



JOSIAS MAXIMO DE JESUS

MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM REATOR DE LEITO
FIXO PARA A SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO E
CONTROLE UTILIZANDO ESTRATÉGIAS
CONVENCIONAIS E LÓGICA *FUZZY*

CAMPINAS
2013



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

JOSIAS MAXIMO DE JESUS

MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM REATOR DE LEITO
FIXO PARA A SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO E
CONTROLE UTILIZANDO ESTRATÉGIAS
CONVENCIONAIS E LÓGICA *FUZZY*

Orientador: Prof. Dr. Flávio Vasconcelos da Silva

Coorientador: Prof. Dr. Pedro Leite de Santana

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE
DEFENDIDA PELO ALUNO JOSIAS MÁXIMO DE JESUS E ORIENTADO
PELO PROF. DR. FLÁVIO VASCONCELOS DA SILVA

Assinatura do Orientador

CAMPINAS
2013

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Rose Meire da Silva - CRB 8/5974

J499m Jesus, Josias Maximo de, 1951-
Modelagem matemática de um reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico e controle utilizando estratégias convencionais e lógica fuzzy / Josias Máximo de Jesus. – Campinas, SP : [s.n.], 2013.

Orientador: Flávio Vasconcelos da Silva.

Coorientador: Pedro Leite de Santana.

Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Leito fixo. 2. Modelagem matemática. 3. Lógica fuzzy. 4. Reatores químicos. 5. Controle de processos químicos. I. Silva, Flávio Vasconcelos da, 1971-. II. Santana, Pedro Leite de. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Mathematical modeling of a fixed bed reactor for the phthalic anhydride synthesis and control using conventional and fuzzy logic strategies

Palavras-chave em inglês:

Fixed bed

Mathematical modeling

Fuzzy logic

Chemical reactors

Chemical process control

Área de concentração: Sistemas de Processos Químicos e Informática

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora:

Flávio Vasconcelos da Silva [Orientador]

Luis Fernando Novazzi

Eduardo Coselli Vasco de Toledo

Sergio Persio Ravagnani

Roger Josef Zemp

Data de defesa: 10-09-2013

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE SISTEMAS QUÍMICOS

TESE DE DOUTORADO

**Modelagem Matemática de um Reator de Leito Fixo para a Síntese
de Anidrido Ftálico e Controle Utilizando Estratégias Convencionais
e Lógica *Fuzzy***

Autor: Josias Maximo de Jesus

Orientador: Prof. Dr. Flávio Vasconcelos da Silva

Coorientador: Prof. Dr. Pedro Leite de Santana

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Tese:



Prof. Dr. Flávio Vasconcelos da Silva, Presidente
FEQ/UNICAMP



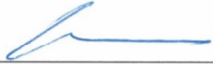
Prof. Dr. Luis Fernando Novazzi
FEI



Dr. Eduardo Coselli Vasco de Toledo
PETROBRÁS



Prof. Dr. Sergio Persio Ravagnani
FEQ/UNICAMP



Prof. Dr. Roger Josef Zemp
FEQ/UNICAMP

Campinas, 10 de setembro de 2013.

DEDICATÓRIA

À minha amada esposa Magna que tem sido meu porto seguro.

Aos meus pais José Máximo e Maria Francisca, “*in memoriam*”, que mesmo de poucos estudos, sempre me incentivaram a buscar novos horizontes no caminho do saber.

À minha família e à família de minha esposa, em especial aos meus sogros, que dentro de suas devoções sempre estiveram orando por mim.

Ao meu colega e amigo Pedro Leite de Santana que sempre se fez presente.

AGRADECIMENTOS

A Deus, sem o qual nada existe e a quem tudo devemos.

À minha família, em especial a minha esposa Magna, pelo amor, incentivo e privação de um convívio mais presente ao longo desses anos.

Ao meu orientador, Professor Flávio Vasconcelos da Silva, pela acolhida e oportunidade oferecida para que este trabalho fosse realizado, destacando sua orientação precisa e eficiente.

Ao meu colega, grande amigo e coorientador, Professor Pedro Leite de Santana, pelo incentivo e companheirismo, o grande esteio na realização deste trabalho.

Ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de Sergipe por minha liberação.

À UNICAMP, em especial ao Departamento de Sistemas de Processos Químicos e Informática, pela oportunidade oferecida para a realização deste trabalho.

Aos colegas do Departamento de Engenharia Química que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho ou pela descontração nos momentos de tensão, em especial aos professores José Jailton, Rogério Pagano, José Augusto Machado, Gisélia Cardoso e Roberto Rodrigues. Nesse rol, inclui-se também o professor Antônio Santos Silva do Departamento de Matemática.

À CAPES pelo apoio financeiro.

“Uma teoria é apenas um modelo do universo, ou de uma parte restrita dele, e um conjunto de regras que relacionam quantidades no modelo a observações que fazemos. Ela existe somente em nossas mentes e não tem qualquer outra realidade (o que quer que isso possa significar). Uma teoria é uma boa teoria se ela satisfaz dois requisitos: ela precisa descrever com exatidão uma grande classe de observações com base em um modelo que contém apenas alguns poucos elementos arbitrários, e ela precisa gerar previsões claras sobre resultados de observações futuras.”

Stephen Hawking

RESUMO

Os reatores de leito fixo constituem importantes sistemas da engenharia química, com muitas aplicações em diversos processos industriais, notadamente no campo das indústrias de refino do petróleo e petroquímica. Do ponto de vista da análise de processos químicos, se mostra relevante o estabelecimento de modelos matemáticos representativos que possam ser aplicados ao projeto, à otimização e ao controle desses sistemas. Neste trabalho, apresenta-se a modelagem matemática fenomenológica de um reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico por oxidação de o-xileno, considerando-se as resistências difusionais mássicas e térmicas externas associadas ao processo de reação catalítica, o qual é realizado com catalisadores não porosos à base de óxidos de vanádio e titânio. O modelo matemático foi implementado como um módulo computacional para simulação do processo nos estados estacionário e dinâmico, a partir do qual se fez um estudo de sensibilidade paramétrica que mostrou a forte influência da temperatura e da concentração de o-xileno na corrente de alimentação, bem como da temperatura do fluido térmico, no comportamento global do reator. Essas constatações permitiram a proposição de estruturas de controle com o objetivo de regular a concentração do produto na saída do reator e manter uma condição térmica operacional segura. Para o controle do reator foram consideradas duas estruturas: (i) um esquema de controle direto da concentração utilizando um controlador convencional PI e um controlador por lógica *fuzzy* (*Fuzzy-PI*) e (ii) um esquema de controle cascata concentração-temperatura utilizando também controladores convencionais PI e *Fuzzy-PI* nas duas malhas (primária e secundária) que compõem a estrutura cascata. Cada controlador teve seu desempenho analisado mediante perturbações do tipo degrau impostas nas condições de alimentação dos reagentes (composição e temperatura). Os resultados evidenciaram um bom desempenho das estruturas de controle cascata, que se mostraram eficientes para controlar a concentração do produto na saída do reator e garantir ao mesmo tempo um regime térmico seguro. Na presença de ruído, os controladores *Fuzzy-PI* apresentaram um desempenho superior ao dos controladores PI convencionais.

Palavras-chave: Reator de leito fixo, modelagem matemática, controle cascata, lógica *fuzzy*.

ABSTRACT

Fixed bed reactors are important systems in chemical engineering with several applications in many industrial processes, mainly in petroleum refining and petrochemical industries. A comprehensive view on these systems through mathematical modeling is crucial for design, optimization and control issues. This work presents a phenomenological mathematical model for a fixed bed reactor applied to the phthalic anhydride synthesis from o-xylene oxidation using supported non-porous V_2O_5 - TiO_2 catalyst. All resistances due to mass and heat flows from the fluid phase to the catalytic particle surface are considered in the mathematical formulation. The mathematical model consisted of a Matlab based computational code for the process simulation both in dynamic and steady-state conditions, providing a parametric sensitivity study that showed the intensive influence of the feed conditions in terms of temperature and o-xylene concentration, as well as the effect of thermal fluid temperature on the global reactor behavior. These observations provided control structures to regulate product concentration leaving the reactor and to avoid the formation of excessive hot spots along the catalytic bed, what is a necessary condition to maintain a safe thermal system operation. It were proposed two structures to control the reactor: (i) a straightforward scheme to control the concentration of phthalic anhydride in the reactor outlet using conventional PI and fuzzy PI controllers, and (ii) another scheme based on a cascade control temperature-concentration also using conventional and fuzzy PI controllers in two (primary and secondary) loops. The behavior of each controller was analyzed by imposing stepwise perturbations in inner o-xylene concentration and in the temperature of the feed. The results showed a good performance of cascade-type controllers, providing the proper regulation of the controlled variable and a safe thermal regime for the system operation. On the other hands, fuzzy logic controllers exhibited better performance for the reactor regulation when measurement noise was taken in account.

Keywords: Fixed bed reactor, mathematical modeling, cascade control, fuzzy logic.

ÍNDICE GERAL

RESUMO	xiii
ABSTRACT	xv
ÍNDICE DE FIGURAS	xxi
ÍNDICE DE TABELAS	xxxii
NOMENCLATURA.....	xxxiii
CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO	1
1.1 Objetivos do Trabalho	5
CAPÍTULO 2: REVISÃO DA LITERATURA	7
2.1 Introdução.....	7
2.2 Modelagem Matemática de Reatores de Leito Fixo.....	7
2.3 Controle de Reatores de Leito Fixo.....	15
2.4 Conclusões.....	23
CAPÍTULO 3: MODELO MATEMÁTICO DO REATOR DE SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO	25
3.1 Introdução.....	25
3.2 Modelagem Matemática	27
3.2.1 Balanços de Massa e Energia	28
3.2.2 Equações Cinéticas	32
3.2.3 Adimensionalização do Modelo	34
3.2.4 Modelo Estacionário.....	38
3.2.5 Solução do Modelo.....	39
CAPÍTULO 4: ESTUDO DA SENSIBILIDADE PARAMÉTRICA DO REATOR DE SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO	47
4.1 Introdução.....	47
4.2 Desempenho da Solução Numérica.....	49
4.3 Efeito das Resistências à Transferência de Massa e Calor.....	55
4.3.1 Gradientes de Concentração e Temperatura.....	69
4.4 Estudo de Sensibilidade Paramétrica.....	75
4.4.1 Influência da Temperatura de Entrada da Mistura Reacional (T_{θ}).....	75
4.4.2 Influência da Temperatura de Entrada do Fluido Refrigerante (T_{c0}).....	79

4.4.3	Influência da Concentração de Entrada do Reagente (C_{A0}).....	82
4.4.4	Influência da Velocidade da Mistura Reacional (v_g).....	84
4.4.5	Influência da Velocidade do Fluido Refrigerante (v_c).....	87
4.5	Conclusões.....	90
CAPÍTULO 5: CONTROLE DO REATOR DE SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO.....		91
5.1	Introdução.....	91
5.2	O Controle PID.....	92
5.3	Controle Cascata e Controle Seletivo.....	95
5.4	Controle PI para o Reator.....	98
5.4.1	Controle Direto.....	99
5.4.2	Controle Cascata.....	100
5.5	O Controle <i>Fuzzy</i>	102
5.5.1	Conjuntos <i>Fuzzy</i> e Lógica <i>Fuzzy</i>	103
5.5.2	Operações Lógicas.....	107
5.5.3	Regras <i>Fuzzy</i>	109
5.5.4	Sistema de Inferência <i>Fuzzy</i>	110
5.5.5	Exemplo de Inferência <i>Fuzzy</i> com o Modelo do Tipo Mamdani.....	113
5.6	Controle <i>Fuzzy</i> para o Reator.....	119
5.6.1	Controle Direto.....	123
5.6.2	Controle Cascata.....	124
5.7	CrITÉrios de Desempenho dos Controladores.....	126
5.8	Conclusões.....	127
CAPÍTULO 6: DESEMPENHO DAS ESTRUTURAS DE CONTROLE.....		129
6.1	Introdução.....	129
6.2	Dinâmica das Variáveis de Controle.....	129
6.3	Tempo de Amostragem.....	134
6.4	Parâmetros de Sintonia dos Controladores.....	141
6.5	Análise de Desempenho das Estruturas de Controle.....	143
6.5.1	Perfil Evolutivo da Temperatura ao Longo do Reator.....	143
6.5.2	Perfis Comparativos de Controle para Perturbações em T_0	151
6.5.3	Perfis Comparativos de Controle para Perturbações em C_{A0}	161
6.5.4	Perturbações Sucessivas – Controladores PI e FZ-PI Cascata.....	171
6.5.5	Controle com Ruído de Medida.....	180
6.6	Conclusões.....	190

CAPÍTULO 7: CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	193
REFERÊNCIAS	197
APÊNDICE A: CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA E CALOR.....	205
APÊNDICE B: ANÁLISE DE DIFERENTES ESTRUTURAS DE CONTROLE CASCATA	211
APÊNDICE C: DINÂMICA DE PRIMEIRA ORDEM COM ATRASO NO TEMPO APLICADA À VARIÁVEL MANIPULADA	217

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 3.1 - Esquema representativo de um reator de leito fixo multitubular para a síntese de anidrido ftálico.....	26
Figura 3.2 - Representação esquemática do reator de leito fixo tubular e do volume de controle diferencial para os balanços de conservação.	27
Figura 3.3 - Esquema ilustrativo do processo de discretização da coordenada espacial ζ pelo método das linhas.	40
Figura 3.4 - Fluxograma de cálculos do módulo computacional para a solução do modelo estacionário.....	45
Figura 3.5 - Fluxograma de cálculos do módulo computacional para a solução do modelo dinâmico.	46
Figura 4.1 - Perfil de temperatura ao longo do reator ($T_0 = 638$ K).....	50
Figura 4.2 - Perfil de temperatura ao longo do reator ($T_0 = 658$ K).....	50
Figura 4.3 - Perfil de concentração de o-xileno ($T_0 = 640$ K).....	52
Figura 4.4 - Perfil de concentração de anidrido ftálico ($T_0 = 640$ K).....	52
Figura 4.5 - Perfil de temperatura ($T_0 = 640$ K).....	53
Figura 4.6 - Perfil de concentração de o-xileno ($T_0 = 658$ K).....	53
Figura 4.7 - Perfil de concentração de anidrido ftálico ($T_0 = 658$ K).....	54
Figura 4.8 - Perfil de temperatura ($T_0 = 658$ K).....	54
Figura 4.9 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-1 ($T_0 = 638$ K).....	57
Figura 4.10 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-2 ($T_0 = 638$ K).....	58
Figura 4.11 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-3 ($T_0 = 638$ K).....	58
Figura 4.12 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-1 ($T_0 = 638$ K).....	59
Figura 4.13 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-2 ($T_0 = 638$ K).....	60
Figura 4.14 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-3 ($T_0 = 638$ K).....	60
Figura 4.15 - Perfil estacionário de concentração de o-xileno no reator ($T_0 = 638$ K).....	61

Figura 4.16 - Perfil estacionário de concentração de anidrido ftálico no reator ($T_0 = 638$ K).	62
Figura 4.17 - Perfil estacionário de temperatura no reator ($T_0 = 638$ K).....	62
Figura 4.18 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-1 ($T_0 = 658$ K).....	63
Figura 4.19 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-2 ($T_0 = 658$ K).....	64
Figura 4.20 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-3 ($T_0 = 658$ K).....	65
Figura 4.21 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-1 ($T_0 = 658$ K).....	66
Figura 4.22 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-2 ($T_0 = 658$ K).....	67
Figura 4.23 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-3 ($T_0 = 658$ K).....	67
Figura 4.24 - Perfil estacionário de concentração de o-xileno no reator ($T_0 = 658$ K).	68
Figura 4.25 - Perfil estacionário de concentração de anidrido ftálico no reator ($T_0 = 658$ K).	68
Figura 4.26 - Perfil estacionário de temperatura no reator ($T_0 = 658$ K).....	69
Figura 4.27 - Perfis dinâmicos de concentração do o-xileno nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 638$ K).....	70
Figura 4.28 - Perfis dinâmicos de temperatura nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 638$ K).....	71
Figura 4.29 - Perfis estacionários de concentração de o-xileno e anidrido ftálico nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 638$ K).	71
Figura 4.30 - Perfis estacionários de temperatura nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 638$ K).....	72
Figura 4.31 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 658$ K).....	73
Figura 4.32 - Perfis dinâmicos de temperatura nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 658$ K).....	73
Figura 4.33 - Perfis estacionários de concentração de o-xileno e anidrido ftálico nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 658$ K).	74
Figura 4.34 - Perfis estacionários de temperatura nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 658$ K).....	74
Figura 4.35 - Efeito de T_0 nos perfis de temperatura dos reagentes.	77
Figura 4.36 - Efeito de T_0 nos perfis de conversão do o-xileno.	77
Figura 4.37 - Efeito de T_0 nos perfis de concentração de o-xileno.....	78
Figura 4.38 - Efeito de T_0 nos perfis de concentração de anidrido ftálico.	78

Figura 4.39 - Efeito de T_{c0} nos perfis de temperatura dos reagentes.....	80
Figura 4.40 - Efeito de T_{c0} nos perfis de conversão do o-xileno.....	80
Figura 4.41 - Efeito de T_{c0} nos perfis de concentração de o-xileno.....	81
Figura 4.42 - Efeito de T_{c0} nos perfis de concentração de anidrido ftálico.....	81
Figura 4.43 - Efeito de C_{A0} nos perfis de temperatura dos reagentes.....	82
Figura 4.44 - Efeito de C_{A0} nos perfis de conversão do o-xileno.....	83
Figura 4.45 - Efeito de C_{A0} nos perfis de concentração de o-xileno.....	83
Figura 4.46 - Efeito de C_{A0} nos perfis de concentração de anidrido ftálico.....	84
Figura 4.47 - Efeito de v_g nos perfis de temperatura dos reagentes.....	85
Figura 4.48 - Efeito de v_g nos perfis de conversão do o-xileno.....	85
Figura 4.49 - Efeito de v_g nos perfis de concentração de o-xileno.....	86
Figura 4.50 - Efeito de v_g nos perfis de concentração de anidrido ftálico.....	86
Figura 4.51 - Efeito de v_c nos perfis de temperatura dos reagentes.....	88
Figura 4.52 - Efeito de v_c nos perfis de conversão do o-xileno.....	88
Figura 4.53 - Efeito de v_c nos perfis de concentração de o-xileno.....	89
Figura 4.54 - Efeito de v_c nos perfis de concentração de anidrido ftálico.....	89
Figura 5.1 - Representação simplificada de um sistema de controle <i>feedback</i>	92
Figura 5.2 - Controle em coluna de destilação: (a) malha simples e (b) esquema cascata.....	96
Figura 5.3 - Controle em reator tubular: (a) malha simples e (b) esquema seletivo.....	97
Figura 5.4 - Estrutura de controle direto da concentração de anidrido ftálico.....	99
Figura 5.5 - Representação esquemática do controlador cascata.....	101
Figura 5.6 - Exemplos de funções de pertinência: (a) triangular, (b) trapezoidal, (c) gaussiana e (d) sino.....	106
Figura 5.7 - Estrutura geral de um sistema de inferência <i>fuzzy</i>	110
Figura 5.8 - Estrutura geral de um sistema de controle <i>fuzzy</i>	112

Figura 5.9 - Representação esquemática do tanque de aquecimento.	114
Figura 5.10 - Ilustração das etapas de inferência <i>fuzzy</i> para o tanque de aquecimento.....	117
Figura 5.11 - Estrutura de cálculo do controlador <i>Fuzzy</i> -PI.....	121
Figura 5.12 - Universo de discurso normalizado com funções de pertinência triangular.	121
Figura 5.13 - Estrutura de cálculo do controlador direto <i>Fuzzy</i> -PI.	123
Figura 5.14 - Estrutura de cálculo do controlador cascata <i>Fuzzy</i> -PI.	125
Figura 6.1 - Comportamento dinâmico da concentração para perturbações em T_0	130
Figura 6.2 - Comportamento dinâmico das temperaturas T_1 e T_2 para perturbações em T_0	131
Figura 6.3 - Comportamento dinâmico das temperaturas T_3 e T_4 para perturbações em T_0	131
Figura 6.4 - Comportamento dinâmico da concentração para perturbações em C_{A0}	132
Figura 6.5 - Comportamento dinâmico das temperaturas T_1 e T_2 para perturbações em C_{A0}	133
Figura 6.6 - Comportamento dinâmico das temperaturas T_3 e T_4 para perturbações em C_{A0}	133
Figura 6.7 - Resposta da concentração de saída de anidrido ftálico para uma perturbação degrau positiva em T_{c0} de 1%.	135
Figura 6.8 - Resposta das temperaturas T_1 , T_2 , T_3 e T_4 a uma perturbação degrau positiva em T_{c0} de 1%.	136
Figura 6.9 - Efeito do tempo de amostragem na variável controlada (controlador PI).	137
Figura 6.10 - Efeito do tempo de amostragem na variável manipulada (controlador PI).	137
Figura 6.11 - Efeito do tempo de amostragem na variável controlada (controlador FZ-PI).	138
Figura 6.12 - Efeito do tempo de amostragem na variável manipulada (controlador FZ-PI).	138
Figura 6.13 - Efeito do tempo de amostragem na variável controlada (controlador PI cascata).	139
Figura 6.14 - Efeito do tempo de amostragem na variável manipulada (controlador PI cascata).	140
Figura 6.15 - Efeito do tempo de amostragem na variável controlada (controlador FZ-PI cascata).	140
Figura 6.16 - Efeito do tempo de amostragem na variável manipulada (controlador FZ-PI cascata).	141

Figura 6.17 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator em malha aberta com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo.	144
Figura 6.18 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator em malha aberta com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo.....	144
Figura 6.19 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo – Controlador PI.....	146
Figura 6.20 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo – Controlador PI.....	146
Figura 6.21 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo – Controlador FZ-PI.....	147
Figura 6.22 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo – Controlador FZ-PI.....	147
Figura 6.23 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo – Controlador PI cascata.....	148
Figura 6.24 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo – Controlador PI cascata.....	148
Figura 6.25 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo – Controlador FZ-PI cascata.....	149
Figura 6.26 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo – Controlador FZ-PI cascata.....	149
Figura 6.27 - Perfis de temperatura estacionários para uma perturbação em T_0 de +4%.	150
Figura 6.28 - Perfis de temperatura ao longo do reator no instante de tempo de máxima temperatura após a perturbação degrau de + 4% em T_0	150
Figura 6.29 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em T_0 de +4%.	151
Figura 6.30 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em T_0 de +4%.	152
Figura 6.31 - Respostas das temperaturas em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em T_0 de +4%.	152
Figura 6.32 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em T_0 de +4%.	153
Figura 6.33 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em T_0 de -4%.	154
Figura 6.34 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em T_0 de -4%.	155

Figura 6.35 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em T_0 de -4%.	155
Figura 6.36 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em T_0 de -4%.	156
Figura 6.37 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em T_0 de +30 K.	158
Figura 6.38 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em T_0 de +30 K.....	158
Figura 6.39 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em T_0 de +30 K.....	159
Figura 6.40 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em T_0 de +30 K.....	159
Figura 6.41 - Perfis estacionários de temperatura para uma perturbação em T_0 de +30 K.	160
Figura 6.42 - Perfis de temperatura nos instantes em que ocorrem os picos máximos para uma perturbação em T_0 de +30 K.....	161
Figura 6.43 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em C_{A0} de +5%.	163
Figura 6.44 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em C_{A0} de +5%.	163
Figura 6.45 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de +5%.	164
Figura 6.46 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de +5%.	164
Figura 6.47 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em C_{A0} de +3%.	166
Figura 6.48 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em C_{A0} de +3%.	166
Figura 6.49 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de +3%.	167
Figura 6.50 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de +3%.	167
Figura 6.51 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em C_{A0} de -3%.	169
Figura 6.52 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em C_{A0} de -3%.	170
Figura 6.53 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de -3%.	170

Figura 6.54 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de -3%.	171
Figura 6.55 - Input da variável T_0 (+2%, -4% e +4% de T_0 de referência).	172
Figura 6.56 - Resposta da variável controlada para perturbações sucessivas em T_0 .	172
Figura 6.57 - Resposta da variável manipulada para perturbações sucessivas em T_0 .	173
Figura 6.58 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para perturbações sucessivas em T_0 .	173
Figura 6.59 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para perturbações sucessivas em T_0 .	174
Figura 6.60 - Input da variável C_{A0} (+3%, -3% e +5% de C_{A0} de referência).	174
Figura 6.61 - Resposta da variável controlada para perturbações sucessivas em C_{A0} .	175
Figura 6.62 - Resposta da variável manipulada para perturbações sucessivas em C_{A0} .	175
Figura 6.63 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $0,40$ m (b) para perturbações sucessivas em C_{A0} .	176
Figura 6.64 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $0,80$ m (b) para perturbações sucessivas em C_{A0} .	176
Figura 6.65 - Inputs das variáveis de distúrbio: (a) T_0 (-4% e +4% de T_0 de referência) e (b) C_{A0} (+3% e +5%, de C_{A0} de referência).	177
Figura 6.66 - Resposta da variável controlada a perturbações sucessivas e simultâneas em T_0 e C_{A0} .	178
Figura 6.67 - Resposta da variável manipulada a perturbações sucessivas e simultâneas em T_0 e C_{A0} .	178
Figura 6.68 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para perturbações sucessivas e simultâneas em T_0 e C_{A0} .	179
Figura 6.69 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para perturbações sucessivas e simultâneas em T_0 e C_{A0} .	179
Figura 6.70 - Espectro do ruído adicionado à concentração ($\sigma = 0,00022$).	180
Figura 6.71 - Espectro do ruído adicionado à concentração ($\sigma = 0,00043$).	181
Figura 6.72 - Espectros dos ruídos adicionados às medidas de temperatura ($\sigma = 0,1$).	181
Figura 6.73 - Espectros dos ruídos adicionados às medidas de temperatura ($\sigma = 0,2$).	182

Figura 6.74 - Resposta da variável controlada com adição de ruído na medida de C_B ($\sigma = 0,00022$) – Controladores: (a) PI e (b) FZ-PI.	183
Figura 6.75 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído na medida de C_B ($\sigma = 0,00022$) – Controladores: (a) PI e (b) FZ-PI.	183
Figura 6.76 - Resposta da variável controlada com adição de ruído na medida de C_B ($\sigma = 0,00043$) – Controladores: (a) PI e (b) FZ-PI.	184
Figura 6.77 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído na medida de C_B ($\sigma = 0,00043$) – Controladores: (a) PI e (b) FZ-PI.	184
Figura 6.78 - Resposta da variável controlada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00022$) e de temperatura ($\sigma = 0,1$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata. ...	185
Figura 6.79 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00022$) e de temperatura ($\sigma = 0,1$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata. ...	186
Figura 6.80 - Resposta da variável controlada com adição de ruído na medida de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,1$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.	186
Figura 6.81 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,1$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata. ...	187
Figura 6.82 - Resposta da variável controlada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00022$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata. ...	187
Figura 6.83 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00022$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata. ...	188
Figura 6.84 - Resposta da variável controlada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata. ...	188
Figura 6.85 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata. ...	189
Figura 6.86 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a), $z = 0,40$ m (b), $z = 0,60$ m (c) e $z = 0,80$ m (d) com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controlador PI cascata.	189
Figura 6.87 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a), $z = 0,40$ m (b), $z = 0,60$ m (c) e $z = 0,80$ m (d) com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controlador FZ-PI cascata.	190
Figura B.1 - Resposta da variável controlada.	212
Figura B.2 - Resposta da variável manipulada.	212

Figura B.3 - Resposta da temperatura no ponto $z = 0,20$ m (T_1).....	213
Figura B.4 - Resposta da temperatura no ponto $z = 0,40$ m (T_2).....	213
Figura B.5 - Resposta da temperatura no ponto $z = 0,60$ m (T_3).....	214
Figura B.6 - Resposta da temperatura no ponto $z = 0,80$ m (T_4).....	214
Figura C.1 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador PI).	220
Figura C.2 - Perfil da variável controlada na saída do processo (Controlador PI).....	221
Figura C.3 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador FZ-PI).	221
Figura C.4 - Perfil da variável controlada na saída do processo (Controlador FZ-PI).....	222
Figura C.5 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador PI cascata)....	222
Figura C.6 - Perfil da variável controlada na saída do processo (Controlador PI cascata).	223
Figura C.7 - Perfis de temperatura em z_1 e z_2 (Controlador PI cascata).	223
Figura C.8 - Perfis de temperatura em z_3 e z_4 (Controlador PI cascata).	224
Figura C.9 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador FZ-PI cascata).	224
Figura C.10 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador FZ-PI cascata).	225
Figura C.11 - Perfis de temperatura em z_1 e z_2 (Controlador FZ-PI cascata).	225
Figura C.12 - Perfis de temperatura em z_3 e z_4 (Controlador FZ-PI cascata).	226

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 4.1 - Valores referenciais para o estudo de sensibilidade paramétrica.	48
Tabela 4.2 - Valores dos coeficientes de transferência de massa e calor.	55
Tabela 4.3 - Regiões consideradas para o estudo do comportamento dinâmico.	56
Tabela 5.1 - Base de regras <i>fuzzy</i> para o tanque de aquecimento.	115
Tabela 5.2 - Tabela de inferência <i>fuzzy</i>	123
Tabela 6.1 - Parâmetros de desempenho – perturbação em T_0 de +4% ($T_0 = 653,12$ K).	142
Tabela 6.2 - Parâmetros de desempenho – perturbação em T_0 de -4% ($T_0 = 602,88$ K).	154
Tabela 6.3 - Parâmetros de desempenho – perturbação em T_0 de +30 K ($T_0 = 658$ K).	157
Tabela 6.4 - Parâmetros de desempenho – Perturbação em C_{A0} de +5% ($C_{A0} = 0,1902$ mol/m ³).	162
Tabela 6.5 - Parâmetros de desempenho – Perturbação em C_{A0} de +3% ($C_{A0} = 0,1865$ mol/m ³).	165
Tabela 6.6 - Parâmetros de desempenho – Perturbação em C_{A0} de -3% ($C_{A0} = 0,1757$ mol/m ³).	168
Tabela A.1 - Parâmetros para o-Xileno e Anidrido ftálico.	209
Tabela A.2 - Propriedades físicas do ar.	209
Tabela A.3 - Valores dos coeficientes de transferência de massa e calor.	210
Tabela B.1 - Parâmetros de desempenho para o controlador PI cascata concentração-temperatura – perturbação em T_0 de +4% ($T_0 = 653,12$ K).	215

NOMENCLATURA

A	Área (m^2)/ matriz associada à derivada primeira no método de colocação ortogonal/ o-Xileno/ alto (rótulo linguístico)
B	Anidrido ftálico/ baixo (rótulo linguístico)
C_A	Concentração de o-xileno ($mol\ m^{-3}$)
C_B	Concentração de anidrido ftálico ($mol\ m^{-3}$)
C_{cat}	Concentração de catalisador ativo na fase sólido ($mol\ m^{-3}$)
$C_{P,A}$	Concentração de o-xileno na superfície da partícula catalítica ($mol\ m^{-3}$)
$C_{P,B}$	Concentração de anidrido ftálico na superfície da partícula catalítica ($mol\ m^{-3}$)
C_{pc}	Capacidade calorífica à pressão constante do fluido refrigerante ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
C_{pg}	Capacidade calorífica à pressão constante do fluido reacional ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
C_{ps}	Capacidade calorífica à pressão constante do sólido ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$)
D_{ei}	Diâmetro externo do tubo interno (m)
D_{ie}	Diâmetro interno do tubo externo (m)
D_{ii}	Diâmetro interno do tubo interno (m)
DE	Derivada do erro normalizado
DVM	Derivada da variável manipulada normalizada
E	Erro normalizado
E_i	Energia de ativação da reação i ($i = 1, 2, 3$) ($J\ mol^{-1}$)
$e(t)$	Erro (valor de <i>set point</i> – valor medido)
F	Vazão ($m^3\ h^{-1}$)
h_{gpa_s}	Coefficiente volumétrico de transferência de calor gás-sólido ($J\ s^{-1}\ m^{-3}\ K^{-1}$)
IAE	Integral do erro absoluto ($mol\ m^{-3}\ min$)
ISE	Integral do quadrado do erro ($mol^2\ m^{-6}\ min^2$)

$ITAE$	Integral do produto do tempo pelo erro absoluto ($\text{mol m}^{-3} \text{ min}^2$)
k	Número de tempos discretos
K	Fator de escala do controlador <i>fuzzy</i> PI
K_c	Ganho do controlador ($\text{K m}^3 \text{ mol}^{-1}$)
K_{c1}	Ganho do controlador primário ($\text{K m}^3 \text{ mol}^{-1}$)
K_{c2}	Ganho do controlador secundário
K_d	Fator de escala do controlador <i>fuzzy</i> PI
K_D	Ganho derivativo ($K_D = K_c \tau_d$)
K_e	Fator de escala do controlador <i>fuzzy</i> PI
$k_{gp} a_s$	Coefficiente volumétrico de transferência de massa gás-sólido ($A = \text{o-xileno}$, $B = \text{anidrido ftálico}$) (s^{-1})
K_I	Ganho integral ($K_I = K_c / \tau_i$)
k_{0i}	Fator de frequência da taxa de reação i ($i = 1, 2, 3$) ($\text{m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$)
K_P	Ganho proporcional ($K_P = K_c$)
L	Comprimento do reator (m)
R	Constante dos gases ($\text{J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)
r	Valor de referência (<i>set point</i>)
$r_{p,i}$	Taxa de reação da reação i ($i = 1, 2, 3$)
t	Tempo (min)
T	Temperatura do fluido reacional (K)
T_a	Tempo de acomodação (min)
T_c	Temperatura do fluido refrigerante (K)
T_m	Temperatura média (K)
T_p	Temperatura na superfície da partícula (K)
T_s	Tempo de amostragem (s)

U	Coeficiente global de transferência de calor ($\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$)
$u(t)$	Sinal de saída do controlador
v_c	Velocidade do fluido refrigerante (m s^{-1})
v_g	Velocidade do fluido reacional (m s^{-1})
V	Volume (m^3)
y_i	Posição do centróide da função de pertinência individual de saída (m)/variável adimensional/variável de saída do processo (variável medida)
z	Coordenada espacial ao longo do reator (m)

SÍMBOLOS GREGOS

α_i	Grupos adimensionais
β_i	Grupos adimensionais
γ_i	Grupos adimensionais
$(\Delta H)_i$	Calor de reação da reação i ($i = 1, 2, 3$) (J mol^{-1})
ε	Porosidade do leito
θ	Tempo adimensional
μ	Difusividade/ grau de pertinência
$\mu(y_i)$	Valor de pertinência de saída de y_i
φ_i	Grupos adimensionais
ρ_c	Massa específica do fluido refrigerante (kg m^{-3})
ρ_g	Massa específica do fluido reacional (kg m^{-3})
ρ_s	Massa específica do sólido (kg m^{-3})
σ	Desvio padrão
τ_d	Tempo derivativo (s)
τ_i	Tempo integral (s)

τ_{i1}	Tempo integral do controlador primário (s)
τ_{i2}	Tempo integral do controlador secundário (s)
τ_m	Constante de tempo mínimo (s)
ω_i	Grupos adimensionais
ζ	Comprimento adimensional

SUBSCRITOS

0	Condição de entrada ou estado inicial
CB	Concentração de B
J	Jaqueta
ref	Referência
sp	<i>Set point</i>
T	Temperatura

CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO E OBJETIVOS DO TRABALHO

Reatores de leito fixo constituem importantes sistemas da engenharia química, com muitas aplicações em diversos processos industriais, notadamente no campo das indústrias de refino do petróleo e petroquímica. De acordo com Elnashaie e Elshishini (1993), “não seria superestimar, dizer que mais de 90-95% dos reatores gás-sólido catalíticos operando industrialmente são do tipo leito fixo”, caracterizando um cenário que certamente não sofreu variação marcante, mesmo com o desenvolvimento de novas rotas químicas de produção.

Os reatores de leito fixo são o resultado prático mais direto do uso industrial dos catalisadores sólidos, cuja descoberta levou a indústria química a novos patamares desde o início do século XX. A aplicação atual dos reatores de leito fixo é bem ampla, sendo os mesmos encontrados na indústria química de base (como exemplos: reforma a vapor do gás natural, síntese de amônia, ácido sulfúrico, metanol etc.), na indústria petroquímica (como exemplos: produção de óxido de etileno, acetato de vinila, butadieno, anidrido maleico, anidrido ftálico, estireno etc.), e na indústria de refino do petróleo (como exemplos: processos de hidrodessulfurização, isomerização, polimerização, hidrocraqueamento etc.).

De forma simplificada, um reator de leito fixo consiste em um tubo cheio com o catalisador que permanece fixo dentro do tubo. Faz-se a mistura reacional fluir através dos espaços vazios entre as partículas catalíticas, de modo que ocorra a reação química. Industrialmente são empregadas, frequentemente, as versões multitubulares dos reatores de leito fixo, preferidas em razão de questões associadas à troca térmica, o que constitui um aspecto crucial de projeto e operação quando se lida com reações fortemente exotérmicas.

Uma série de fenômenos ocorre dentro de um reator de leito fixo. Segundo Elnashaie e Elshishini (1993), “apesar da aparência externa relativamente simples e inofensiva dos reatores catalíticos de leito fixo, os processos que ocorrem dentro dos contornos do sistema e suas interações são bastante complexos, podendo originar complicadíssimos problemas no projeto, operação segura e otimização”.

Além de apresentarem todos os fenômenos básicos que ocorrem nos sistemas típicos da engenharia química, os reatores de leito fixo apresentam complexidades associadas às resistências externa e interna à transferência de massa e calor, o que leva à necessidade de considerar as etapas simultâneas de difusão e de reação na sua modelagem matemática, mediante aplicação dos princípios de conservação às fases fluida e sólida separadamente.

Como os reatores de leito fixo constituem sistemas a parâmetros distribuídos, seus modelos matemáticos dinâmicos são dados por um conjunto de equações diferenciais parciais envolvendo o tempo e a posição como variáveis independentes. Essas características abrem um horizonte interessante do ponto de vista da modelagem dinâmica e do controle das principais variáveis operacionais que determinam o comportamento de um reator de leito fixo.

Apesar do grande avanço que tem ocorrido na modelagem matemática e nos métodos numéricos de resolução de equações diferenciais – isto associado ao notável progresso nos recursos de computação atualmente disponíveis –, há ainda, neste campo, um espaço significativo para pesquisas visando o estabelecimento de modelos matemáticos representativos que possam servir como ferramenta para o projeto, a otimização e o controle de reatores de leito fixo.

Froment e Bischoff (1990) apresentaram um extenso estudo fundamental e referencial sobre o projeto e a modelagem matemática de reatores de leito fixo, destacando alguns fatores que têm conduzido a um aperfeiçoamento crescente nos processos que envolvem este tipo de reator. Esses fatores podem ser divididos em dois grupos: a) inovações tecnológicas; e, b) maior disponibilidade de conhecimentos básicos.

Entre as inovações tecnológicas podem ser citadas: (i) introdução de melhores materiais de construção, que permitem a operação em temperaturas mais elevadas; (ii) melhoria no projeto de componentes internos do reator, como é o caso de sistemas que permitem uma melhor troca de calor; (iii) modificações nos padrões de fluxo para reduzir a queda de pressão, como pode ser exemplificado pelo uso de reatores de fluxo radial na reforma catalítica e na síntese de amônia; (iv) uso de pequenas partículas de catalisadores em regiões onde a transferência de calor é importante e partículas maiores em outras zonas para limitar a queda de pressão, como ocorre na reforma primária a vapor; e, (v) projeto de sistemas de controle mais eficientes.

Quanto aos progressos em pesquisas de caráter fundamental, podem ser destacados: (i) o desenvolvimento de novos catalisadores ou a modificação daqueles já existentes (exemplo: adição de rênio e outros metais raros a catalisadores de Pt/Al₂O₃ para a reforma catalítica, visando aumentar a estabilidade); (ii) avanços na disponibilidade de dados fundamentais; e, (iii) o uso de modelos matemáticos dos reatores como base para o projeto, associado ao notável aumento da capacidade de processamento computacional.

Com o crescente progresso no potencial de cálculo dos atuais computadores, ocorrido nas últimas décadas, tem sido constante e crescente o uso da modelagem matemática para a análise de processos em geral, notadamente no que concerne ao projeto, à definição de estratégias de operação segura, à otimização e ao controle.

A aplicação de modelos matemáticos de base fenomenológica ao controle de processos permanece condicionada à possibilidade de resolvê-los em tempo real, o que é difícil de conseguir no caso de reatores de leito fixo, em função da complexidade das equações que expressam os princípios de conservação aplicados ao sistema.

Nas duas últimas décadas foram desenvolvidas diferentes metodologias para a proposição de modelos representativos mais simples. Essas metodologias são designadas pelo termo geral “identificação de sistemas” e constituem uma alternativa à modelagem matemática usual baseada em equações fenomenológicas. Elas têm por objetivo a obtenção de modelos que proporcionam a relação de causa e efeito entre as variáveis de entrada e de saída do sistema.

Nessa linha, por exemplo, destaca-se a incorporação de redes neurais artificiais à análise de processos, o que ampliou de forma significativa as possibilidades de projetos factíveis de sistemas de controle baseado em modelo, obtendo-se soluções mais eficientes, uma vez que as redes neurais proporcionam altas taxas de computação e apresentam habilidade para se adaptar e continuar a aprender a partir de novas situações, características que proporcionam uma melhoria no seu desempenho preditivo.

Embora a aplicação tradicional de redes neurais concentre-se na chamada abordagem do tipo “caixa-preta” (modelo entrada-saída), é possível também combiná-las com equações fenomenológicas. Modelos deste tipo, que buscam um meio-termo entre os modelos

fenomenológicos e os modelos do tipo entrada-saída baseados em dados são designados como híbridos. De acordo com Assis (2001), “tais modelos procuram conciliar o que se conhece *a priori* de um determinado processo, na descrição fenomenológica, com informações puramente empíricas, ajustadas a partir de dados experimentais”. Esse ajuste pode ser feito por várias metodologias disponíveis, sendo as redes neurais muito interessantes, pois estas conseguem captar não linearidades com relativa facilidade.

Outro progresso muito importante ocorrido nas duas últimas décadas foi o surgimento e a aplicação de técnicas baseadas em lógica nebulosa (*fuzzy logic*), as quais têm sido empregadas com diversos propósitos, tais como a identificação de sistemas e aplicações voltadas para a área de controle.

Conforme destacado por Shaw e Simões (2004), a lógica nebulosa consiste numa forma inovadora de tratar informações imprecisas, proporcionando “um método de traduzir expressões verbais, vagas, imprecisas e qualitativas, comuns na comunicação humana em valores numéricos”, e abrindo as portas à implementação numérico-computacional desse tipo de informação.

O controle por lógica *fuzzy* (FLC) foi uma das primeiras aplicações de conjuntos e sistemas *fuzzy* e tem se constituído em uma das principais aplicações de sucesso para muitos sistemas não lineares complexos ou sistemas não analíticos, tornando-se, portanto, em muitos casos, uma alternativa às técnicas de controle convencional (FENG, 2006).

A indústria moderna trabalha em um ambiente muito complexo que abrange desde as características próprias dos processos, muitas vezes altamente não lineares e de difícil formulação em termos de equações fenomenológicas, às exigências de mercado e de leis ambientais inflexíveis. Isto faz com que o controle eficiente e eficaz do processo seja um item de grande relevância no projeto de uma unidade industrial.

Neste cenário, muitas vezes, o controle PID clássico não apresenta um bom desempenho quando aplicado a processos não lineares em uma ampla faixa de operação, uma vez que este tipo de controle é desenvolvido para sistemas lineares, prioritariamente monovariáveis. No entanto, este tipo de controle apresenta resultados satisfatórios quando aplicados a sistemas não lineares

que operam próximo à condição de *set point*, ou seja, numa pequena faixa de variação, onde o modelo linearizado do processo resulta em uma boa aproximação para o processo real.

Por isso, a busca de novos métodos para lidar com o controle de sistemas complexos tem sido uma tarefa permanente desde a segunda metade do século XX, o que resultou em um vasto conjunto de resultados teóricos e práticos, envolvendo as mais diversas estratégias e técnicas de controle atualmente disponíveis.

1.1 Objetivos do Trabalho

Este trabalho de doutorado tem como objetivo geral estudar a aplicação de diferentes estruturas de controle com estratégia *feedback* a um reator de leito fixo. Como estudo de caso, considera-se a reação de síntese de anidrido ftálico por oxidação de o-xileno, a qual constitui um importante processo da indústria petroquímica, sendo bastante ilustrativa da problemática associada ao controle de reatores de leito fixo envolvendo reações fortemente exotérmicas.

