazão de fluido refrigerante: (a) variável controlada - concentração de B - e (b) vazão de fluido refrigerante



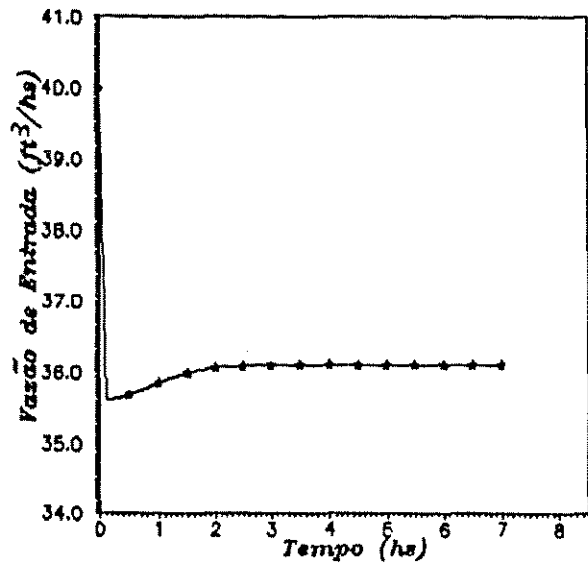
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.23. Comportamento das variáveis, no tempo, para uma estrutura de controle baseada na manipulação da vazão de entrada: (a) concentração de A, (b) concentração de B, (c) temperatura e (d) vazão de entrada - variável manipulada -.

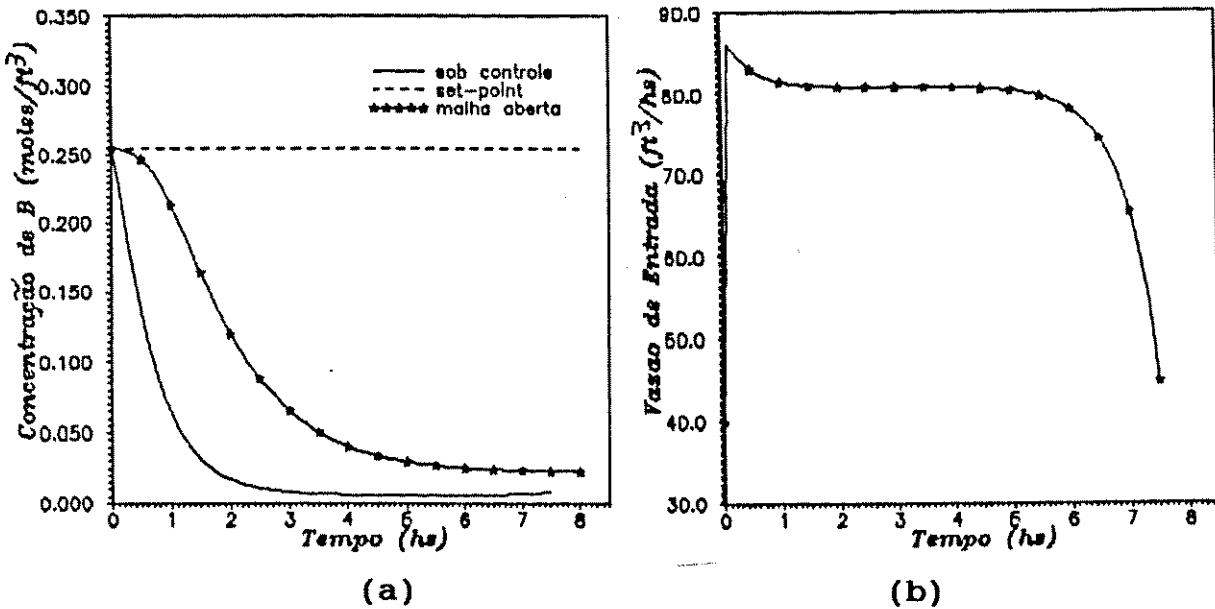


Figura 5.24. Comportamento, no tempo, das variáveis controlada e manipulada para uma estrutura de controle univariável baseada na manipulação da vazão de entrada: (a) variável controlada - concentração de B - e (b) variável manipulada - vazão de entrada -.

O passo de integração das equações dos modelos - seja modelo do sistema ou modelo dos ganhos - é um fator importante no algoritmo de controle. O passo de integração usado no modelo dos ganhos deve ser menor que o usado no modelo do sistema. Este parâmetro deve, portanto, ser cuidadosamente escolhido, mantendo-se um compromisso entre a performance do sistema de controle e aplicações em tempo real. Neste trabalho usou-se um passo da ordem de 10^{-4} para o modelo dos ganhos e 10^{-3} para o modelo do sistema. Quando se usa o passo no modelo dos ganhos igual ao passo usado no modelo do sistema surgem os ruídos nas curvas dos ganhos contra o tempo.

Os parâmetros de ajustes tanto para a estrutura de controle multivariável quanto univariável, apresentam sensibilidades dife-

rentes. Os parâmetros α_2 e α_3 são insensíveis em todos os casos estudados neste trabalho. Os parâmetros de maior sensibilidade são α_1 e β ($\beta_1, \beta_2, \beta_3$ e β_4 no caso multivariável). Não se verifica nenhuma relação direta entre determinados parâmetros α e determinadas variáveis de estado ou manipulada. Já para os parâmetros β verifica-se uma forte relação entre estes e determinadas variáveis manipuladas, principalmente para sistemas univariáveis.

Os parâmetros de ajustes α_1, α_2 , e α_3 podem assumir valores tanto negativos como positivos, ao passo que β deve ser maior que zero. Isto porque para β (β_1 ou β_2 ou β_3 ou β_4) menor que zero a variável manipulada assumirá valores negativos, ou seja, fora dos limites operacionais.

Quando aplica-se o método na forma original, para estruturas de controle univariável, verifica-se que apenas um parâmetro é sensível, e este apresenta uma faixa de sensibilidade. Fora desta faixa por mais que varie o valor do parâmetro, os ganhos não respondem a esta variação. Esta faixa de sensibilidade deixa de existir quando usa-se o método com mudanças nos valores das variáveis de estado no estado estacionário.

Os parâmetros de ajuste apresentam, em certos casos, faixas de estabilidade. Por exemplo, no caso de sistema univariável manipulando a vazão de entrada para a reação $A \rightarrow B \rightarrow C$, consegue-se controlar o sistema - como mostra a figura 5.14(b) - usando $\alpha_1 = 18,5$. No entanto, se mudarmos o valor de α_1 abaixo ou acima de 18,5, perde-se totalmente o controle do sistema.

Geralmente a mudança das condições iniciais das variáveis de Riccati (S_{ij}) atua no sentido de melhorar a estabilidade dos parâmetros no caso citado acima.

Deve ser ressaltado que, embora o controle ótimo trate do ajuste de vários parâmetros de controle, em todos os casos aqui estudados foi possível manter a maioria dos parâmetros fixos e controlar o sistema variando um ou no máximo dois parâmetros. Isto pode motivar a implementação prática deste tipo de controlador.

Quando muda-se os valores das variáveis de estado no estado

estacionário no modelo dos ganhos com o objetivo de eliminar o "off-set" da variável controlada, verifica-se que a variável que realmente deve ser mudada é a temperatura do reator (T_s). No entanto, apesar das outras variáveis terem importância irrelevante frente a T_s , foi mostrado que estruturas de controle que levem o sistema a operar com alta performance podem ser formuladas.

5.5. Conclusões

O êxito da aplicação do método em reatores tanque contínuo agitado depende do tipo de reação química que está ocorrendo e da estrutura do controle utilizada. Isto quer dizer que embora o procedimento proposto neste capítulo seja geral é necessário obter os valores dos parâmetros que permitam um controle adequado. Isto pode ser obtido através de simulação.

O controle de sistemas através de estruturas de controle multivariável é mais complicado do que com estruturas univariáveis, principalmente devido ao fato de que existem interação íntre as variáveis. No entanto, se estas forem usads de maneira adequada um controle eficiente pode ser obtido.

Foi mostrado que com a mudança do estado estacionário no modelo que fornece os ganhos do controlador, torna-se possível controlar processo sem "off-set", sendo isso interessante para melhorar a performance do processo.

Na determinação das condições que permitam um bom controle do sistema foi notado alguns parâmetros de ajuste estão sujeitos à faixas de atuação, que determinam os limites operacionais das variáveis manipuladas. Uma observação muito importante, sobre a tecnica de controle ótimo empregada, é a possibilidade de controle do sistema variando apenas um parâmetro de ajuste, mantendo os outros em valores fixos.

Os assuntos tratados até agora, nesta tese, servem como base para a estruturação do problema de controle usando controladores

baseados na teoria classica de controle, que ainda são muito usuais na indústria. Isto é considerado no próximo capítulo.

Capítulo 6

Controle por Retroalimentação com Algoritmo Modificado

Tendo em vista o processo de modernização pelo qual passam as indústrias químicas e petroquímicas visando o aperfeiçoamento dos processos convencionais, estas estão buscando procedimentos que visam o controle automático de suas operações.

O estudo desenvolvido neste capítulo visa permitir a avaliação destas técnicas de controle automático em reatores tanque contínuo (CSTR), quando as condições de operação são alteradas dos valores nominais através da simulação dinâmica do processo. Este assunto foi tratado recentemente por Maciel Filho e Barbosa Jr. (1991), onde foi mostrado que é necessário identificar as possíveis faixas de operação sem demandar excessiva ação do controlador.

Serão investigadas as performances de alguns algoritmos de controle quanto a facilidade de implementação prática e a qualidade de controle obtido. Uma questão fundamental é o ajuste dos parâmetros do controlador, os quais na maioria das aplicações industriais depende muito da experiência de operadores, que realizam este ajuste através de procedimentos nem sempre adequados, especialmente para sistemas que apresentam instabilidade em malha aberta.

O objetivo do controle aqui é, usando controladores proporcionais, estabilizar a concentração do reagente A na saída do reator. A reação química ($A \rightarrow B$) é a mesma empregada no capítulo 5. A concentração será regulada indiretamente através da temperatura, que é de medição mais fácil e barata. As variáveis manipuladas escolhidas para compor a estrutura de controle SISO com a temperatura de saída do reator foram a vazão de entrada dos reagentes, vazão do fluido refrigerante (devido a fácil manipulação prática das mesmas) e a temperatura de entrada do fluido

refrigerante (por ser as mudanças de temperatura no fluido refrigerante mais fácil do que no fluido de processo).

6.1. Modelo Matemático Empregado

O sistema considerado é o CSTR com a reação química



considerada exotérmica, irreversível e de primeira ordem e onde k é a constante cinética dada pela lei de Arrhenius. Este processo é o mesmo descrito no capítulo 5.

O modelo matemático não considera a equação de balanço de massa para o componente B e é dado pelas seguintes equações diferenciais ordinárias

$$\begin{aligned} \frac{VdC_A}{dt} &= F(C_{Ao} - C_A) - VkC_A & C_A(0) &= C_{As} \\ \frac{VdT}{dt} &= F(T_o - T) - \frac{\Delta HVkC_A}{\rho C_p} - \frac{UA(T - T_J)}{\rho C_p} & T(0) &= T_s \\ \frac{dT_J}{dt} &= \frac{F_J(T_{Jo} - T_J)}{V_J} + \frac{UA(T - T_J)}{\rho_J V_J C_{pJ}} & T_J(0) &= T_{JS} \end{aligned} \quad (6.1)$$

As variáveis de entrada e saída do sistema, usadas neste capítulo, são as mesmas descritas no capítulo 3.

6.3. Controle por Retroalimentação

Considere um processo generalizado como mostrado na figura 6.1(a), onde y é uma variável de saída, d são as perturbações e m

a variável manipulada.

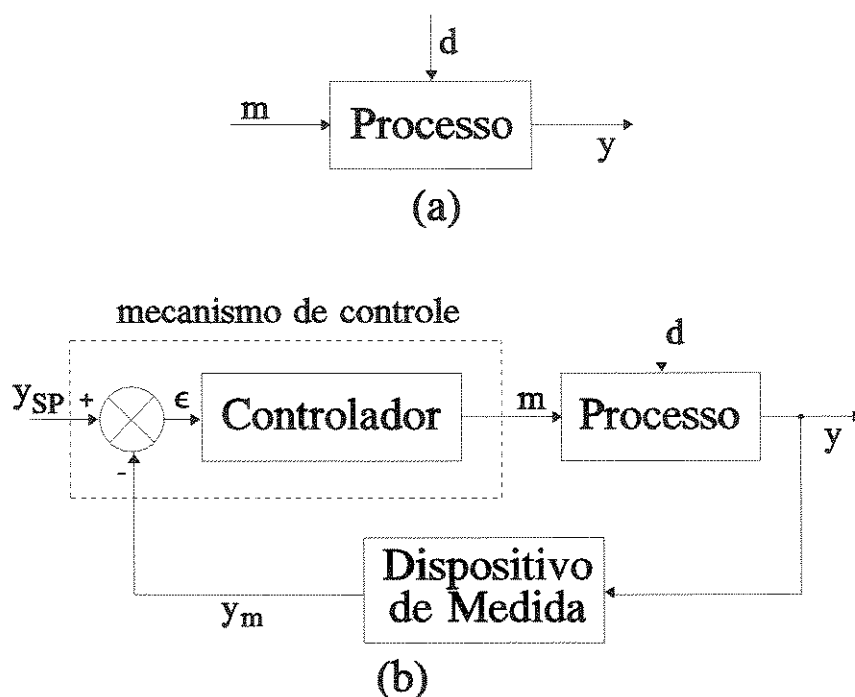


Figura 6.1. (a) processo em malha aberta (b) processo em malha fechada

As perturbações d são mudanças que ocorrem de forma não previstas. O objetivo é, havendo perturbações, manter a variável de saída y em níveis desejados através da manipulação da(s) variável(is) manipulada(s).

A ação de controle segue as seguintes etapas:

1) Mede-se o valor da variável de saída y_m (vazão, pressão, temperatura, nível, concentração) através de um dispositivo de medida apropriado e faz-se então y_m como o valor indicado da variável de saída.

2) Compara-se o valor indicado y_m com o valor desejado y_{SP} ("set-point") da variável de saída. Define-se, assim, o erro (ou desvio) $\epsilon = Y_{SP} - Y_m$.

3) O valor de ϵ é fornecido ao controlador. O controlador muda o valor da variável manipulada m de tal forma a reduzir a magnitude do erro ϵ . Geralmente, o controlador não afeta a variável manipulada diretamente mas através de um dispositivo (geralmente válvula de controle), denominado de Elemento Final de Controle. A figura 6.1(b) resume as três etapas.

O sistema representado na figura 6.1a é chamado de malha aberta (sem controle), enquanto o sistema da figura 6.1b é chamado malha fechada (com controle).

A função do controlador (figura 6.1b) é receber o valor da variável de saída y_m e compará-lo com o valor de y_{sp} e produzir um sinal $m(t)$ tal que o valor de variável de saída retorne a y_{sp} . Entretanto, a variável de entrada do controlador é o erro ($\epsilon(t) = y_{sp} - y_m(t)$), enquanto a variável de saída é $m(t)$. Os vários tipos de controladores por realimentação diferem na forma com que ϵ é transferido para $m(t)$.

Os tipos básicos de controladores por realimentação são: Controlador Proporcional (P), Controlador Proporcional-Integral (PI) e Proporcional-Integral-Derivativo (PID) e estão descritos no Apêndice D.

Os parâmetros destes controladores K_c , τ_i e τ_d são os parâmetros de controle. O projeto de um controlador consiste em encontrar os valores destes parâmetros que controle a resposta do processo de uma forma adequada.

Existem vários métodos de obtenção destes parâmetros, sendo bastante conhecidos o Método da Curva de Reação do Processo e o Método de Ziegler-Nichols (Z-N).

No entanto estes não são satisfatórios e mesmo sendo procedimentos "off-line", podem requerer um tempo excessivamente longo e a performance pode não ser garantida, especialmente para processos com parâmetros variantes. No Apêndice E é descrito resumidamente o procedimento de Z-N usado nesta etapa.