Como objetivos específicos podem ser destacados:

- 1) Desenvolver a modelagem matemática fenomenológica de um reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico, considerando as reações básicas do processo e as resistências difusionais à transferência de massa e calor.
- 2) Implementar um módulo computacional para a simulação do processo de síntese de anidrido ftálico nos estados estacionário e dinâmico.
- 3) Estudar a sensibilidade paramétrica das variáveis relevantes do processo de síntese de anidrido ftálico, verificando suas influências nos perfis de temperatura e de concentração ao longo do reator.
- 4) Aplicar estratégias de controle *feedback* utilizando modalidades convencionais e com lógica *fuzzy*, e analisar seus desempenhos na regulação da concentração de anidrido ftálico na saída do reator e nas temperaturas ao longo do leito catalítico.

CAPÍTULO 2: REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Introdução

Neste capítulo, apresenta-se a revisão da literatura, tendo em vista os principais estudos sobre modelagem matemática e controle de reatores de leito fixo.

Inicialmente, apresenta-se um panorama geral sobre a modelagem matemática de reatores de leito fixo, tópico este que apresenta uma base bastante ampla de trabalhos disponíveis na literatura. Em seguida, passa-se à apresentação dos principais trabalhos encontrados na literatura referentes ao controle de reatores de leito fixo, incluindo-se aqueles que tratam especificamente do processo de síntese de anidrido ftálico.

2.2 Modelagem Matemática de Reatores de Leito Fixo

Devido à grande importância dos reatores de leito fixo na tecnologia química industrial, estes sistemas têm sido estudados extensivamente tanto do ponto de vista teórico quanto experimental.

Karant e Hughes (1974) apresentam uma interessante introdução histórica sobre a evolução dos modelos matemáticos considerados para a representação de reatores de leito fixo. Com base no trabalho destes autores, apresenta-se no parágrafo seguinte, de modo sintético, o quadro evolutivo dos primeiros estudos referentes à modelagem fenomenológica de reatores de leito fixo.

Os modelos mais antigos para reatores de leito fixo surgiram a partir de considerações ligadas a questões envolvendo estabilidade e sensibilidade paramétrica. Barkelew (1959) fez um estudo numérico extensivo a partir de um modelo altamente simplificado para um reator adiabático em regime estacionário, negligenciando difusão axial e radial, bem como gradientes entre fases e intraparticulares. Liu e Amundson (1962) desenvolveram um modelo para um reator adiabático, sem a consideração do efeito de dispersão axial e sem levar em conta gradientes

intraparticulares. As equações transientes resultantes foram resolvidas pelo método das características e a análise mostrou que a estabilidade global do sistema depende da estabilidade das partículas individuais. Em 1963 estes mesmos autores consideraram o fenômeno de dispersão axial, concluindo que no caso de estados estacionários múltiplos os perfis foram mais sensíveis à dispersão axial e à velocidade axial do que nos casos de estado estacionário único. As equações transientes obtidas foram resolvidas por um método iterativo de diferenças finitas. Este mesmo modelo foi melhorado em seguida por Lee (1966) que utilizou um esquema de diferenças mais eficiente para a sua resolução, com a redução do tempo computacional requerido. Liu et al. (1962) também consideraram o caso de um reator não adiabático com resistência à transferência de calor agregada à parede do tubo. Carberry e Wendel (1963) desenvolveram um modelo estacionário para um reator adiabático com a inclusão de dispersão axial de massa e calor, resistências de transporte entre as fases e difusão intraparticular das espécies reagentes, mas negligenciaram gradientes de temperatura. A mistura axial mostrou-se sem influência para os casos em que o comprimento do leito superava em mais de 50 vezes o diâmetro médio das partículas. A resolução do modelo foi obtida por um esquema implícito envolvendo a solução simultânea das equações de diferenças finitas usadas para aproximar as equações diferenciais. Deans e Lapidus (1960) e McGuire e Lapidus (1965) utilizaram uma abordagem que descrevia um reator de leito fixo em termos de um conjunto de células de mistura bidimensionais, com a inclusão de gradientes externos e internos, e dispersão axial e radial, chegando-se a um modelo cujo tempo requerido para a solução era muito excessivo. Hansen (1971) empreendeu a modelagem de um reator de leito fixo não adiabático incluindo todos os fenômenos importantes, a menos da dispersão axial.

O trabalho de Karanth e Hughes (1974), do qual foram destacados os estudos pioneiros na modelagem de reatores de leito fixo, referidos no parágrafo anterior, apresenta um modelo unidimensional que incorpora todos os fenômenos, inclusive a dispersão axial, para a descrição do comportamento estacionário e dinâmico de um reator catalítico de leito fixo. Para a solução das equações, utilizou-se o método de colocação ortogonal. No caso transiente, aplicou-se o método das linhas, fazendo-se a discretização das variáveis espaciais e convertendo o problema de valor inicial e de contorno, expresso em termos de um conjunto de equações diferenciais

parciais, em um problema de valor inicial, dado por um conjunto de equações diferenciais ordinárias, de fácil integração pelos métodos clássicos do tipo Runge-Kutta.

O método de colocação ortogonal, difundido, sobretudo, graças ao trabalho de Villadsen e Stewart (1967), trouxe importante progresso na modelagem de reatores de leito fixo, principalmente pela redução de tempo computacional na solução numérica das equações dos modelos. Inicialmente desenvolvido com foco em problemas de fluxo viscoso, de transferência de calor e de difusão com reação química, o método de colocação ortogonal acabou se mostrando uma excelente técnica para a resolução de diversos tipos de modelos matemáticos.

A partir de 1990 a análise de reatores entrou em uma nova fase. De acordo com Froment e Bischoff (1990), “o desenvolvimento da engenharia das reações químicas como disciplina independente e o aumento das possibilidades computacionais conduziram a uma extensiva exploração do projeto e do desempenho do reator, em estado estacionário e em estado transiente”. Neste cenário de sistematização de conhecimentos básicos da engenharia química e aumento da capacidade instrumental de cálculo, passou-se a dispor de modelos com diferentes graus de sofisticação, indo-se daqueles muito simples, que já podiam ser manipulados antes de 1960, àqueles mais complicados, que demandavam um grande esforço computacional.

Com essa possibilidade, surgiu, também, a questão de escolher o grau de sofisticação requerido e justificável para uma dada aplicação dos modelos matemáticos. Como destacam Froment e Bischoff (1990), o grau de sofisticação depende em primeiro lugar do processo, isto é, do esquema reacional e da sua sensibilidade a perturbações nas condições operacionais. Além disso, tão importante quanto o grau de sofisticação do modelo matemático utilizado para a análise e o projeto de um reator é o grau de precisão com que a cinética e os parâmetros de transporte encontram-se disponíveis. Em outras palavras, não será de muita valia a formulação de um modelo altamente sofisticado incorporando um grande número de parâmetros físicos, se estes não puderem ser estabelecidos com uma precisão aceitável.

Permanece válida, portanto, a observação de Hofmann (1979), de que se deve compatibilizar a complexidade do modelo escolhido para representar o reator com os dados disponíveis e os propósitos do modelo. Modelos com diferentes graus de complexidade podem ser considerados para diferentes tarefas em análise de processos. Assim, modelos em estado

estacionário podem ser empregados com adequação para fins de projeto e otimização, enquanto que para aplicações em controle faz-se necessário dispor do modelo dinâmico do processo.

Os trabalhos referenciais de Froment e Bischoff (1990) e Elnashaie e Elshishini (1993), além da exposição sistemática sobre os fundamentos da modelagem matemática e da análise de desempenho de reatores de leito fixo industriais, apresentam uma ampla revisão dos vários trabalhos disponíveis na literatura até o início da década de 90. Desde então, vários estudos que contemplam a modelagem matemática de reatores de leito fixo têm sido publicados, com foco predominante na abordagem fenomenológica baseada na aplicação dos princípios de conservação da massa, da energia e da quantidade de movimento, juntamente com as equações constitutivas do sistema específico considerado.

Pedernera et al. (1996) propuseram um modelo bidimensional heterogêneo em que se consideram desprezíveis as resistências difusionais e a dispersão axial de calor e massa, assumindo-se partículas catalíticas isotérmicas e pressão constante no reator. A modelagem foi aplicada a uma configuração alternativa de um reator industrial multitubular para síntese de amônia com estrutura de fluxo refrigerante cocorrente e contracorrente, sendo a solução do modelo obtida pelo método das linhas com discretização da variável radial pelo método de colocação ortogonal. Os resultados mostraram que a nova configuração conduz a um aumento na taxa de produção de amônia, a uma redução nos custos de reciclo e a um aumento no tempo de vida do catalisador.

Cheng et al. (1996) desenvolveram um modelo bidimensional pseudo-homogêneo sem dispersão axial para prever o comportamento dinâmico de um reator de leito fixo para o processo de síntese de anidrido ftálico por oxidação parcial de o-xileno. O modelo proposto foi transformado em um sistema algébrico-diferencial pelo método de colocação ortogonal em elementos finitos e aplicado à estimação de atividade catalítica, tendo em vista o propósito de controle e otimização *on line*. O comportamento dinâmico do sistema foi bem reproduzido e o perfil de atividade catalítica inferido com precisão, permitindo compreender a mudança na magnitude do *hot spot* e o movimento do perfil de temperatura ao longo do tempo de campanha do reator.

Szukiewicz et al. (1998) apresentaram um estudo comparativo de dois modelos – heterogêneo e pseudo-homogêneo – aplicados à descrição de um reator de leito fixo para o processo de hidrogenação de acetileno. Os dois modelos apresentaram resultados semelhantes em relação à conversão de acetileno e à seletividade, estando o principal diferencial relacionado ao tempo de computação longo e à abrangência mais geral do modelo heterogêneo quando aplicado a uma ampla faixa de mudanças de condições de operação do processo e à abrangência mais específica e tempo de computação menor do modelo pseudo-homogêneo. Essa constatação levou os autores a concluir que os dois modelos são suplementares, sugerindo-se a utilização combinada dos dois modelos, primeiramente o heterogêneo, para determinar aproximadamente as condições de operação do reator, e em seguida o pseudo-homogêneo, para otimizar essas condições.

Groppi e Tronconi (2000) analisaram o comportamento de catalisadores metálicos estruturados para reações gás-sólido altamente exotérmicas considerando um modelo estacionário heterogêneo bidimensional. As equações dos modelos foram resolvidas mediante discretização das coordenadas axial e radial por colocação ortogonal em elementos finitos, e a partir de simulações os autores delineararam estruturas eficientes de catalisadores que podem ser produzidas e aplicadas em reatores de leito fixo multitubulares para processos industriais de oxidação seletiva.

Tye et al. (2002) propuseram um modelo unidimensional para a reação de acoplamento oxidativo do metano em um reator de leito fixo. O modelo foi comparado para diversos regimes de operação (isotérmico, adiabático e não isotérmico), mostrando-se adequado para prever o desempenho do processo em diferentes condições operacionais, tais como razão metano/oxigênio, temperatura, velocidade espacial e efeito diluente de nitrogênio e vapor d'água na alimentação.

Morais et al. (2003) analisaram as vantagens de configurações operacionais alternativas para a troca de calor em reatores catalíticos de leito fixo, buscando-se chegar a uma situação ótima em termos da eficiência de refrigeração e custos de energia. Quatro possibilidades foram consideradas: cocorrente, contracorrente, cocorrente/contracorrente e contracorrente/cocorrente. O estudo foi realizado considerando-se um modelo heterogêneo rigoroso para um reator de leito

fixo aplicado à oxidação de etanol a acetaldeído, uma reação fortemente exotérmica representativa de uma importante classe de processos industriais. Tendo em vista que o *hot spot* tende a se formar no início do reator, torna-se mais adequada a configuração cocorrente nesta região, enquanto que para a zona de saída do reator o melhor resfriamento é obtido com uma configuração contracorrente.

Wang et al. (2003) apresentaram um modelo estacionário unidimensional heterogêneo para simular um reator de leito fixo aplicado à produção de hidrocarbonetos por síntese de Fischer-Tropsch. A solução do modelo foi obtida pelo método de Gear, utilizado na integração das equações de conservação referentes à fase fluida, conjuntamente com o método de colocação ortogonal em elementos finitos, para resolver as equações da partícula. Os resultados das simulações foram validados a partir de dados de teste de uma planta piloto e de demonstração industrial, sendo o modelo empregado para verificar o efeito dos principais parâmetros de processo no comportamento do sistema.

Rezaie et al. (2005) compararam modelos dinâmicos usuais (homogêneo e heterogêneo) para um reator de leito fixo industrial de síntese de metanol, considerando-se desativação catalítica a longo tempo. A validação dos dois modelos foi feita a partir de dados de uma planta de metanol medidos diariamente por um período de quatro anos. Os dois modelos apresentaram predições praticamente idênticas para as condições de operação industriais, o que se explica devido à alta velocidade da corrente de reagentes, e a consequente redução das resistências difusionais.

Shahrokhi e Baghmisheh (2005) analisaram o comportamento dinâmico de um reator de leito fixo para o processo de síntese de metanol a baixa pressão com base em um modelo unidimensional heterogêneo sem dispersão de massa e energia nas direções axial e radial e sem levar em conta a desativação do catalisador. As equações diferenciais parciais que constituem o modelo matemático foram transformadas em um sistema de equações diferenciais ordinárias no tempo mediante discretização por diferenças finitas, e os resultados das simulações em estado estacionário apresentaram uma boa concordância com dados de um reator industrial.

Zavarukhin e Kuvshinov (2006) desenvolveram um modelo matemático para o processo de síntese de nanofibras de carbono a partir do metano em um reator de leito fixo isotérmico com

um regime de escoamento *plug flow*. O modelo proposto possibilitou não somente calcular e prever os parâmetros do processo, mas também escolher o projeto e as condições de operação ótimas do reator. Os resultados obtidos a partir de simulações mostraram uma boa concordância qualitativa com os dados experimentais observados.

Barrio et al. (2007) propuseram um modelo unidimensional quasi-homogêneo, em que as resistências externas e internas à transferência de massa e calor são negligenciadas, para representar o processo de oxidação parcial catalítica de metano em presença de vapor realizado a baixas temperaturas em um leito fixo. Utilizando-se do modelo desenvolvido, foi possível estudar a influência das variáveis de processo nos perfis de temperatura e na composição dos produtos e delinear estratégias para minimizar *hot spots* que ocorrem ao longo do leito catalítico.

Halabi et al. (2008) apresentaram um modelo heterogêneo unidimensional com dispersão radial de massa e calor desprezíveis, para descrever o comportamento do processo de reforma com autocontrole térmico em condições de estado estacionário e dinâmico. O modelo foi utilizado para definir condições de operação ótimas em termos da temperatura do reformador e da composição do produto, em função das razões molares vapor/carbono e oxigênio/carbono na alimentação, da temperatura desta e do tempo de residência da mistura reacional ao longo do leito catalítico.

Authayanum et al. (2008) apresentaram um modelo pseudo-homogêneo para um reator de leito fixo industrial aplicado à hidrogenação catalítica de gasolina de pirólise. Cineticamente, considerou-se um modelo agregado em termos de três pseudo-componentes: diolefinas, olefinas e parafinas. Os resultados das simulações para os perfis de temperatura e a distribuição dos produtos foram validados com dados disponíveis da planta.

Castillo-Araiza e López-Isunza (2010) desenvolveram um modelo bidimensional pseudo-heterogêneo para analisar o papel da hidrodinâmica e da atividade catalítica na transferência de calor em um reator de leito fixo industrial com baixa relação entre o diâmetro do tubo e o diâmetro da partícula. Como estudo de caso considerou-se a oxidação parcial de o-xileno. Os dados de temperatura e concentração em diferentes condições de estado estacionário foram empregados para validar a modelagem, verificando-se uma concordância razoável das observações empíricas com os resultados das simulações.

Manenti et al. (2011) compararam diferentes modelos (heterogêneo e pseudo-homogêneo) em estado estacionário para a síntese de metanol em reator de leito fixo, assumindo-se difusão axial e radial desprezível. As comparações mostraram que o modelo heterogêneo conduz a resultados similares àqueles do modelo pseudo-homogêneo, sendo os desvios significantes apenas quando o sistema opera em condições específicas fora da região convencional. No dizer dos autores os resultados mostram que o modelo pseudo-homogêneo apresenta um bom compromisso entre precisão e redução do esforço computacional, caracterizando esse modelo como uma excelente alternativa para a descrição dinâmica do sistema e aplicações em controle.

Manenti et al. (2013) desenvolveram um modelo dinâmico unidimensional pseudo-homogêneo para um reator de síntese do metanol, com o objetivo de analisar questões de estabilidade da solução numérica, a qual foi obtida pelo método das linhas com discretização da coordenada espacial por diferentes esquemas de diferenças finitas. Os autores buscaram encontrar formulações e métodos mais apropriados, passando-se à identificação do comportamento do sistema em malha aberta mediante um estudo de sensibilidade paramétrica. Os resultados mostraram que um modelo razoavelmente detalhado, e cuja solução demanda um baixo esforço computacional, permite inferir com precisão a posição e a magnitude do *hot spot*.

Petera et al. (2013) propuseram um modelo heterogêneo dito completo, no qual são contempladas quatro coordenadas: as direções radial e axial do reator, a direção radial da partícula catalítica e o tempo. O modelo foi aplicado à simulação de um reator de leito fixo para síntese de metanol funcionando em condições industriais, sendo resolvido por um algoritmo numérico que combina duas malhas de discretização por elementos finitos (micromalha associada à partícula catalítica e macromalha associada ao reator). Como resultados, são obtidos os perfis de concentração e temperatura nas três coordenadas espaciais consideradas, o que permite verificar fenômenos que ocorrem dentro do catalisador e no reator.

A revisão da literatura mostrou que há um número muito grande de trabalhos sobre a modelagem de reatores de leito fixo. Os estudos destacados nos parágrafos anteriores ilustram a ampla aplicação da modelagem matemática baseada nos princípios fenomenológicos ao estudo do comportamento de reatores de leito fixo. Em geral, os estudos combinam a modelagem com dados empíricos que permitem a estimação de parâmetros e a validação dos modelos matemáticos

propostos. Os modelos desenvolvidos e validados têm servido para fundamentar decisões referentes ao projeto, à operação, à otimização e ao controle de reatores de leito fixo aplicados aos mais diversos processos químicos industriais.

2.3 Controle de Reatores de Leito Fixo

Os reatores de leito fixo, encontrados em muitas indústrias de processos químicos, são sistemas complexos cuja operação apresenta distintos desafios, tais como forte dependência dos perfis de temperatura e composição em relação às condições de entrada. Esses reatores não podem ser operados em temperaturas excessivas, visto que neles, muitas vezes, ocorrem reações exotérmicas que associadas a perturbações de entrada podem gerar picos elevados de temperatura, também conhecidos como pontos quentes (*hot spot*), os quais trazem consequências indesejáveis, tais como descontrole térmico, reações secundárias indesejáveis e desativação de catalisadores (KARAFYLLIS e DAOUTIDIS, 2002).

De acordo com Chou e Wu (2007), para reatores de leito fixo onde ocorrem reações fortemente exotérmicas faz-se necessário controlar simultaneamente picos de temperatura e concentração de saída, de modo a prevenir elevações excessivas de temperatura no reator – que podem conduzir a situações de fuga de temperatura (*runaway*) – e garantir as especificações do produto. No entanto, este tipo de controle é muito difícil e tem atraído a atenção de muitos pesquisadores na busca de soluções cientificamente fundadas e com viabilidade prática. Diferentemente do que ocorre em reatores do tipo tanque agitado, no caso de reatores de leito fixo a manutenção da situação térmica desejada demanda ajustamento do perfil de temperatura ao longo do reator, impondo-se o monitoramento desta variável em diversas posições do reator.

Na prática, devido a restrições físicas e considerações econômicas, há a necessidade de se limitar o número de sensores, tornando-se, portanto, uma questão importante no projeto do controlador a escolha do número e localização ótima dos pontos de medida para obter-se um bom desempenho do sistema de controle. A posição e a magnitude da temperatura do ponto quente não podem ser estabelecidas diretamente via funções não lineares explícitas, sendo

frequentemente aplicada uma estratégia de controle *feedback* de estado ou otimização de estado estacionário (WU e CHEN, 2007).

As maiores dificuldades para a efetivação do controle de reatores de leito fixo, conforme destacado por Chou e Wu (2007), são: (i) a dificuldade de medidas de concentração *on line*; (ii) a natureza distribuída dos parâmetros do problema; (iii) a grande incerteza decorrente da complexidade fenomenológica do sistema, envolvendo reação química simultânea com os processos físicos de transporte; e, (iv) a forte não linearidade do comportamento dinâmico do sistema.

Em muitos processos industriais não é possível medir com rapidez suficiente a variável a ser controlada. Isso ocorre, por exemplo, em relação à concentração de uma determinada espécie química na saída de um reator de leito fixo. A medida em tempo real dessa variável é relativamente dispendiosa, necessitando-se de calibração periódica e manutenção dos analisadores. Além disso, as taxas de amostragem são relativamente lentas devido ao tempo para a purga da linha conectada ao reator e ao tempo para a análise cromatográfica (BUDMAN et al., 1992).

Uma alternativa que se coloca nesses casos é a medição com relativa facilidade de outras variáveis (ditas variáveis secundárias), tais como, temperatura, pressão e taxa de fluxo, e através destas a inferência de valores para a variável-objetivo (dita variável primária). Tem-se, assim, uma estratégia de controle inferencial. O projeto de um sistema de controle inferencial consiste de duas partes: o projeto do estimador e a seleção do controlador. O objetivo do estimador é prever com precisão a variável controlada e o esquema inferencial deve ser robusto, ou seja, ter operabilidade frente a incertezas do modelo (BUDMAN et al., 1992).

Diversas estratégias têm sido propostas para o controle de reatores de leito fixo, em que o objetivo quase sempre é o controle da concentração ou conversão de saída do reator e a manutenção de perfis de temperatura ao longo do leito compatíveis com as restrições do sistema reacional (para evitar reações secundárias, decomposição de materiais e desativação de catalisadores) e de segurança do processo. Nos parágrafos que seguem, apresenta-se um panorama dos principais trabalhos encontrados na literatura referentes ao controle de reatores de leito fixo.

Jutan e colaboradores (1977, apud CHIN et al. (2002)) propuseram um esquema de controle multivariável baseado em modelo, com o intuito de realizar o controle de um reator de leito fixo em escala piloto aplicado a um processo de hidrogenólise de butano. Estes autores derivaram um modelo em espaço de estado com base em um modelo fenomenológico rigoroso para o processo. Com isso, projetaram um estimador de estado e um controlador baseado no modelo para fazer o controle de temperaturas no leito e da composição do produto na saída do reator. A técnica de controle aplicada foi o controle linear quadrático gaussiano (LQG) padrão.

Kozub et al. (1987), utilizando também o mesmo reator de leito fixo para a hidrogenólise de butano, apresentaram uma aplicação de controle avançado multivariável baseado em modelo. O esquema proposto considerou o controle da produção de propano e da conversão de butano, utilizando-se controladores multivariáveis para a manipulação do *set point* da temperatura do ponto quente e da vazão de hidrogênio. Os projetos dos controladores se basearam em funções de transferência multivariável, as quais foram desenvolvidas utilizando-se séries temporais e métodos de identificação de processos. No estudo foram considerados dois tipos de controladores: um controlador de modelo interno (IMC) e um controlador quadrático linear (LQ). Os resultados evidenciaram que os dois controladores, quando bem ajustados, levam a um bom desempenho e robustez para uma ampla faixa de operação das variáveis.

Chen e Sun (1991) propuseram duas estruturas de controle inferencial adaptativo para o controle de um reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico: o controle inferencial linear por modelo interno (IMC) e o controle inferencial não linear por realimentação (*feedback*) de estado (SFC). A configuração de controle proposta foi do tipo SISO, utilizando-se a temperatura de entrada dos reagentes como variável manipulada para o controle da concentração de saída do reator. Os resultados permitiram concluir que o controle baseado em estimador não linear apresenta melhor desempenho frente ao controlador baseado em estimador linear.

Budman et al. (1992) investigaram a aplicação de esquemas de controle inferencial robusto para o controle de um reator de leito fixo experimental para a reação de metanação de dióxido de carbono. Várias técnicas de controle inferencial foram comparadas, constatando-se que o modelo inferencial linear estático baseado em técnicas de mínimos quadrados parciais

apresenta desempenho satisfatório quando a variável de processo se encontra em uma região próxima à região de operação nominal.

Doyle III et al. (1996) apresentaram um projeto de controlador não linear para um reator de leito fixo usando um esquema de controle não linear por linearização *feedback*, cuja ideia básica consiste na transformação de um sistema dinâmico complicado em um sistema dinâmico linear mais simples. A análise concentrou-se na identificação da dinâmica do ponto quente descrita por um modelo de propagação de onda (equação diferencial parcial hiperbólica de primeira ordem). Analisou-se a situação em que a temperatura da jaqueta, suposta uniforme ao longo de todo leito, foi tomada como variável manipulada para o controle da temperatura do ponto quente. As simulações realizadas mostraram as características de robustez do controlador não linear projetado, destacando-se a melhor adequação da aproximação proposta frente ao controle linear tradicional.

Hua et al. (1998) apresentaram uma abordagem para estimar estados desconhecidos e distúrbios de entrada usando observador de estado não linear para um reator de leito fixo autotérmico sob operação periódica. O observador de estado foi tratado a partir de um modelo fenomenológico para o reator, e os resultados obtidos mostraram que os perfis de concentração e temperatura foram bem estimados a partir de um pequeno número de medidas da temperatura, comprovando a relevância da abordagem proposta para o desenvolvimento de estratégias eficientes de controle para reatores de leito fixo.

Zhou et al. (1999) apresentaram uma estratégia de controle com otimização *on line* de um reator de leito fixo com parede resfriada utilizando redes neurais para representar a dinâmica do processo. A principal característica da estratégia proposta consiste no uso de um único algoritmo, que essencialmente é um algoritmo de controle preditivo não linear, para otimizar a produtividade e manter a temperatura do leito baixa. Os resultados mostraram o excelente desempenho do algoritmo proposto para atingir rapidamente a condição operacional ótima com pequena sobreelevação da temperatura do reator.

Ender e Maciel Filho (2000) apresentaram uma configuração de controle multivariável usando redes neurais, considerando-se informações passadas e presentes do processo para projetar o melhor controlador e gerar novas ações de controle. O algoritmo de controle proposto

foi testado em um reator catalítico de leito fixo. Os autores destacam que, em controle de processos, as redes neurais podem ser incorporadas na estratégia de controle segundo os métodos direto ou indireto. No método direto, a rede neural é treinada para representar a dinâmica inversa do sistema. Neste caso, dado o estado corrente do sistema dinâmico e o estado alvo para o próximo instante de amostragem, a rede é treinada para produzir a ação de controle que dirige o sistema para esta meta. No método indireto a rede neural é treinada com dados de entrada e saída a partir de sistemas dinâmicos para representar a dinâmica futura; dado o estado corrente e a ação de controle corrente, a rede aprende a produzir o próximo estado do sistema.

Hua e Jutan (2000) propuseram uma estrutura de controle cascata inferencial não linear para um reator de leito fixo de síntese de anidrido ftálico, sendo o sistema subdividido em três subsistemas. No estudo, os autores consideraram o modelo determinístico que descreve o reator, obtendo a partir deste um modelo agregado por aplicação do método de colocação ortogonal. O esquema proposto contemplou o controle da conversão e a estabilização da temperatura do ponto quente para uma ampla faixa de condições de operação. A estrutura de controle cascata inferencial não linear consistiu de estimadores, um controle com modelo genérico (GMC) e um controlador PID para tratar o controle da conversão de saída pela manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante. Os resultados permitiram concluir que o sistema de controle proposto conduz a um bom desempenho em termos da trajetória do *set point* e também em relação à rejeição de distúrbios, mostrando-se robusto frente a erros de medida e inconsistências do modelo.

Chin et al. (2002) apresentaram uma estrutura de controle preditivo baseado em modelo (MPC) que combina o controle da temperatura do ponto quente e o controle inferencial não linear da composição de um produto. Todos os modelos necessários ao projeto do controlador são obtidos com base em dados, sem a necessidade de esforços para fazer a modelagem fenomenológica. Tomando-se os dados de temperatura ao longo do leito, faz-se a aproximação do perfil de temperatura por uma interpolação polinomial lagrangeana, e determina-se o valor da temperatura no ponto quente igualando-se a derivada de primeira ordem do polinômio ajustado a zero. A técnica de controle proposta foi aplicada a um reator de leito fixo para a síntese de anidrido maleico a partir da oxidação parcial de n-butano, e os resultados mostraram que o

controle MPC inferencial não linear funciona adequadamente para uma larga faixa de condições operacionais.

Wu e Huang (2003) propuseram uma estratégia de controle inferencial não linear com aproximações geométricas para o controle de um reator de leito fixo para síntese de anidrido ftálico a partir da oxidação de o-xileno. A implementação do algoritmo de controle considera um perfil de temperatura de referência (*set point*) e distúrbios mensuráveis, tendo como variável manipulada a vazão e a temperatura de entrada do fluido refrigerante. Os resultados obtidos mostraram que o esquema de controle proposto se apresenta robusto frente a perturbações desconhecidas que podem ocorrer no processo.

Shahrokhi e Baghmisheh (2005) investigaram o comportamento dinâmico e o controle de um reator de leito fixo para a síntese de metanol sob baixas condições de pressão. Para a simulação do sistema, considerou-se um modelo unidimensional heterogêneo, a partir do qual se fez uma análise dos efeitos dos principais parâmetros sobre a produtividade do metanol e sobre o perfil de temperatura ao longo do leito. Com base em simulações dinâmicas, obteve-se um modelo mais simples para representar a dinâmica do processo. Este modelo foi usado para estudar o desempenho de um controlador PID com o emprego de técnicas de controle por modelo interno (IMC) para a sintonia de parâmetros. Fez-se a comparação do desempenho do controlador PID fixo com um controlador PID adaptativo, evidenciando-se, a partir dos resultados que o desempenho deste mostrou-se muito superior àquele do PID fixo.

Chou e Wu (2007) utilizaram as propriedades de passividade do processo e propuseram uma estrutura de controle baseada em modelo para o controle da concentração de saída e estabilização da temperatura de um reator de leito fixo para síntese de anidrido ftálico por oxidação de o-xileno. No sistema de controle foi introduzido um modelo preditivo para a concentração e um compensador de atraso de tempo para corrigir a concentração de saída medida em tempo real por um cromatógrafo a gás. A variável manipulada empregada foi a vazão de alimentação dos reagentes. Os resultados obtidos a partir de simulações permitiram concluir que o esquema de controle proposto consegue mapear trajetórias dinâmicas e contornar distúrbios no processo, atingindo-se efetivamente o controle de trajetória da conversão na saída e a estabilização da temperatura no reator frente a amplas perturbações.

Wu e Chen (2007) analisaram uma estrutura de controle preditivo baseado em medida com a incorporação de um algoritmo de otimização analítica para o controle de um reator tubular exotérmico para a síntese de anidrido ftálico por oxidação de o-xileno. O projeto consiste de dois estágios: as referências de entrada-saída, que são determinadas pela abordagem de otimização do estado estacionário, e o projeto de regulação de saída de sistemas a parâmetros distribuídos não lineares, que é tratado usando controle preditivo não distribuído. Sob a suposição de estado estacionário e características de escoamento *plug flow*, fez-se a aplicação do controle extremo do tipo liga-desliga. As simulações realizadas mostraram que uma trajetória do *output* sem *offset* é atingida e que os picos indesejáveis de temperatura são eliminados, mesmo quando se consideram simultaneamente restrições físicas e distúrbios desconhecidos.

Urrea et al. (2008) estudaram a aplicação de esquemas de controle cascata simples, que incorporam uma malha secundária para a regulação da temperatura numa dada posição interior do reator, visando melhorar o desempenho de controladores industriais do tipo PI/PID no controle da concentração de espécies químicas na saída de reatores tubulares. Foram assumidos modelos dinâmicos de primeira ordem do tipo entrada-saída obtidos a partir de respostas a perturbações do tipo degrau, e também foram avaliados os efeitos da localização do sensor de temperatura, bem como o uso de várias medidas de temperatura. Os autores concluíram a partir dos resultados que se obtém uma estrutura de controle *feedback* robusta para atingir a regulação da composição do produto e uma operação segura por conta da estabilização da temperatura.

Garcia et al. (2009) desenvolveram um controlador por interpolação a partir de três controladores PI sintonizados em três diferentes condições operacionais, com o objetivo de assegurar um bom desempenho do sistema de reação durante o ciclo de vida do catalisador. O controle interpolado foi aplicado a um sistema de síntese de amônia englobando um pré-aquecedor e três leitos tubulares com resfriamento intenso entre os leitos. Os resultados obtidos indicaram um melhor desempenho do controlador proposto, comparativamente a três controladores PI convencionais sintonizados em três condições operacionais distintas, sendo o mesmo adequado para situações em que se faz necessário efetuar elevações compensatórias na temperatura de *set point* devido à desativação do catalisador.

Hernandes-Martinez et al. (2010) exploraram estruturas de controle cascata para controlar a composição na saída de reatores tubulares, considerando-se medidas de temperatura distribuídas ao longo do reator, em três posições axiais (no centro, 20% após a entrada e 20% antes da saída), as quais são ponderadas para dar uma temperatura média que constitui o valor de entrada para o controlador da malha secundária de temperatura. Esse esquema é comparado com a versão padrão do controle cascata em que se considera a medida de temperatura em uma única posição, e também é feita uma análise com medidas em duas posições adicionais (10% após a entrada e 10% antes da saída). As estruturas de controle propostas foram aplicadas a um reator tubular com uma reação exotérmica homogênea de primeira ordem e a um reator de leito fixo para a oxidação parcial de benzeno a anidrido maleico. O projeto dos controladores baseou-se na aproximação dos sistemas por modelos lineares de baixa ordem do tipo entrada-saída, e os resultados das simulações evidenciaram que o esquema que considera uma temperatura média de medidas tomadas em vários pontos ao longo do reator tem melhor desempenho do que aquele com medida de temperatura em um único ponto.

Farsi et al. (2011) estudaram o processo de síntese do éter dimetílico por desidratação do metanol em um reator de leito fixo industrial. Embora o foco principal do estudo tenha sido a modelagem e simulação do processo, fez-se, também, uma análise das características de controle do sistema por simulação dinâmica do processo submetido a um controlador PID convencional, ajustado para controlar a temperatura de entrada do reator por manipulação das vazões em um pré-aquecedor. Verificou-se que as respostas do sistema a distúrbios e mudanças no *set point* conduziam o processo à condição operacional desejada.

Nas duas últimas décadas, conforme já destacado no Capítulo 1, tem sido fortemente desenvolvida na área de controle a aplicação de técnicas baseadas em lógica nebulosa (*fuzzy logic*), o que possibilita um novo modo de incorporação, nas estruturas de cálculo do controlador, de informações provenientes de um conhecimento empírico especialista acerca do processo. Na literatura encontram-se diversos trabalhos que aplicam lógica *fuzzy* ao controle de processos químicos industriais (GHASEM, 2006; SILVA et al., 2006; SABURA BANU e UMA, 2008; SHEIKHZADEH et al., 2008; GLAN DEVADHAS e PUSHPAKUMAR, 2010; GALLUZZO e COSENZA, 2011).

Wang et al. (2011) apresentaram um estudo sobre a aplicação de controle por lógica *fuzzy* a sistemas com características distribuídas representados por equações diferenciais parciais hiperbólicas. A formulação proposta pelos autores foi aplicada com sucesso ao controle de um PFR não isotérmico, no qual ocorre uma reação endotérmica e um fluido térmico é utilizado como meio de aquecimento.

Não foram encontrados na literatura trabalhos com aplicações específicas de lógica *fuzzy* ao controle de reatores de leito fixo.

2.4 Conclusões

Nesta parte do trabalho, apresentou-se a revisão da literatura referente à modelagem matemática e ao controle de reatores de leito fixo. Os estudos destacados na revisão bibliográfica proporcionam uma visão geral acerca das questões básicas, da problemática e das possibilidades associadas à modelagem e ao controle destes importantes sistemas químicos.

Apesar de todo o progresso ocorrido na modelagem matemática de reatores de leito fixo, nem sempre modelos dinâmicos complexos podem ser incorporados a algoritmos de controle, pois neste caso o modelo precisa ser resolvido em tempo real, ou seja, em um tempo reduzido o suficiente para que o sistema de controle possa atuar com um bom desempenho, sem atrasos de resposta. Para as aplicações em controle, portanto, são importantes as estratégias que proporcionam modelos representativos, de computação rápida, com boa capacidade de mapeamento das relações de causa-efeito entre as variáveis de processo. Esse tem sido o objeto da teoria designada como “Identificação de Sistemas”, a qual constitui uma área importante da análise de processos e cujo objeto é o estudo de técnicas alternativas à modelagem baseada nos princípios físico-químicos.

Em geral, o modo de controle PID continua sendo o método de controle *feedback* clássico de maior utilização na indústria, e o mesmo tem sido tomado como referência na maioria dos estudos de controle apresentados na literatura. Boubertakh et al. (2010) se reportam ao estudo de Reznik et al. (2000), dando conta de que o uso industrial do controlador PID supera o percentual

de 90%, sendo este uso ainda mais intenso na área petroquímica (CAMPOS e SAITO, 2004). Nessa mesma linha, Kumar et al. (2008) mencionam que diferentes fontes estabelecem que o percentual de uso se encontra na faixa de 90 a 99%. Destacam ainda que na prática estes controladores se encontram integrados a estruturas complexas, visando obter um melhor desempenho, e que dentre estas a estrutura cascata é comumente usada com o propósito de reduzir o desvio máximo e o erro integral da resposta ao distúrbio. García et al. (2009) afirmam que em torno de 90 a 95% dos controladores industriais são do tipo PID e que a popularidade desses controladores se deve à boa performance, à estrutura simples e à fácil sintonia.

Contudo, os controladores PID não apresentam um bom desempenho para todos os processos, principalmente para aqueles complexos que apresentam alta não linearidade, longos atrasos de tempo e dinâmica não bem definida (REZNIK et al., 2000; HAJ-ALI e YING, 2004; FENG, 2006).

O controle *fuzzy* (ou nebuloso), baseado na teoria dos conjuntos *fuzzy* e na lógica *fuzzy*, tem sido bastante estudado e apresentado como uma alternativa ao controle PID convencional. Conforme destacam Åström e Hägglund (2001), a maioria dos controladores *fuzzy* usados na indústria tem a mesma estrutura do PI ou PID, e a parametrização usando regras e funções de pertinência *fuzzy* torna fácil a adição de não linearidades, informação lógica, e sinais de entrada adicionais à lei de controle.

No tocante ao controle de reatores de leito fixo, tem-se uma área de estudo muito vasta e fortemente explorada, seja no âmbito da pesquisa puramente científica, seja com finalidades práticas industriais. Permanece válida, portanto, a observação de Toledo (1999) em sua tese de doutoramento, ao afirmar que o controle de reatores de leito fixo constitui uma temática que está longe de ser esgotada, uma vez que o universo dos reatores de leito fixo envolve uma grande variedade de processos químicos com cada um deles apresentando particularidades distintas, o que torna impossível uma solução geral.

Embora existam muitos estudos na literatura com foco no controle de reatores de leito fixo, há uma lacuna a ser explorada no que diz respeito à aplicação de técnicas de lógica *fuzzy* ao controle destes sistemas, cuja fenomenologia complexa enseja por novas soluções tecnológicas que otimizem cada vez mais seu desempenho operacional.

CAPÍTULO 3: MODELO MATEMÁTICO DO REATOR DE SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO

3.1 Introdução

O anidrido ftálico constitui importante intermediário da indústria química e farmacêutica, sendo empregado, por exemplo, na fabricação de corantes, pigmentos, vernizes e resinas. Basicamente são dois os processos de obtenção de anidrido ftálico encontrados na indústria: o processo de oxidação do naftaleno e o processo de oxidação do o-xileno, sendo este último o mais utilizado atualmente tendo em vista que o o-xileno se encontra disponível em grande quantidade, obtido em refinarias de petróleo, e apresenta menor preço e facilidade de transporte em relação ao naftaleno (DIAS et al.,1995)

Na prática, podem ser empregadas várias configurações de reatores de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico (PAPAGEORGIOU e FROMENT,1996), as quais têm como objetivo básico proporcionar uma troca térmica eficiente entre o leito catalítico e o fluido térmico, utilizando-se comumente para este fim um sal fundido de alta capacitância térmica. A corrente de alimentação de o-xileno e ar contém um grande excesso de ar, para eliminar a possibilidade de ignições e reduzir a elevação da temperatura, em decorrência do caráter fortemente exotérmico das reações envolvidas. As temperaturas de operação são da ordem de 400°C e utilizam-se catalisadores não porosos suportados à base de V_2O_5 - TiO_2 .

A Figura 3.1 ilustra a configuração usual de um reator multitubular com um fluido térmico escoando na carcaça. De acordo com Lopes (1994), a produção de anidrido ftálico a partir do o-xileno utilizando-se reatores de leito fixo multitubulares tornou-se o processo preferido. Chen e Sun (1991) mencionam que um sistema industrial típico para a síntese de anidrido ftálico é constituído por 2500 tubos de 2,50 cm de diâmetro, cheios de partículas catalíticas de V_2O_5 - TiO_2 e resfriados por sal fundido.

A forte liberação de calor do processo reacional conduz ao desenvolvimento de um perfil de temperatura característico ao longo do leito com um máximo pronunciado próximo à entrada

do reator, o qual é denominado de “ponto quente” (*hot spot*). Isso impõe uma troca térmica adequada para evitar problemas como o descontrole do processo e a desativação do catalisador.

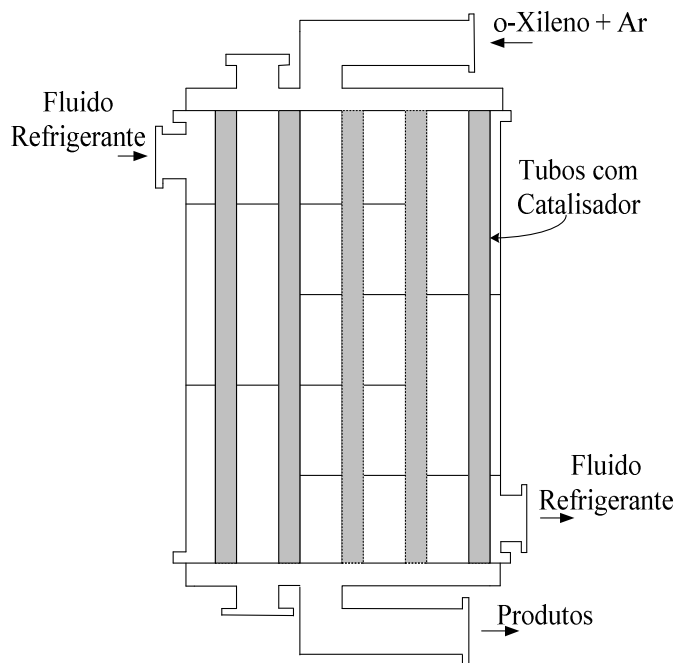


Figura 3.1 - Esquema representativo de um reator de leito fixo multitubular para a síntese de anidrido ftálico.

Fonte: Adaptada de Chen e Sun (1991).

O controle da temperatura do ponto quente constitui uma questão fundamental na operação de reatores de leito fixo envolvendo reações fortemente exotérmicas. A partir de um modelo matemático fenomenológico representativo pode-se fazer um estudo de sensibilidade paramétrica para verificar a influência das variáveis de processo no perfil de temperatura ao longo do leito, bem como na magnitude e localização do ponto quente e suas consequências no desempenho do reator.

O reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico tem sido considerado como um sistema de referência em estudos voltados para a análise de algumas estratégias de controle avançado aplicadas a sistemas químicos (CHEN e SUN, 1991; HUA e JUTAN, 2000; WU e

HUANG, 2003; CHOU e WU, 2007). Este sistema industrial típico, que apresenta características complexas decorrentes das múltiplas reações que ocorrem e da alta exotermicidade destas, é também considerado neste trabalho.

Nas seções que seguem, apresentam-se a formulação de um modelo matemático para o reator de síntese de anidrido ftálico por oxidação de o-xileno e o procedimento numérico utilizado na solução das equações resultantes da modelagem. O objetivo buscado foi dispor de um modelo fenomenológico que contempla os fenômenos básicos que ocorrem no sistema, podendo o mesmo ser aplicado com representatividade aos estudos de sensibilidade paramétrica e de controle desenvolvidos neste trabalho.

3.2 Modelagem Matemática

Um reator multitubular pode ser modelado considerando-se um único tubo (LOPES, 1994), o que corresponde a assumir que existem condições interna e externa idênticas em todos os tubos que constituem o sistema. Neste trabalho, tomou-se como sistema de estudo um reator de leito fixo tubular (Figura 3.2), seguindo a mesma abordagem considerada por Chen e Sun (1991), Hua e Jutan (2000) e Chou e Wu (2007).