6.3. Algoritmo Modificado

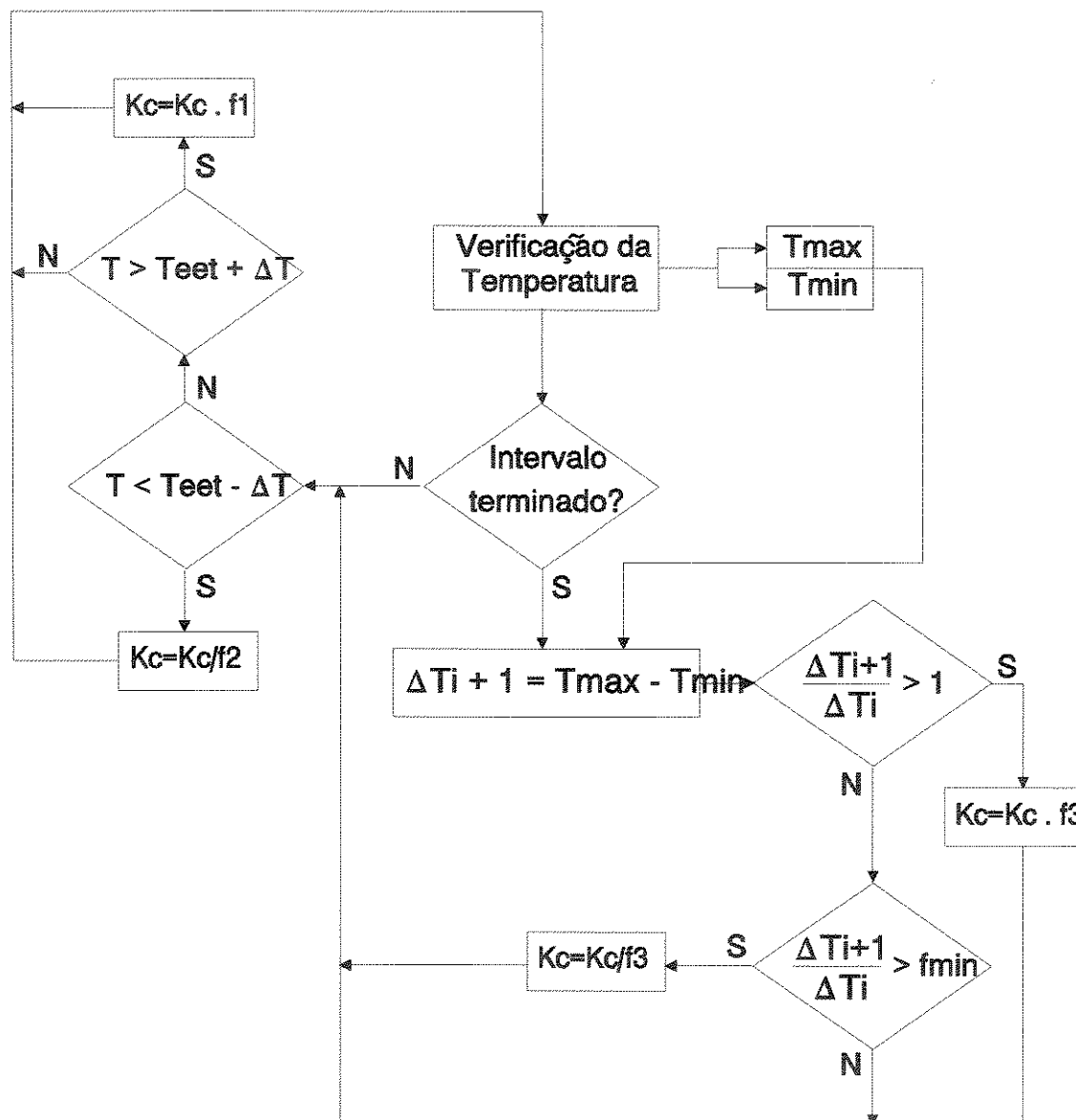
A eficiência dos controladores, descritos na seção anterior, é função da escolha adequada do(s) seu(s) parâmetro(s). Assim, existe a necessidade do desenvolvimento de técnicas que possibilitem o ajuste dos parâmetros do controlador de forma automática e rápida sem expor o sistema a grandes flutuações.

A seguir é descrito, para controladores proporcionais, um método que permite o ajuste automático dos parâmetros do controlador. O método é denominado Método dos Intervalos.

Este método, proposto por Maciel e Tocalino (1991), consiste em dividir o tempo de operação do reator em intervalos iguais e, dentro de cada um destes, medir a diferença entre os valores máximos e mínimos atingidos pela temperatura de saída. Esta diferença é comparada com a progressão atingida no intervalo de tempo anterior. Se houver um aumento da diferença entre as temperaturas máxima e mínima, a constante proporcional de controle (K_c) é multiplicada por um fator maior que 1. Caso contrário, se for constatada uma redução neste intervalo (em relação ao intervalo anterior) a constante terá seu valor reduzido. Obviamente a performance do método pode ser melhorada através da escolha do fator, porém isso não é crítico.

Também verifica-se que se a temperatura subir além de uma tolerância com relação ao "set-point", o termo proporcional (K_c) terá seu valor incrementado. Ocorrendo o oposto, se a temperatura cair abaixo desta mesma tolerância subtraída do "set-point", o valor de K_c será reduzido.

A implementação é baseada no fluxograma mostrado na figura 6.2.



ΔT : tolerância de temperatura

ΔT_i , ΔT_{i+1} : diferença, entre as temperaturas máxima e mínima em cada intervalo

f_1 , f_2 , f_3 : fatores de incremento ou de redução de K_c

Figura 6.2. Diagrama de blocos para o algoritmo de controle "Método dos intervalos"

6.4. Performance do Controlador

As condições operacionais padrão utilizadas nas aplicações estão no apêndice A.

O objetivo do controle é manter a temperatura de saída (e operação, pois trata-se de um reator de mistura perfeita) o mais próximo possível do "set-point", suposto como valor de projeto, como sendo 600 R.

Para se atingir este objetivo usou-se controladores proporcionais cujas equações foram incorporadas, isoladamente, ao modelo de 6.2. Estas equações (que correspondem às estruturas de controle) são

$$F_J = F_{JO} - K_C(T_{SP} - T)$$

$$F = F_O - K_C(T_{SP} - T)$$

$$T_{JO} = 530 - K_C(T_{SP} - T)$$

A seguir são mostrados os resultados para a aplicação de dois métodos: Intervalos e Ziegler-Nichols.

6.4.1. Método dos Intervalos.

A performance do algoritmo foi testada, sendo utilizados os seguintes parâmetros, de acordo com a figura 6.2: $f_s = 1,5$, $f_{min} = 0,1$, $\Delta T = 5,0$ R e intervalos de tempo iguais a 0,1 h em todas as simulações. Os valores de f_1 e f_2 foram 1,5, com raras exceções. Estes valores foram obtidos através de simulações em malha fechada.

O método foi aplicado ao reator submetido a perturbações degraus e senoidais na temperatura de entrada dos reagentes, T_0 .

6.4.1.1. Perturbação Degrau Positiva

Primeiro o processo é simulado, sem ajustes, com a temperatura de entrada dos reagentes T_0 , sendo alterada de 530 para 700 R no instante $t = 3$ h, de acordo com a figura 6.3. Usando uma estrutura de controle em que manipula-se a vazão do fluido refrigerante, nota-se (através da figura 6.4(a)) que a temperatura de saída do reator distancia-se do "set-point", estabilizando-se em torno de 617 R, enquanto a vazão de fluido refrigerante vai para 117 ft³/h, como mostra a figura 6.4(c).

Aplicando o algoritmo proposto para as mesmas condições de partida, usando 4,0 ft³/h.R para K_c inicial, verifica-se na figura 6.5(a) que a temperatura do reator sofre um salto no momento da perturbação, para depois abaixar e manter-se em torno de 604 R. A figura 6.5(d) mostra a ação do método dos intervalos, alterando o valor da constante K_c de forma a suprir com maior intensidade as variações na temperatura.

Uma outra estrutura do controle, baseada na manipulação da vazão de entrada dos reagentes, foi testada para controlar o sistema sujeito à mesma perturbação. Colocou-se o processo sob uma malha fechada com o ganho constante ($K_c = 1$). Vê-se que a temperatura do reator sobe bruscamente para em seguida cair e manter-se em 621 R (figura 6.6(a)), enquanto a vazão de entrada do reagente, após reduzir-se a zero, sobe e estabiliza-se em 17 ft³/h, como é visto na figura 6.6(c).

No entanto quando aplica-se o algoritmo de ganhos ajustáveis para um K_c inicial igual a 1, a temperatura do reator estabiliza-se em 603 R, como visto na figura 6.7(a). As figuras 6.7(c) 6.7(d) mostram, respectivamente, o comportamento da vazão de entrada e do ganho para este caso.

Estes resultados mostram claramente o potencial do método dos intervalos para ajuste dos parâmetros do controlador.

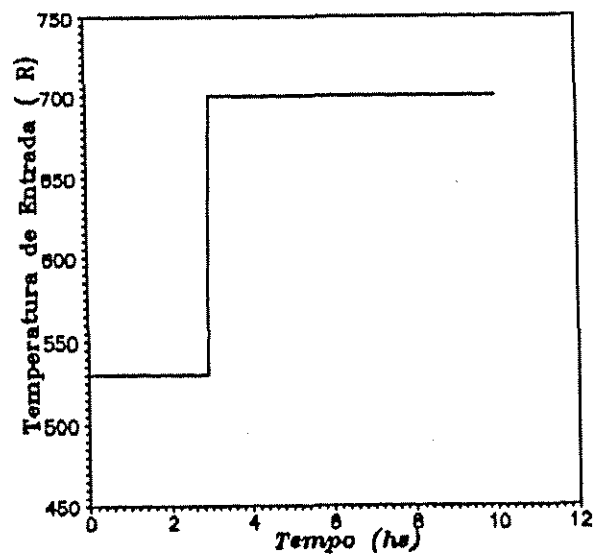


Figura 6.3. Variação da temperatura de entrada dos reagentes no tempo.

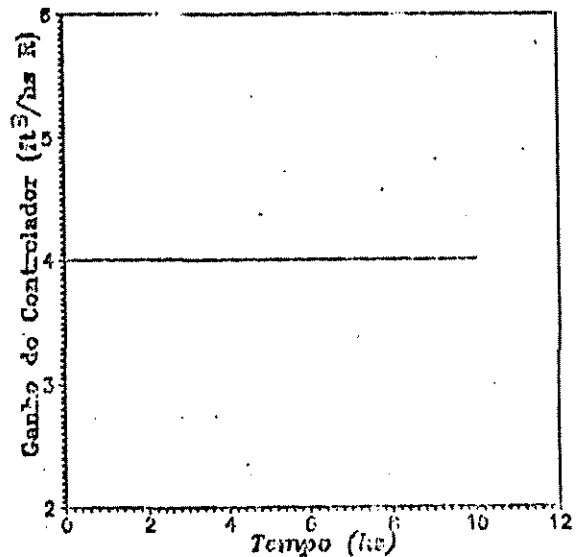
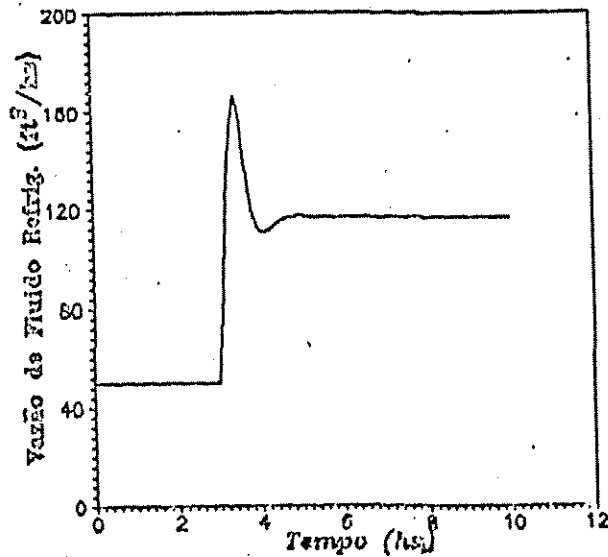
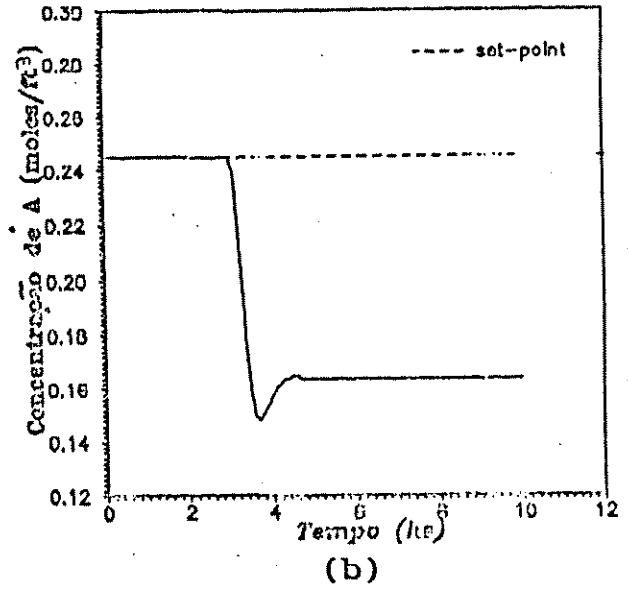
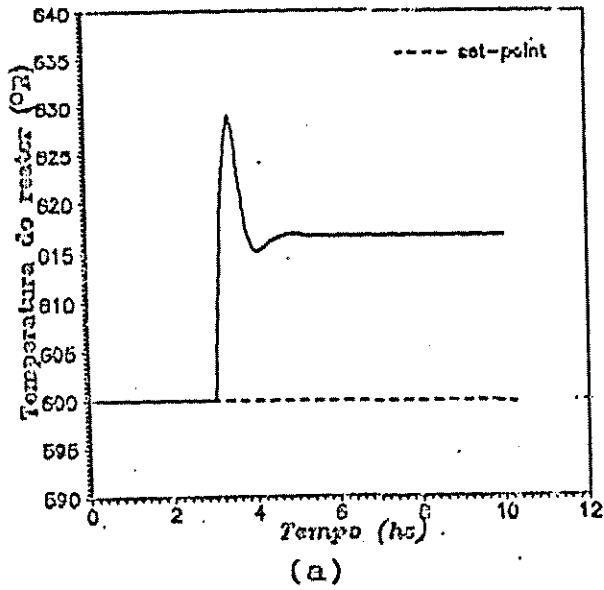
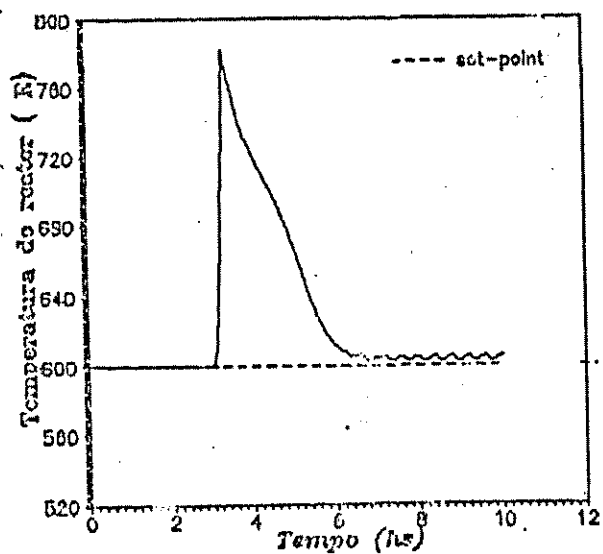
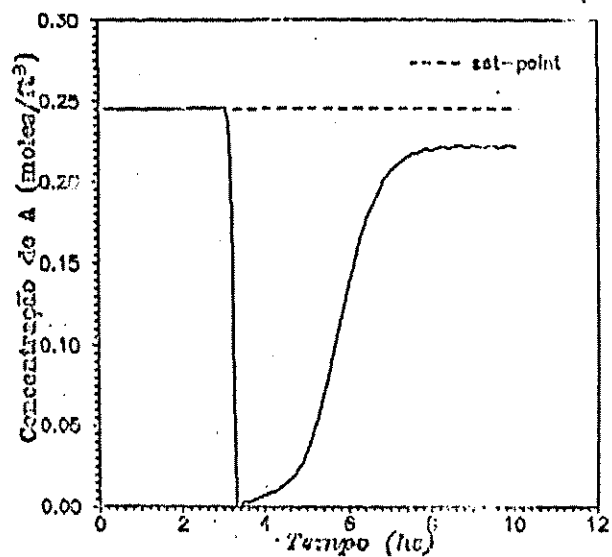


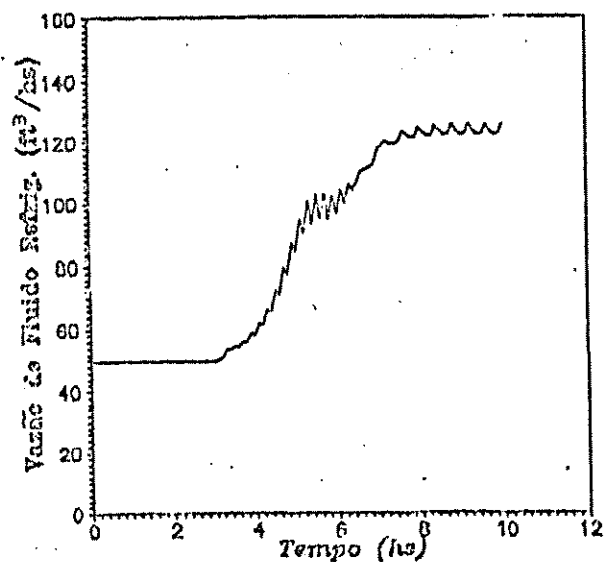
Figura 6.4. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.