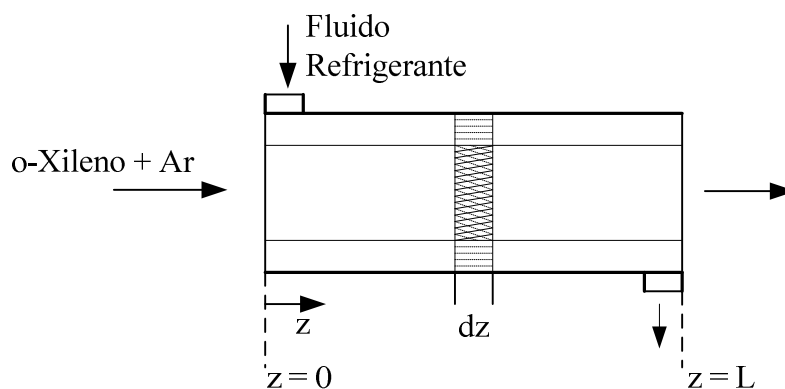


Figura 3.2 - Representação esquemática do reator de leito fixo tubular e do volume de controle diferencial para os balanços de conservação.

Considerou-se uma configuração de fluxo paralelo entre os fluidos reacional e térmico. Em geral, essa configuração de trocador de calor é a mais interessante quando se deseja ter uma troca térmica mais elevada na região de entrada, pois aí ocorre a maior variação entre as temperaturas dos fluidos quente e frio. A configuração contracorrente, por sua vez, proporciona a transferência de calor entre as parcelas mais quentes dos dois fluidos em uma extremidade, e entre as parcelas mais frias dos dois fluidos na outra (INCROPERA e De WITT, 2008). Tendo em vista que o fluido térmico utilizado para a refrigeração do reator de anidrido ftálico tem alta capacitância térmica, o mesmo não sofre mudança sensível de temperatura no seu percurso, de modo que neste caso específico as configurações em paralelo e em contracorrente mostram-se equivalentes.

Para a modelagem do reator as seguintes hipóteses simplificadoras foram consideradas: (i) gradientes radiais de temperatura e concentração desprezíveis; (ii) fluxo empistonado sem dispersão axial; (iii) fluxo com queda de pressão desprezível; e, (iv) presença de resistências externas à transferência de massa e de calor.

Com as hipóteses acima, obtém-se um modelo unidimensional heterogêneo sem dispersão axial em regime transiente, que expressa os princípios de conservação da massa e da energia para as fases fluida e sólida no sistema de reação.

Adicionalmente, considera-se que a mistura reacional segue um comportamento de gás ideal e que as propriedades físicas e o coeficiente global de troca térmica são constantes ao longo do reator.

3.2.1 Balanços de Massa e Energia

A seguir são apresentadas as equações de conservação para o reator de leito fixo, as quais correspondem ao balanço molar para o o-xileno e o anidrido ftálico nas fases gasosa (Equações (3.1) e (3.2)) e sólida (Equações (3.3) e (3.4)), ao balanço de energia para a mistura reacional nas fases gasosa (Equação (3.5)) e sólida (Equação (3.6)) e ao balanço de energia para o fluido térmico (Equação (3.7)), tomando-se um volume de controle diferencial.

$$\varepsilon \frac{\partial C_A}{\partial t} = -v_g \frac{\partial C_A}{\partial z} - (k_{gp} a_s)_A (C_A - C_{P,A}) \quad (3.1)$$

$$\varepsilon \frac{\partial C_B}{\partial t} = -v_g \frac{\partial C_B}{\partial z} - (k_{gp} a_s)_B (C_B - C_{P,B}) \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial C_{P,A}}{\partial t} = \frac{(k_{gp} a_s)_A}{1 - \varepsilon} (C_A - C_{P,A}) - (r_{P,1} + r_{P,3}) \mu C_{cat} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial C_{P,B}}{\partial t} = \frac{(k_{gp} a_s)_B}{1 - \varepsilon} (C_B - C_{P,B}) - (r_{P,2} - r_{P,1}) \mu C_{cat} \quad (3.4)$$

$$\varepsilon \rho_g C_{pg} \frac{\partial T}{\partial t} = -v_g \rho_g C_{pg} \frac{\partial T}{\partial z} - (h_{gp} a_s) (T - T_P) - \frac{4U}{D_{ii}} (T - T_c) \quad (3.5)$$

$$\rho_s C_{ps} \frac{\partial T_P}{\partial t} = \frac{(h_{gp} a_s)}{1 - \varepsilon} (T - T_P) - \mu C_{cat} [(\Delta H)_1 r_{P,1} + (\Delta H)_2 r_{P,2} + (\Delta H)_3 r_{P,3}] \quad (3.6)$$

$$\rho_c C_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial t} = v_c \rho_c C_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial z} + \frac{4D_{ii}U}{D_{ie}^2 - D_{ei}^2} (T - T_c) \quad (3.7)$$

Sendo:

- C_A concentração de o-xileno na fase gasosa;
- C_B concentração de anidrido ftálico na fase gasosa;
- C_{cat} concentração de catalisador ativo na fase sólida;
- $C_{P,A}$ concentração de o-xileno na superfície da partícula de catalisador;
- $C_{P,B}$ concentração de anidrido ftálico na superfície da partícula de catalisador;
- C_{pc} capacidade calorífica à pressão constante do fluido refrigerante;
- C_{pg} capacidade calorífica à pressão constante do fluido reacional;
- C_{ps} capacidade calorífica à pressão constante do sólido;

D_{ei}	diâmetro externo do tubo interno;
D_{ie}	diâmetro interno do tubo externo;
D_{ii}	diâmetro interno do tubo interno;
$h_{gp}a_s$	coeficiente volumétrico de transferência de calor gás-sólido;
$k_{gp}a_s$	coeficiente volumétrico de transferência de massa gás-sólido ($A = o$ -xileno, $B =$ anidrido ftálico);
$r_{p,i}$	taxa de reação da reação i ($i = 1, 2, 3$);
t	tempo;
T	temperatura do fluido reacional;
T_c	temperatura do fluido refrigerante;
T_p	temperatura na superfície da partícula de catalisador;
U	coeficiente global de transferência de calor;
v_c	velocidade do fluido refrigerante;
v_g	velocidade do fluido reacional;
z	coordenada espacial ao longo do reator;
$(\Delta H)_i$	calor de reação da reação i ($i = 1, 2, 3$);
ε	porosidade do leito catalítico;
μ	atividade catalítica;
ρ_c	massa específica do fluido refrigerante;
ρ_g	massa específica do fluido reacional;

ρ_s massa específica do sólido.

O sistema de equações diferenciais parciais, dado pelas Equações (3.1)-(3.7), representa os perfis das variáveis dependentes em função da posição axial (z) e do tempo (t), na forma das seguintes relações funcionais:

$$C_A = C_A(z, t) \quad (3.8)$$

$$C_B = C_B(z, t) \quad (3.9)$$

$$C_{P,A} = C_{P,A}(z, t) \quad (3.10)$$

$$C_{P,B} = C_{P,B}(z, t) \quad (3.11)$$

$$T = T(z, t) \quad (3.12)$$

$$T_p = T_p(z, t) \quad (3.13)$$

$$T_c = T_c(z, t) \quad (3.14)$$

Para a solução do sistema de equações são necessárias condições auxiliares à entrada do reator ($z = 0$) e iniciais ao longo do reator ($t = 0$).

À entrada do reator têm-se as seguintes condições:

$$C_A(0, t) = C_{A0} \quad (3.15)$$

$$C_B(0, t) = C_{B0} \quad (3.16)$$

$$C_{P,A}(0, t) = C_{P,A0} \quad (3.17)$$

$$C_{P,B}(0, t) = C_{P,B0} \quad (3.18)$$

$$T(0,t) = T_0 \quad (3.19)$$

$$T_p(0,t) = T_{p0} \quad (3.20)$$

$$T_c(0,t) = T_{c0} \quad (3.21)$$

As condições iniciais correspondem aos perfis estacionários referenciais para as variáveis dependentes, os quais são dados pelas seguintes relações funcionais:

$$C_A(z,0) = C_A^{ss}(z) \quad (3.22)$$

$$C_B(z,0) = C_B^{ss}(z) \quad (3.23)$$

$$C_{P,A}(z,0) = C_{P,A}^{ss}(z) \quad (3.24)$$

$$C_{P,B}(z,0) = C_{P,B}^{ss}(z) \quad (3.25)$$

$$T(z,0) = T^{ss}(z) \quad (3.26)$$

$$T_p(z,0) = T_p^{ss}(z) \quad (3.27)$$

$$T_c(z,0) = T_c^{ss}(z) \quad (3.28)$$

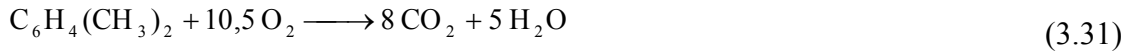
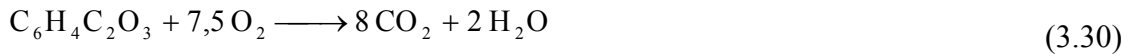
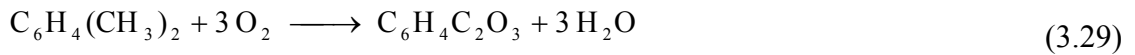
3.2.2 Equações Cinéticas

A reação para a produção de anidrido ftálico a partir da oxidação seletiva do o-xileno sobre o catalisador V_2O_5 - TiO_2 , que constitui a rota básica dos processos comerciais modernos, é bastante complexa, consistindo de várias etapas em série e em paralelo, com a produção de diversas espécies, das quais as mais importantes são: anidrido ftálico, o-tolualdeído, ftalida,

anidrido maleico, monóxido de carbono, dióxido de carbono e água (HERTEN e FROMENT, 1968).

Elnashaie e Elshishini (1993) e Rosa (2007) apresentam diversas alternativas de modelos de reação para a produção de anidrido ftálico por oxidação de o-xileno, propostas ao longo do tempo por diversos pesquisadores, com base em experimentos conduzidos em condições diversas de temperatura, concentração, catalisador etc.

Um esquema simplificado considera três reações básicas, a saber: a reação de interesse que é a oxidação parcial do o-xileno a anidrido ftálico, a reação consecutiva indesejável de oxidação do anidrido ftálico dando dióxido de carbono, e a reação de oxidação total do o-xileno para formar dióxido de carbono. Estas reações são dadas pelas seguintes equações químicas:



Froment (1967), analisando situações operacionais com resistências difusionais desprezíveis, propôs um modelo cinético para descrever esse conjunto de reações. As expressões por ele apresentadas representam taxas intrínsecas e as mesmas foram consideradas neste trabalho para calcular as taxas efetivas de reação na superfície da partícula de catalisador. As taxas intrínsecas são dadas pelas seguintes relações:

$$r_{P,1} = k_{01} \exp\left(-\frac{E_1}{RT_P}\right) C_{P,A} \quad (3.32)$$

$$r_{P,2} = k_{02} \exp\left(-\frac{E_2}{RT_P}\right) C_{P,B} \quad (3.33)$$

$$r_{P,3} = k_{03} \exp\left(-\frac{E_3}{RT_P}\right) C_{P,A} \quad (3.34)$$

Sendo:

E_i energia de ativação da reação i ($i = 1, 2, 3$);

k_{0i} fator de frequência da taxa de reação i ($i = 1, 2, 3$);

R constante dos gases.

Esse modelo cinético tem sido considerado por alguns autores em estudos referentes ao controle do reator de leito fixo para síntese do anidrido ftálico por oxidação de o-xileno (CHEN e SUN, 1991; HUA e JUTAN, 2000; WU e HUANG, 2003; CHOU e WU, 2007).

3.2.3 Adimensionalização do Modelo

As Equações (3.32)-(3.34) foram substituídas nas Equações (3.3), (3.4) e (3.6), e fez-se a adimensionalização do conjunto de equações que representam o modelo matemático do reator, Equações (3.1)-(3.7), e das condições auxiliares dadas pelas Equações (3.15)-(3.28). As seguintes variáveis adimensionais foram definidas:

$$y_1 = \frac{C_A}{C_{A0}} \quad (3.35)$$

$$y_2 = \frac{C_{P,A}}{C_{A0}} \quad (3.36)$$

$$y_3 = \frac{C_B}{C_{A0}} \quad (3.37)$$

$$y_4 = \frac{C_{P,B}}{C_{A0}} \quad (3.38)$$

$$y_5 = \frac{T}{T_0} \quad (3.39)$$

$$y_6 = \frac{T_p}{T_0} \quad (3.40)$$

$$y_7 = \frac{T_c}{T_0} \quad (3.41)$$

$$\theta = \frac{v_s t}{L} \quad (3.42)$$

$$\zeta = \frac{z}{L} \quad (3.43)$$

Sendo L o comprimento do reator.

A substituição destas variáveis conduz às seguintes equações adimensionais para o modelo dinâmico do reator:

$$\frac{\partial y_1}{\partial \theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial y_1}{\partial \zeta} - \frac{\alpha_1}{\varepsilon} (y_1 - y_2) \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial \theta} = \frac{\alpha_1}{(1-\varepsilon)} (y_1 - y_2) - \left[\beta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_6}\right) + \beta_3 \exp\left(-\frac{\gamma_3}{y_6}\right) \right] y_2 \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial y_3}{\partial \theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial y_3}{\partial \zeta} - \frac{\alpha_2}{\varepsilon} (y_3 - y_4) \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial y_4}{\partial \theta} = \frac{\alpha_2}{(1-\varepsilon)} (y_3 - y_4) - \beta_2 \exp\left(-\frac{\gamma_2}{y_6}\right) y_4 + \beta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_6}\right) y_2 \quad (3.47)$$

$$\frac{\partial y_5}{\partial \theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial y_5}{\partial \zeta} - \frac{\alpha_3}{\varepsilon} (y_5 - y_6) - \frac{\varphi_1}{\varepsilon} (y_5 - y_7) \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial y_6}{\partial \theta} = \frac{\alpha_4}{(1-\varepsilon)} (y_5 - y_6) + \beta_1 \delta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_6}\right) y_2 + \beta_2 \delta_2 \exp\left(-\frac{\gamma_2}{y_6}\right) y_4 + \beta_3 \delta_3 \exp\left(-\frac{\gamma_3}{y_6}\right) y_2 \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial y_7}{\partial \theta} = -\omega \frac{\partial y_7}{\partial \zeta} + \varphi_2 (y_5 - y_7) \quad (3.50)$$

As condições de contorno em termos das variáveis adimensionais são dadas por:

$$y_1(0, t) = 1 \quad (3.51)$$

$$y_2(0, t) = y_{20} \quad (3.52)$$

$$y_3(0, t) = y_{30} \quad (3.53)$$

$$y_4(0, t) = y_{40} \quad (3.54)$$

$$y_5(0, t) = 1 \quad (3.55)$$

$$y_6(0, t) = y_{60} \quad (3.56)$$

$$y_7(0, t) = y_{70} \quad (3.57)$$

As condições iniciais em termos das variáveis adimensionais assumem a forma:

$$y_1(\zeta, 0) = y_1^{ss}(\zeta) \quad (3.58)$$

$$y_2(\zeta, 0) = y_2^{ss}(\zeta) \quad (3.59)$$

$$y_3(\zeta, 0) = y_3^{ss}(\zeta) \quad (3.60)$$

$$y_4(\zeta, 0) = y_4^{ss}(\zeta) \quad (3.61)$$

$$y_5(\zeta, 0) = y_5^{ss}(\zeta) \quad (3.62)$$

$$y_6(\zeta, 0) = y_6^{ss}(\zeta) \quad (3.63)$$

$$y_7(\zeta, 0) = y_7^{ss}(\zeta) \quad (3.64)$$

Os parâmetros adimensionais que aparecem nas Equações (3.44)-(3.50) são dados pelas seguintes relações:

$$\alpha_1 = \frac{L(k_{gp} a_s)_A}{v_g} \quad (3.65)$$

$$\alpha_2 = \frac{L(k_{gp} a_s)_B}{v_g} \quad (3.66)$$

$$\alpha_3 = \frac{L(h_{gp} a_s)}{v_g \rho_g C_{pg}} \quad (3.67)$$

$$\alpha_4 = \frac{L(h_{gp} a_s)}{v_g \rho_s C_{ps}} \quad (3.68)$$

$$\beta_1 = \frac{\mu LC_{cat} k_{01}}{v_g} \quad (3.69)$$

$$\beta_2 = \frac{\mu LC_{cat} k_{02}}{v_g} \quad (3.70)$$

$$\beta_3 = \frac{\mu LC_{cat} k_{03}}{v_g} \quad (3.71)$$

$$\gamma_1 = \frac{E_1}{RT_0} \quad (3.72)$$

$$\gamma_2 = \frac{E_2}{RT_0} \quad (3.73)$$

$$\gamma_3 = \frac{E_3}{RT_0} \quad (3.74)$$

$$\delta_1 = \frac{(-\Delta H)_1 C_{A0}}{\rho_s C_{ps} T_0} \quad (3.75)$$

$$\delta_2 = \frac{(-\Delta H)_2 C_{A0}}{\rho_s C_{ps} T_0} \quad (3.76)$$

$$\delta_3 = \frac{(-\Delta H)_3 C_{A0}}{\rho_s C_{ps} T_0} \quad (3.77)$$

$$\varphi_1 = \frac{4UL}{v_g \rho_g C_{pg} D_{ii}} \quad (3.78)$$

$$\varphi_2 = \frac{4D_{ii} UL}{v_g \rho_c C_{pc} (D_{ie}^2 - D_{ei}^2)} \quad (3.79)$$

$$\omega = \frac{v_c}{v_g} \quad (3.80)$$

3.2.4 Modelo Estacionário

As equações para o modelo estacionário são facilmente obtidas anulando-se as derivadas temporais nas equações do modelo dinâmico. Assim, fazendo $\partial y_i / \partial \theta = 0$ nas Equações (3.44)–(3.50) tem-se como resultado o modelo estacionário, dado pelas equações abaixo:

$$\frac{dy_1}{d\zeta} = -\alpha_1 (y_1 - y_2) \quad (3.81)$$

$$\frac{\alpha_1}{(1-\varepsilon)} (y_1 - y_2) - \left[\beta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_6}\right) + \beta_3 \exp\left(-\frac{\gamma_3}{y_6}\right) \right] y_2 = 0 \quad (3.82)$$

$$\frac{dy_3}{d\zeta} = -\alpha_2 (y_3 - y_4) \quad (3.83)$$

$$\frac{\alpha_2}{(1-\varepsilon)} (y_3 - y_4) - \beta_2 \exp\left(-\frac{\gamma_2}{y_6}\right) y_4 + \beta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_6}\right) y_2 = 0 \quad (3.84)$$

$$\frac{dy_5}{d\zeta} = -\alpha_3(y_5 - y_6) - \varphi_1(y_5 - y_7) \quad (3.85)$$

$$\frac{\alpha_4}{(1-\varepsilon)}(y_5 - y_6) + \beta_1 \delta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_6}\right)y_2 + \beta_2 \delta_2 \exp\left(-\frac{\gamma_2}{y_6}\right)y_4 + \beta_3 \delta_3 \exp\left(-\frac{\gamma_3}{y_6}\right)y_2 = 0 \quad (3.86)$$

$$\frac{dy_7}{d\zeta} = \frac{\varphi_2}{\omega}(y_5 - y_7) \quad (3.87)$$

As Equações (3.81)-(3.87), juntamente com as condições auxiliares dadas pelas Equações (3.51)-(3.57) constituem um sistema algébrico-diferencial.

3.2.5 Solução do Modelo

A solução do conjunto de equações diferenciais parciais não lineares que representam o modelo matemático para o reator foi obtida pelo método das linhas. O método das linhas consiste na discretização parcial de uma equação diferencial a derivadas parciais, em que todas as coordenadas menos uma são discretizadas. A coordenada não discretizada deve aparecer na forma de uma derivada primeira, resultando do processo de discretização um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem (PINTO e LAGE, 2001). Para o problema em questão o processo de discretização da variável espacial origina um sistema de equações diferenciais ordinárias na variável tempo, cuja solução fornece a evolução dinâmica das variáveis nos pontos da malha de discretização.

A Figura 3.3 ilustra a ideia do método das linhas, indicando a discretização da coordenada espacial (ζ). Diversas técnicas podem ser consideradas para a discretização, a começar pelas mais simples fórmulas de diferenças finitas. Neste trabalho, o domínio da variável espacial ζ foi discretizado pelo método de colocação ortogonal (VILLADSEN e MICHELSEN, 1978; FINLAYSON, 1980). Para a aproximação foram escolhidos polinômios de Legendre, sendo os pontos de colocação dados pelas raízes do polinômio de maior grau. A determinação dos zeros do

polinômio de Legendre e da matriz de colocação foi feita utilizando-se as subrotinas dadas por Villadsen e Michelsen (1978).

O método de colocação ortogonal se mostrou uma excelente técnica para a resolução de problemas típicos da engenharia química, e requer um número de pontos de discretização bem menor do que os métodos clássicos de diferenças finitas. Lopes (1994) destaca que as características do método tornam sua aplicação bastante simples, apesar de ter uma teoria aparentemente complexa.

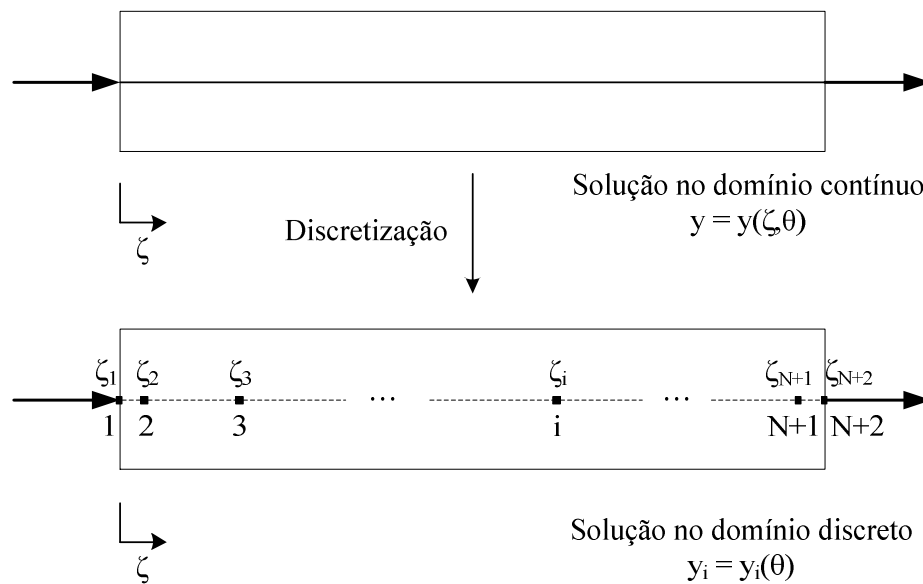


Figura 3.3 - Esquema ilustrativo do processo de discretização da coordenada espacial ζ pelo método das linhas.

Para sua aplicação às equações do modelo, deve-se expressar a derivada primeira em relação à coordenada espacial na forma:

$$\frac{dy_i}{d\zeta} = \sum_{j=1}^{N+2} A_{ij} y_j \quad (3.88)$$

Na equação acima N representa o número de pontos internos de colocação. Os pontos $j = 1$ e $j = N+2$ correspondem, respectivamente, aos valores das variáveis dependentes à entrada ($\zeta = 0$) e à saída ($\zeta = 1$) do reator. Como se trata aqui de um problema de valor inicial, os valores das variáveis dependentes à entrada ($j = 1$) devem necessariamente ser incluídos na aproximação dada pelo método de colocação ortogonal. Quanto aos valores à saída ($j = N+2$), estes podem ou não ser incluídos na aproximação.

Essa constatação está de acordo com a observação de Villadsen e Michelsen (1978) ao tratarem da resolução de problemas de valor inicial pelo método de resíduos ponderados, e destacarem que o ponto final do intervalo de integração pode ser incluído como um ponto de colocação ao lado dos N pontos de colocação internos. Segundo estes autores há certas vantagens para este procedimento quando se resolvem equações diferenciais acopladas com uma ampla faixa de autovalores, e a ordenada do ponto final é obtida sem o passo de extrapolação ou integração. Mas concluem a discussão ressaltando que o erro de aproximação tem a mesma ordem de magnitude daquele obtido apenas com os pontos de colocação internos.

Neste trabalho, os valores das variáveis dependentes em $\zeta = 1$ foram incluídos, como o fazem Chen e Sun (1991), Hua e Jutan (2000) e Chou e Wu (2007) para a resolução de seus modelos. Mas deve-se destacar que simulações realizadas na fase de implementação dos módulos computacionais mostraram que os perfis de concentração e de temperatura são coincidentes considerando-se ou não os valores das variáveis dependentes à saída do reator, isto é, tomando-se o somatório até $N+1$ ou $N+2$.

Substituindo a aproximação para a derivada primeira, dada pela Equação (3.88), nas Equações (3.44), (3.46), (3.48) e (3.50), chega-se ao seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\frac{dy_{1i}}{d\theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \left[\sum_{j=1}^{N+2} A_{ij} y_{1j} + \alpha_1 (y_{1i} - y_{2i}) \right] \quad (3.89)$$

$$\frac{dy_{2i}}{d\theta} = \frac{\alpha_1}{(1-\varepsilon)} (y_{1i} - y_{2i}) - \left[\beta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_{6i}}\right) + \beta_3 \exp\left(-\frac{\gamma_3}{y_{6i}}\right) \right] y_{2i} \quad (3.90)$$

$$\frac{dy_{3i}}{d\theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \left[\sum_{j=1}^{N+2} A_{ij} y_{3j} + \alpha_2 (y_{3i} - y_{4i}) \right] \quad (3.91)$$

$$\frac{dy_{4i}}{\partial\theta} = \frac{\alpha_2}{(1-\varepsilon)} (y_{3i} - y_{4i}) - \beta_2 \exp\left(-\frac{\gamma_2}{y_{6i}}\right) y_{4i} + \beta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_{6i}}\right) y_{2i} \quad (3.92)$$

$$\frac{dy_{5i}}{d\theta} = -\frac{1}{\varepsilon} \left[\sum_{j=1}^{N+2} A_{ij} y_{5j} + \alpha_3 (y_{5i} - y_{6i}) + \varphi_1 (y_{5i} - y_{7i}) \right] \quad (3.93)$$

$$\begin{aligned} \frac{dy_{6i}}{d\theta} = & \frac{\alpha_4}{(1-\varepsilon)} (y_{5i} - y_{6i}) + \beta_1 \delta_1 \exp\left(-\frac{\gamma_1}{y_{6i}}\right) y_{2i} + \beta_2 \delta_2 \exp\left(-\frac{\gamma_2}{y_{6i}}\right) y_{4i} + \\ & \beta_3 \delta_3 \exp\left(-\frac{\gamma_3}{y_{6i}}\right) y_{2i} \end{aligned} \quad (3.94)$$

$$\frac{dy_{7i}}{d\theta} = -\omega \sum_{j=1}^{N+2} A_{ij} y_{7j} + \varphi_2 (y_{5i} - y_{7i}) \quad (3.95)$$

Deve-se notar que as Equações (3.90), (3.92) e (3.94) correspondem às Equações (3.45), (3.47) e (3.49) escritas para o i -ésimo ponto de colocação.

As Equações (3.89)-(3.95) são aplicadas para $i = 2, 3, \dots, N+2$, e para $i = 1$ impõe-se a condição de derivada nula para cada variável, correspondendo isto ao fato de que as condições são constantes à entrada do reator. Com isso, geram-se as $N+1$ equações para cada variável dependente, sendo N o número de pontos de colocação internos no intervalo da variável espacial e A_{ij} os elementos da matriz \mathbf{A} associada à derivada primeira no método de colocação ortogonal. Portanto, tem-se um sistema de $7 \times (N+1)$ equações diferenciais ordinárias, na forma de um problema de valor inicial.

Foram implementados dois módulos computacionais para a simulação dos comportamentos dinâmico e estacionário do reator de leito fixo. Os perfis estacionários podem ser obtidos a partir do módulo transiente considerando tempos longos ou diretamente a partir da execução do módulo estacionário, sendo que a coincidência das duas soluções constitui uma

forma de atestar a robustez do método aplicado à solução do sistema de equações diferenciais parciais que representa o modelo transiente.

O modelo estacionário é dado por um sistema de equações algébrico-diferenciais, e o mesmo foi resolvido com o uso das funções residentes do MATLAB *fsolve* e *ode23tb*. A função *fsolve* é utilizada na solução do sistema algébrico, enquanto que a solução do sistema diferencial é obtida com o uso da função *ode23tb*. Além da função *ode23tb* foi testada também a solução do sistema diferencial com o uso das funções *ode45* e *ode23s*. A função *ode45* não apresentou bons resultados para situações extremas em que as perturbações nas variáveis de entrada levam a perfis térmicos elevados. Já a função *ode23s*, apesar de apresentar os mesmos resultados da função *ode23tb*, requer um tempo de execução bem maior, de modo que a opção final foi por esta última.

As funções *ode23s* e *ode23tb* são recomendadas para problemas rígidos. A primeira é baseada na fórmula modificada de Rosenbrock de 2^a ordem, de passo simples, e implícita, e a segunda é baseada em uma fórmula implícita de Runge-Kutta, implementada com um primeiro estágio que é um passo de regra trapezoidal e um segundo estágio que é uma fórmula de diferenciação atrasada de ordem dois, tomando-se a mesma matriz de avaliação nos dois estágios. De acordo com Burden e Faires (2003), os procedimentos comumente empregados com os sistemas rígidos (*stiff*), particularmente comuns no estudo de vibrações, reações químicas e circuitos elétricos, são os métodos de passos múltiplos implícitos. Isso explica o bom desempenho observado com o uso da função *ode23tb*.

A solução do sistema dado pelas Equações (3.81)-(3.87) conduz aos perfis estacionários de concentração dos constituintes o-xileno (*A*) e anidrido ftálico (*B*) na fase gasosa (C_A e C_B) e na superfície da partícula ($C_{P,A}$ e $C_{P,B}$), dos perfis de temperatura na fase gasosa (*T*) e na superfície da partícula (T_P) e do perfil de temperatura do fluido refrigerante (T_c) ao longo do reator.

O procedimento para a solução desse sistema, conforme fluxograma do módulo correspondente ao modelo estacionário, ilustrado na Figura 3.4, consiste das seguintes etapas:

Etapa 1 – determinação dos valores de $C_{P,A}$, $C_{P,B}$ e T_P em $z = 0$. Esta determinação é feita a partir dos valores C_{A0} , C_{B0} e T_0 em $z = 0$ e de valores de inicialização para $C_{P,A}$, $C_{P,B}$ e T_P . Com

isso, resolve-se o sistema de equações algébricas com a função *fsolve*, obtendo-se os valores finais de $C_{P,A}$, $C_{P,B}$ e T_P em $z = 0$.

Etapa 2 – determinação dos valores de C_A , C_B , T e T_c em $z = z + \Delta z$, onde Δz define o espaçamento incremental para a solução do sistema algébrico. Nesta etapa é usada a função *ode23tb* para a integração do sistema diferencial, tendo os valores de $C_{P,A}$, $C_{P,B}$ e T_P , determinados na etapa anterior, e C_A , C_B , T e T_c , em z , como valores iniciais para integração. O resultado dessa etapa são os valores de C_A , C_B , T e T_c correspondentes a $z = z + \Delta z$.

Etapa 3 – determinação dos valores de $C_{P,A}$, $C_{P,B}$ e T_P em z . Esta determinação é feita a partir dos valores C_A , C_B e T em z e dos valores $C_{P,A}$, $C_{P,B}$ e T_P anteriormente calculados. Com esses valores, resolve-se o sistema de equações algébricas por intermédio da função *fsolve*, obtendo-se, então, os valores $C_{P,A}$, $C_{P,B}$ e T_P por solução do sistema algébrico em z .

Etapa 4 – Repetir as Etapas 2 e 3 até $z = z_{final}$, onde z_{final} é o valor de z correspondente à saída do reator (comprimento do reator).

O procedimento para a resolução do modelo dinâmico, conforme o fluxograma indicado na Figura 3.5, consiste na integração do sistema de equações diferenciais ordinárias geradas pelo procedimento de discretização, dado pelas Equações (3.89)-(3.95). A integração é feita partindo-se de perfis iniciais para as variáveis dependentes nos pontos de colocação. Como resultado, obtêm-se os perfis temporais das variáveis, $C_A(t)$, $C_{P,A}(t)$, $C_B(t)$, $C_{P,B}(t)$, $T(t)$, $T_P(t)$ e $T_c(t)$ nos pontos de colocação (z_k). Em seguida, esses perfis são interpolados com o uso da função *spline* (*MATLAB*), obtendo-se, finalmente, os perfis temporais das variáveis em uma malha regular com espaçamento Δz ao longo do reator.

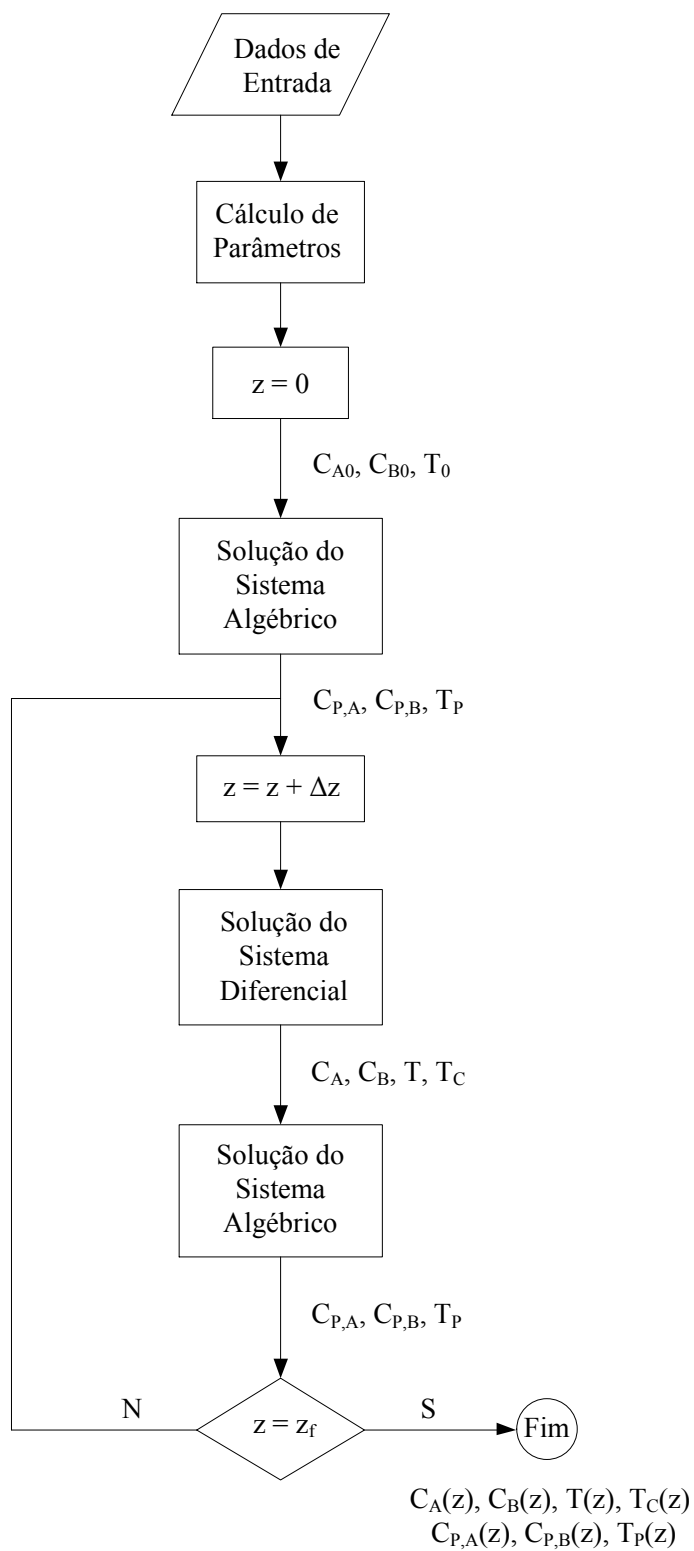


Figura 3.4 - Fluxograma de cálculos do módulo computacional para a solução do modelo estacionário.

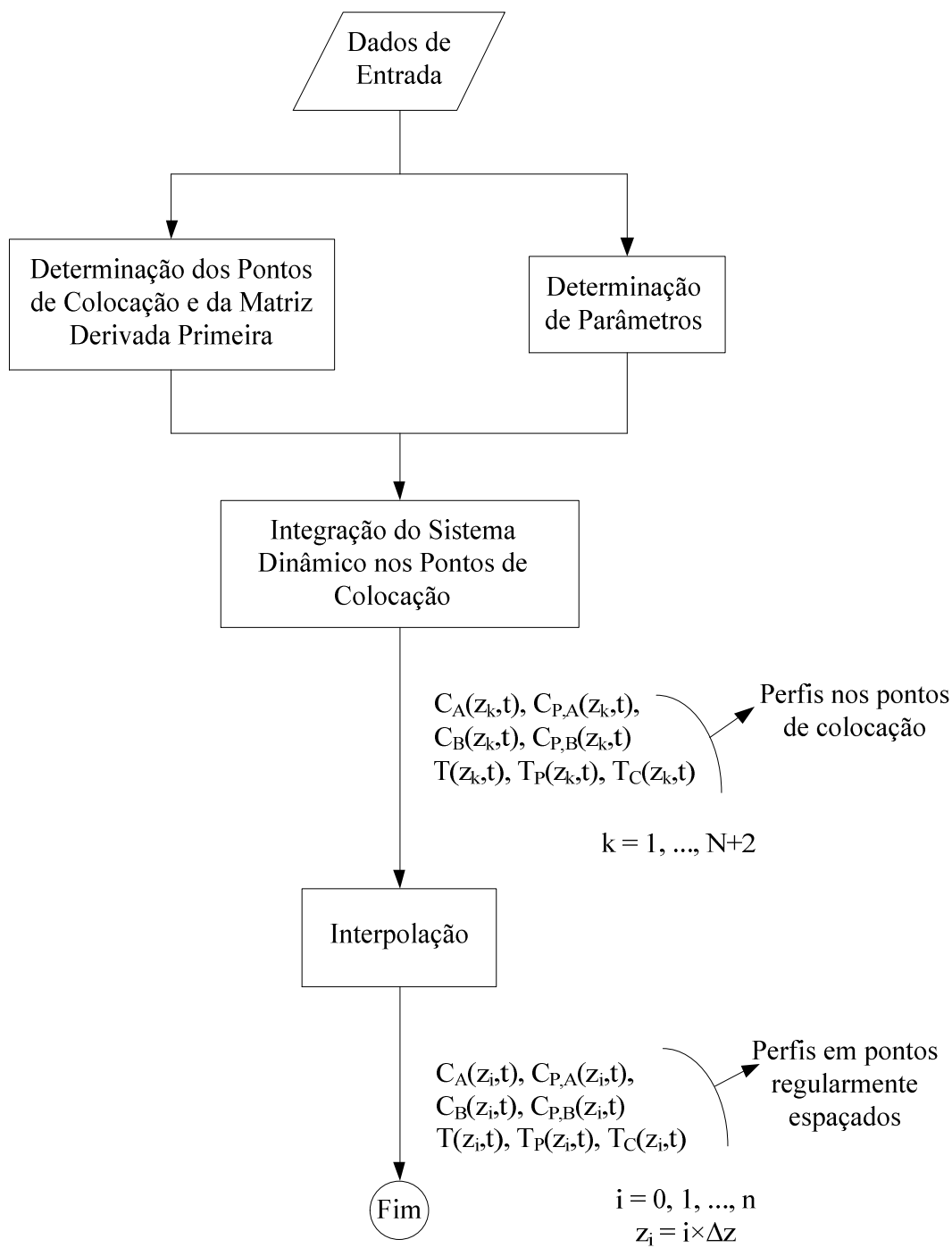


Figura 3.5 - Fluxograma de cálculos do módulo computacional para a solução do modelo dinâmico.

CAPÍTULO 4: ESTUDO DA SENSIBILIDADE PARAMÉTRICA DO REATOR DE SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO

4.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos a partir de simulações com o modelo matemático descrito no capítulo anterior, tendo como foco principal o estudo de sensibilidade dos parâmetros de operação do reator de leito fixo. Os resultados são apresentados em termos de perfis de conversão, concentração e temperatura, os quais são considerados em condições de operação estacionária e dinâmica.

O estudo de sensibilidade conduz a uma compreensão precisa do comportamento do sistema frente a mudanças em suas variáveis de entrada, e isso permite estabelecer em bases seguras estratégias eficientes para o controle do processo.

Na parte inicial, apresentam-se alguns resultados relacionados à análise de desempenho dos métodos utilizados para a solução numérica do modelo matemático. Incluem-se simulações relacionadas à escolha do número de pontos internos de colocação ortogonal, N , empregados no método das linhas para a solução do modelo dinâmico, representado pelas Equações (3.89)-(3.95) e condições auxiliares dadas pelas Equações (3.51)-(3.64). Em relação à solução do problema algébrico-diferencial referente ao modelo estacionário, representado pelas Equações (3.81)-(3.87) e condições auxiliares dadas pelas Equações (3.51)-(3.57), apresenta-se uma análise do passo de discretização da coordenada espacial adotado para a resolução do sistema algébrico, verificando-se o efeito deste parâmetro numérico nos perfis estacionários obtidos.

Antes de se proceder à análise de sensibilidade paramétrica das variáveis de processo, fez-se um estudo relativo à influência dos coeficientes de transferência de massa ($k_{gp}a_s$) e calor ($h_{gp}a_s$) nos perfis de concentração de o-xileno e de temperatura nas fases gasosa e sólida. Foram considerados valores desses coeficientes determinados dentro da faixa de temperaturas em que o reator comumente é operado em condições industriais.

Na Tabela 4.1 são mostrados os valores referenciais das variáveis usados nas simulações.

Tabela 4.1 - Valores referenciais para o estudo de sensibilidade paramétrica.

Parâmetros	Valores de referência
Concentração de o-xileno na alimentação, C_{A0}	0,1811 mol m ⁻³
Concentração de anidrido ftálico na alimentação, C_{B0}	0,0 mol m ⁻³
Pressão no reator, P	186 kPa
Velocidade do fluido reacional, v_g	2,06 m s ⁻¹
Velocidade do fluido refrigerante, v_c	2,00 m s ⁻¹
Temperatura de entrada da mistura reacional, T_0	628,00 K
Temperatura de entrada do fluido refrigerante, T_{c0}	628,00 K
Fator de frequência da taxa de reação da reação i :	
k_{01}	2,418×10 ⁹ m ³ kg ⁻¹ s ⁻¹
k_{02}	2,706×10 ⁹ m ³ kg ⁻¹ s ⁻¹
k_{03}	1,013×10 ⁹ m ³ kg ⁻¹ s ⁻¹
Energia de ativação da reação i :	
E_1	1,129×10 ⁵ J mol ⁻¹
E_2	1,313×10 ⁵ J mol ⁻¹
E_3	1,196×10 ⁵ J mol ⁻¹
Calor de reação da reação i :	
ΔH_1	-1,285×10 ⁶ J mol ⁻¹
ΔH_2	-3,276×10 ⁶ J mol ⁻¹
ΔH_3	-4,561×10 ⁶ J mol ⁻¹
Massa específica do:	
sólido, ρ_s	2000 kg m ⁻³
fluido reacional, ρ_g	0,582 kg m ⁻³
fluido refrigerante, ρ_c	1851,456 kg m ⁻³
Concentração de catalisador ativo na fase sólida, C_{cat}	1 kg-cat m ⁻³
Capacidade calorífica à pressão constante do:	
sólido, C_{ps}	836,0 J (kg K) ⁻¹
fluido reacional, C_{pg}	1045,0 J (kg K) ⁻¹
fluido refrigerante, C_{pc}	483,559 J (kg K) ⁻¹
Coefficiente global de transferência de calor, U	96,02 J (m ² s K) ⁻¹
Comprimento do reator, L	4,0 m
Porosidade do leito, ε	0,35
Diâmetro interno do tubo interno, D_{ii}	0,025 m
Diâmetro externo do tubo interno, D_{ei}	0,0325 m
Diâmetro interno do tubo externo, D_{ie}	0,045 m
Coefficiente de transferência de calor gás-sólido, $h_{gp}a_s$	2,95×10 ⁵ J (s m ³ K) ⁻¹
Coefficiente de transferência de massa gás-sólido:	
o-xileno, $(k_{gp}a_s)_A$	83,24 s ⁻¹
anidrido ftálico, $(k_{gp}a_s)_B$	79,38 s ⁻¹

Esses dados foram tomados a partir dos trabalhos de Anastasov (2002 e 2003) e de Chou e Wu (2007), a menos dos valores para os coeficientes de transferência de massa e calor, os quais foram estimados para uma temperatura de 650 K a partir das correlações sugeridas por Anastasov *et al.* (1988), com os cálculos descritos no Apêndice A.