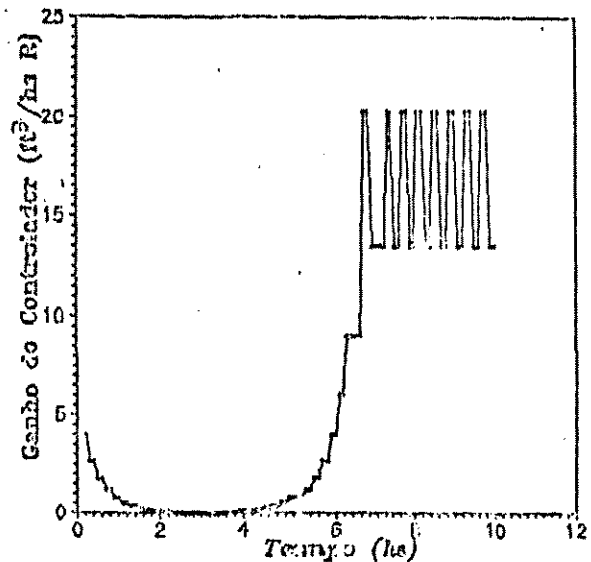
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 6.5. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

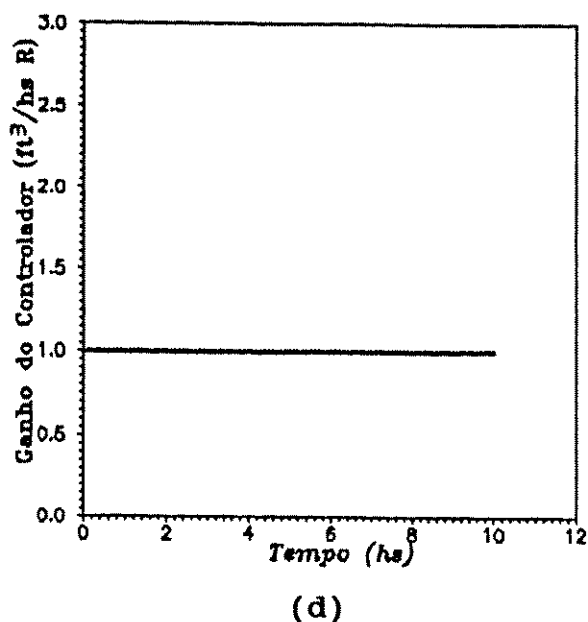
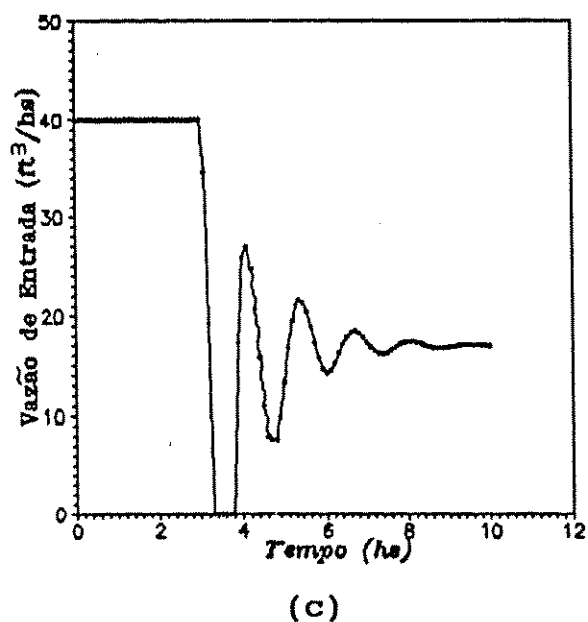
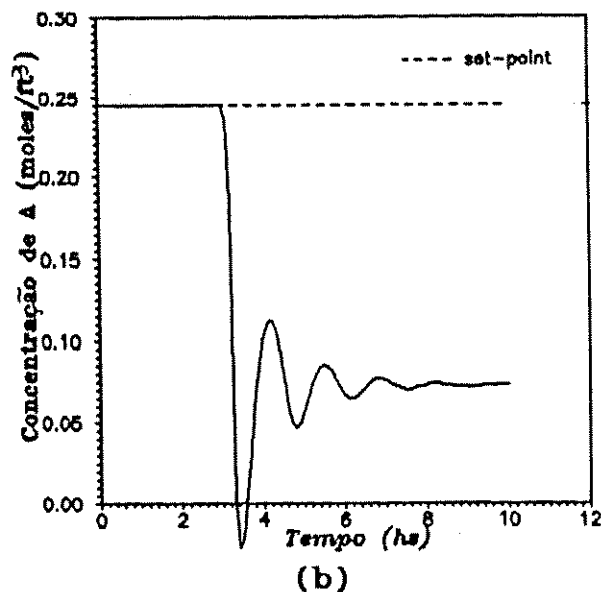
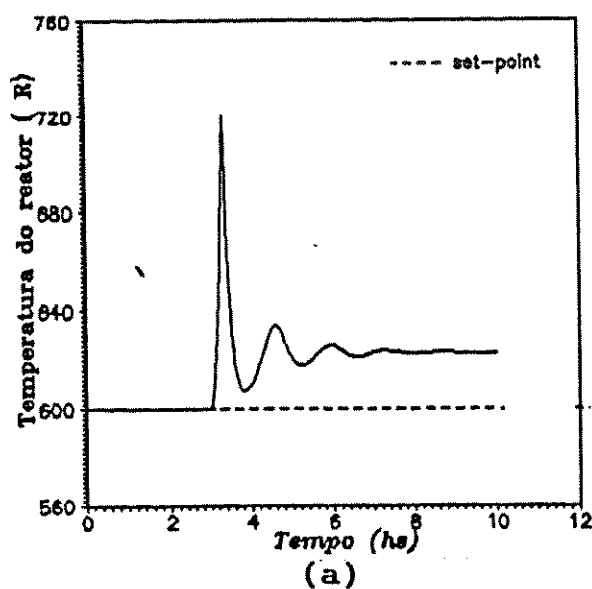


Figura 6.6. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

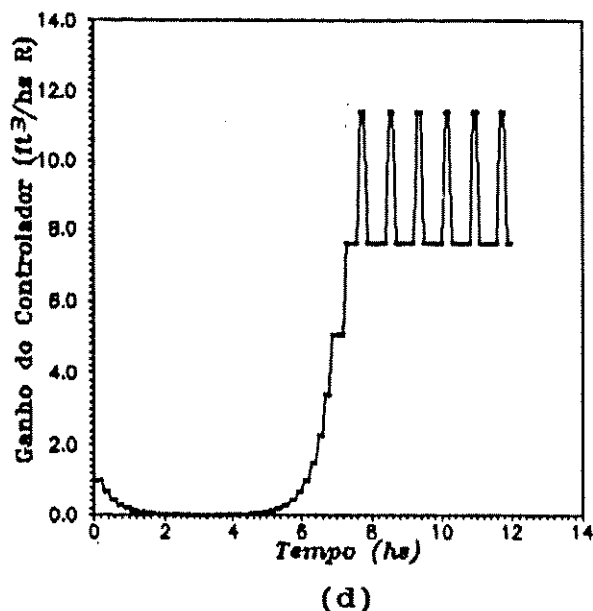
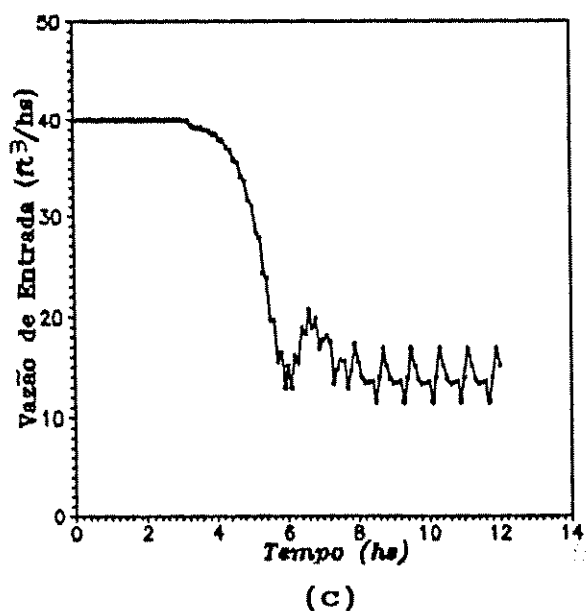
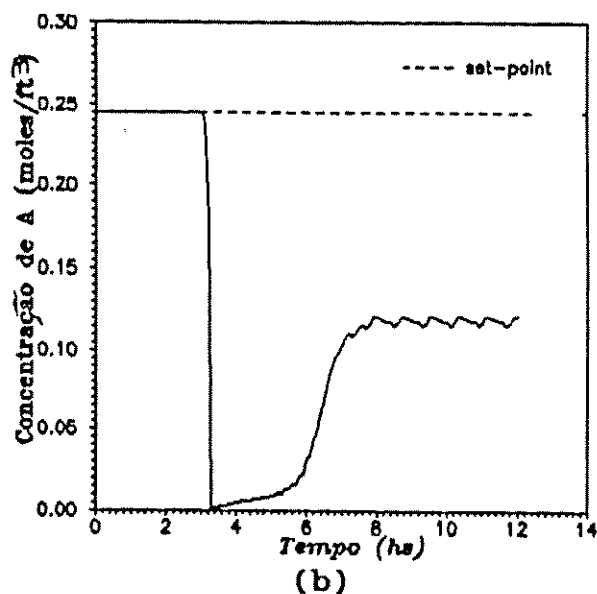
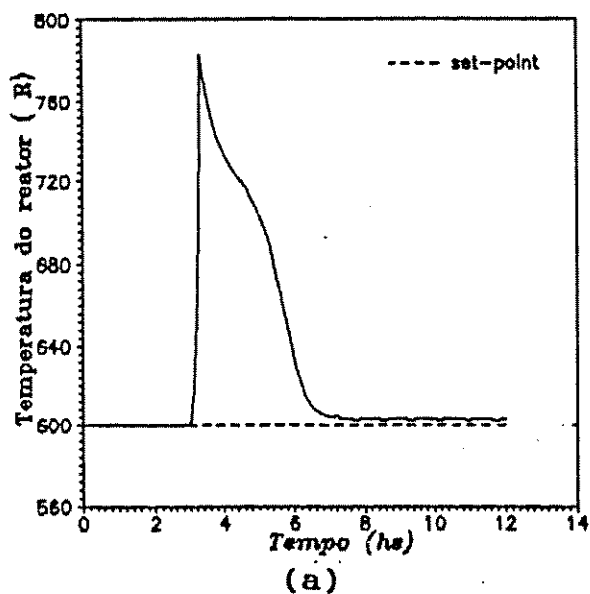


Figura 6.7. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

6.4.1.2. Perturbação Degrau Negativa

Neste caso, a temperatura de entrada dos reagentes no reator foi reduzida de 530 para 450 R no instante $t = 3$ h, como mostra a figura 6.8. A estrutura de controle empregada manipula a vazão de fluido refrigerante para controlar a temperatura de saída do reator.

A primeira situação estudada considera $K_c = 4,0$ ft³/hR, sem ajuste. De acordo com a figura 6.9(a) podemos ver que a temperatura de saída teve uma queda acentuada. A malha de controle, apesar de acusar vazão nula na jaqueta (figura 6.9(c)), não teve atuação satisfatória.

Aplicando o algoritmo de ajuste de K_c , também não foram obtidos resultados satisfatórios. De acordo com a figura 6.10(a) a temperatura do reator estabilizou-se em um patamar inferior ao desejado. Ao mesmo tempo, a constante de controle foi reduzida a quase zero, aproximando a vazão da jaqueta de 50 ft³/h (figuras 6.10(c) e 6.10(d)).

Conclui-se que com as atuais condições iniciais para os fluidos reagentes e circulantes na jaqueta não seria possível a obtenção do objetivo de controle usando-se apenas esta estrutura de controle. Na tentativa de alcançar o objetivo, adicionou-se a mudança de uma outra variável de entrada, além de F_j . A escolhida foi a temperatura de entrada do fluido refrigerante, T_{j0} .

Dessa maneira, aumentando T_{j0} de 530 para 560 R e simulando esta situação com o $K_c = 4,0$ ft³/hR sem ajustes, nota-se (pela figura 6.11(a)) que o resultado não é bom, uma vez que a temperatura de saída do reator permaneceu afastada do "set-point".

Já aplicando o algoritmo do método dos intervalos para o ajuste de K_c neste caso, resultados satisfatórios foram obtidos, como mostrado no conjunto de figura 6.12. Verifica-se que a temperatura do reator estabilizou-se em 599,5 R, praticamente no "set-point". Enquanto que K_c alcançou o patamar em torno de 45 ft³/hR, reduzindo a vazão do fluido refrigerante para 34 ft³/h.

Aplicou-se, também, para perturbações negativas a estrutura de controle baseada apenas na manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante, para manter a temperatura de saída do reator no "set-point".

Para a simulação, usando a nova estrutura de controle com um ganho constante e igual a 2,0 R/R, a temperatura do reator sofreu uma queda brusca para em seguida subir e estabilizar em 571 R (figura 6.13(a)). Enquanto a temperatura de entrada do fluido refrigerante alcançou e manteve-se no patamar de 587 R, de acordo com a figura 6.13(c).

Posteriormente, o algoritmo de K_c ajustável pelo método dos intervalos foi aplicado nessas mesmas condições, partindo inicialmente com um $K_c = 2$ R/R. Neste caso, a temperatura do reator estabilizou-se bem próximo do "set-point" (figura 6.14(a)). A figura 6.14(c) mostra que a temperatura de entrada do fluido refrigerante fica em torno de 571,8 R para o ganho próximo 255 R/R (figura 6.14(d)).

Desta maneira, mesmo para perturbações que afastem significativamente o processo das condições nominais, o método dos intervalos torna viável a aplicação de controle com realimentação usando as estruturas propostas.

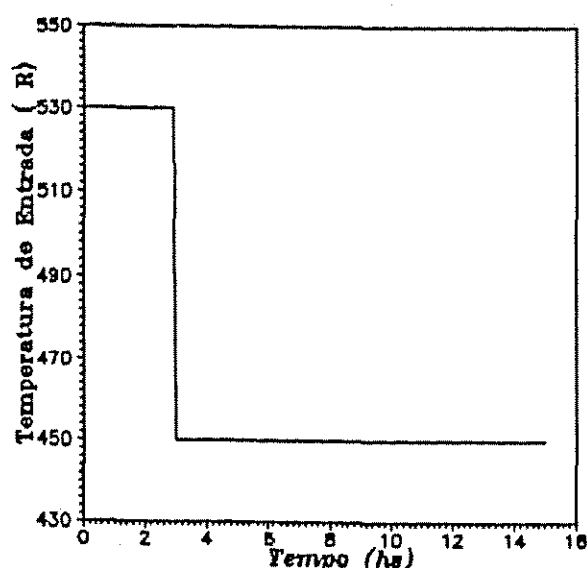


Figura 6.8. Variação da temperatura de entrada dos reagentes no tempo.

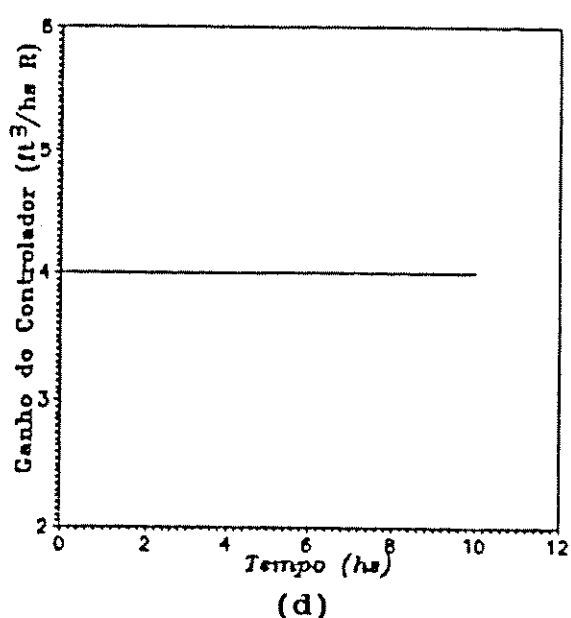
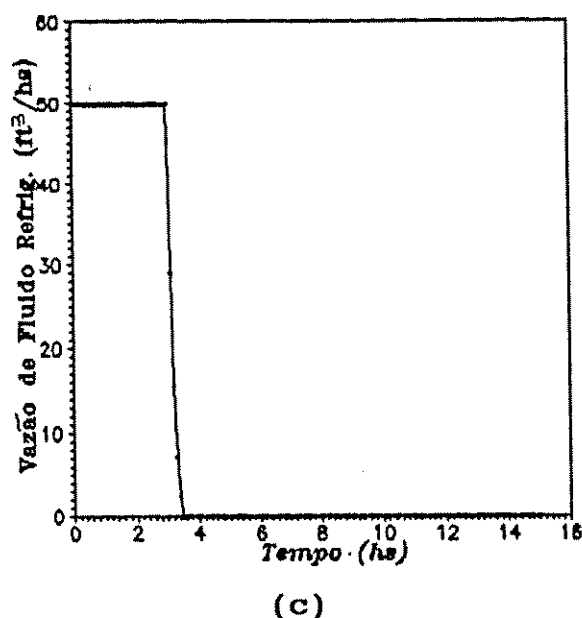
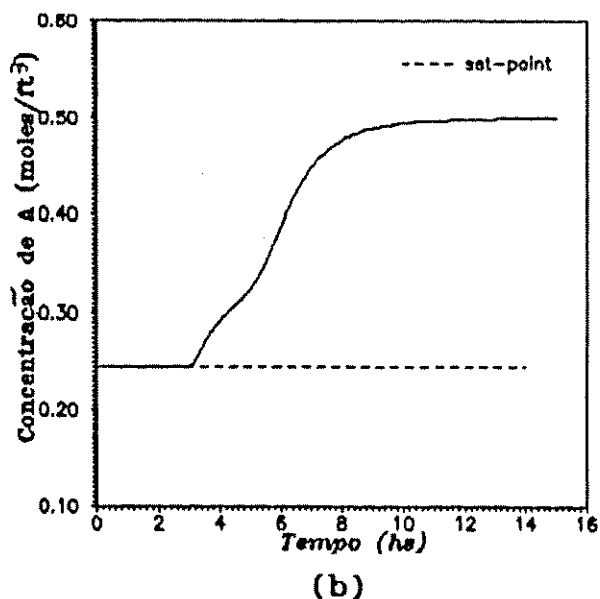
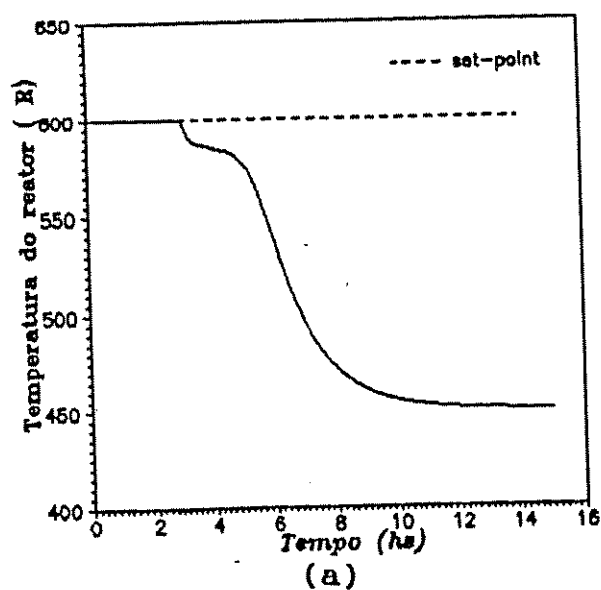


Figura 6.9. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

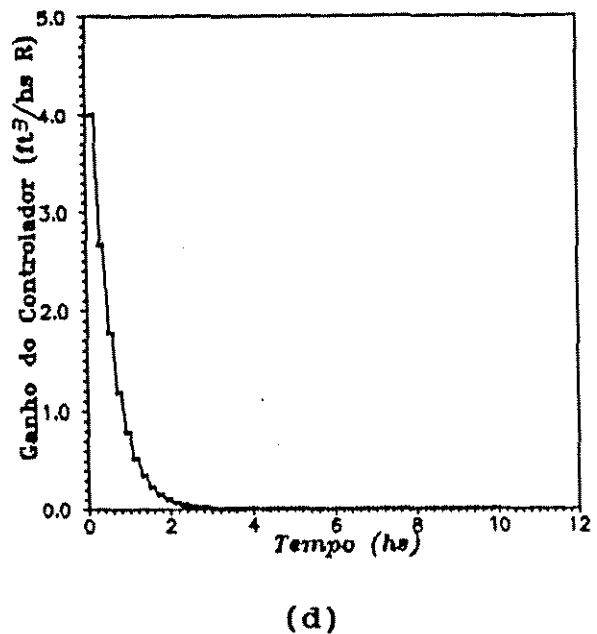
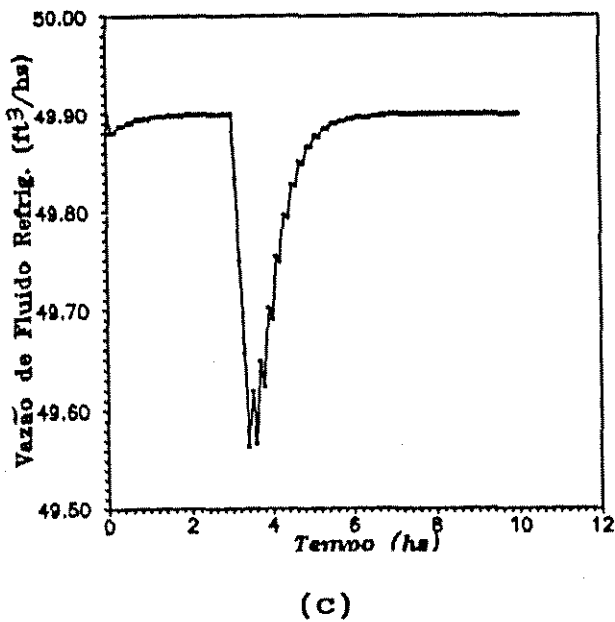
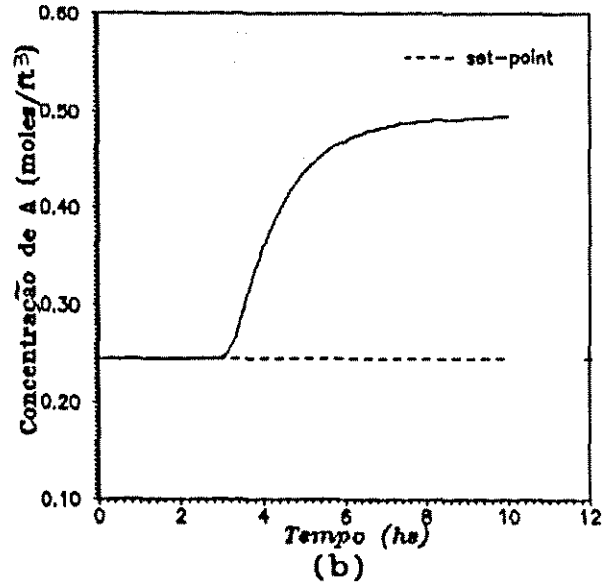
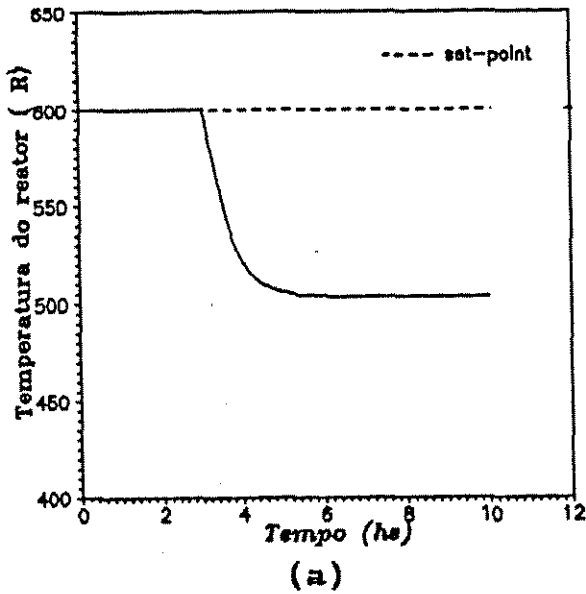
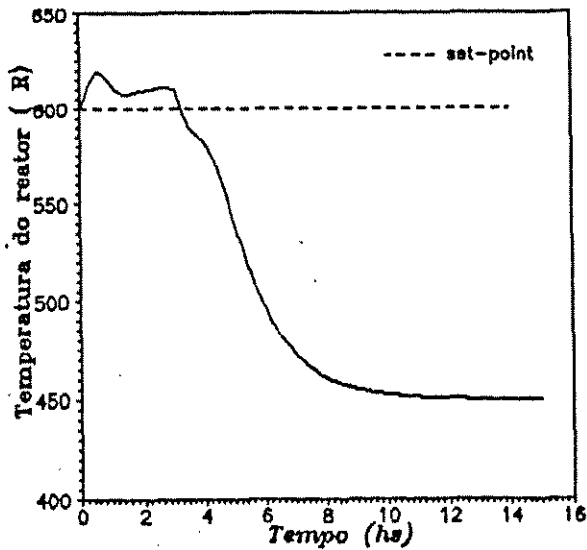
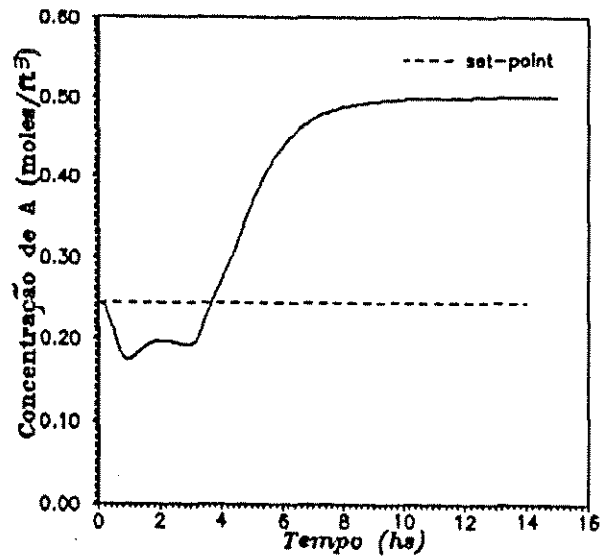


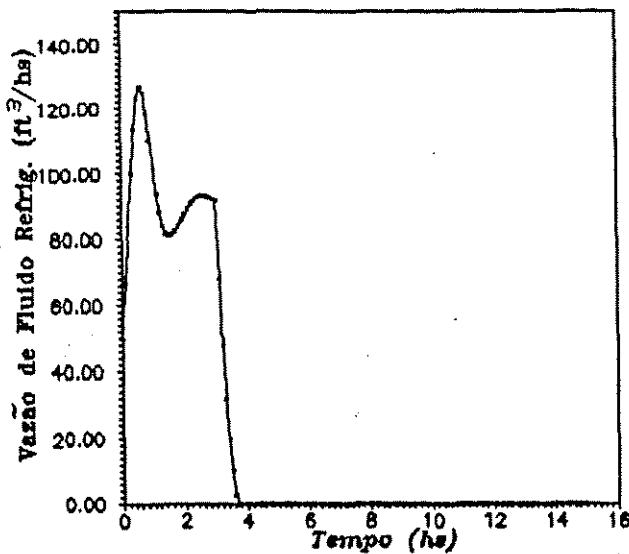
Figura 6.10. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.



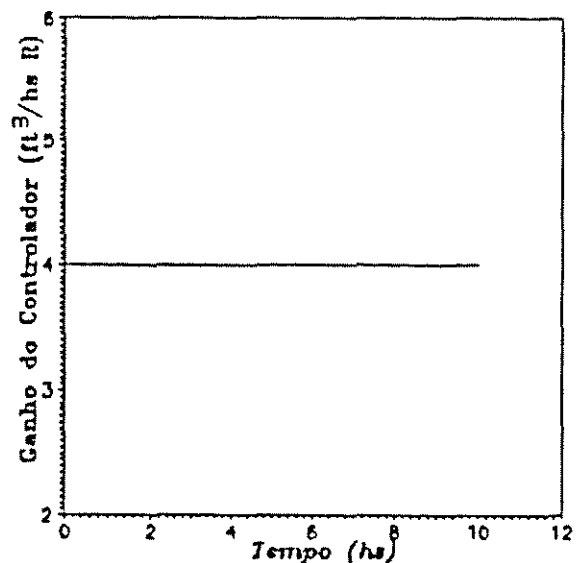
(a)



(b)

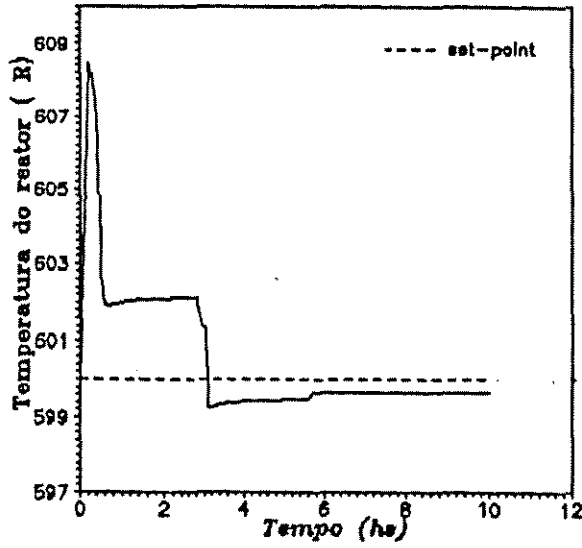


(c)

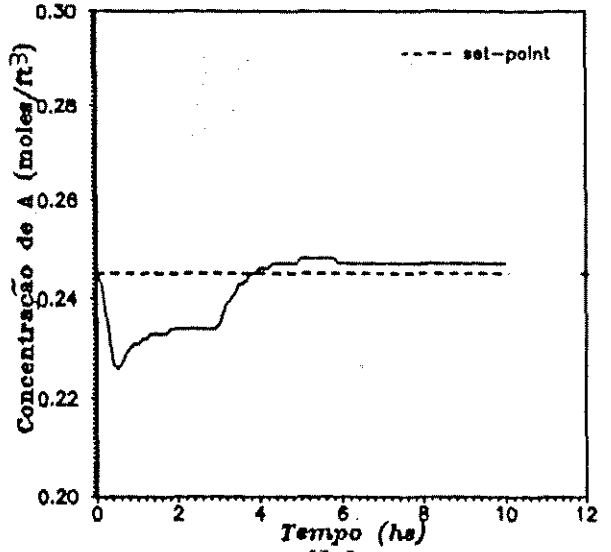


(d)

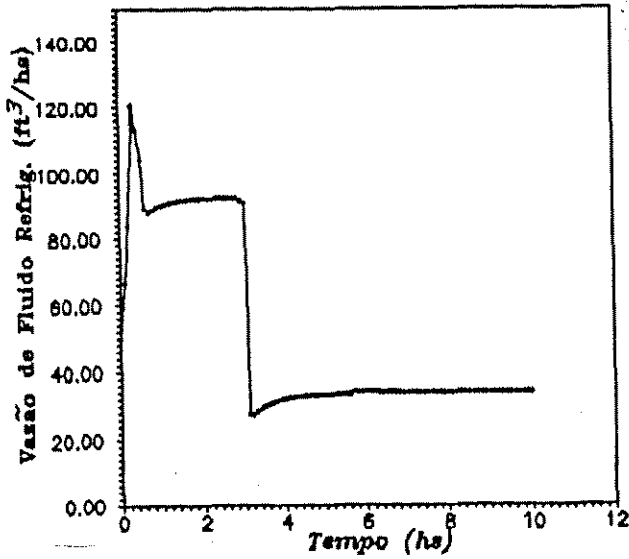
Figura 6.11. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.