4.2 Desempenho da Solução Numérica

Uma questão importante na solução do modelo dinâmico é a verificação do efeito do número de pontos de colocação (N), usados na discretização da coordenada espacial para a aplicação do método das linhas, sobre os perfis assintóticos obtidos para tempos longos. Com esse propósito, foram realizadas diversas simulações variando-se N , e constatando-se que a maior influência ocorre nos perfis de temperatura.

Nas Figuras 4.1 e 4.2 têm-se os perfis de temperatura para duas situações de temperatura de alimentação dentro da faixa de operação do reator, uma intermediária, $T_0 = 638$ K, e outra próxima do limite superior, $T_0 = 658$ K. No primeiro caso (Figura 4.1), observa-se que $N = 18$ já é suficiente para garantir a convergência dos perfis, o que não é verificado no segundo caso (Figura 4.2), com a convergência sendo obtida somente a partir de $N = 24$. Constata-se, portanto, que o valor de N requerido para obter a convergência da solução pelo método das linhas depende da temperatura de alimentação da mistura reacional, ou seja, das condições térmicas em que o reator opera. Isso levou à escolha de $N = 24$ como valor referencial para as simulações realizadas com o modelo, visando à garantia de convergência da solução em toda a faixa de temperaturas simuladas.

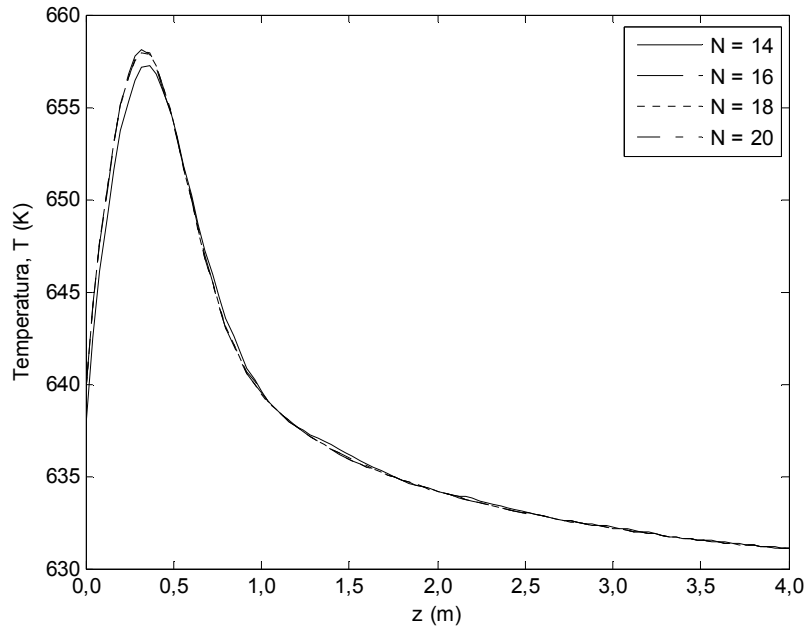


Figura 4.1 - Perfil de temperatura ao longo do reator ($T_0 = 638$ K).

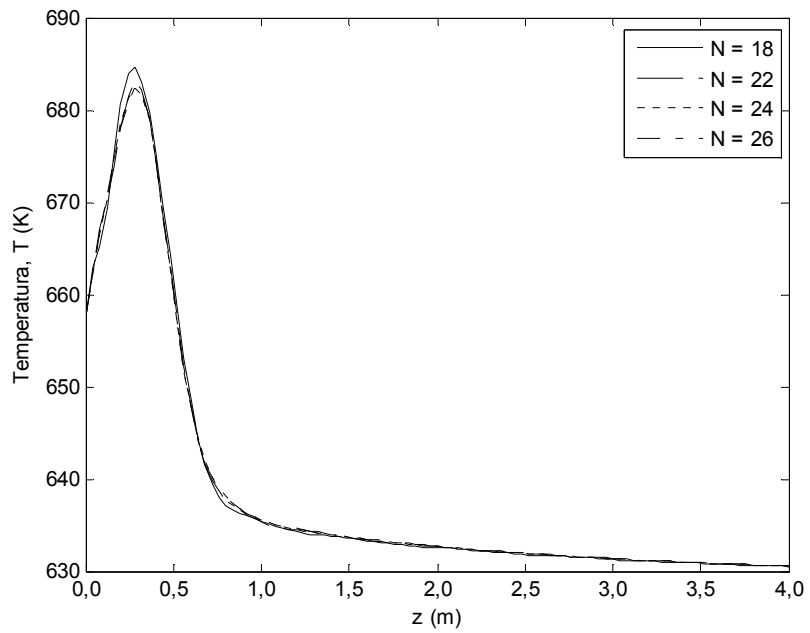


Figura 4.2 - Perfil de temperatura ao longo do reator ($T_0 = 658$ K).

Para verificar a robustez dos dois módulos computacionais elaborados, os perfis de concentração de o-xileno (A) e de anidrido ftálico (B) e o perfil de temperatura obtidos a partir do modelo estacionário foram comparados com a solução assintótica do modelo dinâmico para tempos longos, a qual corresponde aos perfis estabilizados.

Conforme descrito no capítulo anterior, a estratégia adotada para resolver o sistema algébrico-diferencial que constitui o modelo estacionário para o reator consiste na solução do sistema algébrico dado pelas Equações (3.82), (3.84) e (3.86) separadamente, de modo a obter, para um conjunto de valores das variáveis na fase gasosa, os correspondentes valores das variáveis na fase sólida. Com estes valores disponíveis, então, o sistema diferencial dado pelas Equações (3.81), (3.83), (3.85) e (3.87) é integrado por um passo incremental Δz . Para a implementação deste esquema de solução do sistema algébrico-diferencial, considerou-se a solução do sistema algébrico com passo incremental de 0,1%, 0,01% e 0,001% do comprimento do reator (L).

As Figuras 4.3 a 4.8 ilustram o desempenho do esquema de solução do modelo estacionário em função do tamanho do passo incremental assumido para a resolução do sistema algébrico. São mostrados os perfis de concentração de o-xileno (A) e anidrido ftálico (B) e de temperatura ao longo do leito, comparando-se a solução obtida diretamente do modelo estacionário com aquela do modelo dinâmico estabilizado (para tempos longos). Verifica-se que quanto menor for o passo incremental mais a solução do modelo estacionário se aproxima daquela do modelo dinâmico estabilizado. Também se conclui que o tamanho do passo incremental necessário à convergência é influenciado pela temperatura de entrada dos reagentes, requerendo-se passos incrementais menores para a convergência dos perfis no caso de temperaturas mais elevadas.

Tendo em vista as observações acima relatadas e considerando-se que o tempo computacional necessário para a solução do modelo estacionário (sistema de equações algébrico-diferenciais) é bem maior que aquele para obter a solução estabilizada do modelo dinâmico, nos estudos de sensibilidade paramétrica, mostrados na parte final deste capítulo, os perfis estacionários mostrados são aqueles obtidos com o modelo dinâmico simulado para tempos longos.

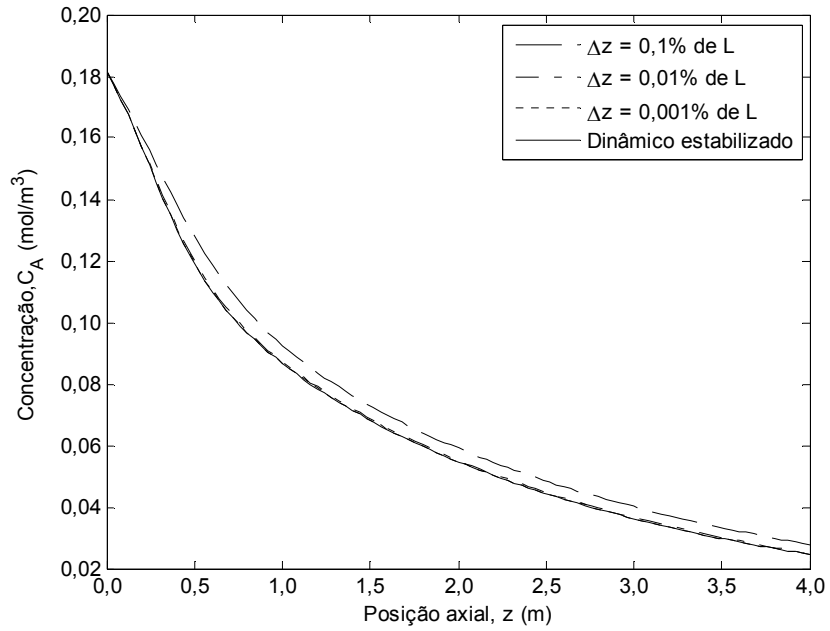


Figura 4.3 - Perfil de concentração de o-xileno ($T_0 = 640$ K).

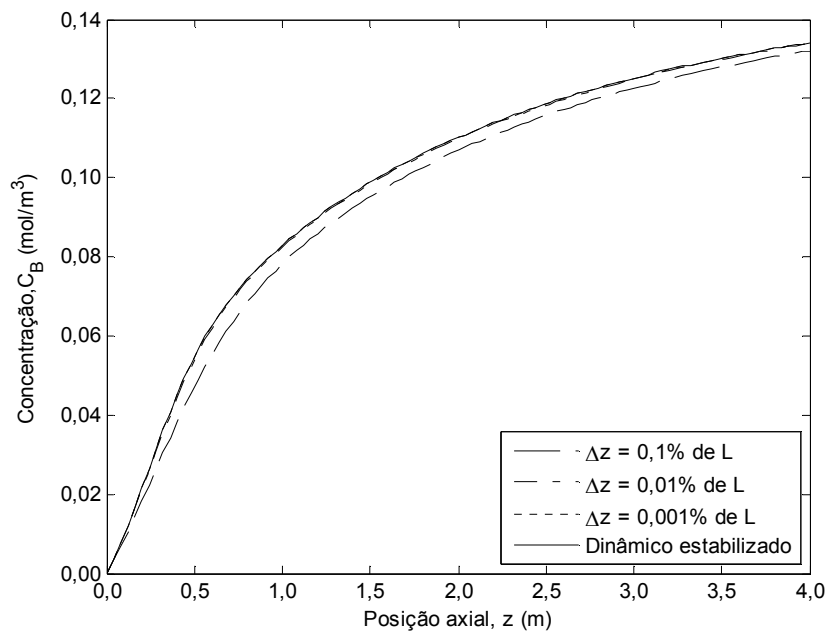


Figura 4.4 - Perfil de concentração de anidrido ftálico ($T_0 = 640$ K).

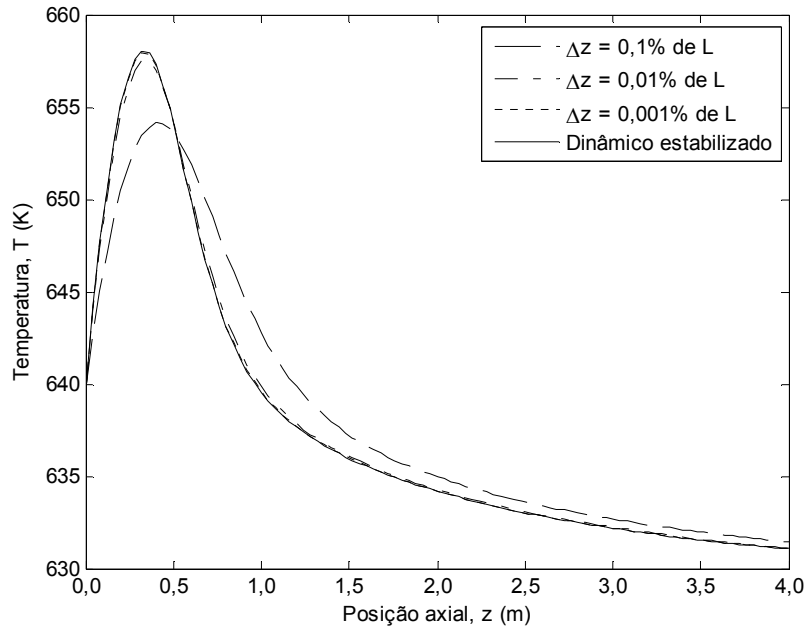


Figura 4.5 - Perfil de temperatura ($T_0 = 640$ K).

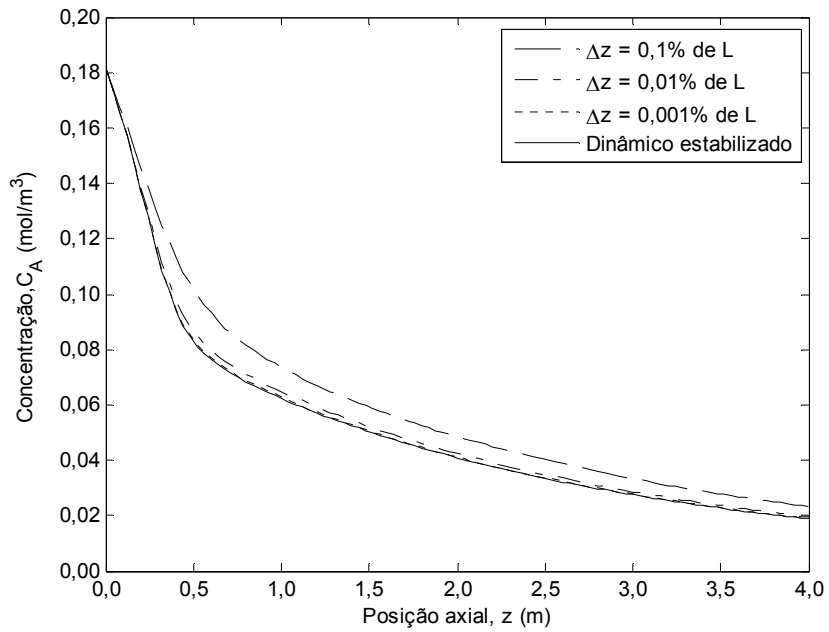


Figura 4.6 - Perfil de concentração de o-xileno ($T_0 = 658$ K).

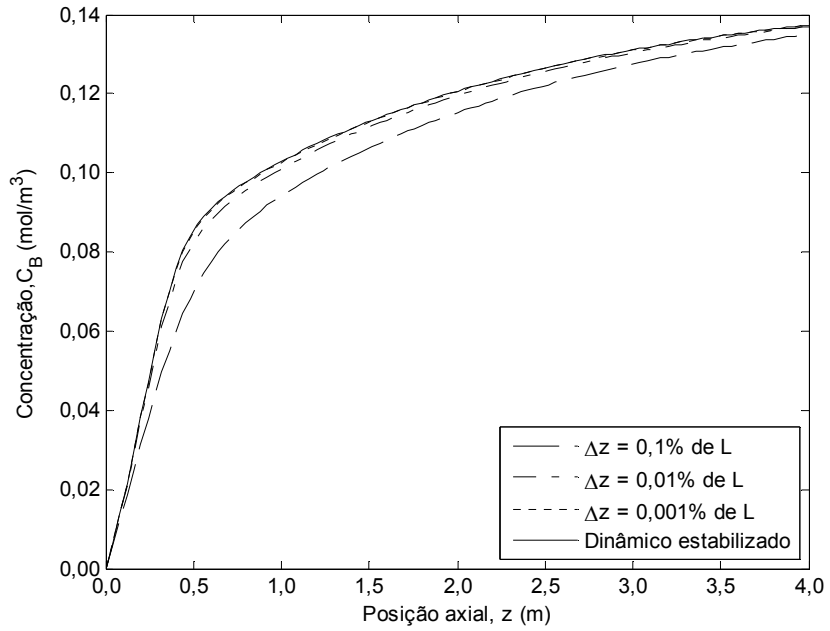


Figura 4.7 - Perfil de concentração de anidrido ftálico ($T_0 = 658$ K).

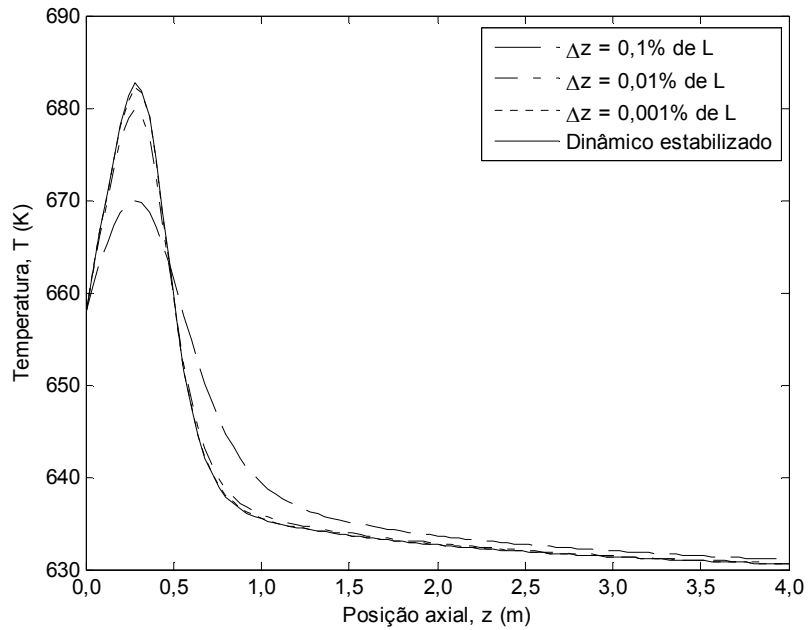


Figura 4.8 - Perfil de temperatura ($T_0 = 658$ K).

4.3 Efeito das Resistências à Transferência de Massa e Calor

O modelo matemático proposto para o reator de leito fixo inclui as resistências difusionais à transferência de massa e calor da fase gasosa para a fase sólida, onde ocorre a reação catalítica. Considerando-se que os catalisadores utilizados para promover a reação de oxidação do o-xileno a anidrido ftálico são do tipo não poroso, assume-se que a reação se dá na superfície externa das partículas catalíticas, desprezando-se, portanto, resistências difusionais internas. Assim, os parâmetros que determinam o efeito das resistências difusionais são os coeficientes de transferência de massa e calor da fase gasosa para a sólida ($k_{gp}a_s$ e $h_{gp}a_s$). Os valores destes coeficientes foram calculados com base nas correlações descritas por Anastasov *et al.* (1988), tomando-se valores médios das propriedades físicas da mistura o-xileno-ar-anidrido ftálico nas temperaturas de 600K, 650K e 700K, estimados a partir de correlações (REID *et al.*, 1988) ou tabelados (INCROPERA e DeWITT, 2008). Na Tabela 4.2 são apresentados os valores preditos para as três temperaturas consideradas (Apêndice A). Obtêm-se valores elevados para os coeficientes de transporte, indicando condições em que as resistências difusionais são de baixa magnitude e o reator opera em regime químico, com gradientes de concentração e temperatura através da interface entre as fases sólida e fluida desprezíveis. Essa é uma situação desejável na operação do reator industrial.

Tabela 4.2 - Valores dos coeficientes de transferência de massa e calor.

Conjunto	T (K)	$(k_{gp}a_s)_A$ (s^{-1})	$(k_{gp}a_s)_B$ (s^{-1})	$h_{gp}a_s$ ($J s^{-1} m^{-3} K^{-1}$)
C-1	600	78,88	75,12	$2,79 \times 10^5$
C-2	650	83,24	79,38	$2,95 \times 10^5$
C-3	700	87,44	83,49	$3,10 \times 10^5$

Para o estudo dos efeitos das resistências difusionais no comportamento dinâmico do reator, foram realizadas simulações impondo-se perturbações, no instante $t = 1000$ s, do tipo degrau na temperatura de alimentação dos reagentes a partir do estado estacionário de referência ($T_0 = 628$ K). Consideram-se perturbações em que esta temperatura passa aos valores 638 K e

658 K, as quais se situam dentro do intervalo tomado para o cálculo dos coeficientes de transferência de massa e calor entre as fases gasosa e sólida.

Os perfis dinâmicos foram acompanhados em três regiões que abrangem a parte rígida do perfil térmico que se desenvolve ao longo do leito, e inclui, portanto, o pico de temperatura. As posições axiais correspondentes a cada uma dessas regiões encontram-se indicadas na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 - Regiões consideradas para o estudo do comportamento dinâmico.

Região	Posição axial (m)
1	$z_1 = 0,16$
	$z_2 = 0,24$
	$z_3 = 0,32$
	$z_4 = 0,40$
2	$z_5 = 0,48$
	$z_6 = 0,56$
	$z_7 = 0,64$
	$z_8 = 0,72$
3	$z_9 = 0,80$
	$z_{10} = 0,88$
	$z_{11} = 0,96$
	$z_{12} = 1,04$

As Figuras 4.9 a 4.14 mostram os perfis de temperatura e concentração de o-xileno, obtidos quando a temperatura de alimentação dos reagentes é mudada para $T_0 = 638$ K. Nota-se que os perfis dinâmicos de concentração e temperatura são praticamente coincidentes para os três conjuntos de valores dos coeficientes de transferência de massa e calor, o que corresponde a uma situação em que o reator opera em regime químico, com resistências difusionais desprezíveis. Conforme já destacado, isso ocorre em função dos valores elevados dos coeficientes de transporte nas condições operacionais consideradas. De acordo com Froment e Bischoff (1990), em reatores

de leito fixo industriais a velocidade de fluxo é geralmente tão alta que a queda de temperatura e concentração no filme é pequena, ao menos para as condições em estado estacionário.

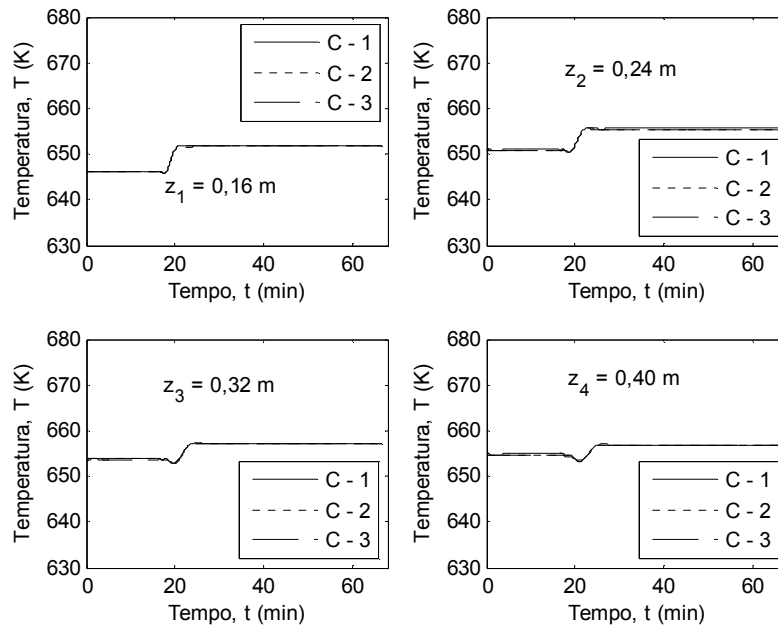


Figura 4.9 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-1 ($T_0 = 638$ K).

Analisando-se por regiões, verifica-se que nas posições onde ocorre o pico de temperatura obtêm-se perfis com maior variação temporal desta variável (Figuras 4.9 a 4.11). Isso mostra a importância de monitorar a temperatura em posições dessa região, visando ao controle térmico do reator. Os perfis de temperatura em algumas posições evidenciam, ainda que em pequena intensidade, a ocorrência do fenômeno de resposta inversa (por exemplo, nas posições z_3 e z_4 , na Figura 4.9), em que a temperatura inicialmente diminui e em seguida aumenta de modo a evoluir para o correspondente estado estacionário, superior ao valor inicial. Conforme destaca Toledo (1999), o termo “resposta inversa” é empregado porque, ao se introduzir uma perturbação numa dada variável de entrada do reator, o comportamento dinâmico da variável dependente analisada segue um caminho contrário ao esperado, e depois retorna seu comportamento para a trajetória esperada.

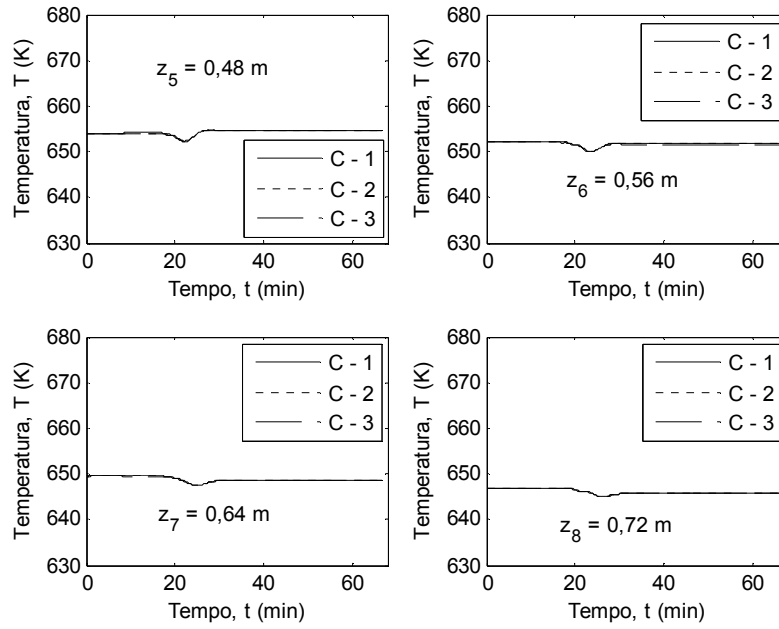


Figura 4.10 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-2 ($T_0 = 638 \text{ K}$).

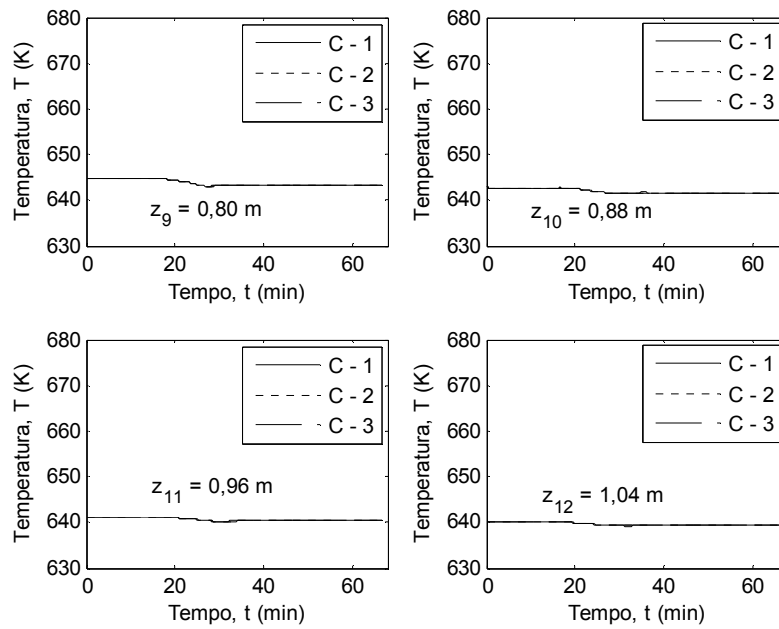


Figura 4.11 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-3 ($T_0 = 638 \text{ K}$).

O fenômeno de resposta inversa constitui uma característica dinâmica de reatores catalíticos de leito fixo e é observável na prática. Conforme destacado por Toledo (1999), esse fenômeno pode ser explicado principalmente devido à diferença entre as capacidades térmicas das fases sólida e fluida. Como a capacidade térmica do sólido $(\rho C_p)_s$ é superior à do gás $(\rho C_p)_g$, então, a fase sólida absorve o calor introduzido no reator devido ao aumento em T_0 , levando a uma diminuição não esperada da temperatura do meio reacional, e resultando, assim, o fenômeno de resposta inversa. Mas, com a evolução no tempo, a reação fortemente exotérmica que ocorre na fase sólida proporciona liberação de calor para a fase fluida e eleva a temperatura desta, fazendo com que sua trajetória evolua no sentido esperado. Um sistema que exibe comportamento dinâmico com resposta inversa torna mais complexo o projeto de uma malha de controle eficiente.

Em relação ao comportamento da concentração (Figuras 4.12 a 4.14), verifica-se que esta variável, em todas as posições consideradas, apresenta um comportamento uniforme de diminuição com o tempo, decorrente do fato de que a elevação da temperatura dos reagentes na alimentação, do seu valor de referência (628 K) para $T_0 = 638$ K, leva a um perfil de conversão de o-xileno mais alto, implicando em menores concentrações desta substância ao longo do reator no novo estado estacionário.

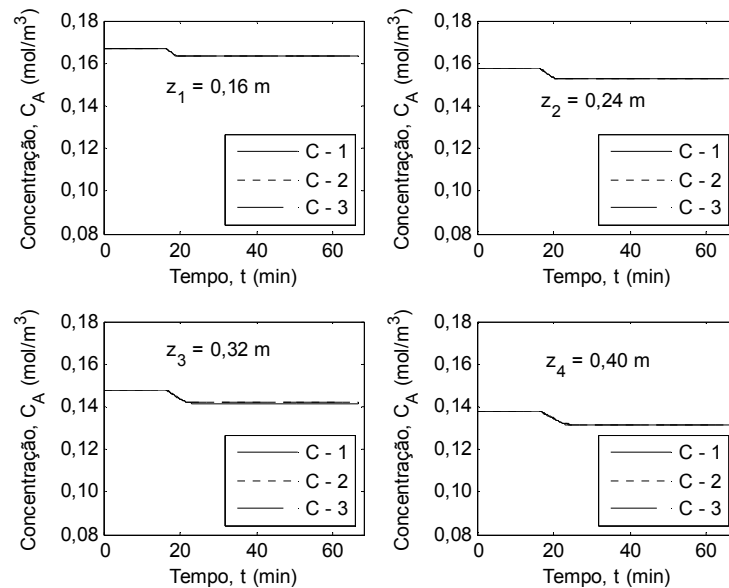


Figura 4.12 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-1 ($T_0 = 638$ K).

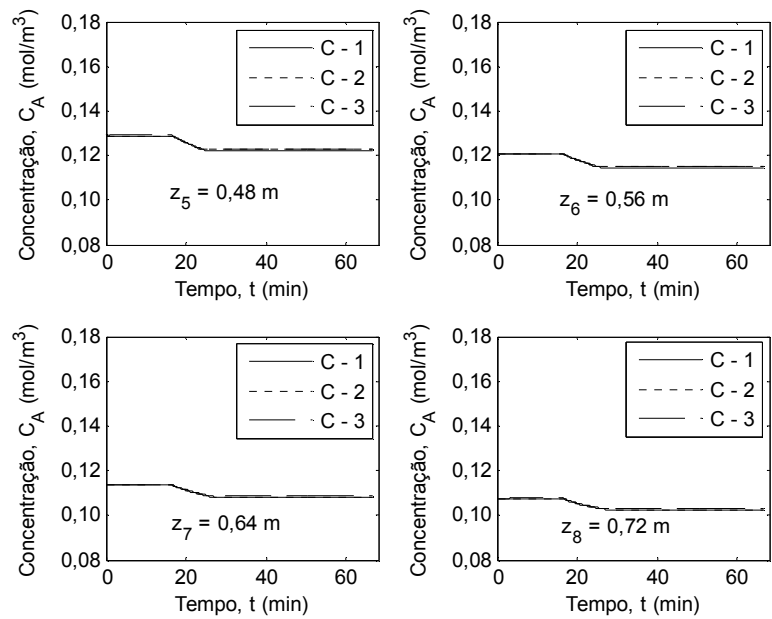


Figura 4.13 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-2 ($T_0 = 638$ K).

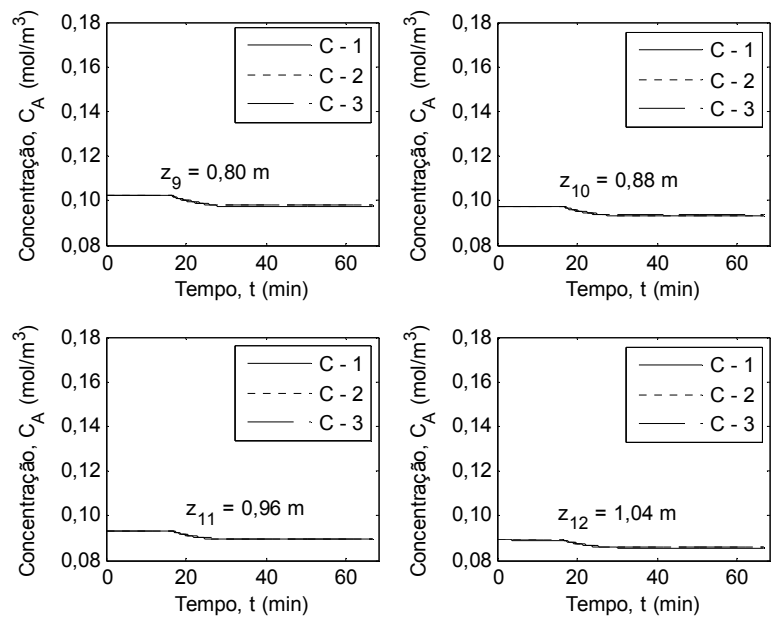


Figura 4.14 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-3 ($T_0 = 638$ K).

Nas Figuras 4.15 a 4.17 têm-se os perfis estacionários obtidos para os três conjuntos de valores dos parâmetros de transferência de massa e calor para $T_0 = 638$ K. Os perfis (temperatura e concentração de o-xileno e de anidrido ftálico) são praticamente coincidentes, o que permite concluir que para este nível térmico de operação as resistências difusionais mássica e térmica não exercem um efeito pronunciado no estado estacionário final do sistema. Neste caso, portanto, o reator opera num regime em que o processo é limitado pela taxa de reação química na superfície externa do catalisador não poroso.

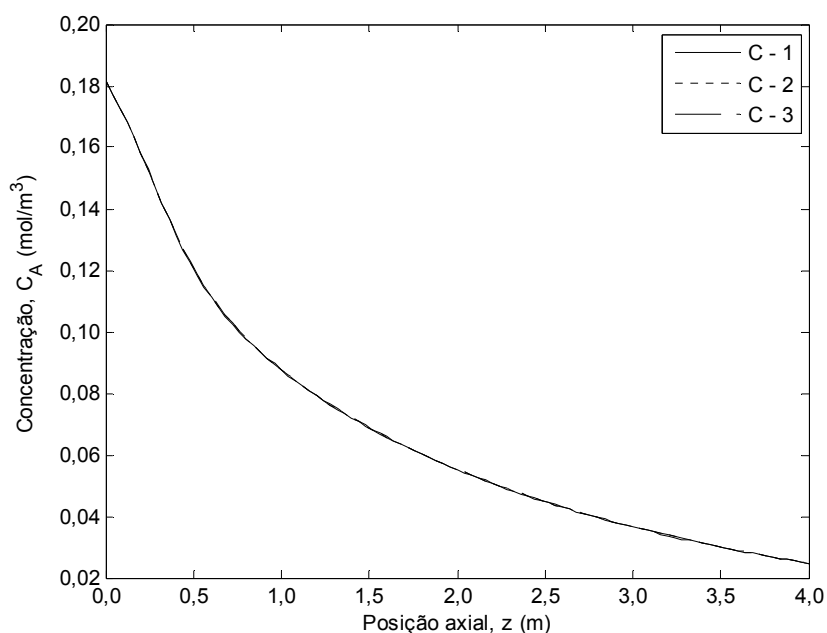


Figura 4.15 - Perfil estacionário de concentração de o-xileno no reator ($T_0 = 638$ K).

Os perfis estacionários de concentração exibem o comportamento esperado para o esquema reacional representativo do processo de oxidação do o-xileno, dado pelas Equações (3.29)-(3.31). A concentração de o-xileno (reagente) diminui continuamente ao longo do reator enquanto que a do anidrido ftálico (produto intermediário) cresce até a saída do reator, significando que para o comprimento considerado a concentração desta espécie não passa ao trecho decrescente típico para o perfil de uma espécie intermediária numa reação em série. Da mesma forma, tem-se um perfil de temperatura que exhibe um pico na região de entrada, característico de reatores de leito fixo envolvendo reações fortemente exotérmicas.

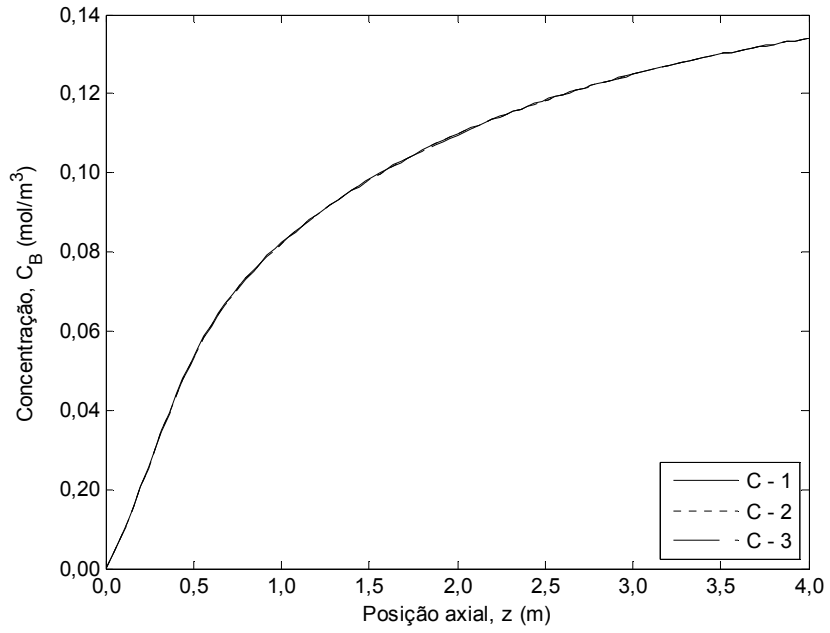


Figura 4.16 - Perfil estacionário de concentração de anidrido ftálico no reator ($T_0 = 638$ K).

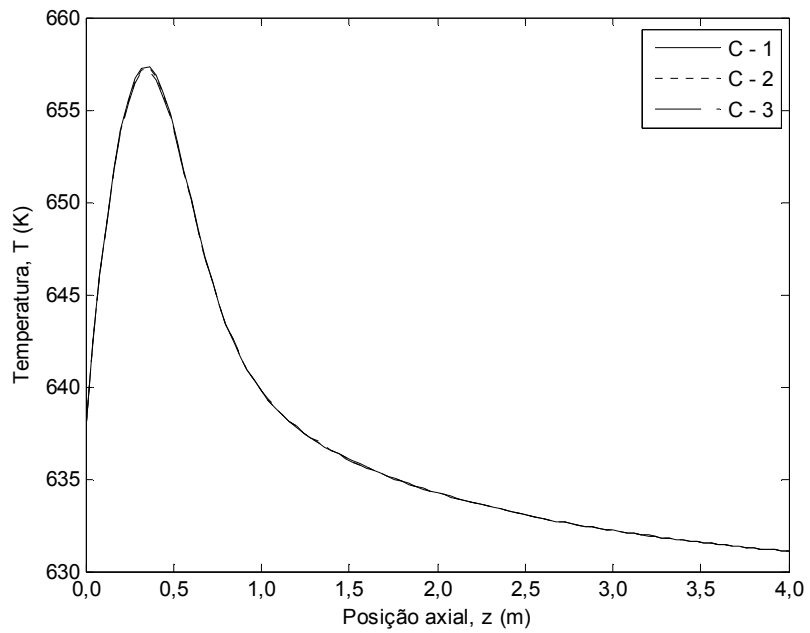


Figura 4.17 - Perfil estacionário de temperatura no reator ($T_0 = 638$ K).

As Figuras 4.18 a 4.20 mostram os perfis de temperatura obtidos quando a temperatura de alimentação dos reagentes sofre uma perturbação degrau que a eleva do valor de referência ($T_0 = 628$ K) para $T_0 = 658$ K. Os perfis dinâmicos de temperatura, neste nível térmico mais elevado de operação, apresentam diferenças perceptíveis frente às três condições consideradas em termos dos coeficientes de transferência de massa e calor. Isto ocorre notadamente para as posições z_1 , z_2 , z_3 , z_4 e z_5 (Figuras 4.18 e 4.19), as quais correspondem à região de formação do pico de temperatura.

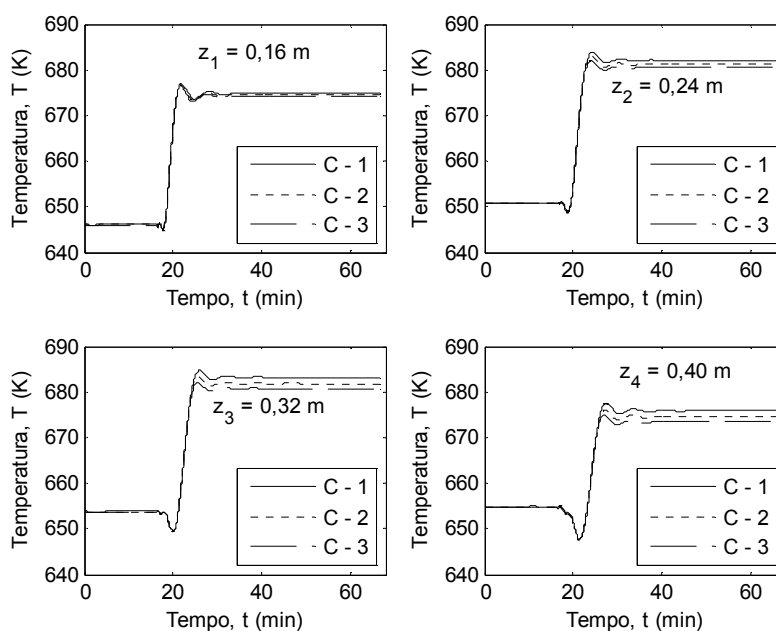


Figura 4.18 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-1 ($T_0 = 658$ K).

Em relação aos perfis dinâmicos de temperatura, observa-se que o fenômeno de resposta inversa também ocorre em algumas posições do reator, e de modo mais acentuado para esta condição térmica em que $T_0 = 658$ K.

Os perfis dinâmicos de temperatura em algumas posições, tais como z_1 , z_2 , z_3 , z_4 e z_5 (Figuras 4.18 e 4.19) exibem oscilações devidas ao método numérico. Isto foi verificado mediante um estudo complementar realizado ao final deste trabalho, no qual foi feita a resolução do modelo dinâmico utilizando-se fórmulas de diferenças finitas a três pontos e considerando-se

uma malha bastante refinada (600 pontos). Na medida em que o grau de refinamento da malha de diferenças finitas é aumentado, tem-se que as oscilações vão sendo suavizadas até desaparecerem. Este mesmo comportamento é verificado na medida em que também se aumenta o número de pontos no esquema de discretização por colocação ortogonal, chegando-se a soluções idênticas pelos dois métodos para todos os perfis das variáveis (dinâmico e estacionário). Apesar dessas oscilações, tem-se que os perfis obtidos com o esquema de solução numérica por colocação ortogonal apresentado neste trabalho permanecem representativos do processo.

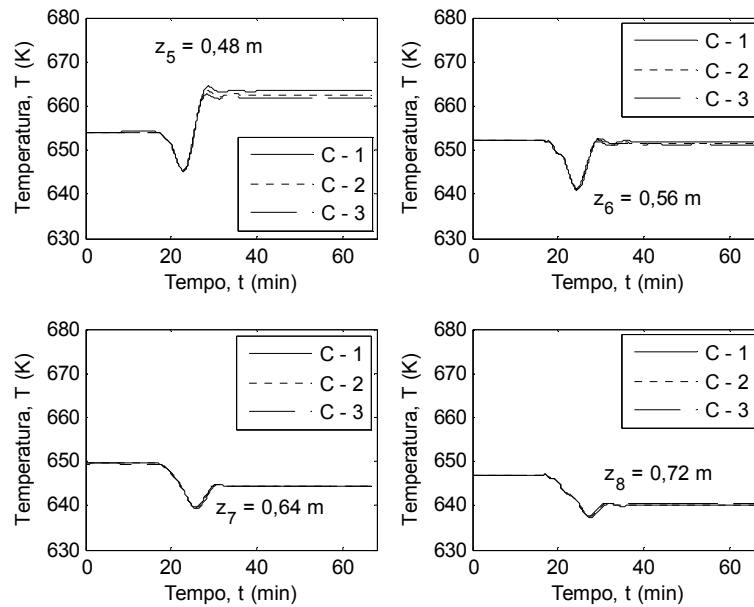


Figura 4.19 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-2 ($T_0 = 658$ K).