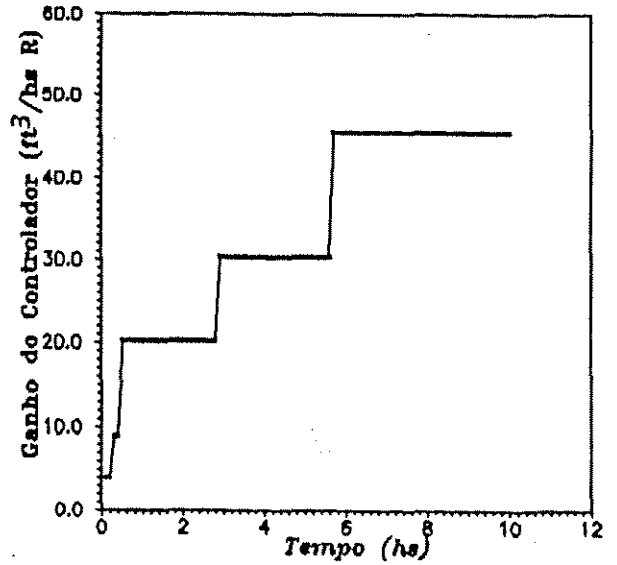
(a)



(b)

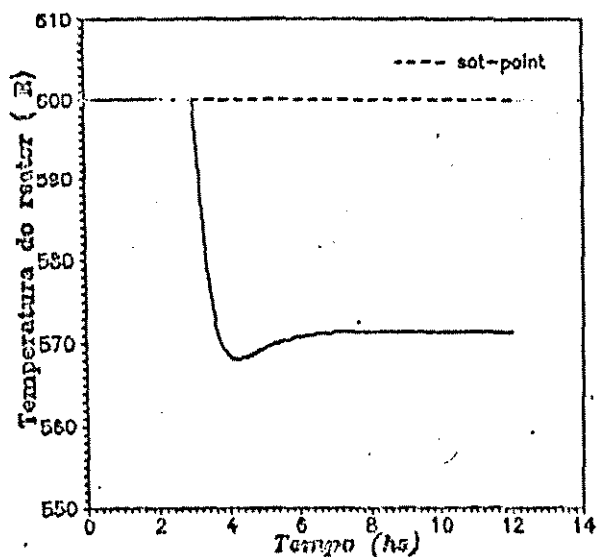


(c)

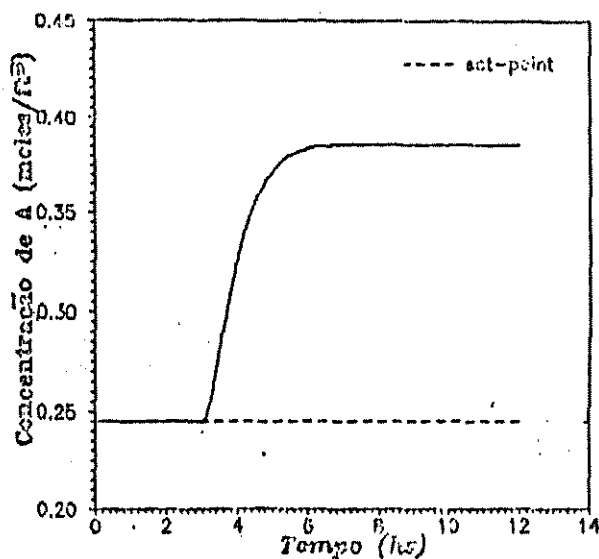


(d)

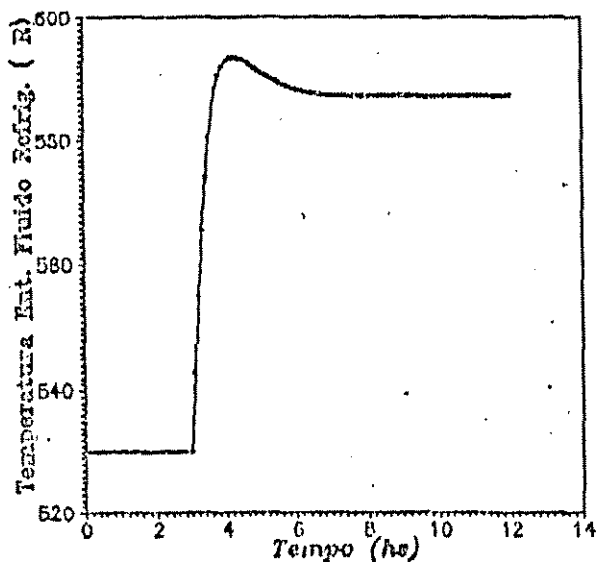
Figura 6.12. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.



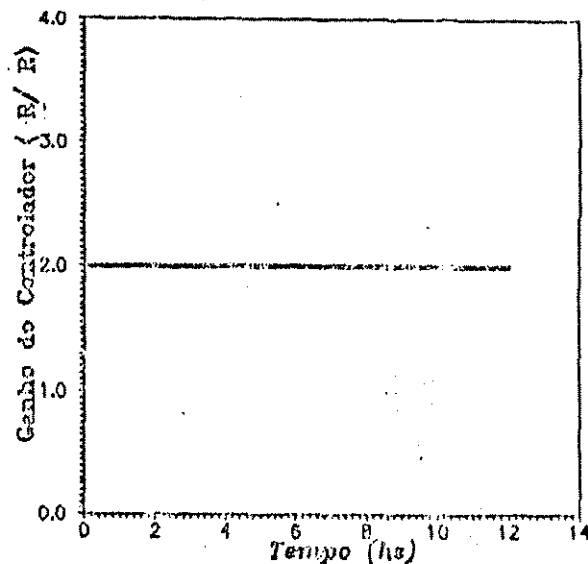
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 6.13. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

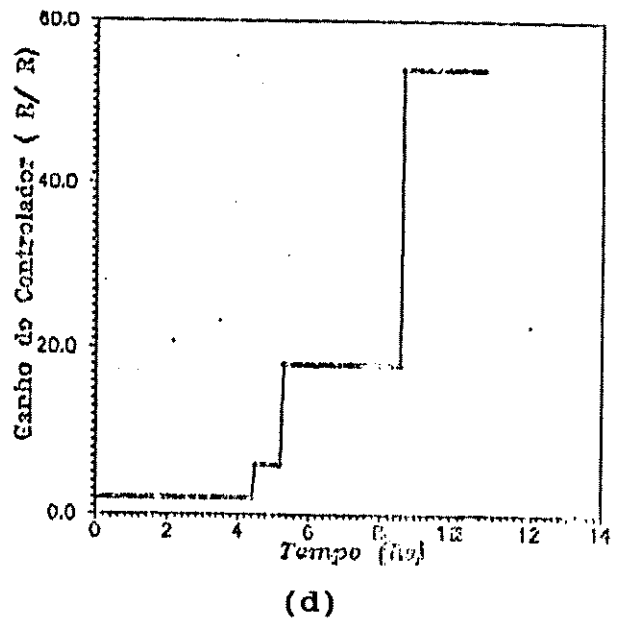
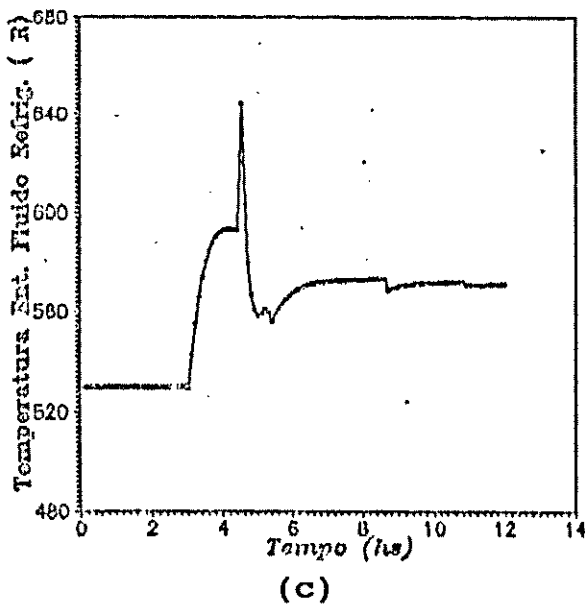
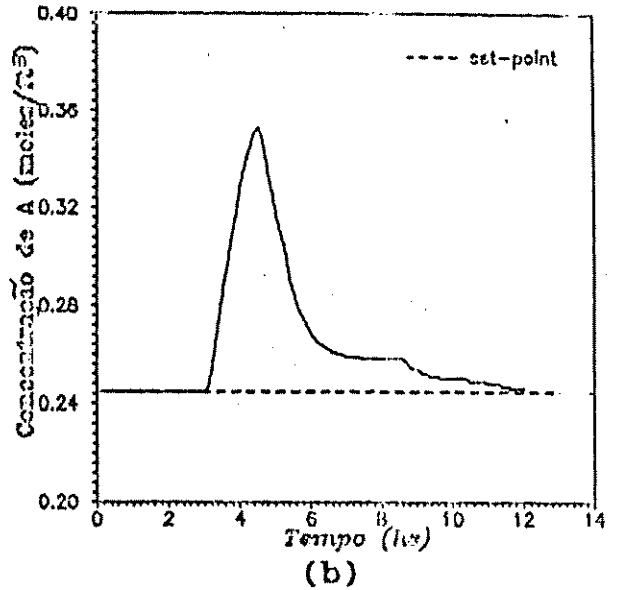
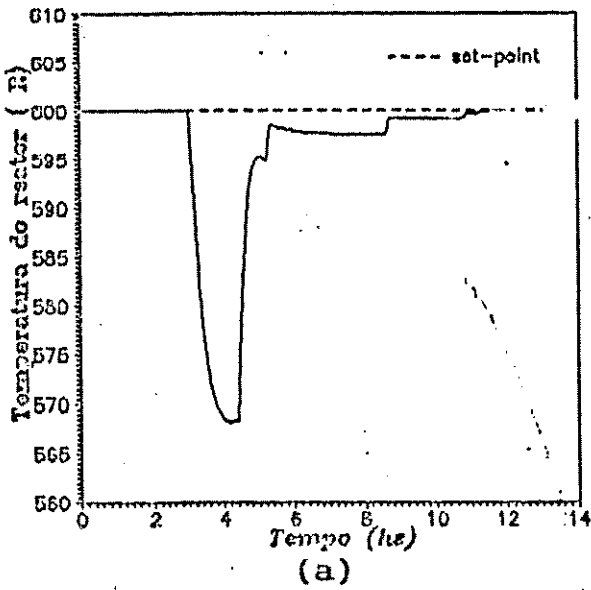


Figura 6.14. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

6.4.1.3. Controle com mudança do "Set-point"

O objetivo é verificar se é possível, usando o Método de Intervalos, controlar o sistema em um novo "set-point" para a temperatura de saída do reator.

Mudou-se o "set-point" de 600 R para 650 R e alterou-se a temperatura de entrada dos reagentes de 530 para 700 R como mostrado na figura 6.3.

Para o processo colocado sob uma estrutura de controle que manipula a vazão de fluido refrigerante para controlar a temperatura de saída do reator com um K_c constante e igual a 4 ft^3/hR , observa-se, na figura 6.15(a), que a temperatura do reator estabilizou-se próximo a 660 R com a vazão do fluido refrigerante ficando em torno de 86 ft^3/h (figura 6.15(c)).

Aplicando o algoritmo de K_c ajustável pelo método dos intervalos para a mesma situação, com um K_c inicial igual 4 ft^3/hR , verifica-se (na figura 6.16(a)) um controle satisfatório sobre a temperatura do reator. A figura 6.16(d) mostra que o ganho mantém-se no patamar próximo a 518 ft_3/hR .

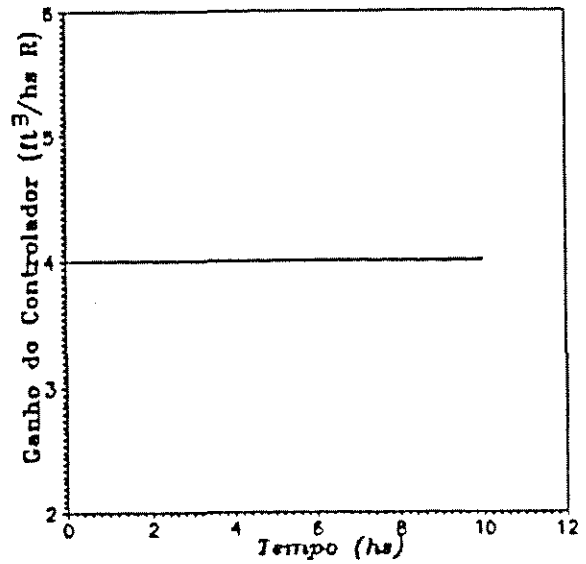
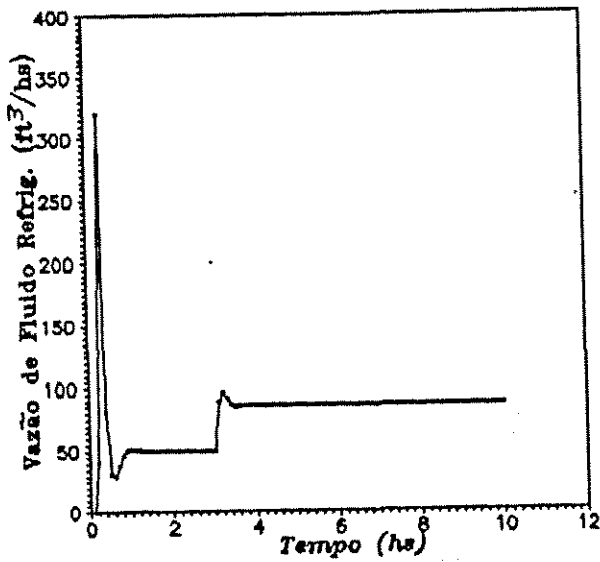
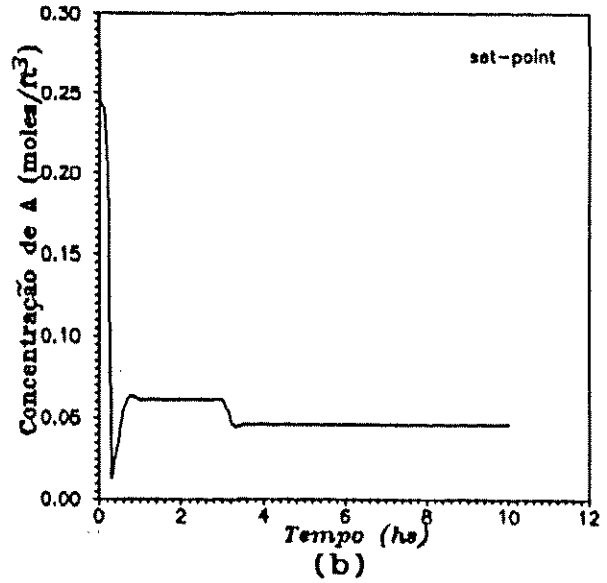
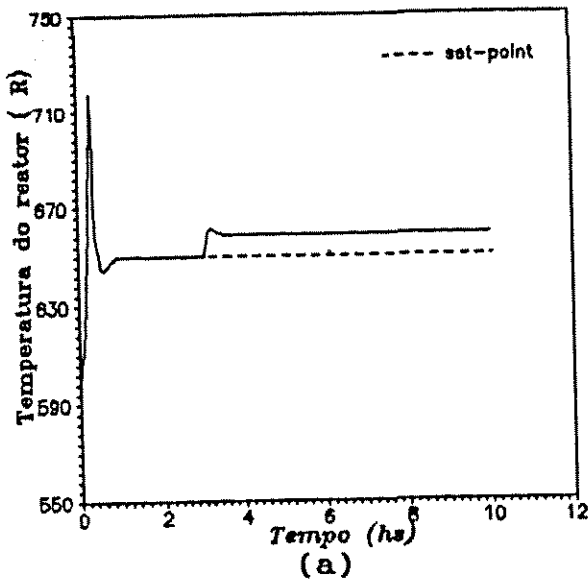


Figura 6.15. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

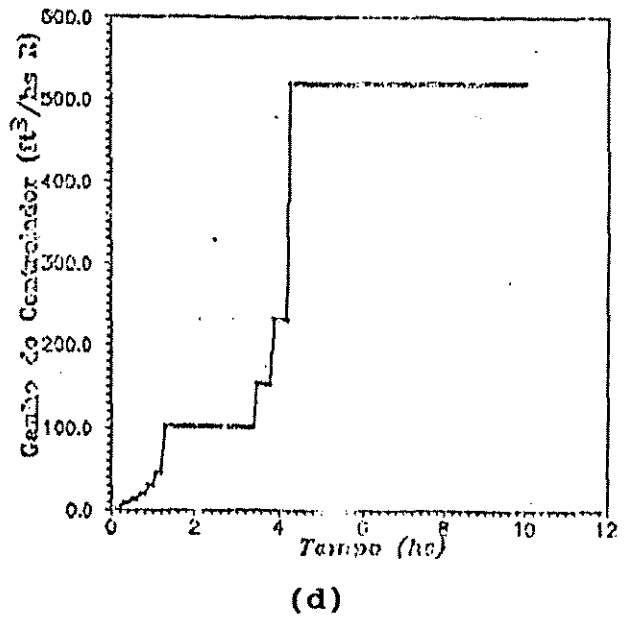
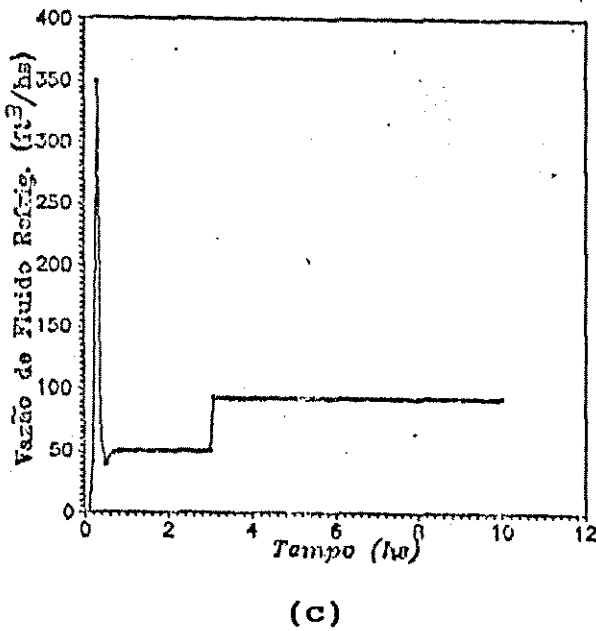
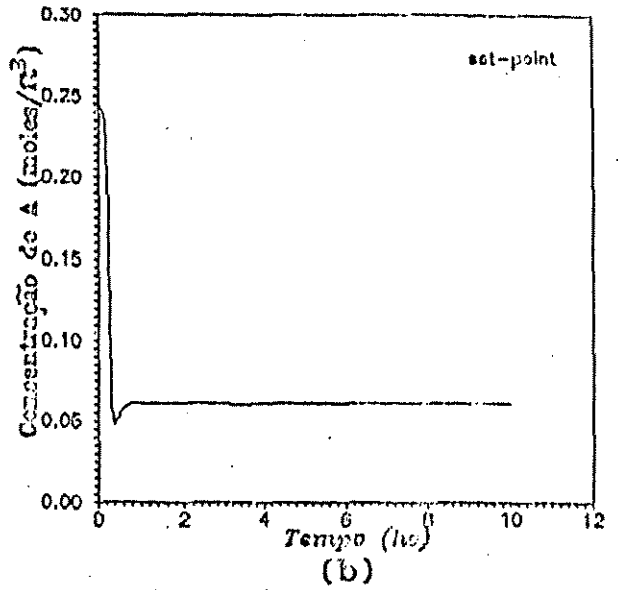
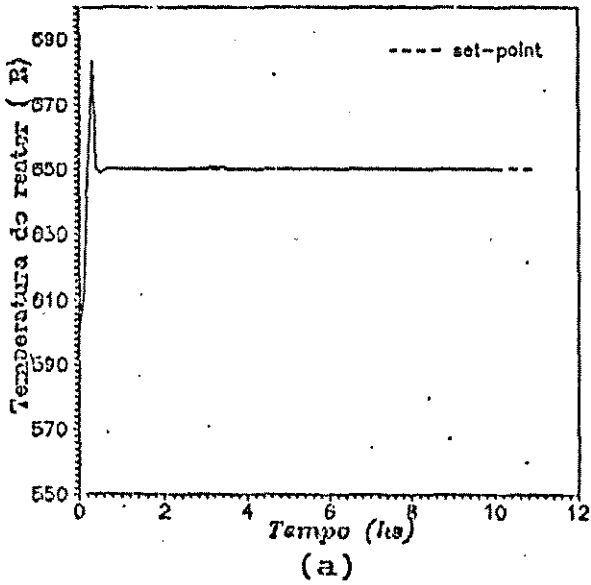


Figura 6.16. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

6.4.1.4. Perturbação Senoidal

Novamente, o processo é colocado sob malha fechada (que manipula a vazão de fluido refrigerante) com K_c sem ajuste e igual a 4 ft³/hR. Fez-se a temperatura de entrada do reator oscilar de acordo com a figura 6.17, além de alterar a temperatura de entrada do fluido refrigerante de 530 para 550 R. Na figura 6.18(a) é mostrado que a temperatura de saída dos reagentes afasta-se do "set-point" e oscila em torno de 606 R. Já a variável manipulada F_r oscila de acordo com a figura 6.18(c).