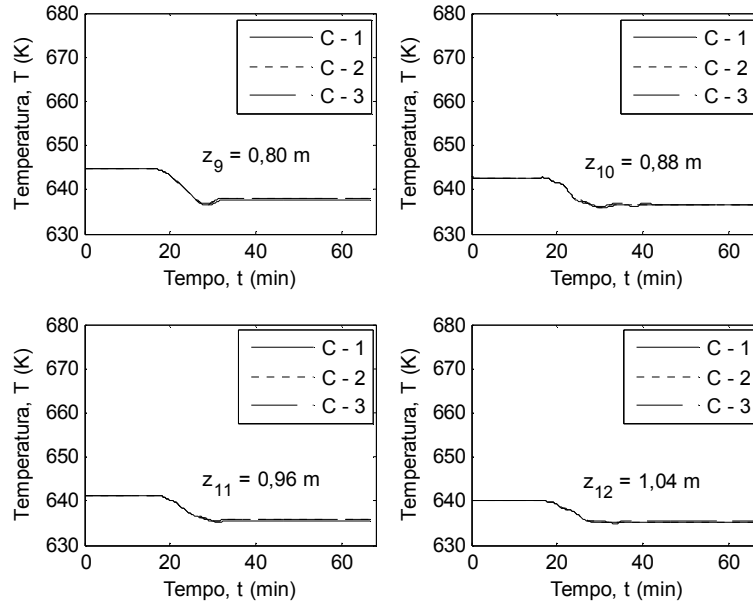


Figura 4.20 - Perfis dinâmicos de temperatura na Região-3 ($T_0 = 658$ K).

Em relação aos perfis dinâmicos de concentração de o-xileno, nas diversas posições consideradas ao longo do reator, conforme mostrado nas Figuras 4.21 a 4.23, são verificadas diferenças muito pequenas para os três conjuntos de valores dos coeficientes de transferência de massa e calor simulados. Como o reator opera em um nível térmico mais elevado do que na situação anterior, tem-se uma situação de maior conversão, ocorrendo uma diminuição mais acentuada da concentração do reagente em todas as posições ao longo do reator no novo estado estacionário para $T_0 = 658$ K.

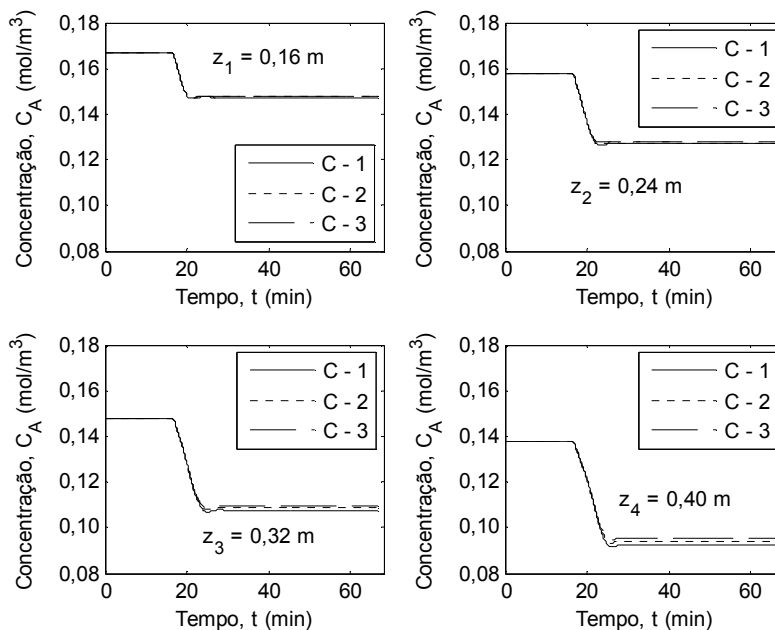


Figura 4.21 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-1 ($T_0 = 658$ K).

Os perfis estacionários de concentração e temperatura ao longo do reator, para $T_0 = 658$ K, são mostrados nas Figuras 4.24 a 4.26. Comparando com o caso anterior, verifica-se que ocorre uma maior influência dos coeficientes de transferência de massa e calor neste caso em que o reator opera em um nível térmico mais elevado. Entretanto, esse efeito é pequeno, e mesmo nos perfis de temperatura onde ele é mais pronunciado, a maior diferença ocorre na região do pico e fica em torno de 3 K (Figura 4.26).

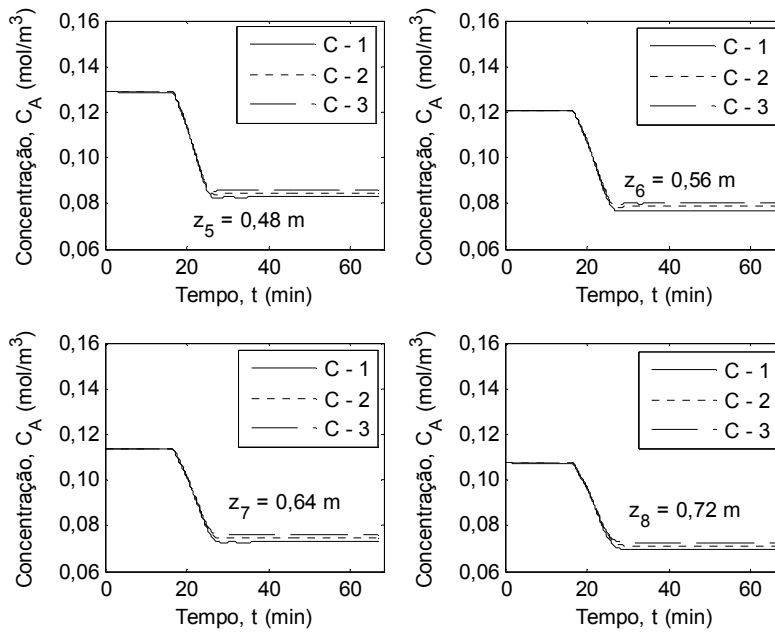


Figura 4.22 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-2 ($T_0 = 658$ K).

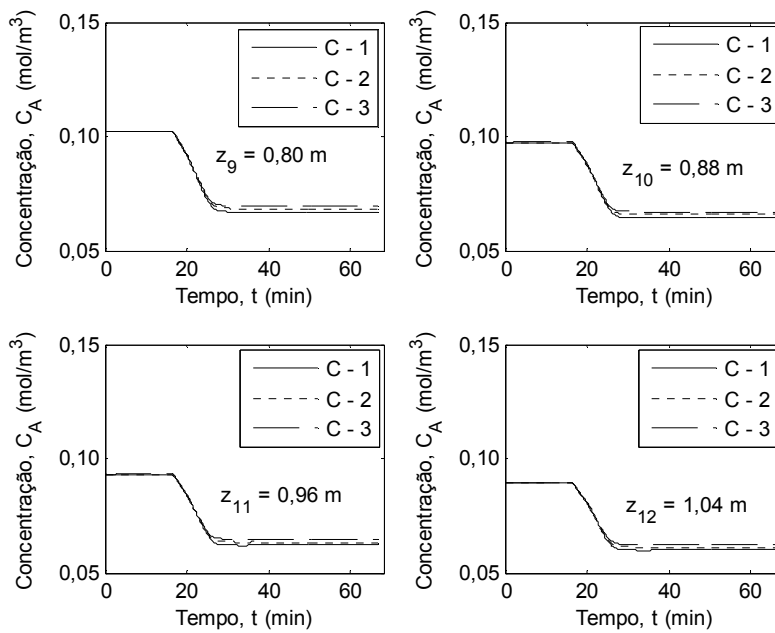


Figura 4.23 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno na Região-3 ($T_0 = 658$ K).

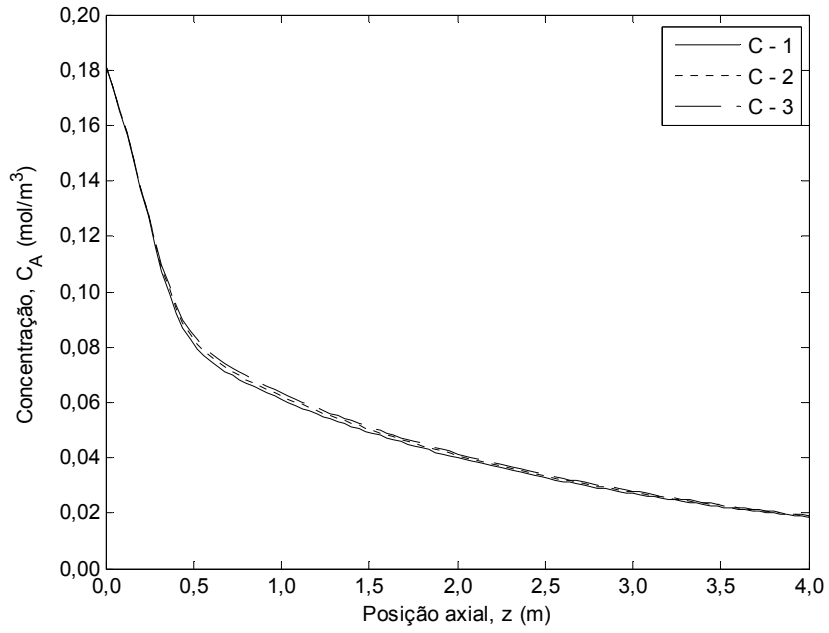


Figura 4.24 - Perfil estacionário de concentração de o-xileno no reator ($T_0 = 658$ K).

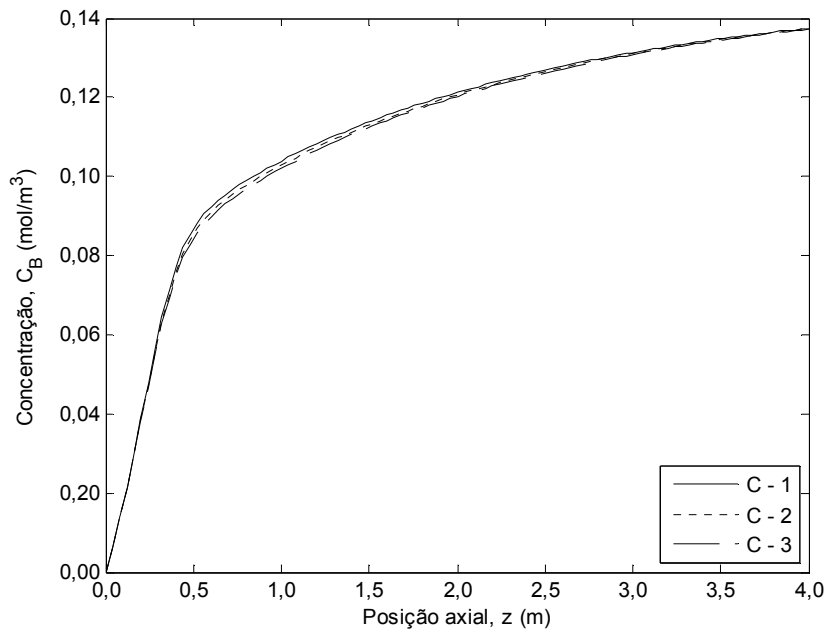


Figura 4.25 - Perfil estacionário de concentração de anidrido ftálico no reator ($T_0 = 658$ K).

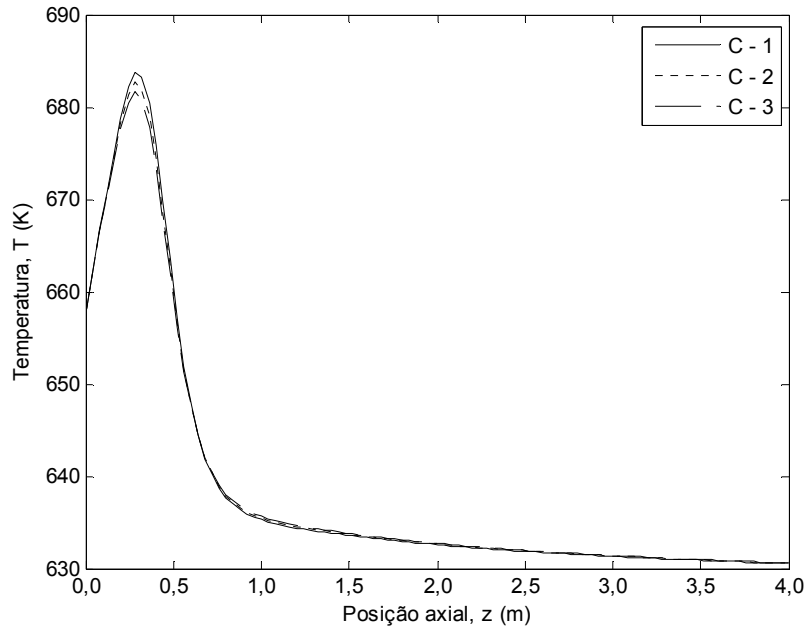


Figura 4.26 - Perfil estacionário de temperatura no reator ($T_0 = 658$ K).

4.3.1 Gradientes de Concentração e Temperatura

As simulações realizadas e os resultados mostrados acima tiveram por objetivo verificar o efeito dos parâmetros de transferência de massa e calor nos perfis dinâmicos e estacionários de concentração e de temperatura. Para isso, conforme destacado, foram tomados os valores dos coeficientes de transporte em três temperaturas diferentes (600, 650 e 700 K). Verifica-se que não ocorre uma influência marcante nos perfis obtidos para a fase gasosa nas três condições analisadas, as quais englobam a faixa térmica em que o reator pode operar.

Considerando que os valores dos coeficientes determinados a 650 K correspondem a uma condição térmica média representativa de toda a faixa operacional possível, então, para as simulações que seguem neste capítulo, bem como nas aplicações do modelo dinâmico ao controle do reator, foram assumidos os valores dos coeficientes de transporte nesta temperatura intermediária.

O conhecimento do efeito das resistências difusionais sobre o desempenho do reator é de fundamental importância, pois em condições de limitações difusionais a operação torna-se mais complexa, com implicações na resposta do sistema de controle. As Figuras 4.27 e 4.28 mostram os perfis dinâmicos de concentração de o-xileno e de temperatura nas fases gasosa e sólida em quatro posições próximas à entrada do reator, para $T_0 = 638$ K, com os perfis estacionários correspondentes dados nas Figuras 4.29 e 4.30.

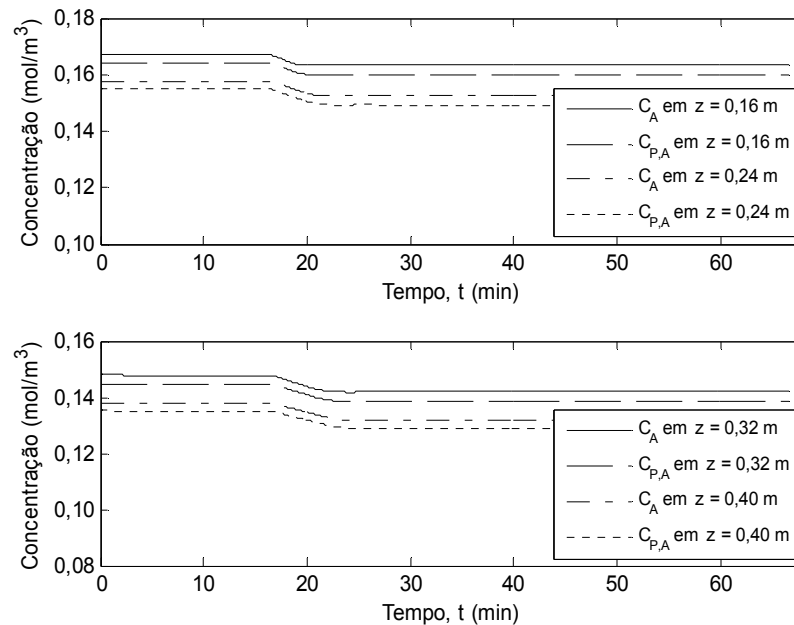


Figura 4.27 - Perfis dinâmicos de concentração do o-xileno nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 638$ K).

Os gradientes de concentração que ocorrem entre as fases gasosa e sólida, conforme ilustrado na Figura 4.27, não levam a modificações significativas nos perfis de concentração estacionários obtidos para o o-xileno (Figura 4.29), sendo os valores nas duas fases muito próximos, com uma diferença de concentração que se situa em torno de $0,0030 \text{ mol/m}^3$ nas posições consideradas.

Em relação aos perfis de temperatura (Figura 4.28), os gradientes ficam em torno de aproximadamente: 1,8 K, em z_1 ; 1,2 K, em z_2 ; 1,8 K em z_3 ; e 1,4 K em z_4 . A diferença entre os picos de temperatura dos perfis mostrados na Figura 4.30 é $T_p - T = 1,7$ K.

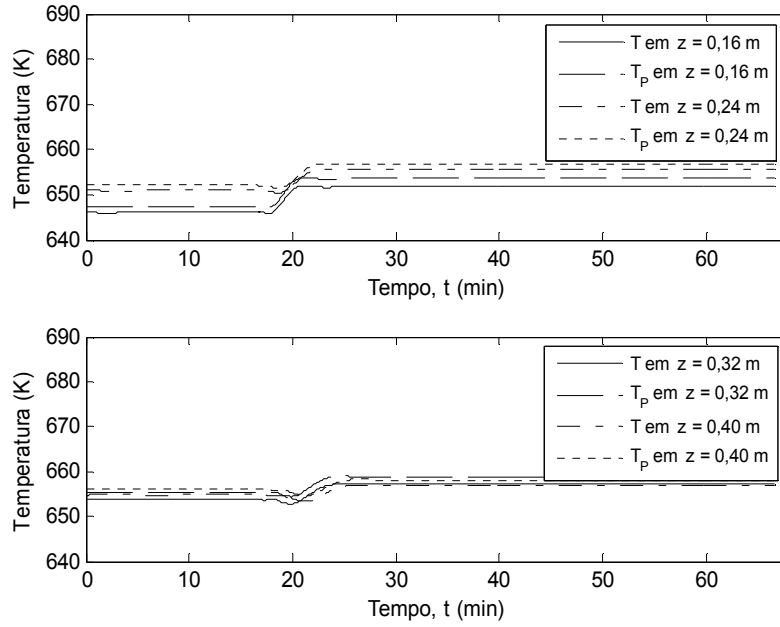


Figura 4.28 - Perfis dinâmicos de temperatura nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 638$ K).

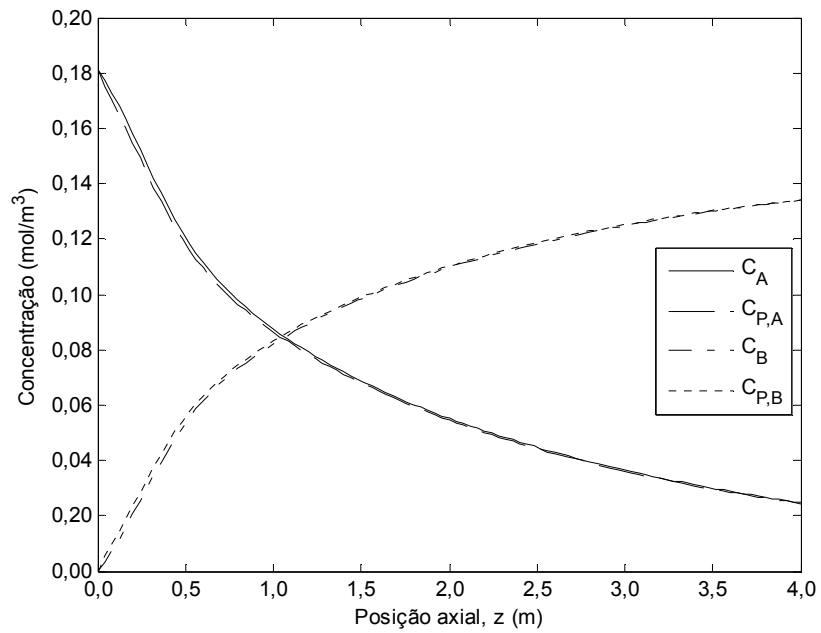


Figura 4.29 - Perfis estacionários de concentração de o-xileno e anidrido ftálico nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 638$ K).

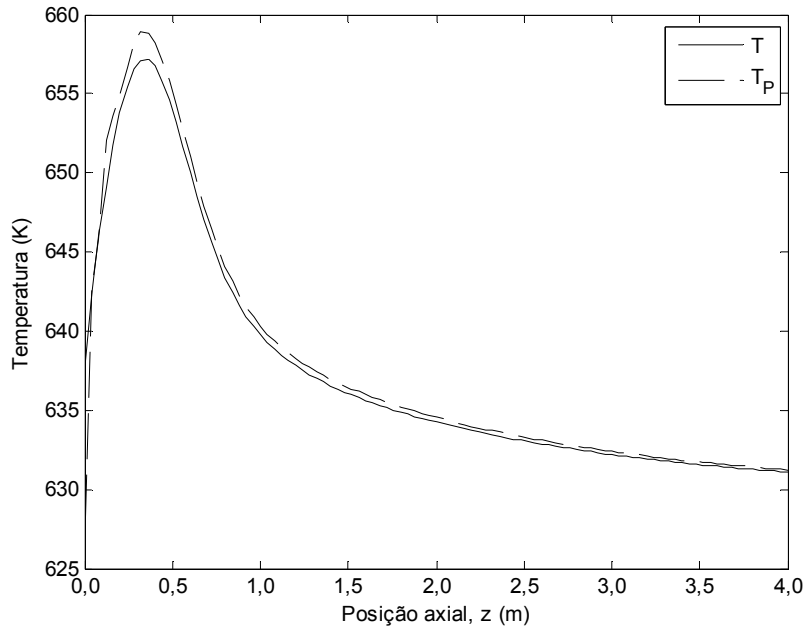


Figura 4.30 - Perfis estacionários de temperatura nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 638$ K).

Nas Figuras 4.31 e 4.32 são mostrados os perfis dinâmicos de concentração de o-xileno e de temperatura nas fases gasosa e sólida em duas posições próximas à entrada do reator, para $T_0 = 658$ K, e os perfis estacionários correspondentes nas Figuras 4.33 e 4.34. Os resultados são similares àqueles obtidos na simulação anterior, para $T_0 = 638$ K, mas ocorrem gradientes interfaciais maiores. O gradiente de concentração é de cerca de $0,0055 \text{ mol/m}^3$, e os gradientes de temperatura ficam em torno de: 3,8 K, em z_1 ; 2,1 K, em z_2 ; 3,2 K em z_3 ; e, 1,8 K em z_4 . A diferença entre os picos de temperatura dos perfis mostrados na Figura 4.34 é $T_p - T = 3,2$ K.

Nos perfis dinâmicos de temperatura verifica-se o fenômeno de resposta inversa, já destacado acima. Na Figura 4.32, por exemplo, tomando-se a posição $z = 0,32$ m (região do pico de temperatura), verifica-se que, ao se elevar a temperatura de alimentação do fluido reagente de 628 para 658 K, a temperatura inicialmente segue uma trajetória de diminuição, até um tempo de cerca de 20 minutos, quando então o perfil de temperatura retoma uma trajetória crescente até atingir a temperatura de estado estacionário correspondente à posição considerada, de cerca de 680 K, a qual é superior àquela existente antes da perturbação.

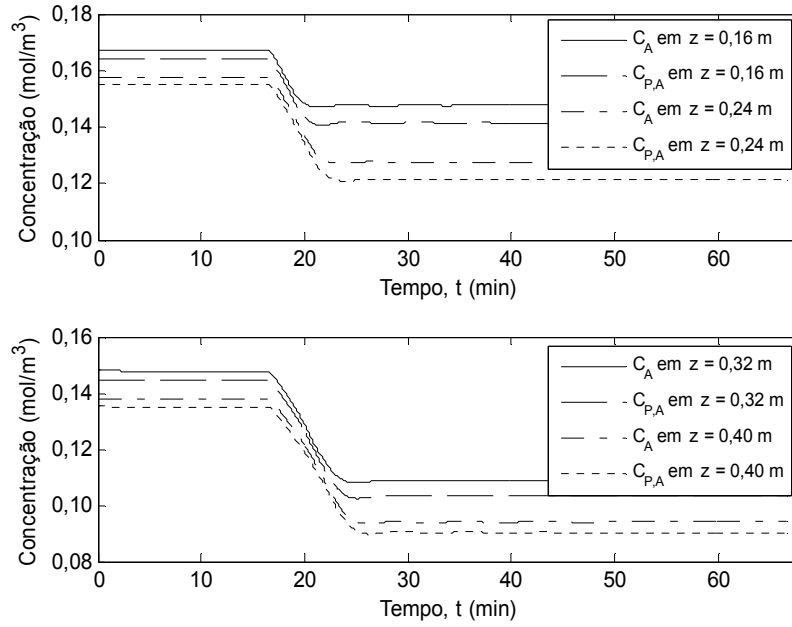


Figura 4.31 - Perfis dinâmicos de concentração de o-xileno nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 658$ K).

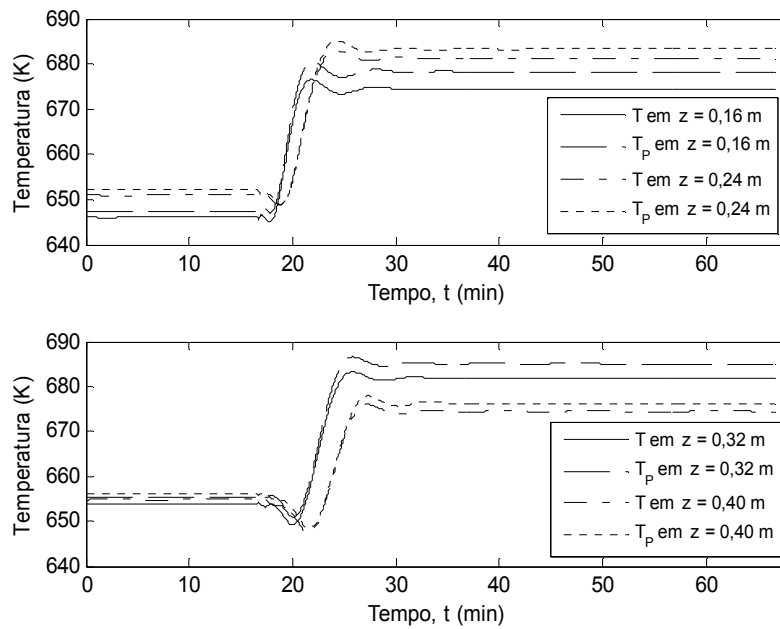


Figura 4.32 - Perfis dinâmicos de temperatura nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 658$ K).

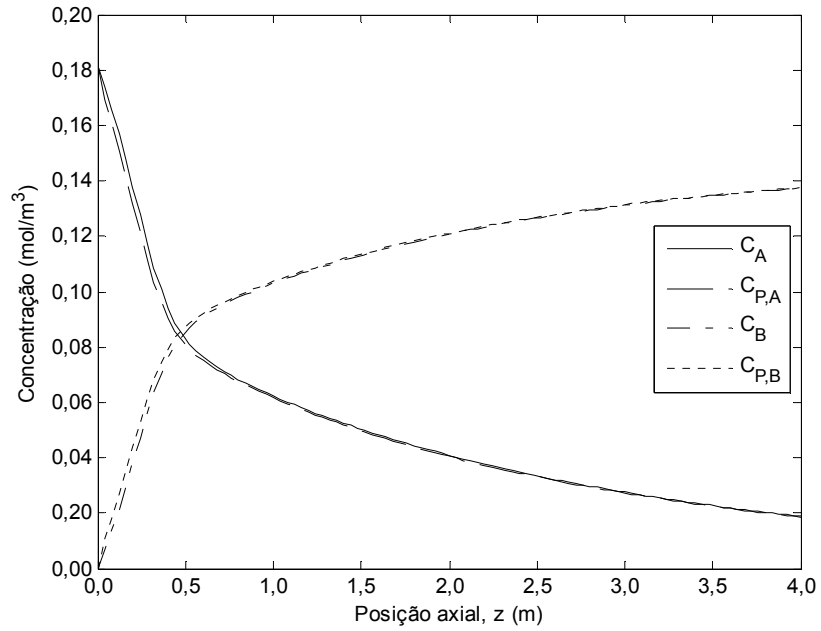


Figura 4.33 - Perfis estacionários de concentração de o-xileno e anidrido ftálico nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 658$ K).

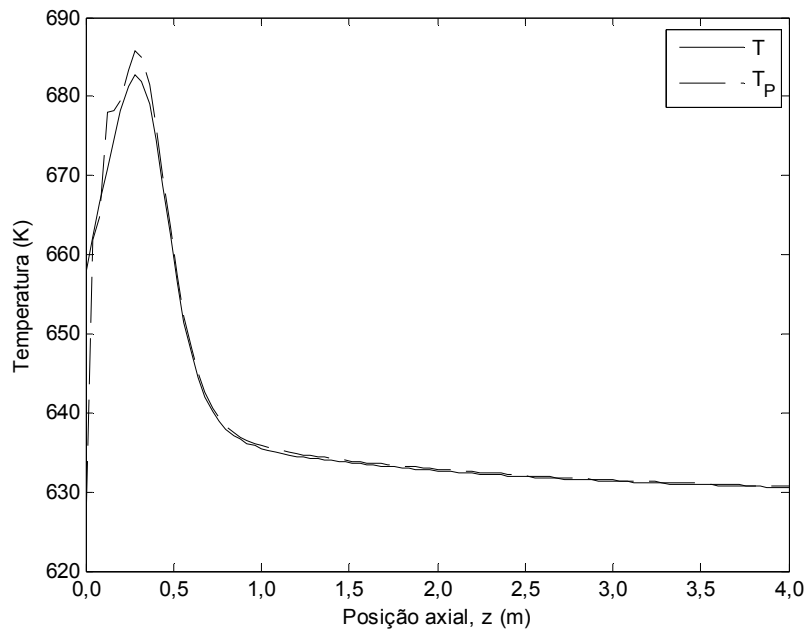


Figura 4.34 - Perfis estacionários de temperatura nas fases gasosa e sólida ($T_0 = 658$ K).

4.4 Estudo de Sensibilidade Paramétrica

A liberação de calor associada a reações fortemente exotérmicas em reatores de leito fixo ocasiona o desenvolvimento de picos de temperatura que devem ser controlados de modo a evitar que os mesmos se elevem para além de valores aceitáveis, levando a situações de descontrole que afetam a qualidade do produto final e a economia do processo, e comprometendo a própria segurança operacional do reator. Por isso, torna-se importante o estudo da sensibilidade dos parâmetros de operação, para que seja possível identificar aqueles que ao serem perturbados provocam maior influência nos perfis das variáveis dependentes ao longo do reator, possibilitando assim uma escolha adequada das variáveis a serem controladas e/ou manipuladas. O reator de leito fixo para a oxidação de o-xileno a anidrido ftálico, considerado neste trabalho, constitui um exemplo bem ilustrativo de um sistema que exhibe perfis térmicos complexos e que demandam uma atenção especial em relação ao projeto e ao controle do processo.

Uma vez que o conhecimento do comportamento das variáveis em estado estacionário mostra-se fundamental para a compreensão de problemas associados ao controle do processo e à seleção das variáveis manipuladas, realizou-se um estudo de sensibilidade paramétrica do reator, levando-se em conta o efeito das diversas variáveis de operação sobre os perfis de conversão, concentração e temperatura ao longo do reator. Os resultados obtidos são mostrados nesta seção.

4.4.1 Influência da Temperatura de Entrada da Mistura Reacional (T_0)

Nas Figuras 4.35 a 4.38 estão representados os perfis estacionários de temperatura, conversão do o-xileno e concentração de o-xileno e de anidrido ftálico, respectivamente, para diversas temperaturas de entrada dos reagentes.

A Figura 4.35 evidencia o forte efeito da temperatura de entrada dos reagentes, T_0 , sobre os perfis de temperatura estacionários que se formam ao longo do leito. Na medida em que esta temperatura é aumentada, tem-se uma elevação marcante do perfil, com a formação de picos de temperatura cada vez mais elevados e mais próximos à entrada do reator. Nota-se também que

para valores de T_0 maior do que 659 K o sistema foge de um comportamento estável em malha aberta, apresentando o fenômeno conhecido como “*runaway*”, caracterizado por um disparo do perfil de temperatura (FROMENT e BISCHOFF, 1990).

Analisando-se os perfis de conversão (Figura 4.36) e os correspondentes perfis de concentração de o-xileno (Figura 4.37) e de anidrido ftálico (4.38), verifica-se que a reação ocorre com maior velocidade na região de entrada do reator, acentuando-se esse comportamento à medida que a temperatura de alimentação é aumentada.

Embora os perfis de conversão e de concentrações obtidos para cada valor de T_0 sejam diferentes, os valores de conversão do o-xileno à saída do reator permanecem numa faixa relativamente próxima.

Isso significa que é possível operar com perfis térmicos diferentes que levam ao mesmo efeito em termos de conversão do o-xileno ou de concentração de anidrido ftálico à saída do reator. Na prática, para um processo com essa natureza o que se busca, de fato, é operar o reator com um perfil de temperatura que garanta o nível de conversão necessário para obter-se a composição desejada dos produtos na saída do reator, mantendo-se os requisitos térmicos ótimos para o processo.

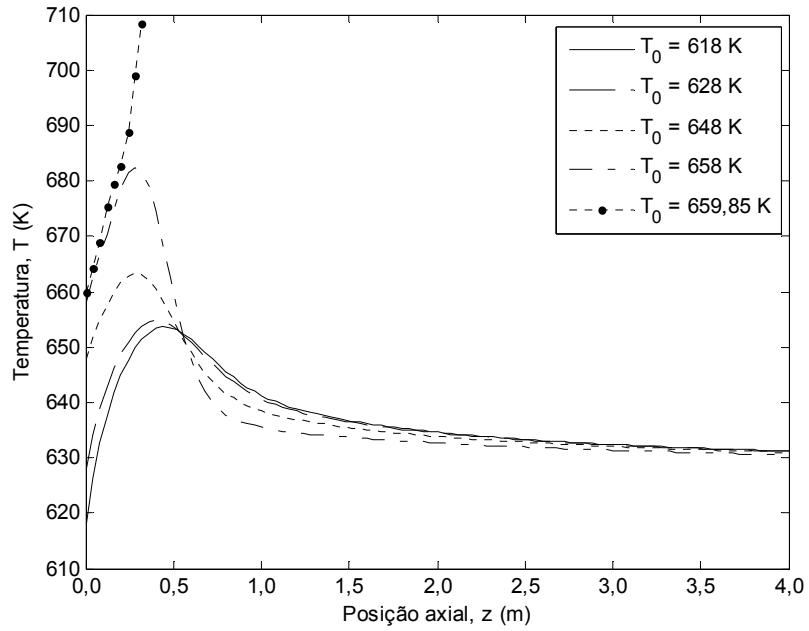


Figura 4.35 - Efeito de T_0 nos perfis de temperatura dos reagentes.

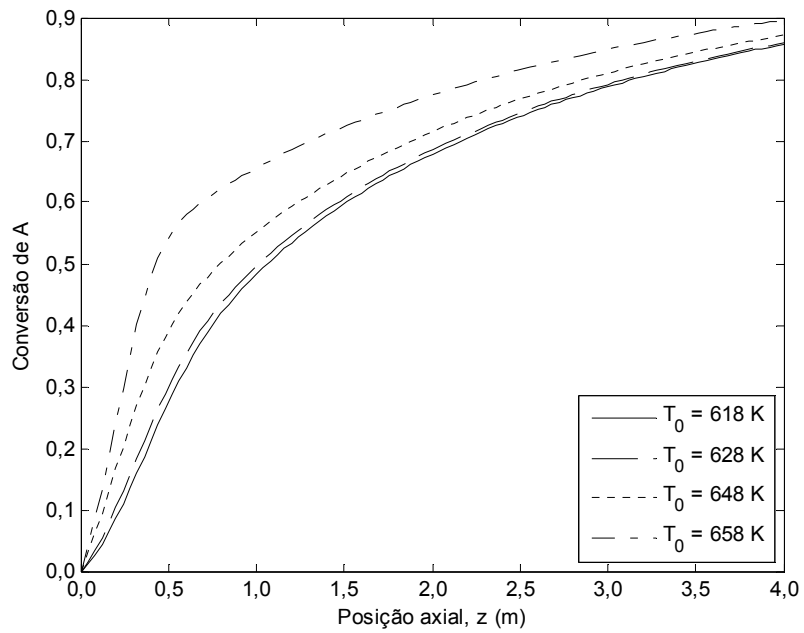


Figura 4.36 - Efeito de T_0 nos perfis de conversão do o-xileno.

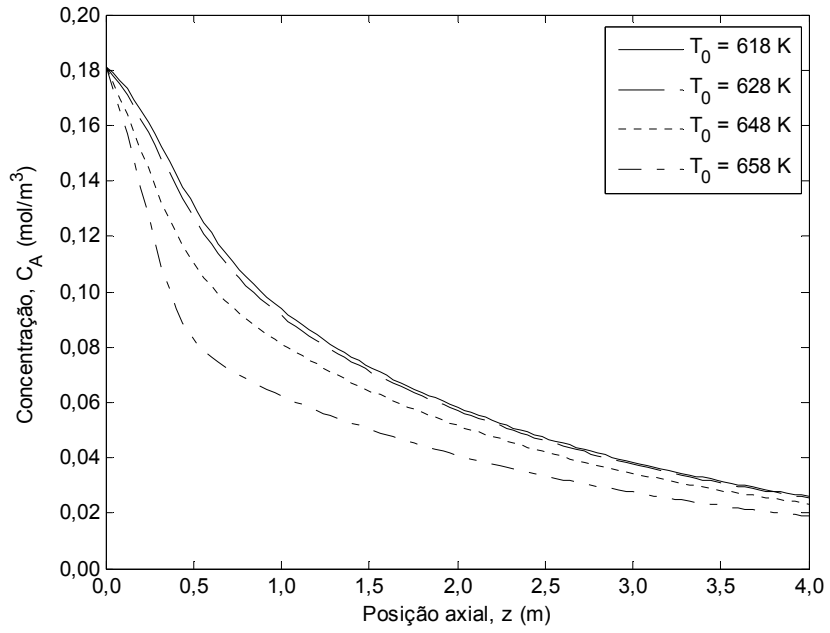


Figura 4.37 - Efeito de T_0 nos perfis de concentração de o-xileno.

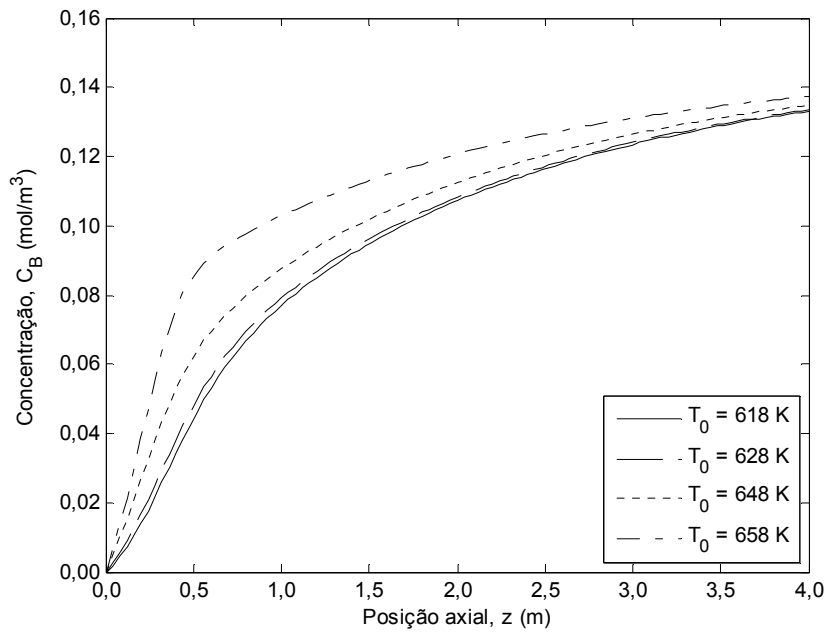


Figura 4.38 - Efeito de T_0 nos perfis de concentração de anidrido ftálico.

4.4.2 Influência da Temperatura de Entrada do Fluido Refrigerante (T_{c0})

Nas Figuras 4.39 a 4.42 estão representados os perfis de temperatura, conversão de o-xileno e concentrações de o-xileno e anidrido ftálico para diversas temperaturas de entrada do fluido refrigerante.

Verifica-se que a temperatura de entrada do fluido refrigerante apresenta forte influência tanto nos perfis de temperatura (Figura 4.39) como nos perfis de conversão (Figura 4.40) e concentrações do o-xileno (Figura 4.41) e anidrido ftálico (Figura 4.42). A diminuição da temperatura de entrada do fluido refrigerante exerce o esperado efeito de reduzir sensivelmente a magnitude do pico de temperatura, o que se mostra importantíssimo do ponto de visto do controle térmico do reator.

Todos os perfis mantêm a mesma forma já observada para o efeito da temperatura de entrada dos reagentes (incluindo-se, também, a possibilidade de ocorrência do fenômeno de *runaway*). Mas deve-se destacar que neste caso os valores das variáveis (temperatura, conversão e concentrações) sofrem uma modificação mais significativa ao longo de todo o comprimento do reator. Isso leva a concluir que mudanças na temperatura de entrada do fluido refrigerante modificam mais intensamente os valores de temperatura e de conversão na saída do reator, diferentemente do que ocorre para mudanças na temperatura de entrada dos reagentes, cuja influência é mais pronunciada à entrada do reator, isto é, na região em que ocorre a formação do pico de temperatura.

Esse comportamento indica que a temperatura de entrada do fluido térmico, T_{c0} , apresenta-se como uma variável manipulada adequada quando o propósito é promover modificações simultâneas nos perfis de temperatura e de conversão ao longo do reator. Isso ocorre porque essa variável é uma das variáveis definidoras da taxa de transferência de calor que é removida do leito catalítico.

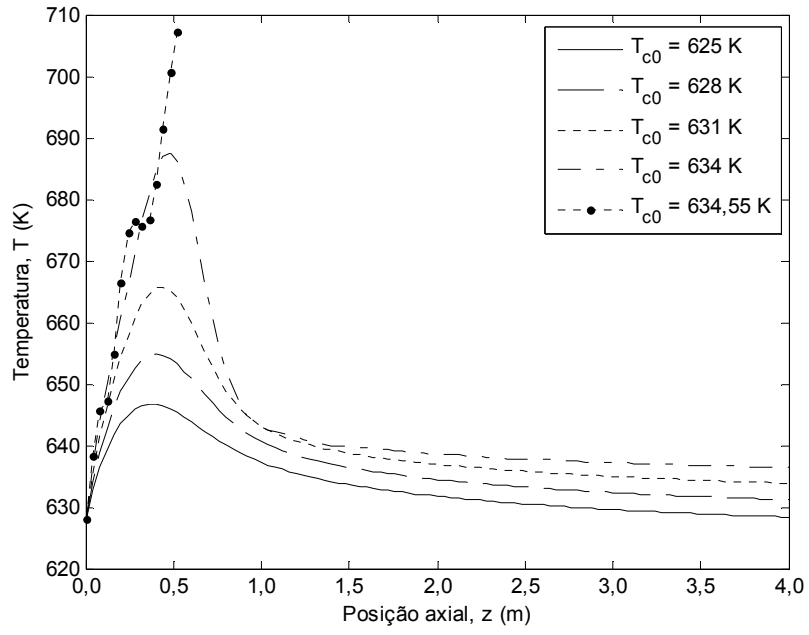


Figura 4.39 - Efeito de T_{c0} nos perfis de temperatura dos reagentes.

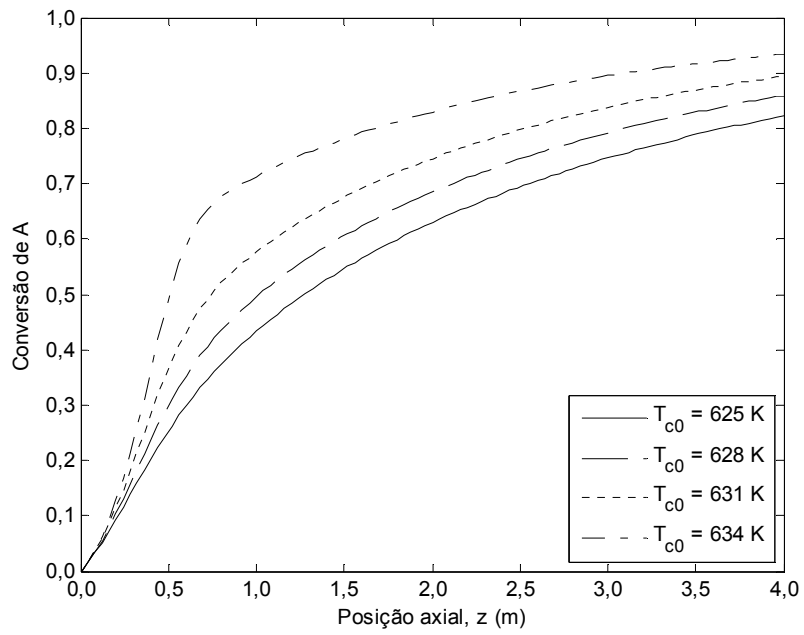


Figura 4.40 - Efeito de T_{c0} nos perfis de conversão do o-xileno.