Aplicando o algoritmo de K_c ajustável pelo método dos intervalos nas mesmas condições descritas acima, com um ganho inicial igual a 4 ft³/hR, constatou-se que a temperatura do reator é controlada satisfatoriamente no "set-point" (figura 6.19(a)), ao mesmo tempo em que a variável manipulada F_r assume um comportamento oscilatório (figura 6.19(c) e o K_c é incrementado a valores superiores a 2000 ft³/h R (figura 6.19(d)).

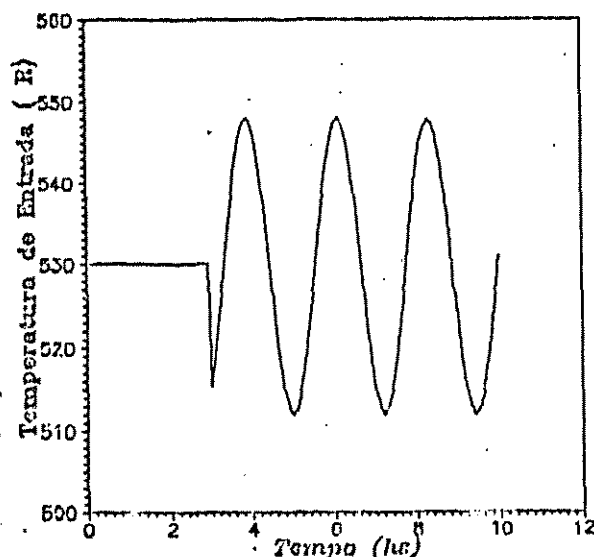


Figura 6.17. Variação da temperatura de entrada dos reagentes no tempo.

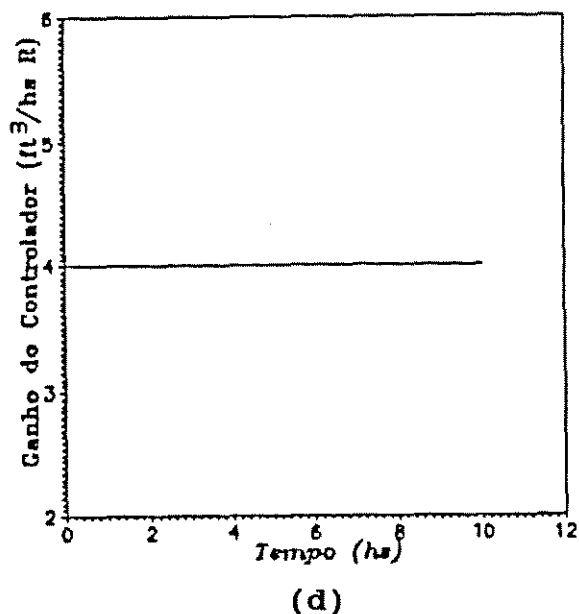
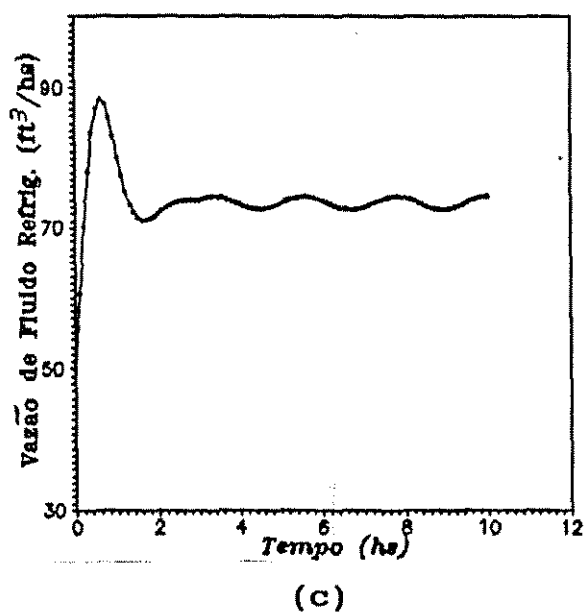
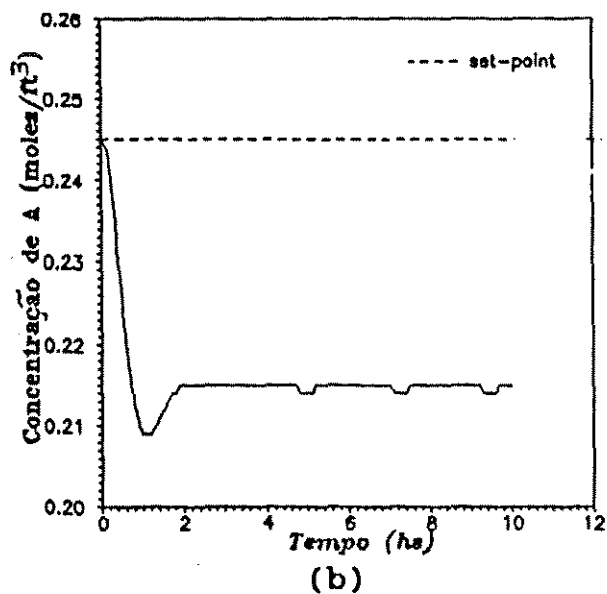
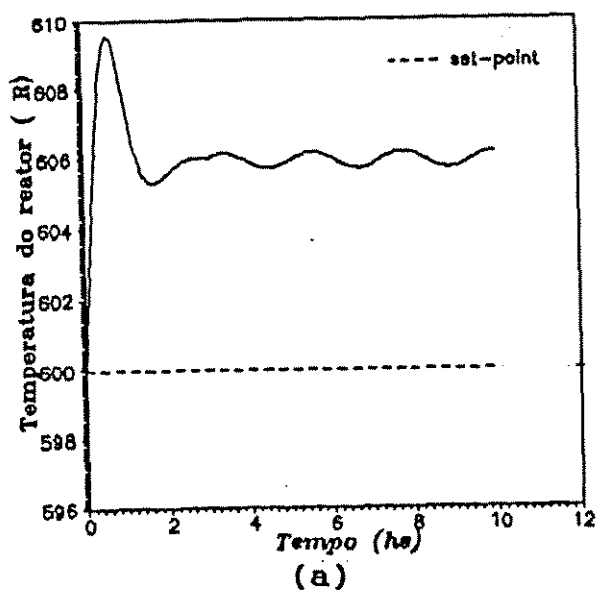


Figura 6.18. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

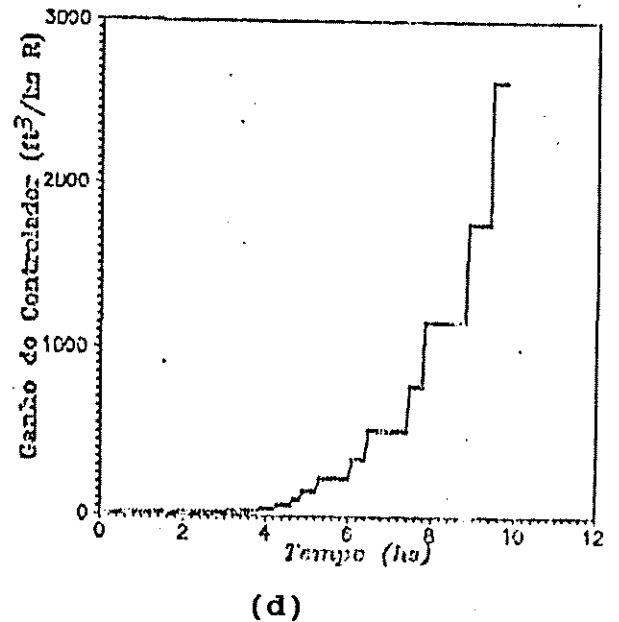
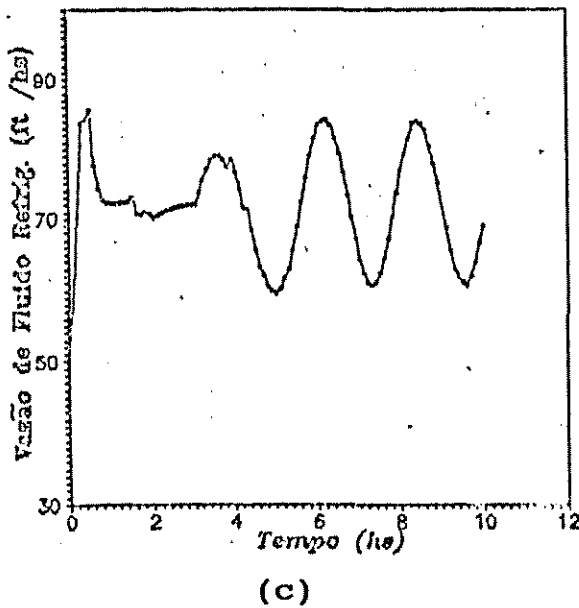
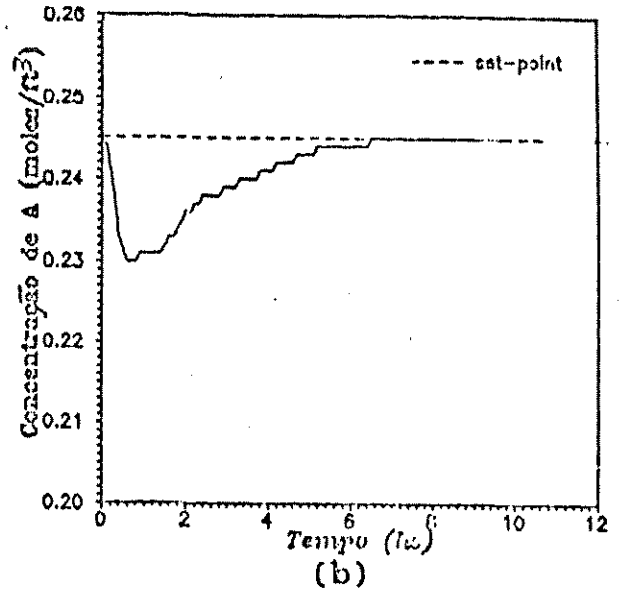
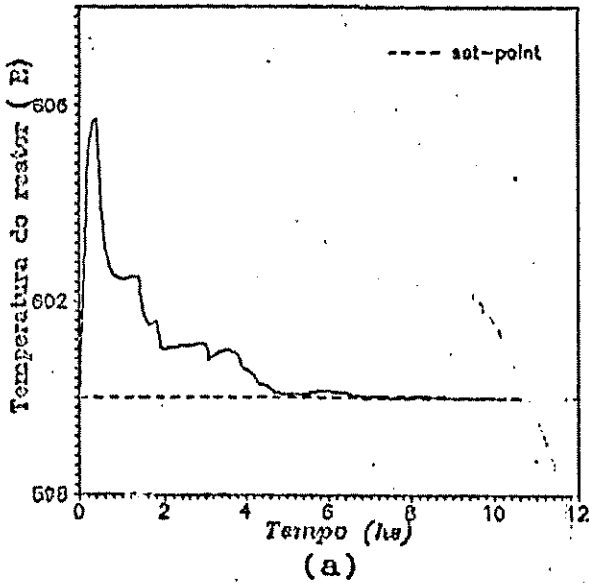


Figura 6.19. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

6.4.2. Método de Zigler-Nichols

Este método é aplicado segundo as considerações descritas no Apêndice E.

Para obter o valor da constante de ultimate K_u , mudou-se o valor do "set-point" de 600 para 610 R e após diversas simulações, usando K_c diferentes, obteve-se $K_u = 1,36$, correspondente à figura 6.20. O valor do ganho do controlador a ser usado nas estruturas de controle é $K_c = 0,68 \text{ ft}^3/\text{hR}$.

Para a situação em que a temperatura de entrada dos reagentes sofre uma alteração de 530 para 700 R e que a estrutura de controle usa a vazão de fluido refrigerante como variável manipulada com $K_c = K_u/2 \text{ ft}_3/\text{hR}$, a temperatura de saída do reator afasta-se do "set-point" e estabiliza-se em 655 R, de acordo com a figura 6.21.

Aplicando o sistema, nas mesmas condições acima, em uma estrutura de controle baseada na manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante, a temperatura de saída do reator afastou-se ainda mais do "set-point" (figura 6.22(a)).

Verifica-se, então, através das figuras, que o K_c (obtido pelo método de Z-N) não reprime satisfatoriamente os distúrbios impostos a T_o , a exemplo do que é obtido pelo ajuste dos parâmetros do controlador pelo procedimento do método dos intervalos.

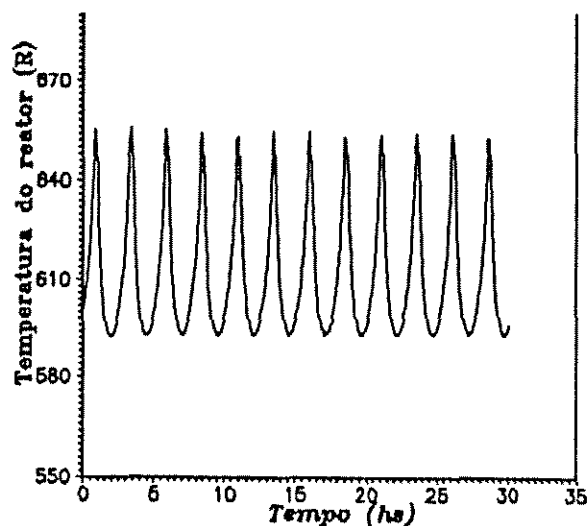


Figura 6.20. Temperatura do reator para o Ganho de Ultimate.