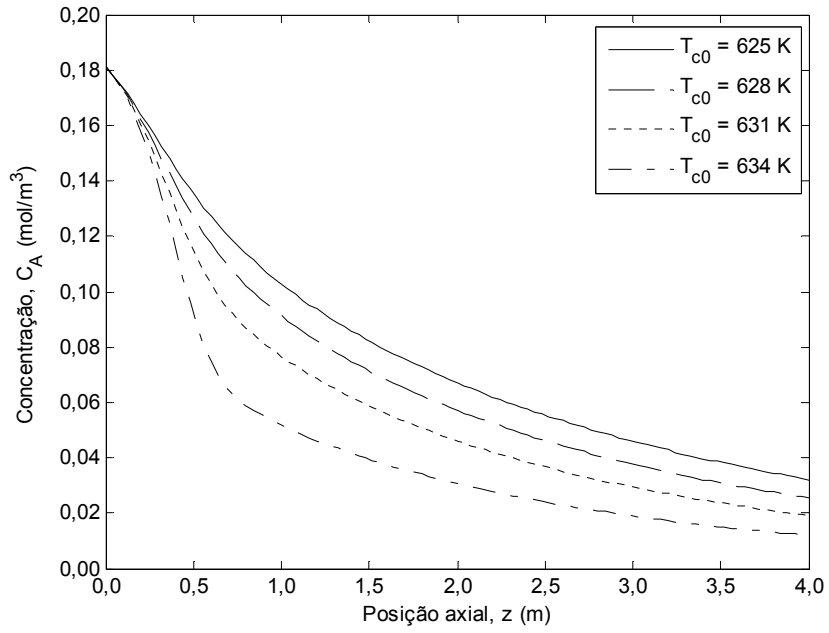


Figura 4.41 - Efeito de T_{c0} nos perfis de concentração de o-xileno.

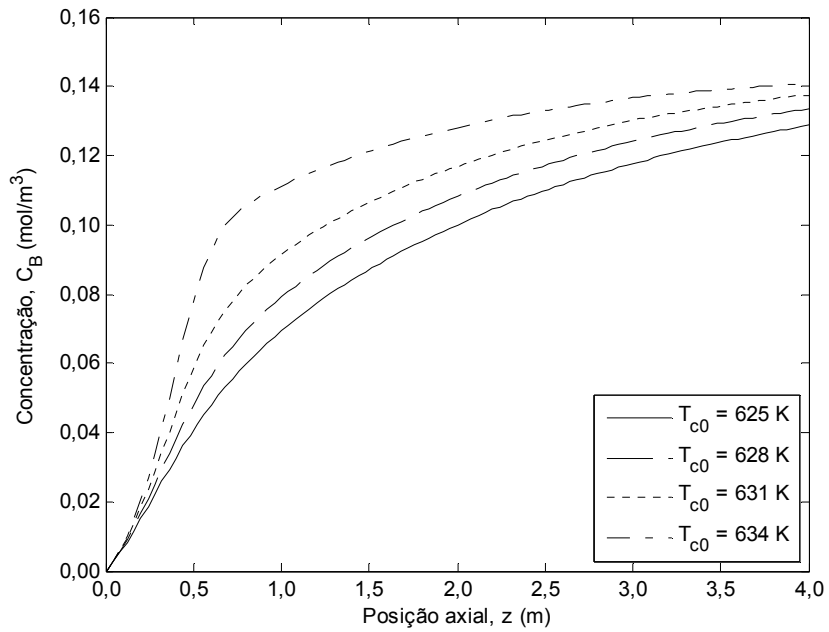


Figura 4.42 - Efeito de T_{c0} nos perfis de concentração de anidrido ftálico.

4.4.3 Influência da Concentração de Entrada do Reagente (C_{A0})

As Figuras 4.43 a 4.46 mostram a influência da concentração de entrada do reagente (o-xileno) nos perfis de temperatura, conversão de o-xileno e concentrações de o-xileno e anidrido ftálico ao longo do leito catalítico. Observam-se perfis de temperatura com um pico (*hot spot*) muito sensível à concentração de entrada do reagente, mas praticamente coincidentes após a região do pico de temperatura, similarmente ao que ocorre com o efeito da temperatura de alimentação dos reagentes (T_0).

Os perfis de conversão do o-xileno (Figura 4.44) e de concentração de o-xileno (Figura 4.45) e anidrido ftálico (Figura 4.46) seguem um comportamento também similar àquele verificado para mudanças em T_0 , mas devendo-se destacar que, neste caso, a conversão de saída apresenta uma sensibilidade bem maior a mudanças em C_{A0} .

Verifica-se também a possibilidade de ocorrência de *runaway* com o aumento no valor de C_{A0} , o que explica a razão por que esta reação é realizada industrialmente partindo-se de uma corrente altamente diluída de o-xileno em ar.

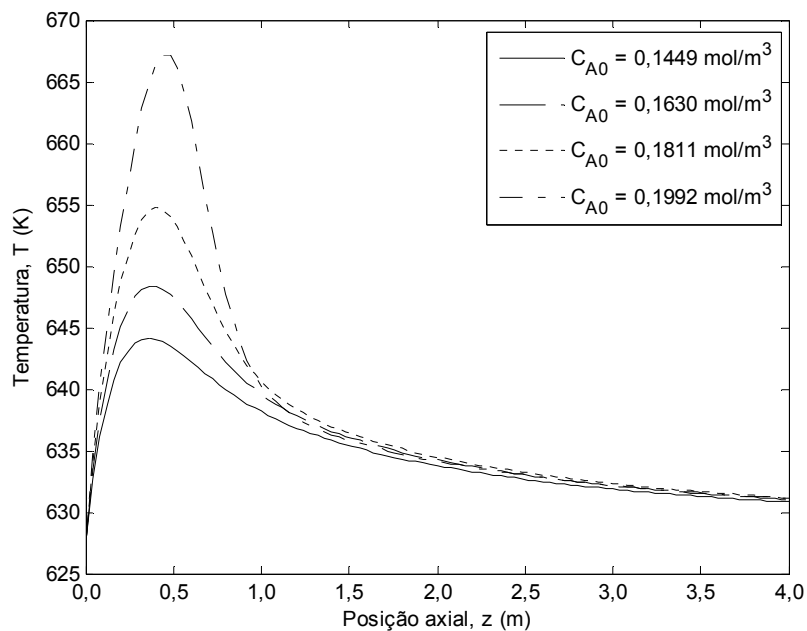


Figura 4.43 - Efeito de C_{A0} nos perfis de temperatura dos reagentes.

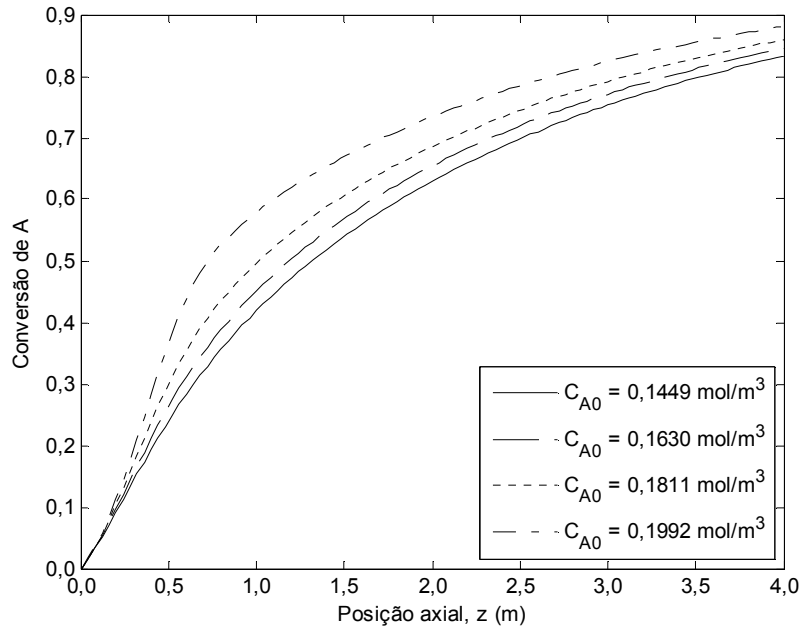


Figura 4.44 - Efeito de C_{A0} nos perfis de conversão do o-xileno.

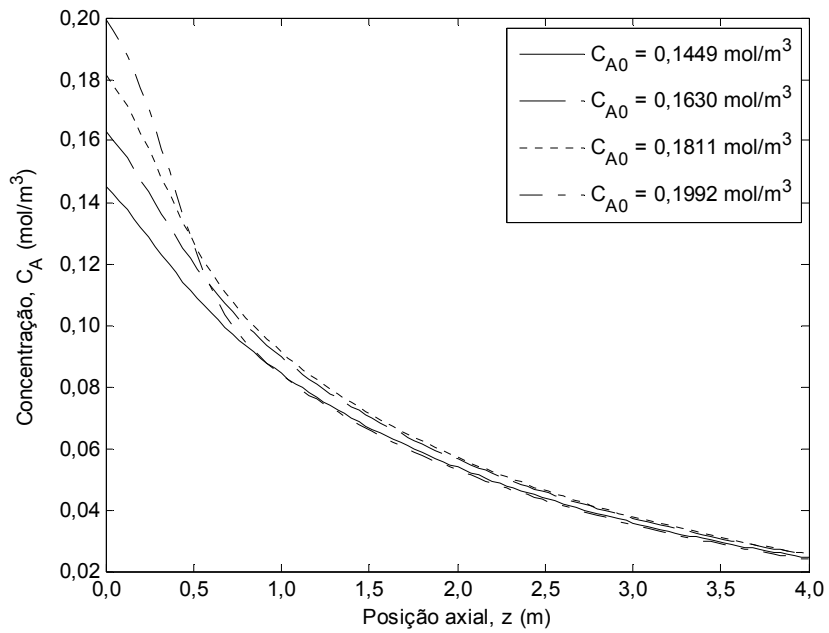


Figura 4.45 - Efeito de C_{A0} nos perfis de concentração de o-xileno.

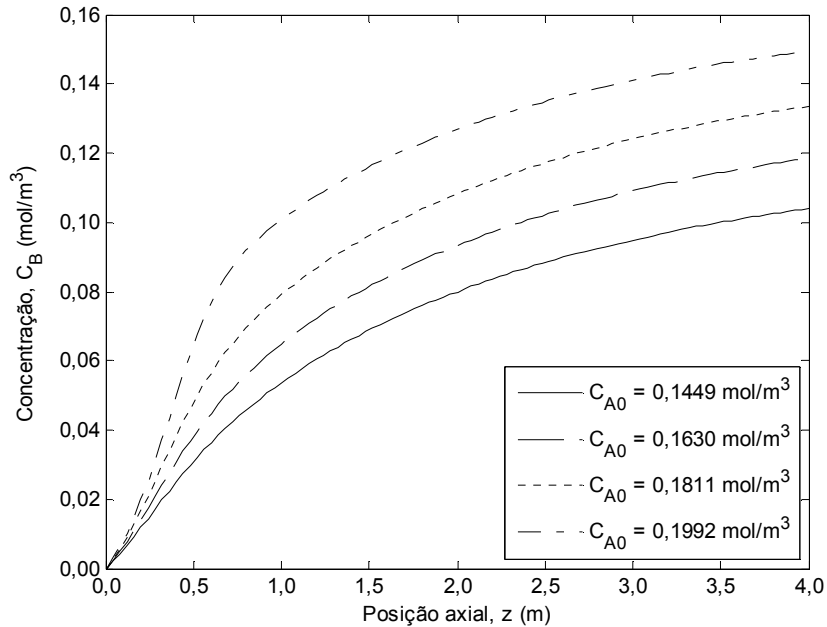


Figura 4.46 - Efeito de C_{A0} nos perfis de concentração de anidrido ftálico.

4.4.4 Influência da Velocidade da Mistura Reacional (v_g)

A velocidade da mistura reacional está diretamente relacionada à vazão dos reagentes que deve ser processada. As Figuras 4.47 a 4.50 mostram a influência desta variável nos perfis de temperatura, de conversão do o-xileno e de concentração de o-xileno e anidrido ftálico ao longo do leito catalítico.

Mudanças na velocidade da mistura reacional geram perfis distintos de conversão e de temperatura ao longo do leito, resultando em valores diferenciados para a conversão e a temperatura de saída. Verifica-se o esperado aumento na conversão de o-xileno para menores valores de v_g , que correspondem a um maior tempo de permanência da mistura reacional no reator. Outra constatação é que não há influência quanto à magnitude do pico de temperatura, a qual praticamente não sofre alteração com mudanças na velocidade da mistura reacional. Entretanto, tem-se um deslocamento axial da posição em que se localiza este pico.

Esses resultados indicam a possibilidade de empregar v_g como variável manipulada para o controle da conversão, mas não para o controle da temperatura.

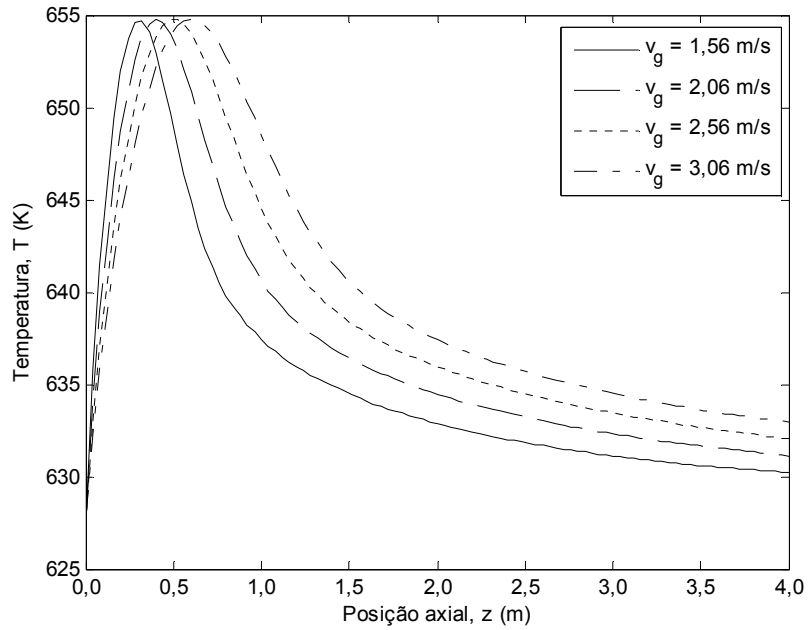


Figura 4.47 - Efeito de v_g nos perfis de temperatura dos reagentes.

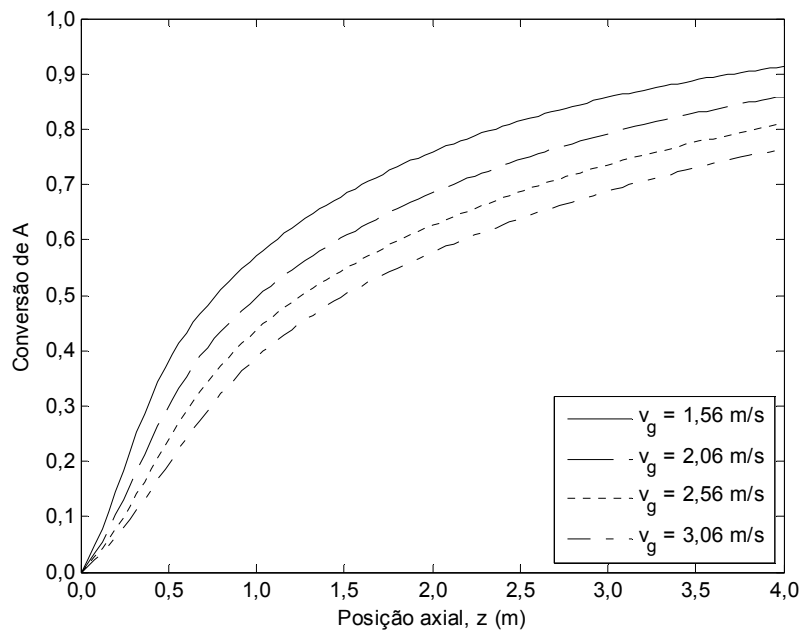


Figura 4.48 - Efeito de v_g nos perfis de conversão do o-xileno.

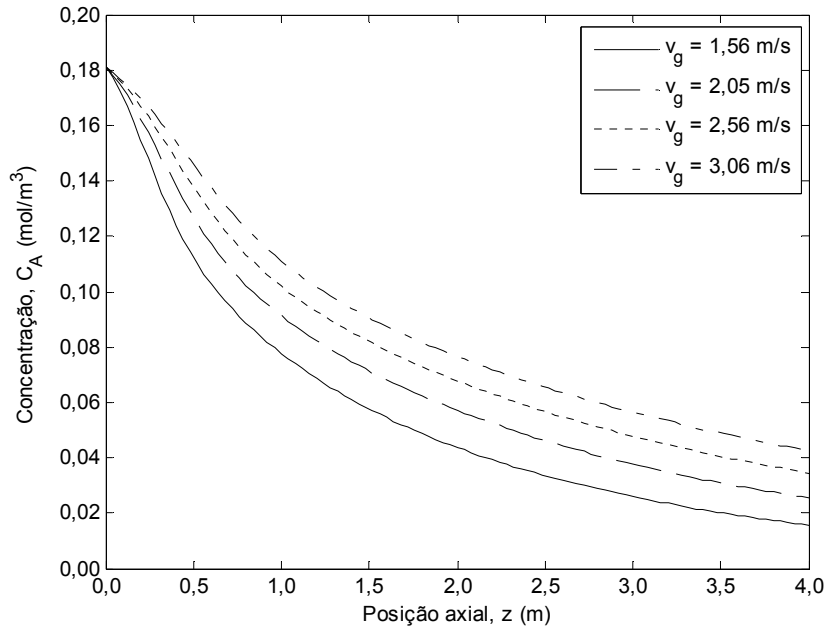


Figura 4.49 - Efeito de v_g nos perfis de concentração de o-xileno.

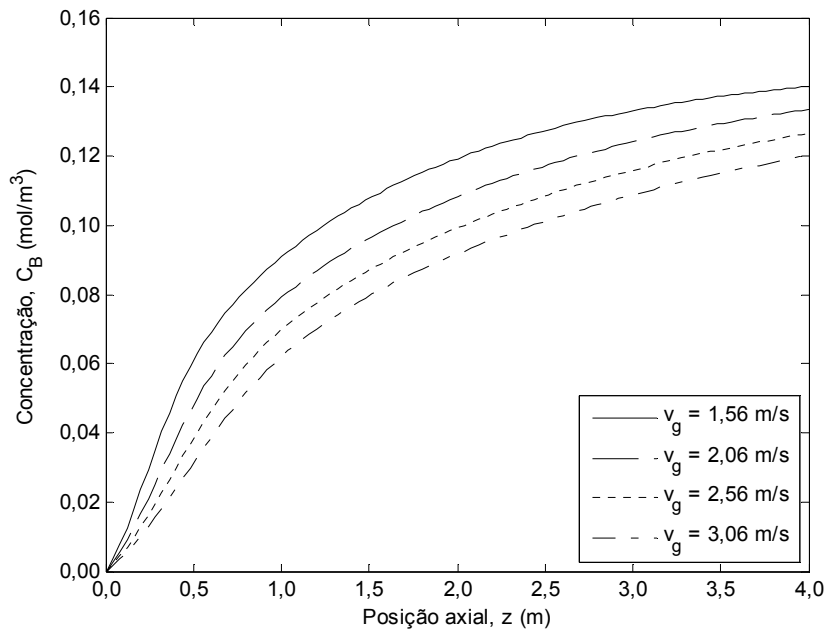


Figura 4.50 - Efeito de v_g nos perfis de concentração de anidrido ftálico.

4.4.5 Influência da Velocidade do Fluido Refrigerante (v_c)

As Figuras 4.51 a 4.54 mostram o efeito da velocidade do fluido refrigerante nos perfis de temperatura, de conversão do o-xileno e de concentração de o-xileno e de anidrido ftálico ao longo do leito. Verifica-se que os perfis obtidos não são afetados por mudanças em v_c , o que caracteriza uma inadequação da velocidade do fluido refrigerante como variável manipulada para o controle do reator.

Os perfis praticamente coincidentes se explicam pelo fato de que o fluido térmico considerado tem uma alta capacitância térmica. Assim, mesmo mudanças significativas em v_c não modificam o valor do parâmetro φ_2 , dado pela Equação (3.79), que tem sua magnitude predominantemente definida pelo produto $\rho_c C_{pc}$. O valor desse produto é bastante elevado para o fluido térmico considerado ($C_c = \rho_c C_{pc} = 1851,456 \times 483,559 = 895288 \text{ J m}^{-3} \text{ K}$) frente ao valor para o fluido reacional ($C_g = \rho_g C_{pg} = 0,582 \times 1045 = 608,19 \text{ J m}^{-3} \text{ K}$). Com essa condição física ($C_c \gg C_g$), o fluido térmico absorve uma grande taxa de calor sem sofrer mudanças sensíveis em sua temperatura, caracterizando uma situação operacional especial em que a troca térmica é realizada do leito catalítico para um meio fluido a uma temperatura aproximadamente constante ao longo do reator.

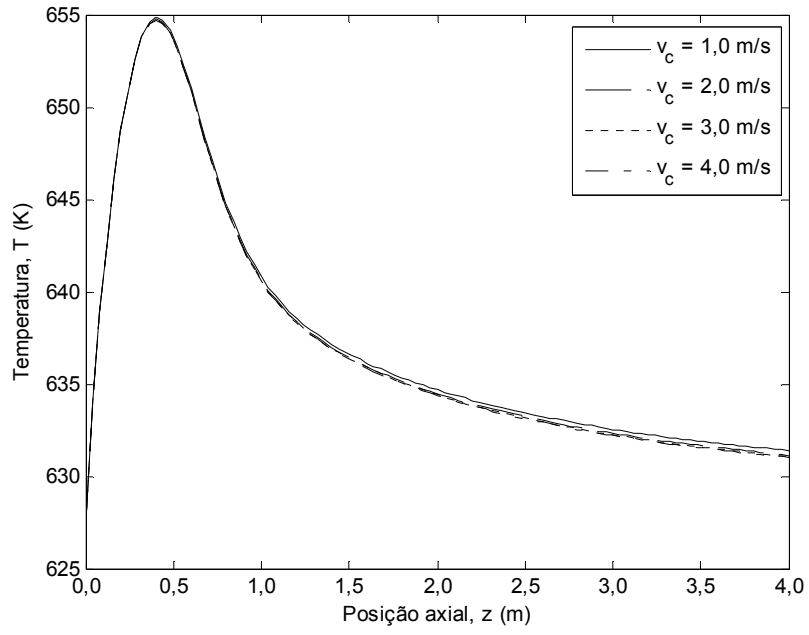


Figura 4.51 - Efeito de v_c nos perfis de temperatura dos reagentes.

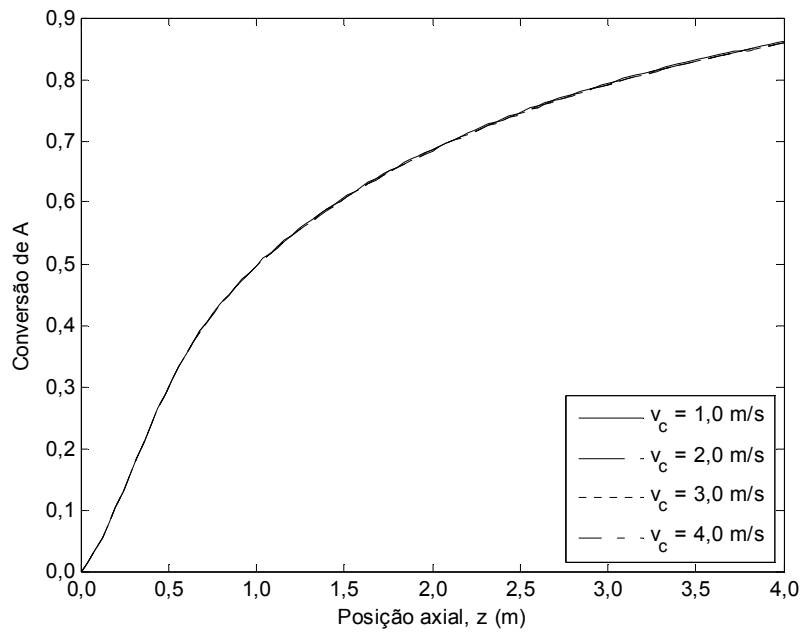


Figura 4.52 - Efeito de v_c nos perfis de conversão do o-xileno.

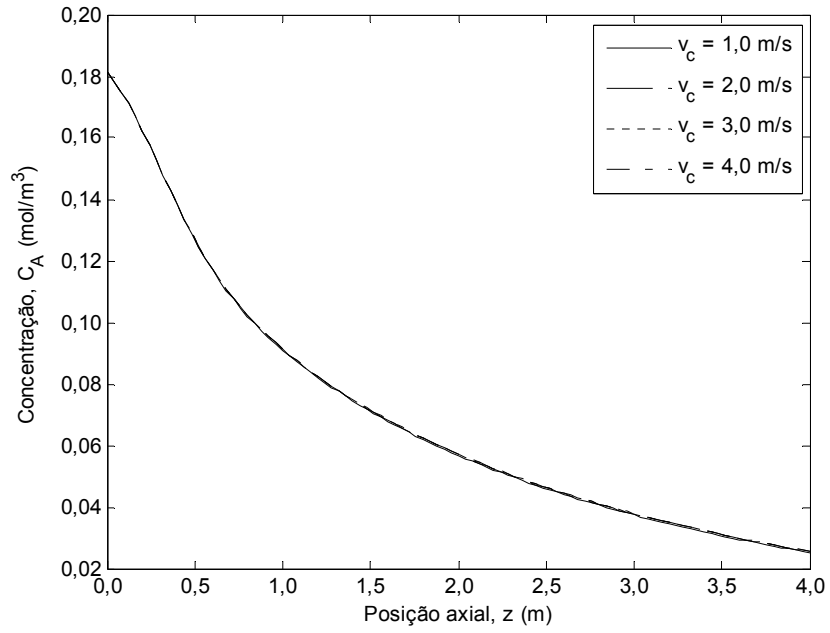


Figura 4.53 - Efeito de v_c nos perfis de concentração de o-xileno.

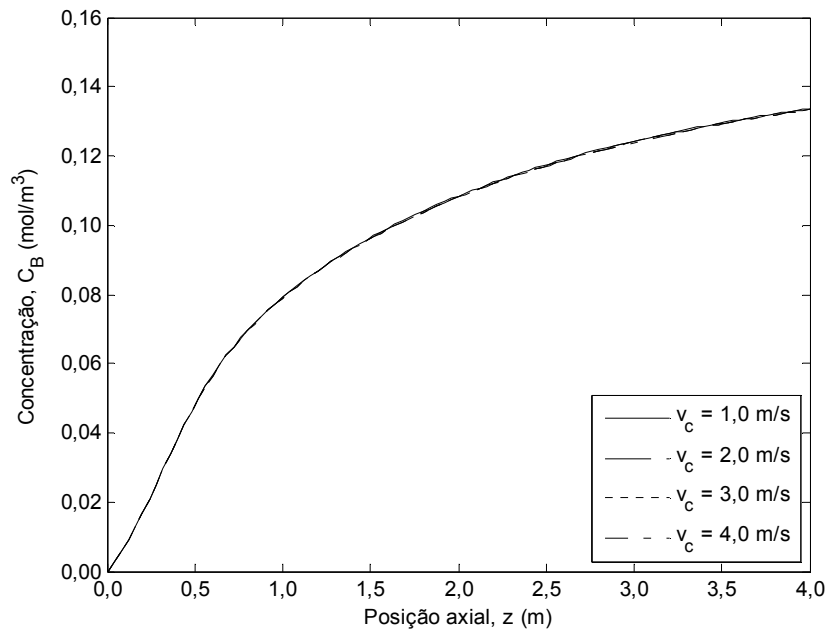


Figura 4.54 - Efeito de v_c nos perfis de concentração de anidrido ftálico.

4.5 Conclusões

Neste capítulo, apresentou-se um estudo extensivo do comportamento dinâmico do reator de leito fixo para síntese de anidrido ftálico e da sensibilidade paramétrica das variáveis relevantes do processo.

O estudo de sensibilidade permitiu concluir que perturbações nas variáveis T_{c0} , T_0 e C_{A0} têm uma grande influência nos perfis de temperatura, notadamente na região próxima à entrada do reator, onde se desenvolve o pico de temperatura (*hot spot*). Em relação a T_{c0} especificamente, verifica-se que seu efeito se dá em termos da evolução de perfis de temperatura diferentes não apenas na região do pico, mas ao longo de todo o leito. Quanto aos perfis de concentração estes são mais afetados pelas variáveis T_{c0} e C_{A0} .

A velocidade do fluido reacional (v_g) afeta fortemente a concentração do produto na saída do reator, porém sua influência na magnitude do pico de temperatura é insignificante. Já a velocidade do fluido refrigerante (v_c) não apresenta influência nos perfis de concentração e de temperatura, por conta das características do fluido refrigerante considerado, o qual constitui um sistema de arrefecimento especial, adequado para a remoção de calor em reatores onde ocorrem reações fortemente exotérmicas.

Para todas as condições simuladas, representativas da faixa em que o sistema é comumente operado industrialmente, verificou-se que o pico de temperatura se forma próximo à região de entrada do reator. Essa observação permite delinear a localização preferencial de medidas de temperatura em posições nesta região, visando ao acompanhamento e ao controle das condições térmicas no leito.

As informações obtidas do estudo de sensibilidade paramétrica são fundamentais para a definição de estruturas regulatórias eficientes, visando ao controle da composição dos produtos e do regime térmico do reator. No próximo capítulo as estratégias *feedback* consideradas neste trabalho para o controle do reator de síntese de anidrido ftálico são apresentadas.

CAPÍTULO 5: CONTROLE DO REATOR DE SÍNTESE DE ANIDRIDO FTÁLICO

5.1 Introdução

Neste capítulo apresentam-se algumas estratégias de controle *feedback* aplicadas ao reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico, cujas características operacionais, a modelagem matemática e a sensibilidade paramétrica foram apresentadas nos capítulos anteriores. São consideradas duas estruturas de controle empregando as ações proporcional e integral na forma convencional e com lógica *fuzzy*. Na primeira estrutura considera-se um esquema de controle direto em que apenas a variável controlada é medida, enquanto que na segunda propõe-se um esquema cascata em que a variável controlada e a temperatura em quatro posições ao longo do leito são medidas.

A lógica *fuzzy*, conforme já destacado, tem sido uma opção considerada nas duas últimas décadas, para o projeto de estruturas de controle eficientes em diversas áreas tecnológicas, com muitas aplicações bem sucedidas em alguns processos da engenharia química. Com o propósito de verificar sua aplicabilidade ao controle do reator de leito fixo para síntese de anidrido ftálico, considerou-se o controle por lógica *fuzzy* na forma convencional, empregando-se o método de inferência do tipo Mamdani. As ideias fundamentais referentes à lógica *fuzzy* são abordadas panoramicamente nesta parte do trabalho.

Os elementos básicos da teoria envolvida e as estruturas de controle propostas para o reator encontram-se descritas em conjunto com a sequência de todos os cálculos envolvidos em sua implementação computacional. Assume-se que o objetivo do controle é manter a concentração de anidrido ftálico na saída do reator (C_B) em um valor de referência (*set point*). Entretanto, é também de interesse verificar, ao mesmo tempo, a eficiência de cada um dos controladores em evitar a formação de picos de temperatura (*hot spot*) elevados no leito catalítico, de modo a garantir uma operação térmica ótima do ponto de vista da economia e da segurança do processo. Esses requisitos operacionais, em geral, são aqueles desejados na prática

industrial de reatores de leito fixo nos quais são realizadas reações fortemente exotérmicas (KARAFYLLIS e DAOUTIDIS, 2002; CHOU e WU, 2007).

5.2 O Controle PID

Uma estrutura básica simplificada de um sistema de controle *feedback* encontra-se representada na Figura 5.1, sendo r o valor de referência (*set point*), y o valor de saída do processo (variável medida), e o erro (diferença entre o valor de *set point* e aquele medido) e u o valor do sinal de saída do controlador (variável manipulada).

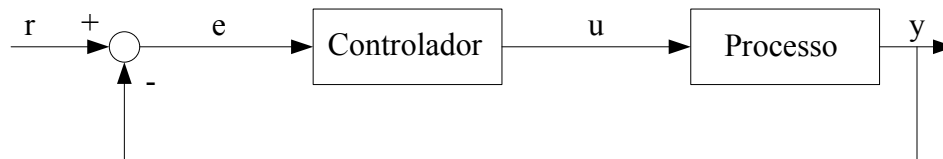


Figura 5.1 - Representação simplificada de um sistema de controle *feedback*.

A estratégia de controle por realimentação ou *feedback* tem como característica básica a atuação do controlador após a detecção de um erro na variável controlada. Este erro constitui a variável de entrada do controlador, e pode-se definir, com base nele, leis de controle para manipular alguma variável de processo que permita restabelecer o valor desejado da variável controlada.

A lei de controle do tipo PID é formada pela soma de três ações de controle construídas a partir do erro: a ação proporcional (P) que é responsável pela estabilização da variável, atuando em função do erro presente; a ação integral (I) que é responsável pela eliminação do erro de regime permanente (*offset*), atuando com base no erro passado; e a ação derivativa (D) que tem a função de aumentar a rapidez da ação proporcional, atuando em função da projeção de erro

futuro. O erro é determinado pela diferença entre o valor de referência (*set point*) e o valor de saída do processo (variável controlada) medido por um elemento sensor.

O sinal de saída do controlador PID é o resultado da soma das três ações de controle (P+I+D), e sua representação na forma contínua é dada pela relação:

$$u(t) = K_P e(t) + K_I \int_0^t e(t) dt + K_D \frac{de(t)}{dt} \quad (5.1)$$

Sendo:

$u(t)$	sinal de saída do controlador;
$e(t)$	erro (valor de <i>set point</i> – valor medido);
K_P	ganho proporcional ($K_P = K_c$);
K_I	ganho integral ($K_I = K_c/\tau_i$);
K_D	ganho derivativo ($K_D = K_c\tau_d$);
τ_i	tempo integral;
τ_d	tempo derivativo.

Considerando-se aproximações de primeira ordem e um tempo de amostragem T_s , a Equação (5.1) pode ser escrita na forma discretizada, dada por:

$$u(kT_s) = K_P e(kT_s) + K_I \sum_{i=0}^k e(iT_s) T_s + K_D \frac{e(kT_s) - e((k-1)T_s)}{T_s} \quad (5.2)$$

Uma maneira de contornar a possibilidade de saturação do sinal de controle em razão dos valores elevados que o somatório resultante da discretização da integral pode assumir é escrever a Equação (5.2) na forma incremental, conforme a seguinte expressão (NASCIMENTO e YONEYAMA, 2000):

$$u((k+1)T_s) - u(kT_s) = K_p [e((k+1)T_s) - e(kT_s)] + K_I T_s e((k+1)T_s) + \frac{K_D}{T_s} [e((k+1)T_s) - 2e(kT_s) + e((k-1)T_s)] \quad (5.3)$$

ou

$$u_{k+1} = u_k + b_0 e_{k+1} + b_1 e_k + b_2 e_{k-1} \quad (5.4)$$

Sendo $u_k = u(kT_s)$ e $u_{k+1} = u((k+1)T_s)$.

$$b_0 = K_p + K_I T_s + \frac{K_D}{T_s} \quad (5.5)$$

$$b_1 = -\left(K_p + 2 \frac{K_D}{T_s} \right) \quad (5.6)$$

$$b_2 = \frac{K_D}{T_s} \quad (5.7)$$

O mesmo resultado é obtido diferenciando-se a Equação (5.1) e resolvendo-a por diferenças finitas.

Uma das razões que motiva o grande uso industrial do controle PID é a simplicidade da lei de controle expressa pela Equação (5.1). O problema consiste, então, em determinar os parâmetros de sintonia (K_c , τ_i e τ_d) que definem o comportamento dinâmico do controlador. Para isso, dispõe-se de um conjunto de métodos que usam formas distintas de determinação dessas constantes e que definem sistemáticas para a sintonia do controlador. Dentre estes métodos, podem ser destacados os métodos clássicos de Ziegler-Nichols e aquele que procede por simples tentativa e erro.

Para tornar o processo de determinação ou ajuste desses parâmetros o menos exaustivo possível deve-se levar em conta a influência que cada um deles tem no desempenho do controlador. O aumento do ganho do controlador (K_c) aumenta a velocidade de resposta e reduz o erro permanente (*offset*), mas valores muito elevados conduzem a uma resposta oscilatória. A

redução do tempo integral (τ_i) aumenta o ganho integral (K_I) e como consequência a velocidade de redução do *offset*, enquanto que o aumento de τ_i leva a uma condição de oscilação. A ação derivativa atua no sentido de diminuir o sobressinal e o tempo de estabilização, sendo usada principalmente em processos lentos, com grandes tempos mortos. No entanto, o aumento excessivo no tempo derivativo (τ_d), que corresponde a um aumento no ganho derivativo (K_D), a exemplo do que ocorre com as outras ações, pode causar problemas de controle, principalmente quando o processo exibe respostas muito rápidas. O método de sintonia dos parâmetros, portanto, deve conduzir a valores dos parâmetros que garantam o bom desempenho do controlador.

5.3 Controle Cascata e Controle Seletivo

Em determinadas situações de processo o controle por realimentação não fornece o desempenho requerido, sendo necessário utilizar estratégias avançadas.

O controle cascata é uma das estratégias que melhoram significativamente o desempenho que se obtém com a utilização do controle por realimentação, e o mesmo tem sido aplicado com resultados muito satisfatórios em determinadas situações (SMITH e CORRIPIO, 2008). Para Luyben (1990), o controle cascata constitui um dos conceitos mais úteis em controle avançado, e o mesmo tem como propósitos: eliminar o efeito de algumas perturbações e melhorar o desempenho dinâmico da malha de controle. Na Figura 5.2b é mostrada uma estrutura básica de controle cascata aplicada ao controle de temperatura em uma coluna de destilação (LUYBEN, 1990). A estrutura considerada tem o papel de eliminar efeitos de perturbação na pressão do suprimento de vapor para o refeedor. Conforme descrito por Luyben (1990), quando ocorrem aumentos na pressão de suprimento de vapor a queda de pressão através da válvula de controle torna-se maior, levando a um aumento na vazão de vapor para o refeedor. Caso fosse empregado um controlador de temperatura de malha simples (ilustrado na Figura 5.2a), nenhuma correção seria efetuada até que a vazão de vapor aumentasse a taxa de líquido vaporizado e esta maior taxa de vapor formado começasse a aumentar a temperatura no quinto prato, o que implicaria em uma perturbação do sistema todo por conta de uma mudança na pressão do suprimento de vapor. Ao empregar-se a estrutura cascata (Figura 5.2b), o controlador de fluxo de

vapor perceberá imediatamente o aumento na vazão de vapor e atuará na válvula de modo a restabelecer a vazão ao seu *set point*. O resultado disso é que o refeedor e a coluna serão afetados apenas levemente em decorrência de mudanças na pressão do suprimento de vapor. Isso confere à estrutura cascata características da ação de controle antecipativa (*feedforward*).

Outra estratégia de controle avançado é aquela conhecida como controle seletivo (chamada na prática de “controle leiloeiro”), considerada industrialmente para o controle de temperatura em reatores de leito fixo. Essa estratégia encontra-se ilustrada na Figura 5.3.

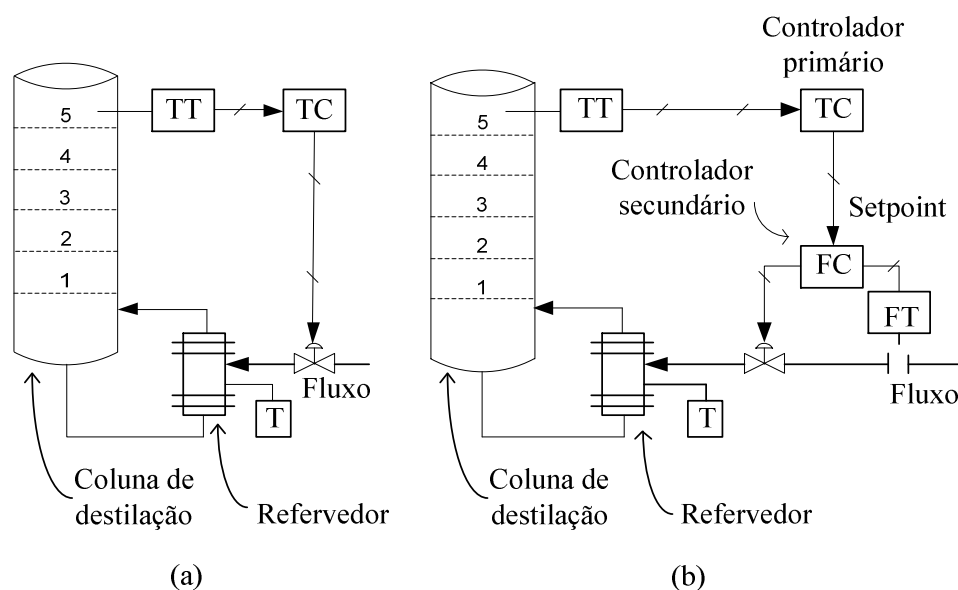


Figura 5.2 - Controle em coluna de destilação: (a) malha simples e (b) esquema cascata.

Fonte: Adaptada de Luyben (1990).

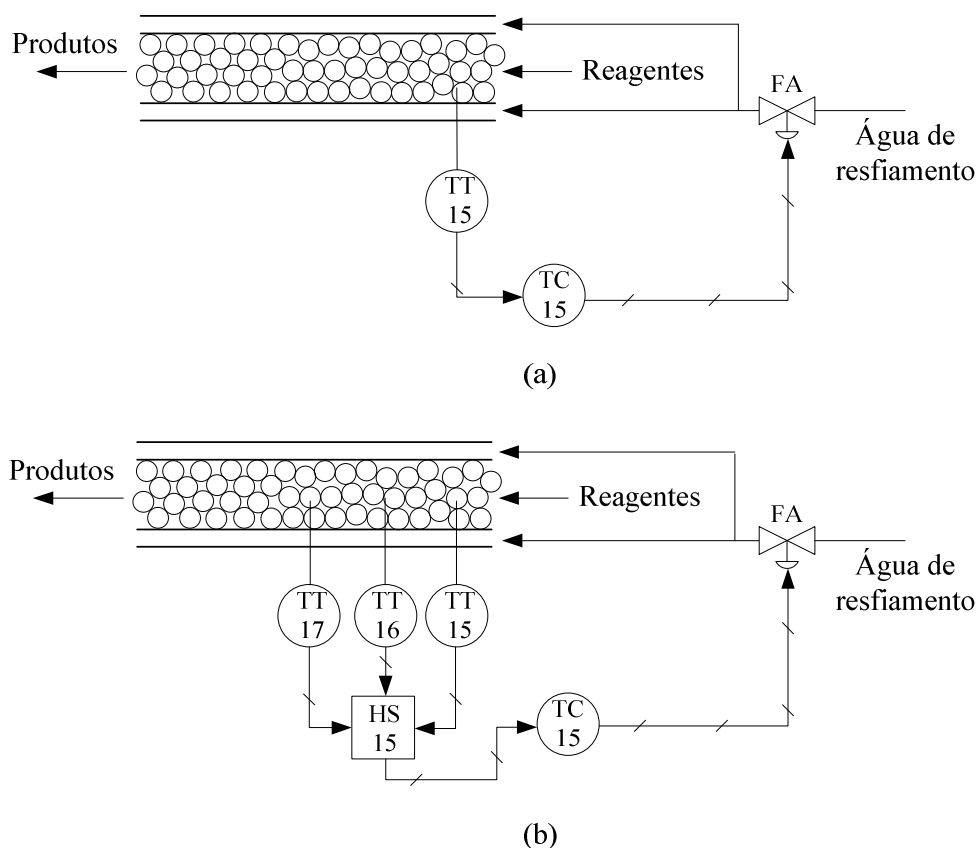


Figura 5.3 - Controle em reator tubular: (a) malha simples e (b) esquema seletivo.

Fonte: Adaptada de Smith e Corripio (2008).