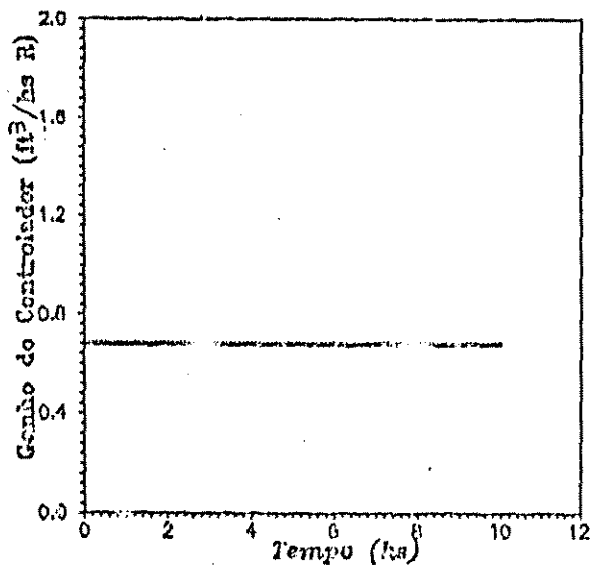
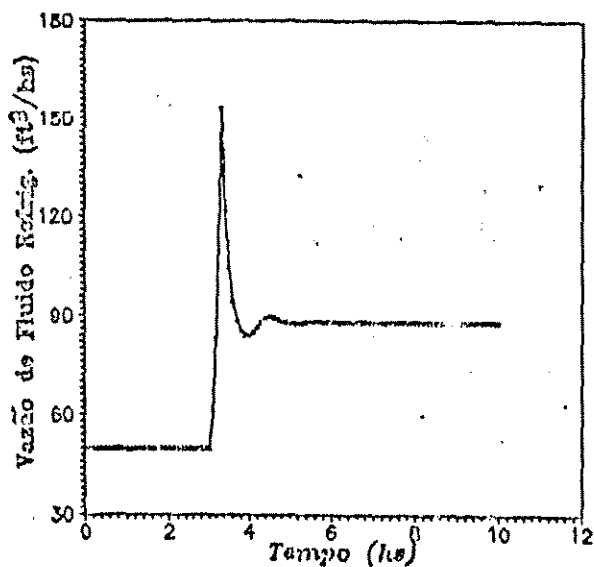
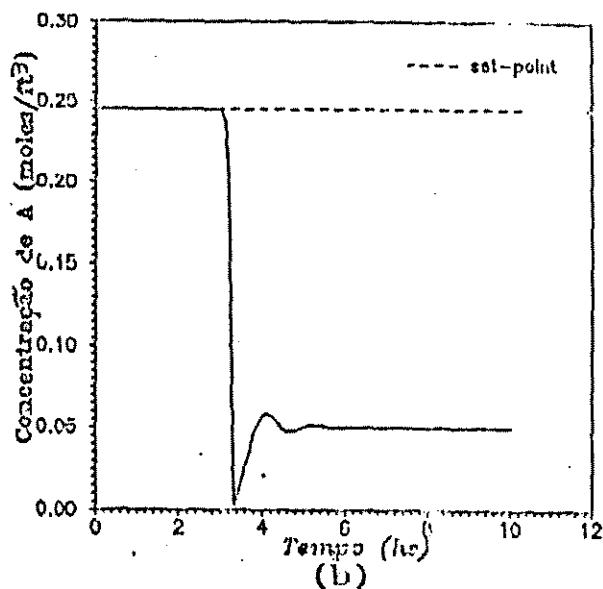
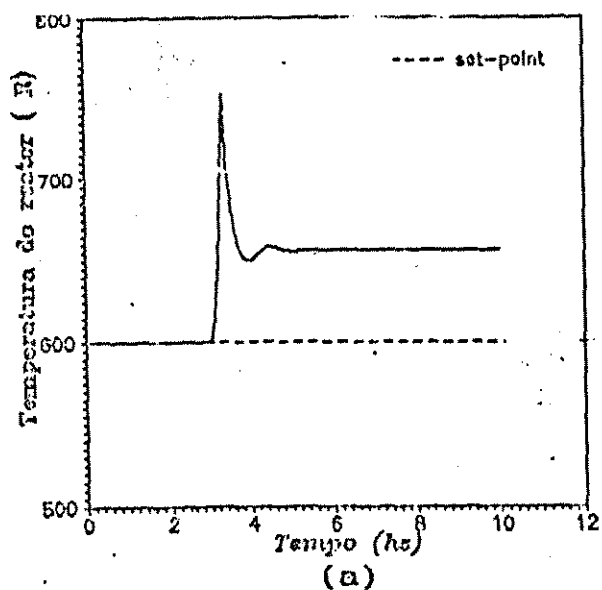


Figura 6.21. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

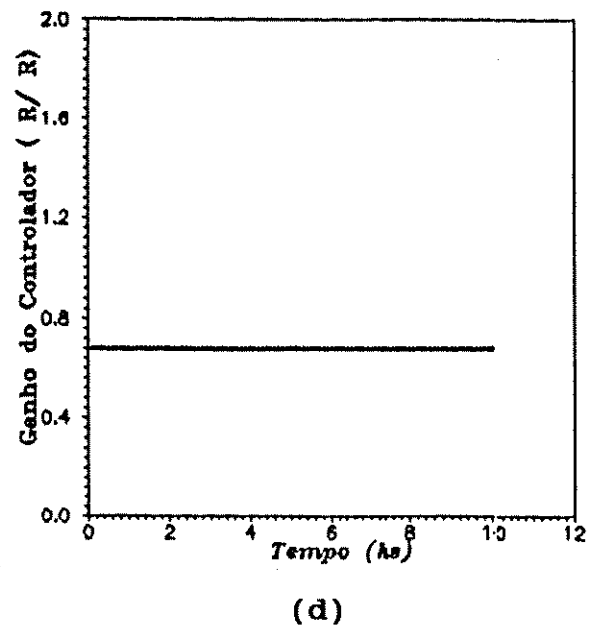
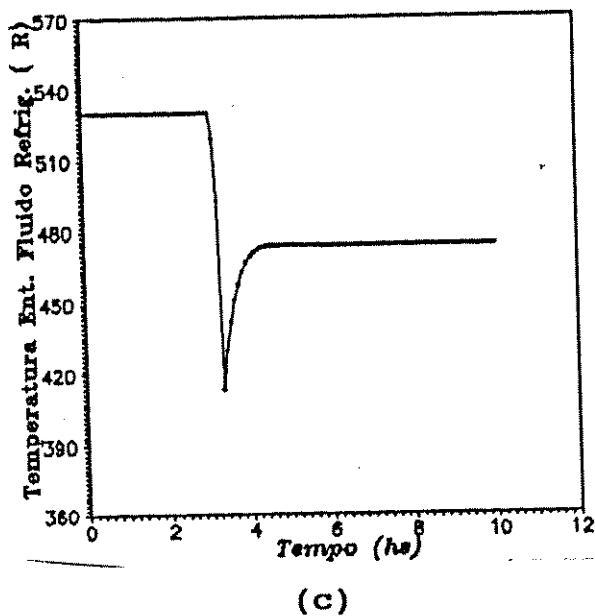
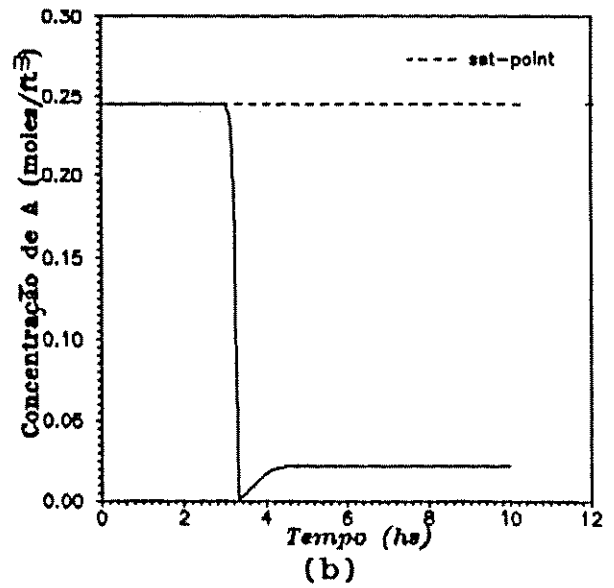
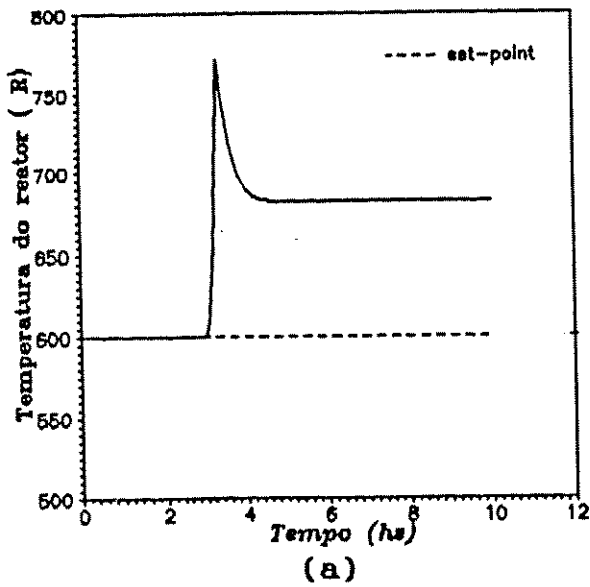


Figura 6.22. Comportamento, no tempo, das variáveis: (a) temperatura, (b) concentração de A, (c) vazão de fluido refrigerante - variável manipulada - e (d) ganho do controlador.

6.5. Discussões

O método dos intervalos apresentou-se bem em todas as situações estudadas em 6.5.1, embora, com a perturbação degrau negativa em T_0 e usando uma estrutura de controle baseada na manipulação de F_J , tenha sido necessário fazer uma alteração na temperatura de entrada do fluido refrigerante.

A dificuldade surgida com a perturbação negativa deve-se ao fato de que este constitui um caso a parte dos outros estudados. Em todos os outros casos, o fluido refrigerante mantém sua função original que é de refrigeração, ou seja, de retirar calor da mistura reacional. De acordo com os diagramas da concentração no tempo das figuras 6.9(b) e 6.10(b), torna-se evidente que a concentração de reagentes na entrada e na saída do processo são praticamente iguais ($C_A = C_{A0} = 0,5$ moles/ft³) o que indica que não houve conversão e, conseqüentemente, geração de calor.

Aumentando T_{J0} há uma inversão de função, ou seja, o fluido refrigerante passa a ter uma função aquecedora, injetando no sistema a energia necessária para a conversão. Isto fica nítido no diagrama de concentração *versus* tempo da figura 6.12(b).

Constatou-se que o ganho $K_c = K_u/2$, obtido pelo método de Ziegler-Nichols, imprime uma ação de controle pequena sob as variáveis manipulada em qualquer que seja a estrutura de controle. Isto pode ser comprovado nas figuras 6.21(a) e 6.22(a), onde a temperatura do reator estabilizou-se em um patamar bastante afastado do "set-point".

Comparando, então, o método de Intervalos com o método de Z-N para a obtenção de parâmetros de controladores exclusivamente proporcionais, conclui-se que a superioridade do primeiro reside não só no fato de produzir um "off-set" menor no estado estacionário, como também de ser aplicado durante a operação.

O método de Z-N demanda um grande espaço de tempo até que resultados sejam gerados, haja vista o fato de que este trata de um

método de tentativa e erro e, a avaliação da instabilidade do sistema para cada valor de K_c sendo feita em um certo intervalo, aumentaria em muito o tempo de aplicação do método. Além do mais, é um procedimento que deve ser aplicado "off-line".

Por outro lado, pelo método dos intervalos, após o surgimento de uma perturbação em T_0 , o tempo necessário para que uma nova constante mais adequada às novas condições do sistema seja encontrada é bem menor, uma vez que o algoritmo da figura 6.2 prevê sua utilização de forma automática, paralelamente à operação do reator.

Os resultados apresentados na seção 6.5.1, para a aplicação do método dos intervalos, demonstra a viabilidade de utilização deste em sistema em tempo real.

6.6. Conclusões

A aplicação de técnicas de controle clássico em processos químicos não lineares e multivariável pode ter seu sucesso comprometido se os parâmetros do controlador não forem convenientemente escolhidos. Dentro deste contexto o grande problema está associado com a inexistência métodos confiáveis para obter os parâmetros do controlador. Como mostrado, o método de Ziegler-Nichols, para ajuste de parâmetros do controlador, não forneceu bons resultados. Por outro lado, a aplicação do método dos intervalos foi satisfatória em todas as situações estudadas, independente da estrutura de controle e tipo de perturbação usados.

Os resultados obtidos, usando o método dos intervalos, demonstra a viabilidade de sua utilização em tempo real e mostra que técnicas de controle clássico devem ser testadas antes de fazer o projeto de controlador baseado nos princípios do controle avançado.

Capítulo 7

Conclusões e Sugestões

7.1. Conclusões

Este trabalho mostrou a necessidade de que os estudos sobre análise dinâmica, otimização e controle de processos químicos precisam ser feitos conjuntamente.

A metodologia proposta para analisar o efeito de variações simultâneas nas variáveis de entrada através de curvas de superfície é conveniente para definir estruturas de controle e política operacional em sistemas multivariável e não lineares. Na verdade as curvas de superfície permitem identificar com relativa facilidade as regiões de maior flexibilidade das variáveis.

O uso do procedimento de otimização (utilizando o "Princípio Máximo de Pountryagin") pode ser útil na obtenção de "set-points" ótimos para controle e na definição de política operacional de reatores químicos. No entanto, cuidados devem ser tomados com relação a cinética da reação química bem como o tipo de operação ao reator (contínuo ou batelada).

A aplicação da teoria do controle ótimo, via PQL, em reatores CSTR produz resultados satisfatórios para os dois tipos de reações químicas estudadas. Estas técnicas com algumas mudanças nas variáveis de estado estacionário, no modelo dos ganhos do controlador, permite o controle sem "off-set". Embora o método de controle ótimo aqui empregado possua vários parâmetros de controle a serem ajustados, uma boa performance de controle é alcançada mantendo a maioria dos parâmetros em valores fixos e ajustando apenas um ou no máximo dois destes parâmetros.

Os resultados obtidos com o método dos Intervalos, para obtenção dos parâmetros de controle, demonstra a viabilidade de sua utilização em tempo real e abre novas perspectivas para as aplicações com sucesso de técnicas de controle clássico.

7.2. Sugestões para Trabalhos Futuros

Para possibilitar um estudo mais aprofundado da análise dinâmica dos reatores tipo CSTR, seria interessante considerar o gradiente térmico na parede do reator e a agitação no interior do reator. O principal intuito é considerar uma nova capacitância térmica que pode afetar a dinâmica do sistema.

Existe escopo para desenvolver um outro método de obtenção de "set-point" ótimo usando técnicas de otimização em tempo real não linear baseada em teoria de programação quadrática (especificamente o SQP) e compará-lo com o utilizado nesta tese (Princípio Máximo de Pountryagin).

Para obter um algoritmo de controle que seja mais robusto, seria conveniente formular o método PQL de controle ótimo com ação de controle Integral (Ray, 1981) além da Proporcional.

Para avaliar melhor o potencial do Método dos Intervalos, sugere-se estender esse procedimento para permitir a obtenção dos parâmetros de controle para controladores PI e PID aplicados a outros processos químicos.

Referências Bibliográficas

Balakotaiah, V. e Luss, D., 1982, "Exact steady-state multiplicity criteria for two consecutive or parallel reactions in lumped-parameter systems", *Chemical Engineering Science*, 37(3), 443-445.

Baldyga, J. e Rohani, S., 1987, "Determination of the micromixing level in a CSTR: transient step response of reactive tracers", *Chemical Engineering Science*, 42(3), 575-580.

Bar-Eli, K., 1984, "On the coupling of chemical oscillators", *J. phys. Chemical*, 88, 3616-3632.

Bar-Eli, K., 1985, "On the stability of coupled chemical oscillators", *Physica*, 14D, 242-252.

Bayley, J. E.; Horn, F. J. e Lin, R. C., 1971, "Cyclic operation of reaction systems: effects of heat and mass transfer resistance", *Aiche Journal*, 17(4), 818-825.

Chemburkar, R. M.; Morbidelli, M. e Varmas, A., 1986, "Parametric sensitivity of a CSTR", *Chemical Engineering Science*, 41(6), 1647-1654.

Chemburkar, R. M.; Rossler, D. E. e Varmas, A., 1987, "Dynamics of consecutive reactions in a CSTR - a case study", *Chemical Engineering Science*, 42(6), 1507- 1509.

Edgar, T. F. e Himmelblau, D. M., 1989, "Optimization of Chemical Process", McGraw-Hill Book Company - International Edition.

Eliçabe, G. E.; Frontini, G. L. e Meira, G. R., 1986, "Adaptive model-following control of a certain class of non-linear process unit application to a continuous periodic reactor", *Chemical Engineering Science*, 41(7), 1833-1841.

Filippi, C., 1986, "Autoadaptive Control of Batch Processes", *Doctoral Thesis, Laboratoire des Sciences du Genie Chimique, CNRS-ENSIC, Nanci, France.*

Fillipi, C.; Greffe, P.; Bordet, J.; Villermaux, J.; Barnay, J. L. Bonte; P. e Georgakis, C., 1986, "Tendency modeling of semibatch reactors for optimization and control", *Chemical Engineering Science*, 41(4), 913-920.

Georgakis, C., 1986, "On the use of extensive variables in process dynamics and control", *Chemical Engineering Science*, 41(6), 1471-1484.

Gray, P. e Kordylewski, W., 1985, "Dynamic response to perturbations in the non-isothermal CSTR. Times to ignition and times for temperature decay - I. Adiabatic operation", *Chemical Engineering Science*, 40(8), 1577-1583.

Gray, P. e Kordylewski, W., 1985, "Dynamics responses to perturbations in the non-isothermal, continuous-flow stirred-tank reactor (CSTR) - II. Nonadiabatic operation: the general case", *Chemical Engineering Science*, 40(9), 1703-1707.

Hoffmann, U. e Schadlich, H. K., 1986, "The influence of reaction orders and of changes in the total number of moles on the conversion in a periodically operated CSTR.", *Chemical Engineering Science*, 41(11), 2733-2738.