Os sinais de temperatura tomados em posições ao longo do reator são enviados para um seletor de alta e a temperatura mais alta é enviada ao controlador de temperatura cuja saída proporciona a manipulação da vazão do fluido refrigerante. Considerando-se o caso de reações fortemente exotérmicas, as localizações para a medida da temperatura são próximas à entrada do reator, onde a reação ocorre com maior intensidade. Com essa estratégia de controle, portanto, pode-se controlar o pico de temperatura. Em algumas situações, o controle seletivo é utilizado também para estabelecer um mecanismo de compensação do perfil de temperatura frente à desativação catalítica. Assim, em função das temperaturas medidas ao longo do leito, o sistema de controle deve atuar para elevar o perfil de temperatura de modo a superar a desativação do catalisador e garantir os níveis de conversão na saída do reator.

O controle seletivo é interessante quando o objetivo se resume ao controle da temperatura, isto é, para manter uma condição térmica ao longo do leito que garanta ao mesmo tempo os requisitos de segurança do processo e a composição desejada na saída do reator.

É possível construir estruturas de controle robustas a partir de estratégias *feedback*, tais como os controles cascata e seletivo, aqui ilustrados. Urrea et al. (2008) e Hernandez-Martinez et al. (2010), por exemplo, exploram a potencialidade do controle cascata, considerando a aplicação de estruturas do tipo concentração-temperatura ao controle de reatores tubulares.

Embora estruturas desse tipo não deem em geral o mesmo desempenho que se obtém com técnicas modernas, “sua principal vantagem é sua simplicidade, uma vez que sua construção é baseada em esquemas de controle industrial bem conhecidos e aceitos, que podem levar a um esquema de controle prático capaz de fazer frente ao problema de compromisso entre capacidade de desempenho e complexidade computacional” (URREA et al., 2008).

5.4 Controle PI para o Reator

Neste trabalho, para o controle do reator de síntese de anidrido ftálico, foram inicialmente considerados controladores convencionais do tipo PI, aplicados segundo dois esquemas: uma estrutura simples envolvendo o controle direto da concentração de anidrido ftálico na saída do reator e uma estrutura cascata do tipo concentração-temperatura. Em todas as estruturas, tomou-se como variável manipulada a temperatura de entrada do fluido térmico. Essa configuração utilizando-se a temperatura de entrada do fluido térmico como variável manipulada para o controle de reatores de leito fixo tem sido considerada em alguns trabalhos da literatura (HUA e JUTAN, 2000; URREA et al., 2008; HERNANDEZ-MARTINEZ et al., 2010). Mas deve-se destacar que a manipulação da temperatura de entrada de um fluido térmico é algo que se mostra de difícil operacionalização no contexto industrial, e implicaria na necessidade de um processo adicional para realizar a mudança desta temperatura.

Na prática, o controle de reatores envolvendo reações fortemente exotérmicas é normalmente realizado manipulando-se a vazão de um fluido refrigerante com capacitância

térmica adequada para promover a taxa de transferência de calor necessária à manutenção das condições térmicas requeridas para a operação do sistema.

5.4.1 Controle Direto

Nesta estrutura, o objetivo é controlar a concentração de anidrido ftálico na saída do reator (C_B) utilizando-se uma malha simples, com medida desta variável e manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante (T_{c0}), conforme indicado na Figura 5.4. Nenhuma informação acerca das temperaturas ao longo do leito é incluída na formulação do controle.

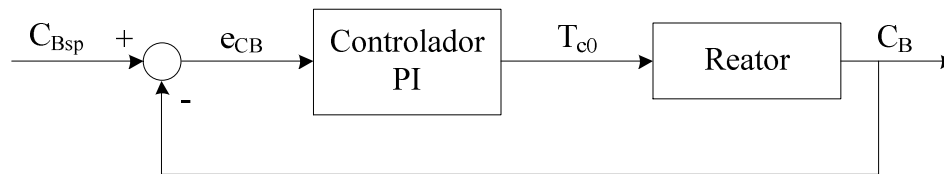


Figura 5.4 - Estrutura de controle direto da concentração de anidrido ftálico.

A lei de controle PI para este caso, com base nas Equações (5.4)-(5.7), é dada por:

$$(T_{c0})_k = (T_{c0})_{k-1} + K_c \left[\left(1 + \frac{T_s}{\tau_i} \right) (e_{CB})_k - (e_{CB})_{k-1} \right] \quad (5.8)$$

Com $k = 1, 2, \dots, n$, representando os instantes de amostragem.

Nesta estrutura de controle, portanto, o problema consiste em determinar os valores adequados dos parâmetros de sintonia (K_c e τ_i), buscando-se a estabilização da variável controlada, C_B , em sua condição de *set point*, frente a modificações nas variáveis de perturbação, T_0 e C_{A0} , mediante manipulação da temperatura de entrada do fluido refrigerante, T_{c0} .

5.4.2 Controle Cascata

Do estudo de sensibilidade paramétrica, realizado no capítulo anterior, verificou-se que a concentração de saída de anidrido ftálico muda muito pouco para as diferentes condições dentro da faixa operacional. Isso evidencia que o maior problema na operação do reator não é, de fato, o controle da composição da corrente de saída, mas sim o controle do perfil de temperatura.

O uso de controle seletivo de temperatura, que constitui uma solução usual em algumas situações práticas, seria suficiente para regular o perfil de temperatura ao longo do leito. No entanto, apesar de ser suficiente em alguns processos, nos quais se assegura um dado nível de conversão dos reagentes a partir de uma condição térmica no leito, essa estratégia não garante a manutenção da mesma composição do produto na saída do reator.

Em função do bom desempenho que uma estrutura de controle cascata pode apresentar em determinadas situações, conforme destacado na seção anterior, considerou-se uma estrutura de controle cascata do tipo concentração-temperatura para o reator de síntese de anidrido ftálico.

A estrutura proposta tem como objetivo básico a regulação da concentração do anidrido ftálico na saída do reator frente a distúrbios nas condições de entrada da carga reagente. Como objetivo associado, busca-se a manutenção de uma operação térmica sem a formação de picos de temperatura elevados ao longo do reator.

Na formulação do controle são consideradas as medidas das temperaturas T_1 , T_2 , T_3 e T_4 nas posições z_1 , z_2 , z_3 e z_4 ao longo do reator para cada instante de amostragem, e a média aritmética (T_m) dessas temperaturas é usada no controle. O uso da média permite captar com maior representatividade a situação térmica da região onde se desenvolve o pico de temperatura. Hernandez-Martinez et al. (2010) utilizam essa sistemática em seu estudo, mostrando o melhor desempenho do controlador quando se considera um valor médio ponderado das temperaturas tomadas em três posições diferentes. No desenvolvimento deste trabalho também foram feitos alguns testes computacionais comparando o esquema que inclui o valor médio da temperatura em quatro posições com versões em que a temperatura é medida em uma única posição ou quando o controle é seletivo do maior valor das quatro temperaturas medidas. Os resultados obtidos

demonstraram o melhor desempenho da estrutura cascata com o valor médio (T_m) das quatro temperaturas (Apêndice B).

A Figura 5.5 mostra a representação esquemática da estrutura de controle cascata proposta, constituída por duas malhas, uma denominada de malha primária ou principal, e a outra denominada de malha secundária ou “escrava”.

A malha principal, para o controle da concentração de anidrido ftálico na saída do reator, tem como variável de entrada do controlador primário PI o erro (e_{CB}) entre o valor de referência (*set point*) da concentração de anidrido ftálico (C_{Bsp}) e o valor C_B medido, e como variável de saída a temperatura de referência ou *set point* dinâmico (T_{ref}) da malha secundária.

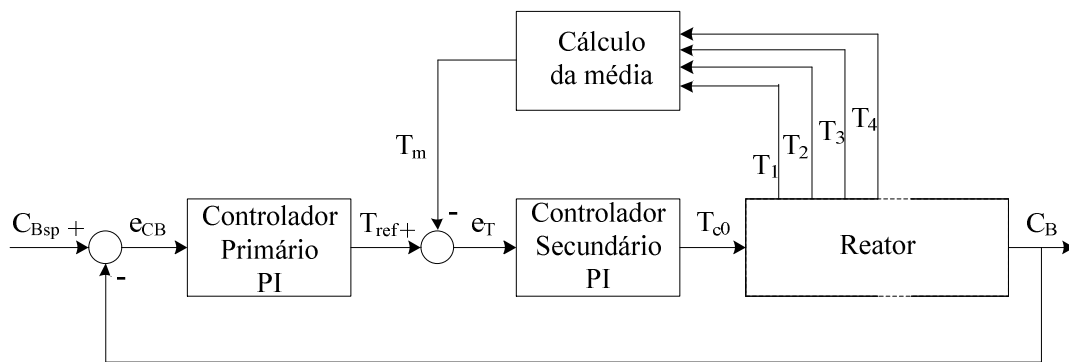


Figura 5.5 - Representação esquemática do controlador cascata.

A malha secundária exerce um papel antecipatório na detecção de distúrbios, reduzindo os efeitos destes na variável de processo controlada. Por esse viés, obtém-se também o controle da temperatura do leito, evitando-se a ocorrência de picos excessivos de temperatura, os quais não poderiam ser contidos com um controle direto com medida apenas da concentração de anidrido ftálico na saída do reator. Esta malha é constituída, também, por um controlador do tipo PI tendo como variável de entrada o erro (e_T) entre uma temperatura de referência (T_{ref}), calculada pela malha principal, e a média (T_m) das quatro temperaturas, medidas na região de localização do

pico de temperatura, e como variável de saída a temperatura de entrada do fluido refrigerante (T_{c0}), que é a variável manipulada do processo.

As leis de controle dos controladores PI secundário e primário que compõem a estrutura cascata proposta (Figura 5.5), são dadas pelas relações:

$$(T_{c0})_k = (T_{c0})_{k-1} + K_{c2} \left[\left(1 + \frac{T_s}{\tau_{i2}} \right) (e_T)_k - (e_T)_{k-1} \right] \quad (5.9)$$

$$(T_{ref})_k = (T_{ref})_{k-1} + K_{c1} \left[\left(1 + \frac{T_s}{\tau_{i1}} \right) (e_{CB})_k - (e_{CB})_{k-1} \right] \quad (5.10)$$

Sendo:

- K_{c1} ganho do controlador primário;
- K_{c2} ganho do controlador secundário;
- τ_{i1} tempo integral do controlador primário;
- τ_{i2} tempo integral do controlador secundário.

Nesta estrutura de controle cascata, portanto, o problema consiste em determinar os valores adequados dos parâmetros de sintonia K_{c1} , K_{c2} , τ_{i1} e τ_{i2} , para que se atinja o bom desempenho do controle cascata concentração-temperatura.

5.5 O Controle *Fuzzy*

Um dos objetivos deste trabalho foi fazer a aplicação de lógica *fuzzy* ao controle do reator de leito fixo para síntese de anidrido ftálico, de modo a analisar o desempenho de controladores

que utilizam esta ferramenta de cálculo, bastante explorada e aplicada atualmente em diversos domínios tecnológicos.

Na seção seguinte, antes de se passar à descrição das estruturas de controle propostas para o reator, faz-se uma exposição panorâmica dos elementos básicos associados à teoria geral da lógica *fuzzy*.

5.5.1 Conjuntos *Fuzzy* e Lógica *Fuzzy*

A teoria dos Conjuntos *Fuzzy* (ou nebulosos) e a Lógica *Fuzzy* fornecem os fundamentos e possibilitam a geração de técnicas robustas para a solução de problemas, com grande aplicação em diversas áreas, especialmente nas áreas de controle e tomada de decisão.

A Lógica Nebulosa (*Fuzzy Logic*), desenvolvida inicialmente por Zadeh (1965), tem como ponto forte a capacidade de inferir conclusões e gerar respostas baseadas em informações vagas, ambíguas e qualitativamente incompletas e imprecisas. Estas informações subjetivas surgem da experiência cotidiana, como por exemplo, constatações do tipo: a água está “morna”, a vazão é “grande”, o nível está “baixo” etc.

A lógica *fuzzy* é baseada na teoria dos conjuntos *fuzzy*, desenvolvida como uma extensão da teoria dos conjuntos tradicionais. Na lógica clássica, uma proposição pode assumir apenas dois valores lógicos extremos: ou “completamente verdadeiro” ou “completamente falso”, podendo-se atribuir os valores 0 ou 1 a estas situações. Por sua vez, na lógica *fuzzy* considera-se que uma premissa pode ser parcialmente verdadeira ou parcialmente falsa, assumindo, então, um grau de verdade que varia de 0 a 1. O grau de verdade ou de pertinência indica o grau em que um elemento pertence a um conjunto, sendo o próprio conjunto clássico um caso particular, onde o grau de pertinência pode assumir apenas os valores extremos 0 ou 1.

As variáveis usadas em lógica *fuzzy*, por não terem valores precisos, são denominadas variáveis linguísticas, e são definidas como na linguagem cotidiana, representando aspectos de valores. Quando se diz, por exemplo, que a pressão está baixa, tem-se uma informação imprecisa, uma vez que ela não estabelece um valor exato para a pressão, mas uma faixa de valores possíveis.

A lógica *fuzzy* é uma forma de mapear um espaço de entrada para um espaço de saída por meio de sentenças ou regras condicionais do tipo SE-ENTÃO. Têm-se como exemplos: SE chove ENTÃO o rio enche; SE a pressão é alta ENTÃO a vazão é alta.

Um conjunto *fuzzy* A em um universo de discussão X com seus elementos representados por x é definido como um conjunto de pares ordenados, sendo expresso por:

$$A = \{x, \mu_A(x) \mid x \in X\} \quad (5.11)$$

Sendo $\mu_A(x)$ denominada função de pertinência de x em A , a qual estabelece o quanto x pertence ao conjunto A do universo de discurso X .

O universo de discurso X pode ser considerado contínuo ou discreto. Se X é contínuo, então o conjunto *fuzzy* é representado pela expressão:

$$A = \int_X \mu_A(x) / x \quad (5.12)$$

Se X é discreto, a representação do conjunto *fuzzy* é dada por:

$$A = \sum \mu_A(x_i) / x_i \quad (5.13)$$

A função de pertinência define a forma como cada ponto no espaço de entrada (ou universo de discurso) é relacionado ao (ou mapeado para o) valor de pertinência (ou grau de pertinência) no intervalo $[0 \ 1]$.

Diversas funções de pertinência podem ser usadas nos sistemas de inferência *fuzzy*, e a escolha adequada da função a usar torna-se um passo importante na solução do problema. As funções triangulares são as mais simples e, juntamente com as funções gaussianas, são escolhidas quando se deseja expressar pertinência decrescente à direita e pertinência crescente à esquerda. Já a função trapezoidal é conveniente quando se deseja uma faixa de pertinência máxima mais larga. Nos casos em que é importante a delimitação de seus extremos no ponto de máximo são adequadas funções do tipo curva em “S” e as semitrapezoidais (AGUIAR e JUNIOR, 1999).

A seguir são indicadas as relações matemáticas das principais funções de pertinência usadas nos sistemas de inferência *fuzzy*.

A função triangular é formada por três parâmetros escalares a , b e c que representam os três vértices do triângulo, sendo definida por:

$$\mu_A(x; a, b, c) = \begin{cases} 0, & x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ \frac{c-x}{c-b}, & b \leq x \leq c \\ 0, & c \leq x \end{cases} \quad (5.14)$$

A função trapezoidal é formada por quatro parâmetros escalares a , b , c , e d , os quais constituem os vértices do trapézio, sendo definida por:

$$\mu_A(x; a, b, c, d) = \begin{cases} 0, & x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 1, & b \leq x \leq c \\ \frac{d-x}{d-c}, & c \leq x \leq d \\ 0, & d \leq x \end{cases} \quad (5.15)$$

A função gaussiana tem como parâmetros a media c e o desvio padrão σ , sendo definida por:

$$\mu_A(x; \sigma, c) = \exp\left(\frac{-(x-c)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (5.16)$$

A função sigmoidal contém os parâmetros escalares a e c , onde c é o ponto de inflexão da curva, sendo definida por:

$$\mu_A(x; a, c) = \frac{1}{1 + \exp(-a(x-c))} \quad (5.17)$$

A função sino utiliza três parâmetros escalares, tal que a representa a extremidade da curva quando $\mu_A(x) = 0$, b o ponto de inflexão da curva quando $\mu_A(x) = 0,5$ e c é o ponto central da curva. Esta função é definida por:

$$\mu_A(x; a, b, c) = \frac{1}{\left(1 + \left|\frac{x-c}{a}\right|^{2b}\right)} \quad (5.18)$$

A Figura 5.6 exibe quatro das funções de pertinências ($f(x)$) referidas acima e de uso frequente na literatura de controle *fuzzy*.

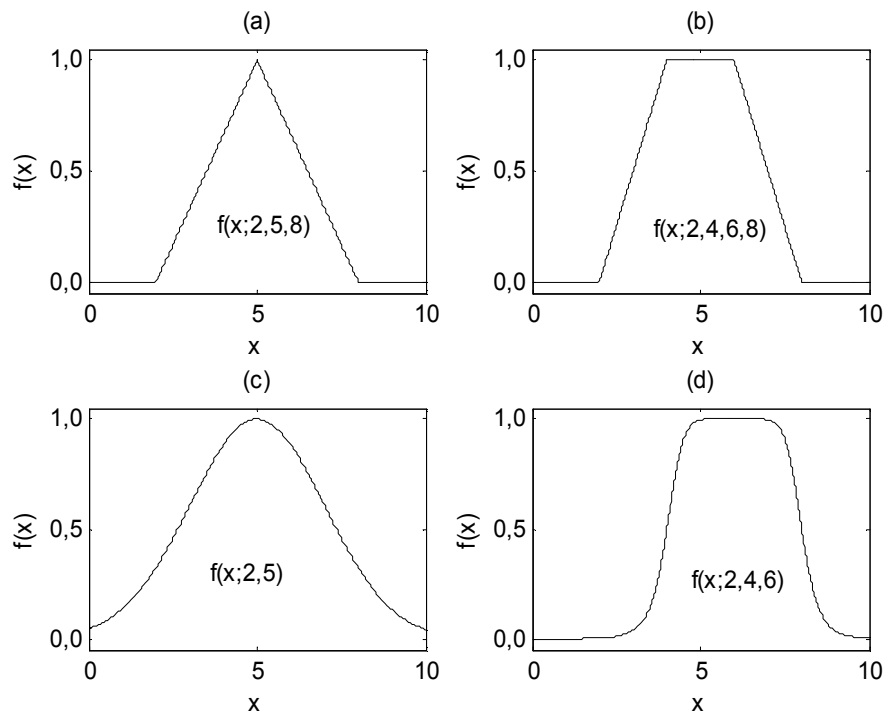


Figura 5.6 - Exemplos de funções de pertinência: (a) triangular, (b) trapezoidal, (c) gaussiana e (d) sino.

5.5.2 Operações Lógicas

As operações lógicas básicas dos conjuntos *fuzzy*, a exemplo dos conjuntos clássicos, são feitas por meio dos conectivos E, que representa a interseção dos conjuntos, e OU, que representa a união dos conjuntos. No entanto, essas operações apresentam significados distintos dos apresentados pelos conjuntos tradicionais. As operações *fuzzy* relativas à interseção e à união são mais comumente expressas por normas triangulares, denominadas de t-norma e t-conorma ou s-norma das funções de pertinência.

A t-norma, de uso mais frequente em controle, representa uma operação de mínimo ou um produto algébrico das funções de pertinência enquanto que a s-norma representa uma operação de máximo ou uma soma algébrica das funções de pertinência. Esses operadores indicam um mapeamento entre duas funções de pertinência *fuzzy* no intervalo $[0,1]$.

Supondo-se os conjuntos A e B do universo de discurso X , têm-se:

- t-norma:

$$A \text{ E } B = A \cdot t \cdot B = \mu_{A \cap B}(x) = \mu_A(x) \wedge \mu_B(x) = \min(\mu_A(x), \mu_B(x)) \quad (5.19)$$

ou

$$A \text{ E } B = A \cdot t \cdot B = \mu_{A \cap B}(x) = \mu_A(x) \times \mu_B(x) \quad (5.20)$$

- s-norma ou t-conorma:

$$A \text{ OU } B = A \cdot s \cdot B = \mu_{A \cup B}(x) = \mu_A(x) \vee \mu_B(x) = \max(\mu_A(x), \mu_B(x)) \quad (5.21)$$

ou

$$A \text{ OU } B = A \cdot s \cdot B = \mu_{A \cup B}(x) = \mu_A(x) + \mu_B(x) - \mu_A(x) \times \mu_B(x) \quad (5.22)$$

Um operador é denominado de t-norma, $T:[0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$, se o mesmo apresenta as seguintes propriedades:

$$\text{Comutativa: } T(a,b) = T(b,a) \quad (5.23)$$

$$\text{Associativa: } T(T(a,b),c) = T(a,T(b,c)) \quad (5.24)$$

$$\text{Monotônica: } a \geq b \wedge c \geq d \Rightarrow T(a,c) \geq T(b,d) \quad (5.25)$$

$$\text{Condições de contorno: } T(a,1) = a \text{ e } T(a,0) = 0 \quad (5.26)$$

O operador t-conorma, $V:[0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$, obedece às propriedades que seguem:

$$\text{Comutativa: } V(a,b) = V(b,a) \quad (5.27)$$

$$\text{Associativa: } V(V(a,b),c) = V(a,V(b,c)) \quad (5.28)$$

$$\text{Monotônica: } a \geq b \wedge c \geq d \Rightarrow V(a,c) \geq V(b,d) \quad (5.29)$$

$$\text{Condições de contorno: } V(a,0) = a \text{ e } V(a,1) = 1 \quad (5.30)$$

Outra definição importante é a de complemento de um conjunto *fuzzy* A , definida pela relação:

$$\mu_{A^c}(x) = 1 - \mu_A(x), \quad \forall x \in X \quad (5.31)$$

As operações de agregação combinam uma coleção de conjuntos *fuzzy* para produzir um único conjunto *fuzzy*.

Operações de interseção, união, complemento e agregação são operações sobre conjuntos ordinários ou nebulosos definidos no mesmo universo de discurso. O produto cartesiano é uma operação que envolve tanto conjuntos ordinários quanto conjuntos nebulosos definidos em universos de discurso distintos. Como exemplo, considerando-se os conjuntos *fuzzy* A e B definidos nos universos de discurso X e Y , respectivamente, tem-se que o produto cartesiano é dado por:

$$\mu_{A \times B}(x,y) = \mu_A(x) \wedge \mu_B(y), \quad \forall x \in X \text{ e } \forall y \in Y \quad (5.32)$$

Uma relação *fuzzy* é um novo conjunto *fuzzy* que representa o grau de associação entre elementos de dois ou mais conjuntos *fuzzy*.

As operações de interseção e união de duas relações *fuzzy* (R e S) definidas no espaço $X \times Y$ são dadas por:

$$\mu_{R \cap S}(x, y) = \mu_R(x, y) * \mu_S(x, y), \quad \forall x \in X \text{ e } \forall y \in Y \quad (5.33)$$

$$\mu_{R \cup S}(x, y) = \mu_R(x, y) \oplus \mu_S(x, y), \quad \forall x \in X \text{ e } \forall y \in Y \quad (5.34)$$

Uma composição de relações *fuzzy* é uma nova relação *fuzzy* cuja operação é denotada pelo operador composicional “ \circ ”.

Considerando duas relações *fuzzy* R e S definidas em $X \times Y$ e $Y \times Z$, respectivamente, cujo universo de discurso Y é comum, então, a composição destas duas relações é dada por:

$$\mu_{R \circ S}(x, z) = \sup_y [\mu_R(x, y) * \mu_S(y, z)], \quad x \in X, y \in Y \text{ e } z \in Z \quad (5.35)$$

5.5.3 Regras *Fuzzy*

Regra *fuzzy* ou proposição difusa é uma sentença que expressa relações entre variáveis linguísticas e conjuntos difusos, podendo apresentar composições por meio de conectivos e transformadores. A avaliação de proposições consiste em aferir o nível de “verdade” ou pertinência apresentado em relação a uma dada situação (AGUIAR e JUNIOR, 1999)

Uma regra *fuzzy* simples assume a seguinte forma:

SE x é A ENTÃO y é B

No enunciado acima, a parte “ x é A ” é o antecedente da regra e a parte “ y é B ” é o conseqüente; x e y são variáveis linguísticas e A e B são os valores linguísticos (ou rótulos) definidos por conjuntos *fuzzy* nos universos de discurso X e Y , respectivamente. Por exemplo:

SE está quente ENTÃO a temperatura é alta.

SE a válvula está totalmente aberta ENTÃO a vazão é alta.

5.5.4 Sistema de Inferência *Fuzzy*

A inferência *fuzzy* é o processo de formulação do mapeamento de uma dada entrada para uma saída usando lógica *fuzzy*. O mapeamento forma uma base a partir da qual podem ser tomadas decisões ou estabelecidos padrões.

A estrutura de um sistema de inferência *fuzzy*, representado na Figura 5.7, é constituída basicamente de quatro componentes principais, a saber: uma interface de *fuzzificação*, uma base de conhecimento, uma unidade de inferência ou tomada de decisão lógica, e uma interface de *defuzzificação*.

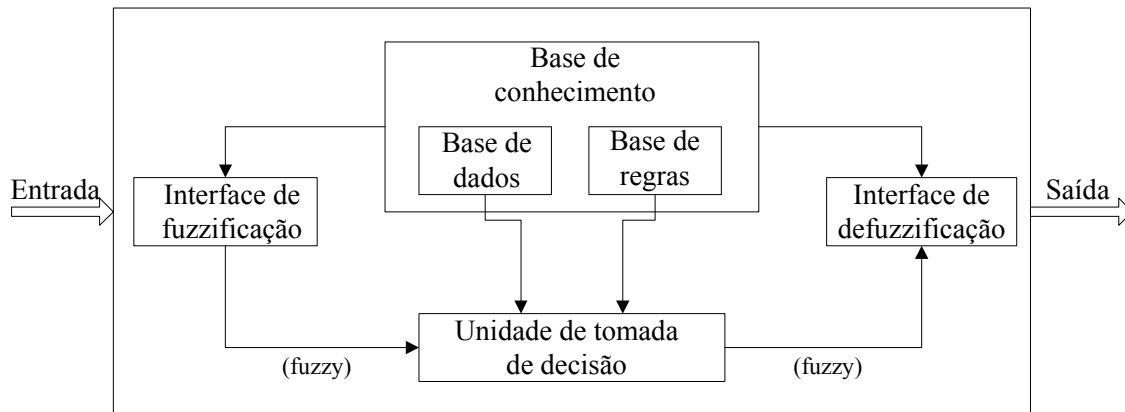


Figura 5.7 - Estrutura geral de um sistema de inferência *fuzzy*.

Fonte: Jang (1993).

Na interface de *fuzzificação* ocorre o mapeamento escalar que transfere a faixa (*range*) dos valores reais das variáveis de entrada no correspondente universo de discurso e executa a função de *fuzzificação* para converter os dados em valores linguísticos.

A base de conhecimento é composta por uma base de dados e uma base de regras *fuzzy*. A base de dados fornece as definições necessárias usadas na definição das regras de inferência e manipulação dos dados *fuzzy* para gerar uma saída lógica. A base de regras caracteriza os objetivos do sistema e é estabelecida pelo especialista por meio de um conjunto de regras linguísticas.

Na unidade de inferência ou tomada de decisão ocorre o cálculo dos antecedentes cujos conectivos podem ser “e” ou “ou”, o cálculo das implicações de cada uma das regras por meio dos operadores, por exemplo, “mínimo (min)” ou “produto (prod)” e composição dos consequentes cujos operadores podem ser, por exemplo, “máximo (max)” ou “soma limitada (soma)”

Na interface de *defuzzificação* ocorre o processo inverso à fase de *fuzzificação*. Nesta etapa, os valores linguísticos são convertidos em valores reais. Vários métodos podem ser usados para fazer esta conversão. Dentre estes, citam-se os métodos do Centro-de-Área (COA) ou Centro-de-Gravidade (COG), Centro-do-Máximo (COM) e Média-do-Máximo (MOM) (SHAW e SIMÕES, 2004). A expressão do método do Centro de Área, de uso mais frequente, é dada por:

$$y_{COA} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i \mu(y_i)}{\sum_{i=1}^N \mu(y_i)} \quad (5.36)$$

Sendo:

y_i posição do centróide da função de pertinência individual de saída;

$\mu(y_i)$ valor de pertinência de saída de y_i .

Os sistemas de inferência *fuzzy* têm sido aplicados de forma promissora em diversos campos, dos quais, dentre outros, podem ser destacados: modelagem de sistemas, controle automático, otimização, planejamento, classificação de dados, reconhecimento de padrões,

análise de decisões, biomatemática, visão computacional e vida artificial (TANSCHKEIT et al., 2007).

Em um controlador por lógica *fuzzy* (FLC, *fuzzy logic controller*), conforme representado na Figura 5.8, o comportamento dinâmico do sistema é caracterizado por um conjunto de regras linguísticas baseadas no conhecimento do processo apreendido por especialistas.

O conhecimento do especialista é normalmente apresentado na forma de sentenças condicionais ou regras que expressam que SE determinadas condições são satisfeitas ENTÃO se pode inferir determinadas conseqüências ou conclusões. Portanto, um esquema simplificado de um sistema de controle *fuzzy* resulta da substituição do bloco do controlador (Figura 5.1) pelo sistema de inferência *fuzzy* (Figura 5.7), resultando na estrutura geral indicada na Figura 5.8.

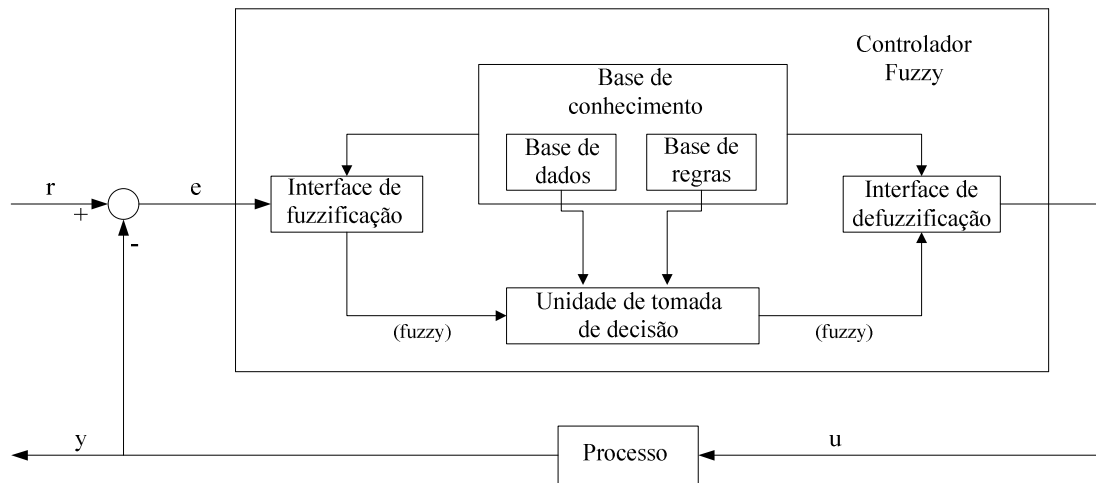


Figura 5.8 - Estrutura geral de um sistema de controle *fuzzy*.

Dependendo da estrutura da regra SE-ENTÃO os modelos de inferência mais usados, e que aparecem com frequência na literatura são: o modelo do tipo Mamdani (ou linguístico) e o modelo do tipo Takagi-Sugeno (ou paramétrico).

O modelo do tipo Mamdani é tipicamente usado em sistemas baseados no conhecimento especializado. Neste modelo, o antecedente e o consequente da regra são proposições *fuzzy* do tipo:

$$R_i: \text{SE } x_1 \text{ é } A_{i1} \text{ E } x_2 \text{ é } A_{i2} \text{ E } \dots \text{ E } x_k \text{ é } A_{ik} \text{ ENTÃO } y \text{ é } B_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Na regra acima, A_i e B_i são os termos linguísticos antecedentes e consequentes, respectivamente (exemplo: alta, média, baixa, muito baixa), x e y são as variáveis linguísticas de entrada e saída, respectivamente (exemplo: temperatura, pressão, concentração, vazão), e n é o número de regras *fuzzy*.

Já no modelo de inferência do tipo Takagi-Sugeno (TAKAGI e SUGENO, 1985) o antecedente apresenta a mesma formulação do modelo Mamdani, porém o consequente da regra é formado por uma relação linear das variáveis de entrada. Em função disso, esse modelo é considerado um modelo híbrido onde o antecedente da regra tem formulação linguística e o consequente é uma relação matemática, conforme representação da i -ésima regra, dada por:

$$R_i: \text{SE } x_1 \text{ é } A_{i1} \text{ E } x_2 \text{ é } A_{i2} \text{ E } \dots \text{ E } x_k \text{ é } A_{ik} \text{ ENTÃO } y_i = a_{0i} + a_{1i}x_1 + \dots + a_{ki}x_k$$

Sendo os coeficientes a_{0i} , a_{1i} , ..., a_{ki} os parâmetros consequentes da i -ésima regra.

5.5.5 Exemplo de Inferência *Fuzzy* com o Modelo do Tipo Mamdani

Este exemplo tem caráter ilustrativo das etapas e operações envolvidas no estabelecimento de uma predição de valor para uma dada variável de processo utilizando-se inferência *fuzzy* do tipo Mamdani. Não há aqui a preocupação com os detalhes mais rigorosos requeridos para a aplicação desta sistemática a uma situação de controle.

O sistema considerado consiste em um tanque de aquecimento, conforme ilustrado na Figura 5.9. A temperatura do líquido dentro do tanque (T) deve ser controlada por manipulação da vazão do fluido quente (F_{J0}) que circula na jaqueta. A vazão de alimentação de líquido para o tanque (F_0) e a sua temperatura (T_0) são consideradas como variáveis de perturbação.

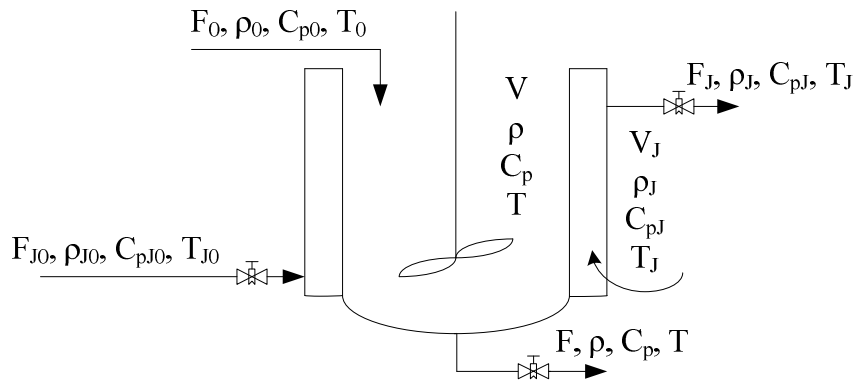


Figura 5.9 - Representação esquemática do tanque de aquecimento.

Na modelagem do sistema, foram feitas as seguintes considerações simplificadoras: (i) a vazão de saída do líquido aquecido (F) é igual à vazão de entrada (F_0); (ii) a vazão de saída do fluido térmico da jaqueta (F_J) é igual à vazão de entrada (F_{J0}); e, (iii) as propriedades físicas de ambos os fluidos são constantes ($\rho = \rho_0$, $\rho_J = \rho_{J0}$, $C_p = C_{p0}$ e $C_{pJ} = C_{pJ0}$). As simplificações (i) e (ii) pressupõem que havendo mudanças nas vazões de entrada dos fluidos simultaneamente as vazões de saída seriam modificadas para garantir as igualdades $F = F_0$ e $F_J = F_{J0}$.

Com as considerações feitas, o modelo matemático para o tanque de aquecimento assume uma forma simples, obtendo-se as equações diferenciais e a lei de controle para a manipulação da vazão de fluido térmico:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_0 - T) + \frac{UA}{\rho V C_p}(T_J - T) \quad (5.37)$$

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{F_J}{V_J}(T_{J0} - T_J) - \frac{UA}{\rho_J V_J C_{pJ}}(T_J - T) \quad (5.38)$$

$$F_J = F_J^{sp} - K(T^{sp} - T) \quad (5.39)$$

A aplicação de inferência *fuzzy* envolve as seguintes etapas: (i) identificação dinâmica do sistema; (ii) estabelecimento dos universos de discurso de cada uma das variáveis (*range*), (iii) atribuição de valores linguísticos ou rótulos para cada uma das variáveis e escolha das funções de

pertinência – fase de *fuzzificação*, (iv) estabelecimento das regras *fuzzy* – base de regras, (v) realização das operações de inferência, agregação e composição; e, (vi) *defuzzificação*.

Para a identificação do sistema, consideraram-se como variáveis de entrada: a vazão do fluido através do tanque (F) e sua temperatura no tanque (T), e como variável de saída (ou manipulada, pensando-se numa estrutura de controle): a vazão do fluido de aquecimento através da jaqueta (F_J).

Os universos de discurso ou ranges considerados para as variáveis são: $280 \leq T \leq 320$, $270 \leq F \leq 330$ e $40 \leq F_J \leq 120$. Na prática estes valores podem ser estabelecidos a partir do conhecimento sobre o processo. Neste exemplo ilustrativo o estabelecimento do universo de discurso foi resultado de simulações realizadas com o modelo matemático para o tanque de aquecimento (Equações (5.37)-(5.39)). Nas simulações foram assumidos os seguintes valores para os parâmetros e *set point* das variáveis: $F = 300 \text{ m}^3/\text{h}$; $F_J = 80 \text{ m}^3/\text{h}$; $V = 30 \text{ m}^3$; $V_J = 5 \text{ m}^3$; $T_0 = 300 \text{ K}$; $T_{J0} = 500 \text{ K}$; $U = 4 \times 10^5 \text{ kJ}/(\text{m}^2 \text{ h K})$; $\rho = 980 \text{ kg}/\text{m}^3$; $\rho_J = 1000 \text{ kg}/\text{m}^3$; $c_p = 4,2 \text{ kJ}/(\text{kg K})$; $C_{pJ} = 5 \text{ kJ}/(\text{kg K})$; $T_{sp} = 347,15 \text{ K}$; $T_{J,sp} = 354,43 \text{ K}$.

Os subconjuntos *fuzzy* ou valores linguísticos (rótulos) atribuídos às variáveis – temperatura (T), vazão do fluido (F) e vazão do fluido de aquecimento (F_J) – são: Baixa (B), Média (M) e Alta (A). Assim, para cada variável, foram atribuídas três funções de pertinência triangulares igualmente espaçadas.

A base de regras é formada a partir da observação do operador ou engenheiro de controle. Nesta ilustração, a base de regras foi estabelecida a partir de observações extraídas da simulação do processo, o que permitiu elaborar a Tabela 5.1.

Tabela 5.1 - Base de regras *fuzzy* para o tanque de aquecimento.

$T \backslash F$	B	M	A
B	M	A	A
M	M	M	M
A	B	B	B

Foram estabelecidas, então, as nove regras abaixo indicadas – igual ao número de rótulos elevado ao número de variáveis de entrada, $3^2 = 9$.

R₁: **Se T é B e F é B então F_J é M ,**

R₂: **Se T é B e F é M então F_J é A ,**

R₃: **Se T é B e F é A então F_J é A ,**

R₄: **Se T é M e F é B então F_J é M ,**

R₅: **Se T é M e F é M então F_J é M ,**

R₆: **Se T é M e F é A então F_J é M ,**

R₇: **Se T é A e F é B então F_J é B ,**

R₈: **Se T é A e F é M então F_J é B ,**

R₉: **Se T é A e F é A então F_J é B .**

Procede-se à inferência *fuzzy* por meio da regra composicional *max-min*, em que se consideram as operações de agregação por meio do conectivo *E* na mesma regra e o conectivo *OU* para regras distintas que apresentam o mesmo rótulo na variável de saída. Esta etapa de inferência e a seguinte, de *defuzzificação*, são representadas na Figura 5.10, na qual se encontram indicadas as variáveis de entrada (T e F) e saída (F_J) na abscissa e a função de pertinência (μ) na ordenada.

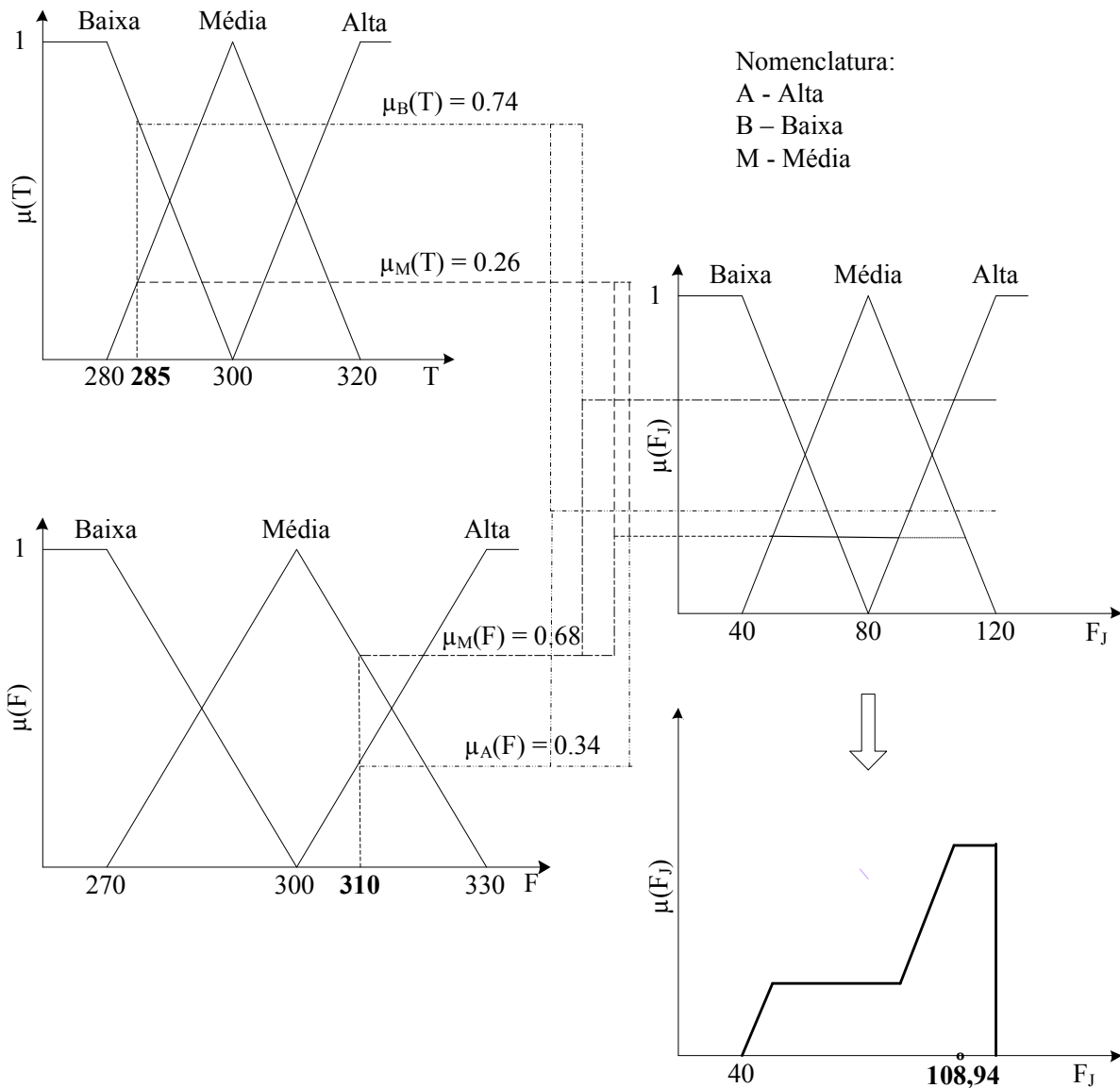


Figura 5.10 - Ilustração das etapas de inferência *fuzzy* para o tanque de aquecimento.

Tomando-se como exemplo os valores de 285 K para T e $310 \text{ m}^3/\text{h}$ para F e localizando estes valores na figura, tem-se que a ordenada partindo de $T = 285$ K (Figura 5.10a) intercepta as funções de pertinência de baixa e média nos valores de pertinência $\mu_B(T) = 0,74$ e $\mu_M(T) = 0,26$, respectivamente. Da mesma forma, a ordenada partindo de $F = 310 \text{ m}^3/\text{h}$ (Figura 5.10b) intercepta as funções de pertinência de média e alta nos valores de pertinência $\mu_M(F) = 0,68$ e $\mu_A(F) = 0,34$, respectivamente. Em razão disso, das nove regras listadas acima, apenas as regras R_2 , R_3 , R_5 e R_6 são utilizadas para a obtenção de F_j . As operações são descritas a seguir.