Horn, F. J. M. e Bailey, J. E., 1968, *J. Optimization Theory Appl.*, 2, 441.

Horn, F. J. M. e Lin, R. C., 1967, *Ind. Eng. Chemical Process Design Develop*, 6, 21.

Hugo, P. e Steinbach, J., 1986, "A comparison of the limits of safe operation of a SBR and CSTR", *Chemical Engineering Science*, 41(4), 1081-1087.

Jenson, V. G. e Jeffreys, G. V., 1977, "Mathematical Methods Chemical Engineering", Academic Press, Inc., second edition.

Kahlert, C.; Rossler, O. E. e Varma, A., 1981, *Modeling of Chemical Reaction Systems*, 355-365.

Kennedy, C. R. e Aris, R., 1980, "Bifurcationsof a model diffusion-reaction system", *New Approaches to Nonlinear Problems in Dinamics*.

Kerrekidis, I. G.; Aris, R. e Schmidt, L. D., 1986, "The stirred tank forced", *Chemical Engineering Science*, 41(6), 1549-1560.

Kubickova, Z. e Kubicek, M. e Marek, M., 1987, "Fed-batch operation of stirred reactor", *Chemical Engineeering Science*, 42(2), 327-333.

Leib, T. M.; Rumschitzki, D. e Feinberg, M., 1988, "Multiple steady states in complex isothermal CFSTRs - I. General considerations", *Chemical Engineering Science*, 43(2), 321-328.

Luyben, W. L., 1974, "Process Simulation, and Control for Chemical Engineers", McGraw-Hill International Book Company - International Edition.

Maciel Filho, R., 1989, "PhD thesis: Modelling and Control of Multitubular Fixed Bed Reactors", The University of Leeds, Leeds - England - U.K.

Maciel Filho, R. e Barbosa Jr., V. P., 1991, "Optimized Operation of Continuous Tank Reactors by Dinamic Behavoiur", Laboratório de Otimização de Projetos e Controle Avançado - Faculdade de Engenharia Química, Unicamp - Campinas SP.

Maciel Filho, R. e McGreavy, C., 1992, "Control Structures and Desing of Multitubular Reactor" *ESCAPE-1. Supplement to Computers and Chemical Engineering, Supplementary volume*, 16, 89-97.

Maciel Filho, R. e Tocalino, S. A. P., 1991, "Desenvolvimento de Ambientes para Simulação Dinâmica de Processos Químicos", Laboratório de Otimização de Projetos e Controle Avançado - Faculdade de Engenharia Química, Unicamp - Campinas SP.

McGreavy, C. e Maciel Filho, R., 1989, "Modelling of Distribution Parameter Systems for Control. IEE colloquium on Model Validation for Control System Design and Simulation", 7.1-7.4, London, U.K.

Mankin, J. C. e Hudson, J. L., 1986, "The dynamics coupled nonisothermal continuous stirred tank reactors", *Chemical Engineering Science*, 41(10), 2651-2661.

Planeaux, J. B. e Jensen, K. F., 1986, "Bifurcation phenomena in CSTR dynamics: a system with extraneous thermal capacitance", *Chemical Engineering Science*, 41(6), 1497-1523.

Ponnuswamy, S. R., 1984, "On-line Measurements and Control of a Batch Polymerization Reactor", *PhD Thesis*, University of Alberta, Alberta, Canada.

Ray, W. H., 1981, "Advanced Process Control", McGraw-Hill Book Company.

Rumschitzki, D. e Feinberg, M., 1988, "Multiple steady states in complex isothermal CFSTRs - II. Homogeneous reactors",

Chemical Engineering Science, 43(2), 329-337.

Stephanopoulos, G., 1984, "Chemical Process Control - An Introduction to Theory and Practica", Prentice-Hill, Inc. - Englewood Cliffs, New Jersey 07632.

Tsiligiannis, C. A. e Svoronos, S. A., 1988, "Dynamic interactors in multivariable process control - I. The general time delay case", *Chemical Engineering Science*, 43(2), 339-347.

Tsotsis, T., 1983, "Spatially-patterned states in systems of interacting lumped reactors", *Chemical Engineering Science*, 38, 701-717.

Uppal, A.; Ray, W. H. e Poore, A. B., 1976, "The classification of the dynamic behaviour of continuous stirred tank reactors - influence of reactor residence time", *Chemical Engineering Science*, 31, 205-214.

Waller, I. e Kapral, R., 1984, "Synchronization and chaos in coupled nonlinear oscillators", *Phys. Lett.*, 105A, 163-168.

Weast, R. C.; Astle, M. J. e Beyer, W. H., 1985, "CRC Handbook of Chemistry and Physics", CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida USA.

Wu, W. T. e Cheng, J. J., 1986, "Global control of a nonisothermal CSTR using a Moving Model", *Chemical Engineering Science*, 41(10), 2457-2461.

Yeo, B. P., 1987, "Optimal singular control of a continuous stirred-tank reactor via quase-linearization", *Chemical Engineering Science*, 42(10), 2465-2467.

Apêndices

Apêndice A. Dados de operação do reator CSTR em condições nominais

A.1. Para uma reação $A \rightarrow B$.

$$F_o = 40 \text{ ft}^3/\text{h}$$

$$C_{Ao} = 0,5 \text{ moles/ft}^3$$

$$T_o = 530 \text{ R}$$

$$T_{Jo} = 530 \text{ R}$$

$$F_J = 49,9 \text{ ft}^3/\text{h}$$

$$V = 48 \text{ ft}^3$$

$$V_J = 3,85 \text{ ft}^3$$

$$T_s = 600 \text{ R}$$

$$T_{Js} = 594,6 \text{ R}$$

$$C_{As} = 0,245 \text{ moles/ft}^3$$

$$C_{Bs} = 0,254 \text{ moles/ft}^3$$

$$E = 30000 \text{ BTU/mol}$$

$$R = 1,99 \text{ BTU/mol R}$$

$$A = 250 \text{ ft}^2$$

$$U = 150 \text{ BTU/h.ft}^2 \text{ R}$$

$$C_p = 0,75 \text{ BTU/lbmol R}$$

$$C_{pJ} = 1,0 \text{ BTU/lbmol R}$$

$$\alpha = 7,08 \times 10^{10} \text{ h}^{-1}$$

$$\Delta H = -30000 \text{ BTU/mol}$$

$$\rho = 50 \text{ lbm/ft}^3$$

$$\rho_J = 62,3 \text{ lbm/ft}^3$$

A.2. Para uma reação $A \rightarrow B \rightarrow C$.

$$F_o = 40 \text{ ft}^3/\text{h}$$

$$C_{Ao} = 0,5 \text{ moles/ft}^3$$

$$C_{Bo} = 0.0 \text{ moles/ft}^3$$

$$T_o = 530 \text{ R}$$

$$T_{Jo} = 530 \text{ R}$$

$$F_J = 50 \text{ ft}^3/\text{h}$$

$$V = 48 \text{ ft}^3$$

$$V_J = 3,85 \text{ ft}^3$$

$$T_s = 600 \text{ R}$$

$$T_{Js} = 594,6 \text{ R}$$

$$C_{As} = 0,245 \text{ moles/ft}^3$$

$$C_{Bs} = 0,1 \text{ moles/ft}^3$$

$$E_1 = 35000 \text{ BTU/mol}$$

$$E_2 = 33000 \text{ BTU/mol}$$

$$R = 1,99 \text{ BTU/mol R}$$

$$A = 250 \text{ ft}^2$$

$$U = 150 \text{ BTU/h.ft}^2 \text{ R}$$

$$C_p = 0,75 \text{ BTU/lbmol R}$$

$$C_{pJ} = 1,0 \text{ BTU/lbmol R}$$

$$\alpha_1 = 1,30 \times 10^{13} \text{ h}^{-1}$$

$$\alpha_2 = 2,88 \times 10^9 \text{ h}^{-1}$$

$$\Delta H = -30000 \text{ BTU/mol}$$

$$\rho = 50 \text{ lbm/ft}^3$$

$$\rho_J = 62,3 \text{ lbm/ft}^3$$

Apêndice B. Linearização

Uma situação bastante importante para muitos problemas em Engenharia Química é a linearização de uma função não linear usando Expansão em Série de Taylor com truncamento no segundo termo.

Considere uma equação diferencial ordinária não linear, dada por

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \quad (\text{B.1})$$

Expandindo a função não linear $f(x)$ em uma Série de Taylor em torno de um ponto x_0 :

$$f(x) = f(x_0) + \left(\frac{df}{dx}\right)_{x_0} \frac{x - x_0}{1!} + \left(\frac{d^2f}{dx^2}\right)_{x_0} \frac{(x - x_0)^2}{2!} + \dots + \left(\frac{d^nf}{dx^n}\right)_{x_0} \frac{(x - x_0)^n}{n!} \quad (\text{B.2})$$

Negligenciando os termos de ordem maior ou igual a dois na equação B.2, tem-se a aproximação para $f(x)$

$$f(x) \approx f(x_0) + \left(\frac{df}{dx}\right)_{x_0} (x - x_0) \quad (\text{B.3})$$

Há um erro introduzido na aproximação B.3 da mesma ordem do termo

$$I = \left(\frac{d^2f}{dx^2}\right)_{x_0} \frac{(x - x_0)^2}{2!} \quad (\text{B.4})$$

Consequentemente, a aproximação B.3 é satisfatória somente quando x é um valor muito próximo de x_0 , onde o valor do termo I é muito pequeno. Logo a função $f(x)$ linearizada é dada por

$$\frac{dx}{dt} = f(x_0) + \left(\frac{df}{dx}\right)_{x_0}(x - x_0) \quad (\text{B.5})$$

Apêndice C. Definição de Matrizes

Dada uma matriz quadrática $A_{n \times n}$, define-se:

Matriz transposta de A : é a matriz que se obtém de A pela troca das linhas pelas colunas, representada por A^T .

Matriz simétrica de A : quando $A = A^T$ ou seja, $a_{ij} = a_{ji}$ para todos os i e todos os j .

"Rank" (representado por r): é o número de linhas ou coluna linearmente independentes na matriz.

Matriz simétrica positiva definida: A matriz simétrica A só é positiva definida se e somente se existir uma matriz C tal que $A = C^T C$.

Matriz simétrica positiva semidefinida: A matriz simétrica A de "rank" r só é positiva semidefinida se e somente se existir uma matriz C de rank r tal que $A = C^T C$.

Apêndice D. Tipos de Controladores

Descrição dos três tipos básicos de controladores

1 - Controlador Proporcional - P.

A variável de saída do controlador $m(t)$ é proporcional ao erro ϵ .

$$m(t) = K_c \epsilon(t) + m_s \quad (D.1)$$

onde K_c é o ganho proporcional do controlador e m_s o valor da variável de saída quando ϵ é igual a zero.

Características do controlador

- . Acelera a resposta do processo controlado
- . Produz "off-set".

2 - Controlador Proporcional-Integral - PI

O sinal de atuação do controlador $m(t)$ com relação ao erro ϵ é dado por

$$m(t) = K_c \epsilon(t) + \frac{K_c}{\tau_I} \int_0^t \epsilon(t) dt + m_s \quad (D.2)$$

onde τ_I é a constante de tempo integral.

A ação integral faz com que:

- . A saída do controlador $m(t)$ mude enquanto existir o erro ϵ , eliminando o "off-set".
- . A resposta apresenta oscilações.
- . Se o aumento de K_c produz uma resposta muito rápida, o sistema torna-se mais oscilatório e pode ser conduzido à instabilidade.

3 - Controlador Proporcional-Integral-Derivativo - PID.

A saída do controlador é dada por

$$m(t) = K_c \epsilon(t) + \frac{K_c}{\tau_I} \int_0^t \epsilon(t) dt + K_c \tau_D \frac{d\epsilon}{dt} + m_S \quad (D.3)$$

onde τ_D é a constante de tempo derivativo

Efeitos da ação derivativa:

- . Antecipa qual será o erro no futuro imediato e aplica a ação de controle, a qual é proporcional à taxa de mudança do erro.
- . Não atua para erros ϵ constantes
- . Introduce um efeito estabilizador na resposta de malha fechada do processo.

A figura D.1 mostra a resposta de um sistema, que sofreu uma perturbação do tipo degrau, para os três tipos de controladores.

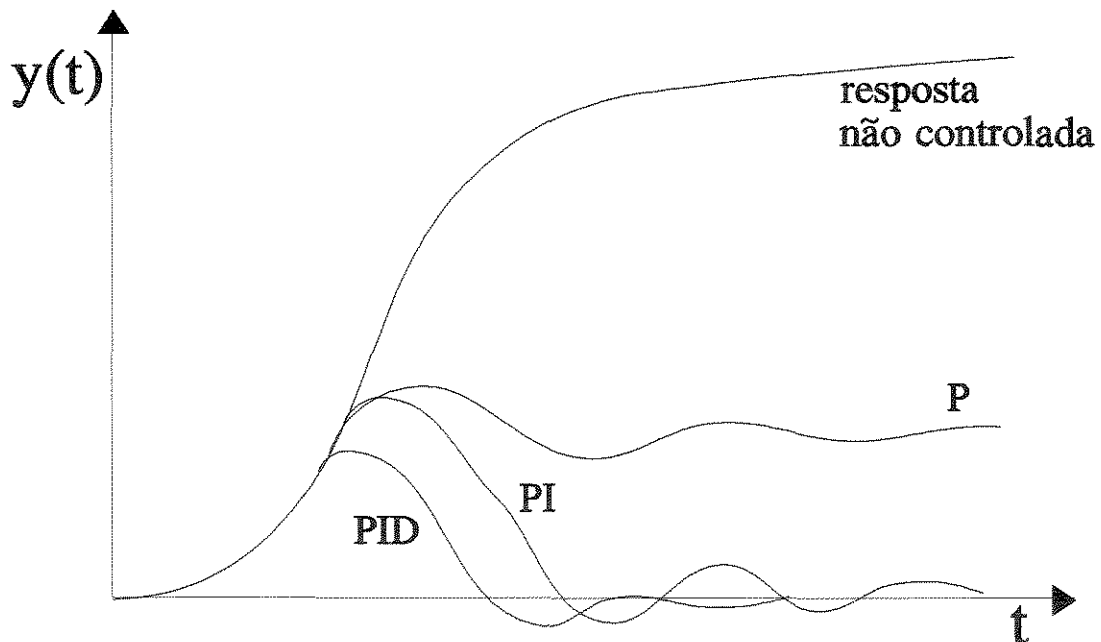


Figura D1. Resposta de um sistema submetido a vários tipos de controle

Apêndice E. Método de Obtenção de Parâmetros do Controlador.

Método de Ziegler-Nichols (Z-N)

Para a aplicação deste método o sistema deve estar em malha fechada e operando em níveis desejados (condições de projeto)

Usando apenas controle proporcional, o método consiste em variar gradativamente a constante de controle e, para cada valor, observar o comportamento do sistema durante certo tempo. A partir de um determinado valor para K_c , o sistema se tornará instável e oscilatório. Este valor será então chamado de Constante de Ultimato (K_u) para o sistema. De acordo com o método Z-N, os parâmetros do controlador são dados pelas seguintes relações:

1 - Controlador Proporcional

$$K_C = \frac{K_u}{2}$$

2 - Controlador Proporcional-Integral

$$K_C = \frac{K_u}{2,2}$$

$$\tau_I = \frac{P_u}{1,2}$$

onde P_u é o Período de Ultimato (período com oscilações constantes)

3 - Controlador Proporcional-Integral-Derivativo

$$K_C = \frac{K_u}{1,7}$$

$$\tau_I = \frac{P_u}{2}$$

$$\tau_D = \frac{P_u}{8}$$

Abstract

The control of chemical processes is a determining factor to a good performance of the whole plant. However, its success will be highly restricted to the development of suitable control structures. In this work, it was proposed and investigated several structures of control looking for obtaining suitable off-line and on-line control of chemical reactor. For that some non-conventional techniques were used.

A non-isothermic continuous stirred tank reactor (CSTR) to chemicals reactions of the type $A \rightarrow B$ ou $A \rightarrow B \rightarrow C$ (considered exothermic, irreversible with first order kinetics) was used as the system, where the control objective is to maximize product B. The study of this system is of major importance in many process is of the chemical and biotechnological industries. In spite of being a lumped parameter system, the process multivariable and nonlinear so that it has a complex dynamic behaviour.

A comprehensive dynamic study for simultaneous perturbations of the inputs was carried out. The proposed methodology to analyse such effects showed out to be very convenient in the definitions of control strategies and operational policies.

Made the dynamic analyse of the system was began the optimization study through a procedure to define the set-point for the reactor optimum operation, strategies and implementation of control algorithm. Following, the optimum control theory was applied in the reactor control, allowing to obtain satisfactory results, for different structures of control.

In the control design system is fundamental to identify controller parameters. In this work, it was carried out the evaluation of a technique of acquisition of parameters for automatic control, using the interval method. It is shown the viability of this technique in real time control and this point out to the fact classical control techniques must be tested before using principles of advanced control.