Agregação:

$$R_2 : \quad \mu'_A(F_J) = \mu_B(T) \wedge \mu_M(F) = \min(0,74; 0,68) = 0,68 \quad (5.40)$$

$$R_3 : \quad \mu''_A(F_J) = \mu_B(T) \wedge \mu_A(F) = \min(0,74; 0,34) = 0,34 \quad (5.41)$$

$$R_5 : \quad \mu'_M(F_J) = \mu_M(T) \wedge \mu_M(F) = \min(0,26; 0,68) = 0,26 \quad (5.42)$$

$$R_6 : \quad \mu''_M(F_J) = \mu_M(T) \wedge \mu_A(F) = \min(0,26; 0,34) = 0,26 \quad (5.43)$$

Composição:

$$\mu_A(F_J) = \mu'_A(F_J) \vee \mu''_A(F_J) = \max(0,68; 0,34) = 0,68 \quad (5.44)$$

$$\mu_M(F_J) = \mu'_M(F_J) \vee \mu''_M(F_J) = \max(0,26; 0,26) = 0,26 \quad (5.45)$$

Portanto, a saída de alta é truncada em $\mu_A(F_J) = 0,68$ e a saída de média é truncada em $\mu_M(F_J) = 0,26$, conforme ilustrado na Figura 5.10c, conduzindo à figura cuja área resultante está representada na Figura 5.10d.

A última etapa é a *defuzzificação*, que consiste em transformar os valores *fuzzy* obtidos pelas Equações (5.44) e (5.45) em um valor real. Considerando-se, para este exemplo, o método do centro de área, efetua-se a seguinte operação:

$$F_{J,COA} = \frac{\mu_M(F_J)F_J(M) + \mu_A(F_J)F_J(A)}{\mu_M(F_J) + \mu_A(F_J)} = \frac{0,26 \times 80 + 0,68 \times 105,63}{0,26 + 0,68} = 98,54$$

Assim, tem-se que o valor de saída ou inferido para F_J é 98,54 m³/h, quando as variáveis de entrada, T e F , assumem os valores de 285 K e 310 m³/h, respectivamente. Em uma aplicação de controle, por exemplo, isso significa que se as variáveis T e F passassem de seu nível

estacionário para estes valores, então, a vazão de fluido de aquecimento (F_J) deveria ser levada para o valor inferido.

5.6 Controle *Fuzzy* para o Reator

A segunda alternativa considerada para o controle do perfil de temperatura e da concentração de anidrido ftálico na saída do reator de leito fixo foi usar um controlador *fuzzy* proporcional-integral, denominado controlador *Fuzzy*-PI (FZ-PI), o qual tem como base de formulação a lei do controlador PI convencional. Neste caso, porém, as variáveis de entrada são o erro ($e(t)$) e a derivada do erro ($de(t)$), e o sinal de saída é a derivada da variável manipulada.

A relação de cálculo do controlador *Fuzzy*-PI é obtida a partir da lei de controle PI, ou seja, a lei de controle resultante da soma das ações proporcional e integral, dada pela relação:

$$u(t) = K_c e(t) + K_I \int_0^t e(t) dt \quad (5.46)$$

Diferenciando-se a Equação (5.46), obtém-se a lei do controlador na forma de velocidade, expressa como:

$$\frac{du(t)}{dt} = K_c \frac{de(t)}{dt} + K_I e(t) \quad (5.47)$$

Aproximando-se as derivadas da Equação (5.47) por diferenças finitas, com um incremento igual a um período de amostragem T_s , obtém-se a representação da lei de controle na forma discretizada, dada por:

$$\frac{u(k) - u(k-1)}{T_s} = K_c \frac{e(k) - e(k-1)}{T_s} + K_I e(k) \quad (5.48)$$

ou

$$\Delta U_k = K_c \Delta E_k + K_I e_k \quad (5.49)$$

Sendo:

$$\Delta U_k = \frac{\Delta u_k}{T_s} \quad (5.50)$$

$$\Delta E_k = \frac{\Delta e_k}{T_s} \quad (5.51)$$

$$u_k = u(k) \text{ e } u_{k-1} = u(k-1) \quad (5.52)$$

$$\Delta u_k = u_k - u_{k-1} \quad (5.53)$$

$$\Delta e_k = e_k - e_{k-1} \quad (5.54)$$

O sinal de saída do controlador PI, portanto, é dado por:

$$u_k = u_{k-1} + \Delta u_k \quad (5.55)$$

Tomando-se como base a Equação (5.49) para o controlador PI, escreve-se a equação correspondente ao controlador *Fuzzy*-PI, a qual é dada por:

$$K \dot{U}_k = K_d \Delta E_k + K_e e_k \quad (5.56)$$

Sendo

$$K \dot{U}_k = \Delta U_k \quad (5.57)$$

Os fatores de escala K , K_d e K_e na Equação (5.56) constituem os parâmetros de ajustamento do controlador *Fuzzy*-PI. A função desses parâmetros é fazer a normalização das variáveis de entrada e de saída do sistema de inferência para que o universo de discurso dos antecedentes e consequentes corresponda ao range $[-1 \ 1]$. O sistema de inferência *fuzzy* recebe os valores $K_d \Delta E_k$ e $K_e e_k$ e fornece o valor de \dot{U}_k , a partir do qual se obtém a correção a ser

aplicada na variável manipulada u . A representação esquemática da estrutura de cálculo do controlador *Fuzzy*-PI é apresentada na Figura 5.11.

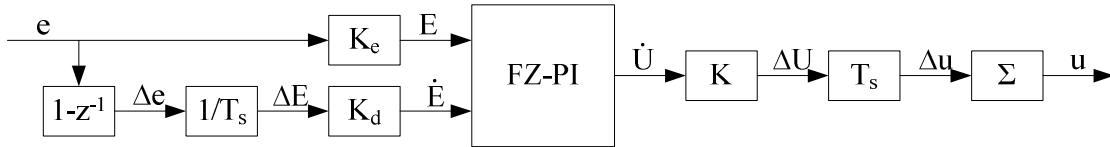


Figura 5.11 - Estrutura de cálculo do controlador *Fuzzy*-PI.

Neste trabalho, para a aplicação do controle por lógica *fuzzy* ao reator, o universo de discurso normalizado de cada variável de entrada e saída foi representado por um conjunto de sete funções de pertinência triangulares igualmente espaçadas (Figura 5.12).

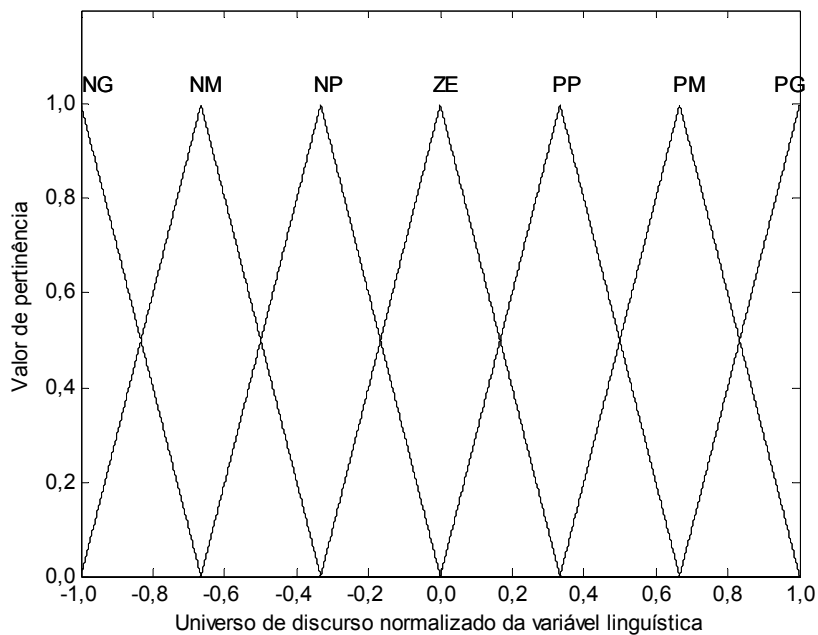


Figura 5.12 - Universo de discurso normalizado com funções de pertinência triangular.

Os rótulos ou valores linguísticos atribuídos às funções de pertinência de cada variável de entrada e para a variável de saída são: *NG* (negativo grande), *NM* (negativo médio), *NP*

Tabela 5.2 - Tabela de inferência *fuzzy*.

$\begin{matrix} DE \\ E \end{matrix}$	<i>NG</i>	<i>NM</i>	<i>NP</i>	<i>ZE</i>	<i>PP</i>	<i>PM</i>	<i>PG</i>
<i>NG</i>	<i>NG</i>	<i>NG</i>	<i>NG</i>	<i>NG</i>	<i>NM</i>	<i>NP</i>	<i>ZE</i>
<i>NM</i>	<i>NG</i>	<i>NG</i>	<i>NG</i>	<i>NM</i>	<i>NP</i>	<i>ZE</i>	<i>PP</i>
<i>NP</i>	<i>NG</i>	<i>NG</i>	<i>NM</i>	<i>NP</i>	<i>ZE</i>	<i>PP</i>	<i>PM</i>
<i>ZE</i>	<i>NG</i>	<i>NM</i>	<i>NP</i>	<i>ZE</i>	<i>PP</i>	<i>PM</i>	<i>PG</i>
<i>PP</i>	<i>NM</i>	<i>NP</i>	<i>ZE</i>	<i>PP</i>	<i>PM</i>	<i>PG</i>	<i>PG</i>
<i>PM</i>	<i>NP</i>	<i>ZE</i>	<i>PP</i>	<i>PM</i>	<i>PG</i>	<i>PG</i>	<i>PG</i>
<i>PG</i>	<i>ZE</i>	<i>PP</i>	<i>PM</i>	<i>PG</i>	<i>PG</i>	<i>PG</i>	<i>PG</i>

Na aplicação do controle por lógica *fuzzy* ao reator foram consideradas também duas estruturas para a regulação da concentração de anidrido ftálico no produto da reação, semelhante às estruturas apresentadas na Seção 5.4, as quais contemplaram um controle direto da concentração e um controle cascata concentração-temperatura.

5.6.1 Controle Direto

A configuração simples ou direta consiste em controlar a concentração do anidrido ftálico na saída do reator (C_B) por manipulação da temperatura do fluido refrigerante (T_{c0}) utilizando-se um controlador *Fuzzy-PI* cuja estrutura de cálculo é mostrada na Figura 5.13.

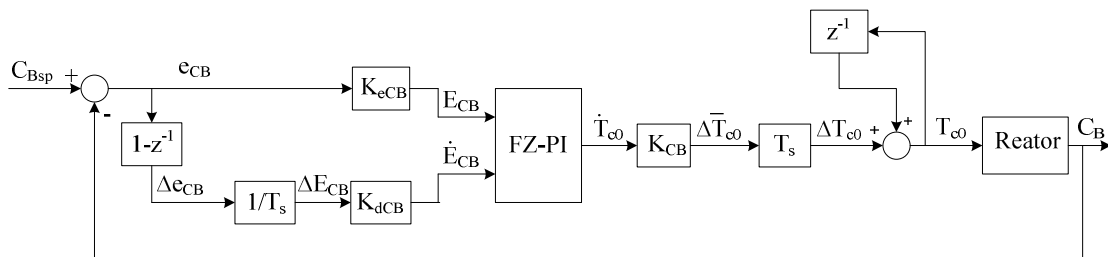


Figura 5.13 - Estrutura de cálculo do controlador direto *Fuzzy-PI*.

Nesta estrutura apenas a concentração de anidrido ftálico na saída do reator (C_B) é medida. O problema consiste na determinação dos fatores de escala K_{eCB} , K_{dCB} e K_{CB} que convertem a faixa de variação real das variáveis de entrada e saída para o controlador *Fuzzy*-PI.

Li e Gatland (1996) propuseram regras que relacionam os parâmetros de sintonia dos controladores convencionais PI, PD e PID aos controladores *fuzzy* a dois termos (*Fuzzy*-PI e *Fuzzy*-PD) e a três termos (*Fuzzy*-PID). As relações propostas por estes autores determinam os valores iniciais dos fatores de escala do controlador *fuzzy* a partir dos parâmetros de sintonia do correspondente controlador convencional. Assim, por exemplo, uma vez sintonizado o controlador clássico PI, seus parâmetros podem ser usados para determinar os fatores de escala do controlador *Fuzzy*-PI. Isso pode reduzir em muito o trabalho exaustivo de sintonia pelo método de tentativa e erro, uma vez que se passa a dispor de uma referência útil para iniciar o processo de testes.

Para a sintonia dos controladores utilizou-se o método de tentativa e erro, partindo-se dos valores preditos pelas relações propostas por Li e Gatland (1996). Vários testes computacionais foram realizados sistematicamente, de modo a chegar-se finalmente aos fatores de escala K_{eCB} , K_{dCB} e K_{CB} que proporcionam um bom desempenho do controlador em termos dos critérios de desempenho apresentados ao final deste capítulo.

5.6.2 Controle Cascata

A estrutura de controle cascata considerada é constituída por dois controladores *Fuzzy*-PI, conforme a estrutura de cálculo mostrada na Figura 5.14. Tem-se como variável controlada a concentração de anidrido ftálico na saída do reator (C_B) e como variável manipulada a temperatura do fluido refrigerante (T_{c0}).

A malha principal, para o controle da concentração de anidrido ftálico na saída do reator, tem como variáveis de entrada do controlador primário *Fuzzy*-PI o erro (e_{CB}) entre o valor de *set point* da concentração de anidrido ftálico na saída do reator (C_{Bsp}) e o valor medido (C_B), e como variável de saída a temperatura de referência (T_{ref}) da malha secundária. A malha secundária tem

por objetivo o controle da temperatura do leito, evitando-se a formação de picos excessivos de temperatura. Esta malha também é constituída por um controlador *Fuzzy*-PI tendo como variável de entrada o erro (e_T) e a derivada do erro (Δe_T), e como variável de saída a temperatura do fluido refrigerante (T_{c0}), que é a variável manipulada do sistema de controle. O erro é resultante da diferença entre a temperatura de referência (T_{ref}), calculada pela malha principal, e a temperatura média (T_m) das quatro temperaturas medidas ao longo do reator (T_1, T_2, T_3 e T_4), seguindo-se o mesmo padrão adotado no controle cascata convencional, descrito na Seção 5.4.2.

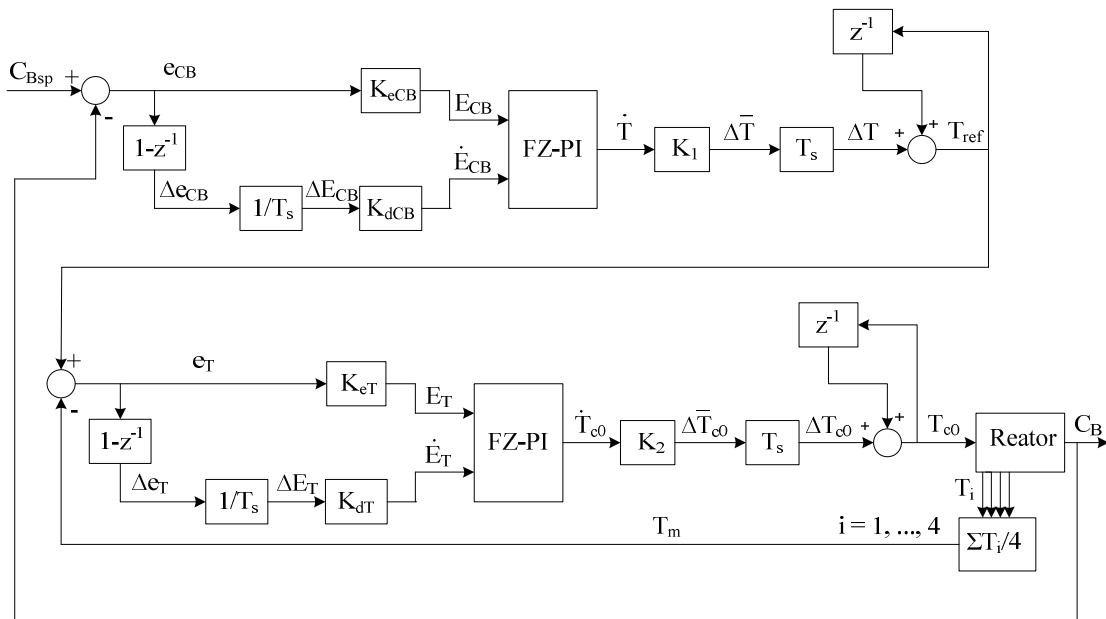


Figura 5.14 - Estrutura de cálculo do controlador cascata *Fuzzy*-PI.

No caso dos dois controladores *Fuzzy*-PI que compõem as duas malhas, o problema se apresenta bem mais complexo, visto que se faz necessário proceder ao ajuste de seis fatores de escala (K_{eCB} , K_{dCB} , K_1 , K_{eT} , K_{dT} e K_2), associados às malhas primária e secundária do controlador cascata concentração-temperatura. Também neste caso, para o ajuste dos parâmetros, utilizou-se o procedimento de tentativa e erro, iniciando-se a sintonia pela malha de controle secundária e passando-se em seguida para a sintonia dos parâmetros da malha primária. Numa etapa final, procedeu-se ao refinamento dos parâmetros conjuntamente.

5.7 Critérios de Desempenho dos Controladores

A sintonia dos controladores foi baseada em critérios clássicos de desempenho, os quais são estabelecidos a partir da resposta transiente do sistema a uma perturbação degrau unitária no *set point* ou na carga.

Os critérios de desempenho considerados para avaliação das estruturas de controle propostas para o reator de leito fixo foram os seguintes: (i) tempo de acomodação T_a (tempo necessário para que a curva da variável alcance uma faixa em torno do valor de referência, após uma perturbação degrau, e aí permaneça), (ii) sobrelevação máxima (valor do pico máximo menos o valor de referência), (iii) *ISE* (integral do erro quadrado); (iv) *IAE* (integral do valor absoluto do erro), e, (v) *ITAE* (integral do erro absoluto ponderado pelo tempo).

Os índices de desempenho *ISE*, *IAE* e *ITAE* são definidos pelas seguintes relações (OGATA, 1982; SEBORG et al., 1989; LUYBEN, 1990):

$$ISE = \int_0^{\infty} e^2(t) dt \quad (5.58)$$

$$IAE = \int_0^{\infty} |e(t)| dt \quad (5.59)$$

$$ITAE = \int_0^{\infty} t|e(t)| dt \quad (5.60)$$

Conforme destacado por Ogata (1982), o *ISE* e o *IAE* computam principalmente o erro que ocorre no início da resposta, dando menor relevância à duração para atingir-se o estado estacionário; enquanto que o *ITAE* computa equilibradamente toda a variação, uma vez que no início um erro grande é ponderado com um peso pequeno, e no final da resposta transitória um erro pequeno é ponderado com um peso grande.

Para o sistema considerado neste trabalho, a variável controlada não tem seu valor final correspondente à unidade, como ocorre na definição padrão do tempo de acomodação. Em razão disso, definiu-se a seguinte concentração adimensional:

$$b = \frac{C_B(t) - C_{Bsp}}{C_{Bsp}} \quad (5.61)$$

Tendo em vista que o valor da concentração de anidrido ftálico na saída do reator (variável controlada) varia dentro de uma pequena faixa, tomou-se o tempo de acomodação como sendo o instante no qual a variável entra definitivamente no intervalo definido pelos limites de $\pm 0,01\%$ de b . Assim, têm-se os seguintes limites definidores da região de estabilização da variável controlada:

$$C_{B,\text{superior}} = 1,0005 C_{Bsp} \quad (5.62)$$

$$C_{B,\text{inferior}} = 0,9995 C_{Bsp} \quad (5.63)$$

Conforme já destacado, a sintonia dos controladores propostos foi feita pelo procedimento de tentativa e erro, buscando-se otimizar o desempenho de cada controlador em termos do conjunto dos critérios acima estabelecidos, e considerando-se que uma característica desejável de um bom controlador PI é apresentar o menor erro possível e um tempo mínimo para atingir o *set point* final (tempo de acomodação).

5.8 Conclusões

Neste capítulo foram apresentadas as estruturas dos controladores considerados para o controle regulatório da concentração de anidrido ftálico na saída do reator e para evitar a formação de perfis de temperatura com picos (*hot spots*) elevados. Fez-se também a descrição da formulação matemática das equações que estabelecem as respectivas leis de controle.

Como observação importante, deve-se destacar que o uso das três ações de controle (proporcional, integral e derivativa) depende das características do processo que se deseja controlar. Assim, nem sempre se faz necessário o uso do controlador PID, uma vez que pode ocorrer, para uma situação específica considerada, uma relação custo/benefício desfavorável. Em razão da baixa frequência de uso da ação derivativa na indústria, a maioria dos controladores

apresenta-se com a configuração do tipo PI (ÅSTRÖM e HÄGGLUND, 2001). Neste trabalho, para o controle do reator de leito fixo, foram consideradas apenas as ações proporcional e integral.

No capítulo seguinte, são apresentados e discutidos os resultados obtidos a partir de diversas simulações realizadas para testar o desempenho de cada controlador proposto.

CAPÍTULO 6: DESEMPENHO DAS ESTRUTURAS DE CONTROLE

6.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados os resultados referentes ao controle regulatório do reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico, considerando-se as estruturas de controle propostas e apresentadas no capítulo anterior.

O problema dinâmico consiste em regular a concentração de anidrido ftálico na saída do reator no valor de *set point*, para distúrbios nas condições da corrente de alimentação dos reagentes (concentração de o-xileno e temperatura), por manipulação da temperatura do fluido de refrigeração.

Foram realizadas várias simulações com o objetivo de estabelecer uma comparação do desempenho das estruturas de controle não somente no que se refere à capacidade de manter a concentração de anidrido ftálico na saída do reator em seu valor de referência, mas também de manter o controle térmico do reator, evitando-se a evolução de perfis de temperatura com picos excessivos, o que na prática constitui, de fato, a grande questão operacional posta para o controle de reatores de leito fixo em que ocorrem reações fortemente exotérmicas.

As simulações dos quatro controladores propostos foram feitas utilizando-se um módulo computacional implementado com os recursos de programação e de lógica *fuzzy* do *MatLab*.

6.2 Dinâmica das Variáveis de Controle

Tendo em vista que as estruturas de controle propostas envolvem quatro medidas de temperaturas, T_1 , T_2 , T_3 e T_4 tomadas em posições diferentes ao longo do reator ($z_1 = 0,20$ m, $z_2 = 0,40$ m, $z_3 = 0,60$ m e $z_4 = 0,80$ m) e a medida de concentração de anidrido ftálico na corrente efluente (C_B), foram realizadas algumas simulações para verificar o comportamento dinâmico

destas variáveis frente a mudanças nas condições de alimentação dos reagentes (concentração de o-xileno, C_{A0} , e temperatura, T_0).

Na Figura 6.1 são mostrados os perfis de concentração que se obtêm para perturbações de $\pm 4\%$ no valor de referência da temperatura de alimentação dos reagentes ($T_0 = 628$ K), os quais permitem verificar o comportamento não linear do processo, tendo em vista que para uma mesma variação na variável de entrada o sistema atinge estados estacionários com variações diferentes em relação o valor estacionário de partida.

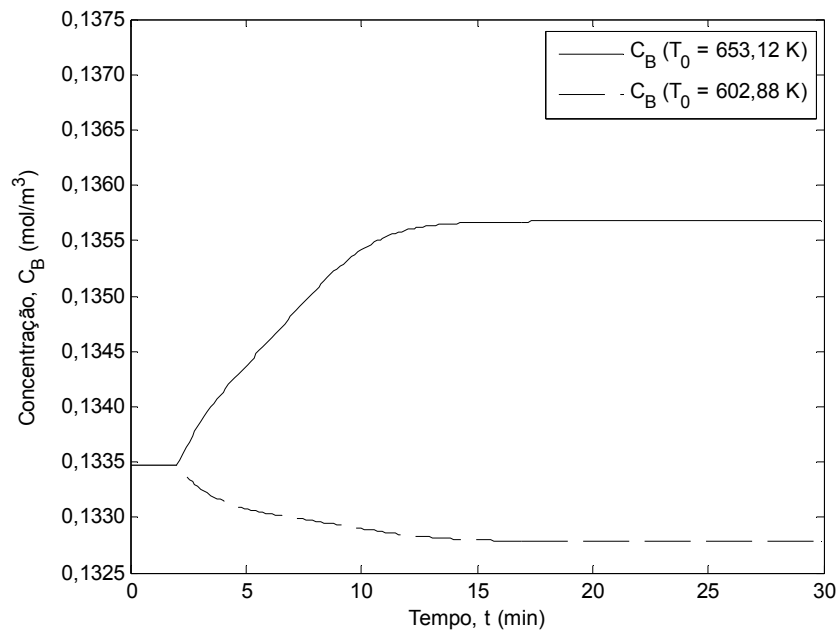


Figura 6.1 - Comportamento dinâmico da concentração para perturbações em T_0 .

Nas Figuras 6.2 e 6.3 são mostrados os perfis de temperatura nas posições do leito consideradas no esquema de controle cascata. A resposta evidencia igualmente um comportamento não linear da temperatura em cada ponto considerado. Distúrbios em T_0 levam a operação do reator para uma situação térmica diferente com um novo perfil de temperatura. Um aumento em T_0 proporciona um perfil de temperatura mais elevado, que vai sendo suavizado por conta da troca de calor com o fluido refrigerante. Isso explica por que as temperaturas T_1 e T_2 atingem valores estacionários maiores para perturbações positivas em T_0 , diferentemente do que ocorre com as temperaturas T_3 e T_4 .

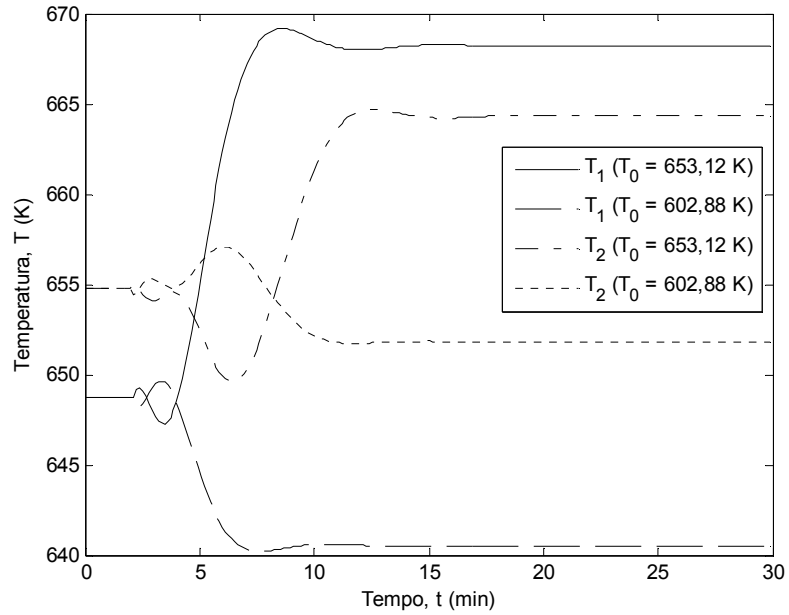


Figura 6.2 - Comportamento dinâmico das temperaturas T_1 e T_2 para perturbações em T_0 .

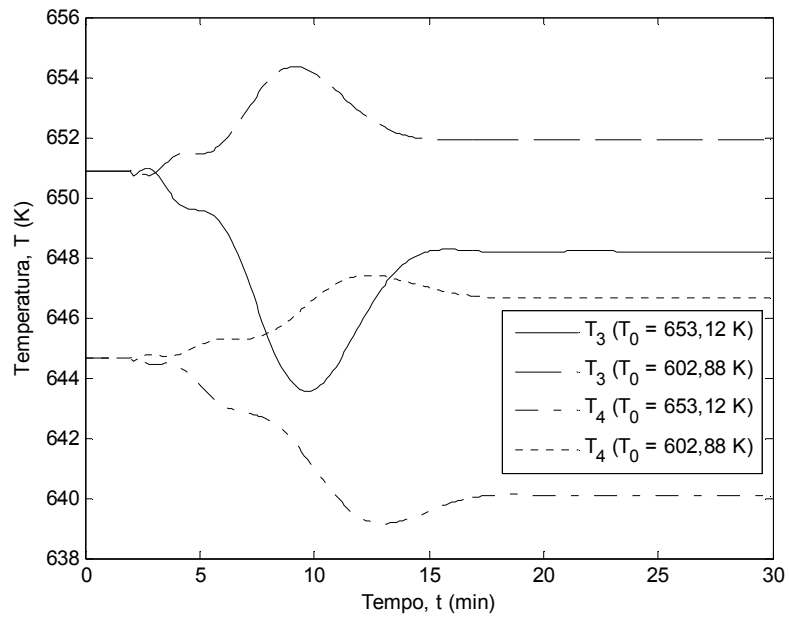


Figura 6.3 - Comportamento dinâmico das temperaturas T_3 e T_4 para perturbações em T_0 .

Para perturbações de $\pm 10\%$ no valor de referência da concentração de o-xileno na alimentação ($C_{A0} = 0,1811 \text{ mol/m}^3$), obtêm-se os perfis de concentração de anidrido ftálico na

saída do reator indicados na Figura 6.4. Estes perfis aparentam uma simetria indicativa de um comportamento linear, mas que não ocorre estritamente. Para uma perturbação de + 10% ($C_{A0} = 0,1992 \text{ mol/m}^3$) o valor final de C_B é $0,1495 \text{ mol/m}^3$, correspondendo a uma variação de 11,98% em relação ao estado estacionário inicial, enquanto que para uma perturbação de - 10% ($C_{A0} = 0,1630 \text{ mol/m}^3$) o valor final de C_B é $0,1185 \text{ mol/m}^3$, tendo-se uma variação de 11,24%. Para as condições operacionais consideradas, a concentração de anidrido ftálico na saída do reator não sofre variações significativas em função dos diferentes perfis de temperatura obtidos para cada valor de C_{A0} . Isso indica um comportamento aproximadamente linear para a resposta de C_B a mudanças na concentração de o-xileno na entrada do reator.

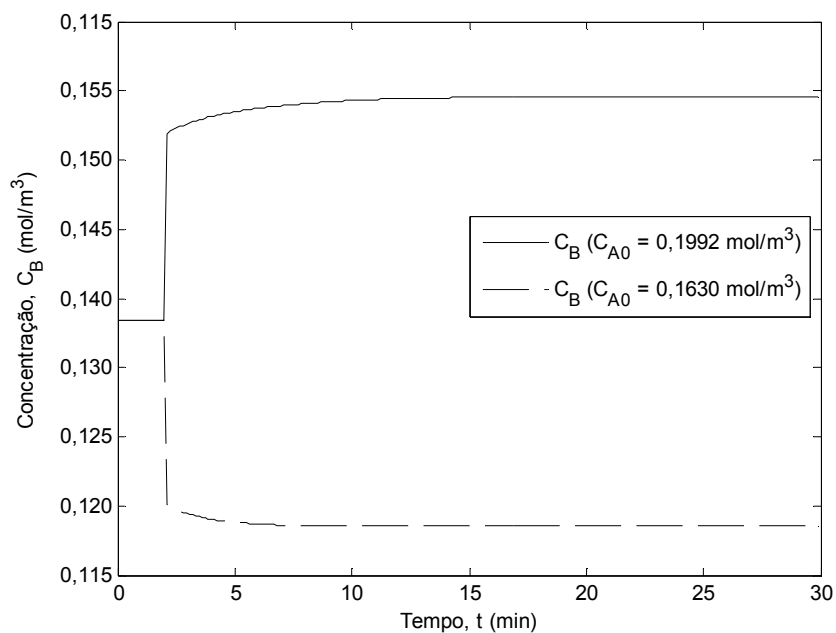


Figura 6.4 - Comportamento dinâmico da concentração para perturbações em C_{A0} .

Os perfis de temperatura nas posições em que esta variável é medida são apresentados nas Figuras 6.5 e 6.6, destacando-se o comportamento não linear da resposta frente a perturbações em C_{A0} . Observa-se também que elevações no valor da concentração de o-xileno na alimentação sempre conduzem a perfis de temperatura mais altos na região contemplada pelos quatro pontos de medida.

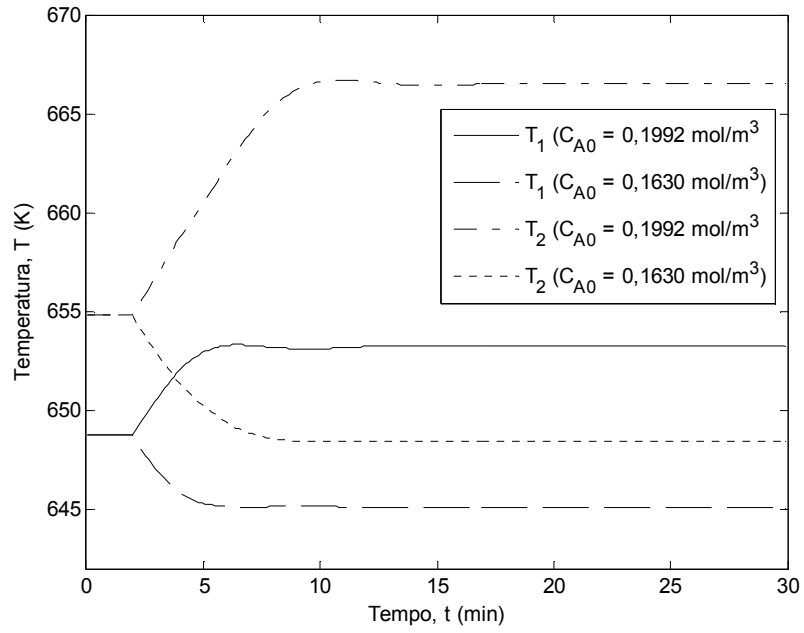


Figura 6.5 - Comportamento dinâmico das temperaturas T_1 e T_2 para perturbações em C_{A0} .

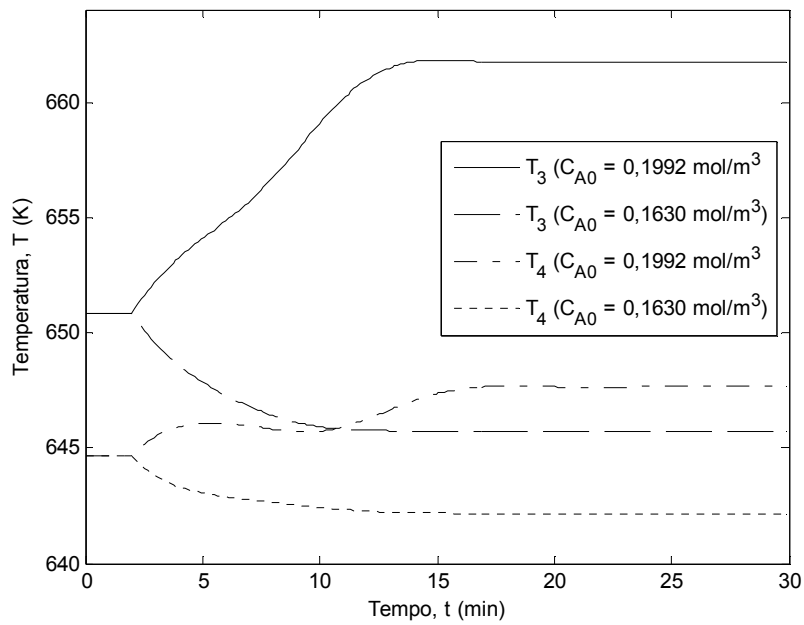


Figura 6.6 - Comportamento dinâmico das temperaturas T_3 e T_4 para perturbações em C_{A0} .

6.3 Tempo de Amostragem

Industrialmente as funções de controle são em grande parte realizadas com o uso de computadores, sendo os cálculos executados a cada intervalo regular de tempo, o qual é chamado de tempo de amostragem (T_s). Tempos menores de amostragem levam a uma correção mais rápida dos cálculos do controlador, o que implica em um melhor desempenho deste.

Há uma forte relação entre o tempo de amostragem do controlador e o processo ao qual ele deve ser integrado. De acordo com Smith e Corripio (2008), o tempo de amostragem de controladores digitais varia de cerca de um terço de um segundo a vários minutos, em função da aplicação. Estes autores destacam ainda que uma boa regra prática consiste em tomar o tempo de amostragem como sendo cerca de um décimo da constante de tempo efetiva do processo. Esta regra prática tem sido considerada em aplicações na área de controle e também na identificação de sistemas (ZANATA, 2005).

Neste trabalho, o tempo de amostragem foi determinado com base no valor da constante de tempo mínima do processo (τ_m), observando-se a resposta dinâmica das variáveis C_B , T_1 , T_2 , T_3 e T_4 , frente a uma perturbação degrau na variável manipulada, T_{c0} . Para essa determinação, fez-se uma perturbação de 1% no valor de T_{c0} , obtendo-se os gráficos mostrados nas Figuras 6.7 e 6.8. Observa-se que a variável C_B (concentração de anidrido ftálico na saída do reator) é aquela que apresenta uma resposta mais rápida, e também que o seu comportamento segue uma dinâmica de processo de primeira ordem. Assim, procedeu-se à determinação do valor da constante de tempo correspondente ao gráfico da Figura 6.7.

Para um processo de primeira ordem a constante de tempo é definida como sendo o tempo necessário para que a resposta a uma perturbação degrau que provoca um perfil crescente atinja o valor de aproximadamente 63% de seu valor de estabilização.

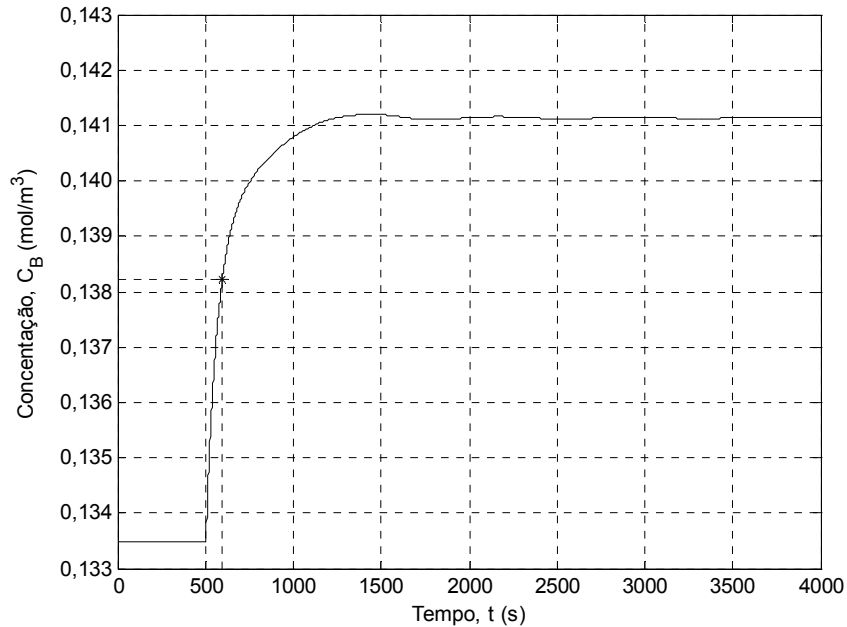


Figura 6.7 - Resposta da concentração de saída de anidrido ftálico para uma perturbação degrau positiva em T_{c0} de 1%.

O cálculo, tendo em vista a definição da constante de tempo, consiste em determinar a concentração correspondente a 63% do valor de estabilização com base na Figura 6.7 e identificar na abscissa do gráfico o tempo correspondente a esse valor de concentração. Esse procedimento também pode ser realizado, de forma mais precisa, diretamente a partir dos valores gerados e usados para o traçado do perfil de concentração na Figura 6.7. Tem-se o seguinte cálculo:

$$(C_B(4000) - C_B(500)) * 0,63 + C_B(500) = (0,1411 - 0,1335) * 0,63 + 0,1335 = 0,1383$$

Sendo: $C_B(500)$ a concentração de B (anidrido ftálico) antes da perturbação degrau, em $t = 500$ segundos, e $C_B(4000)$ a concentração de B plenamente estabilizada, em $t = 4000$ segundos.

O tempo correspondente à concentração de $0,1383 \text{ mol/m}^3$ é de 600 segundos. Assim, a constante de tempo é de 100 segundos ($\tau_m = 600 - 500$).

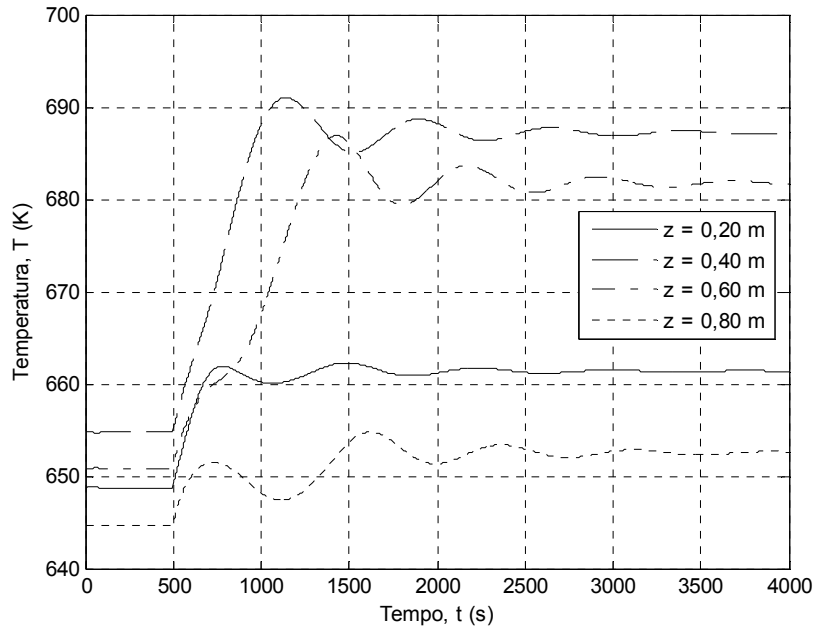


Figura 6.8 - Resposta das temperaturas T_1 , T_2 , T_3 e T_4 a uma perturbação degrau positiva em T_{c0} de 1%.

Considerando-se, então, o valor da constante de tempo encontrado ($\tau_m = 100$ segundos), e aplicando-se a regra proposta por Smith e Corripio (2008), o tempo de amostragem (T_s) deve ser tomado como sendo igual a um décimo da constante de tempo efetiva do processo. Assim, para o problema em questão, resultou um tempo de 10 segundos.

Feita a sintonia com esse tempo de amostragem, foram realizadas simulações para verificar o desempenho dos algoritmos de controle propostos frente a modificações no tempo de amostragem em torno do valor de sintonia. As Figuras 6.9 a 6.15 apresentam sequências de gráficos indicando o seu efeito nos perfis das variáveis controlada e manipulada.

No caso dos controladores diretos PI (Figuras 6.9 e 6.10) e FZ-PI (Figuras 6.11 e 6.12), verifica-se o mesmo desempenho das variáveis controlada e manipulada para tempos de amostragem menores e maiores do que 10 segundos. O valor máximo testado foi de 20 segundos, igual ao dobro do tempo de amostragem estimado pela regra heurística, o que indica que uma vez sintonizado o sistema responderia de forma adequada para uma ampla faixa de valores de tempo de amostragem.

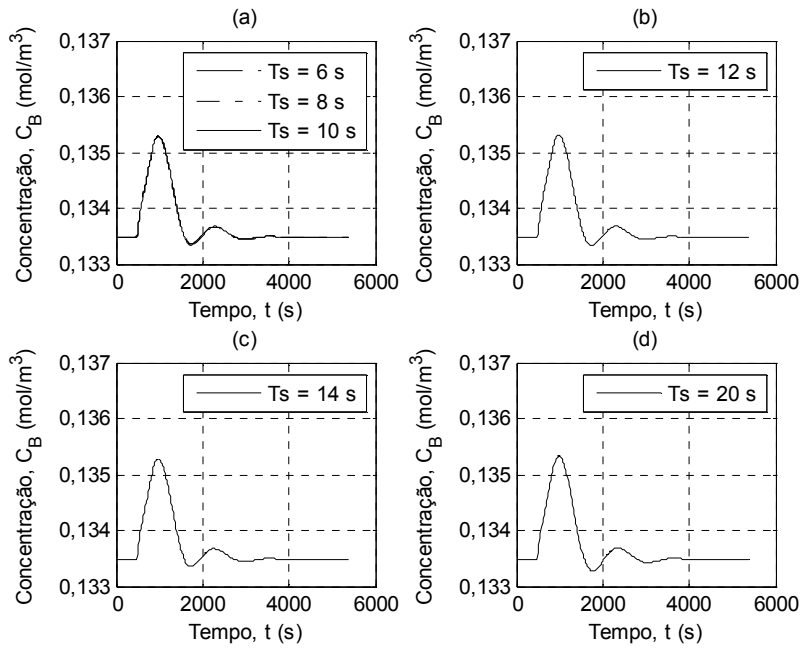


Figura 6.9 - Efeito do tempo de amostragem na variável controlada (controlador PI).

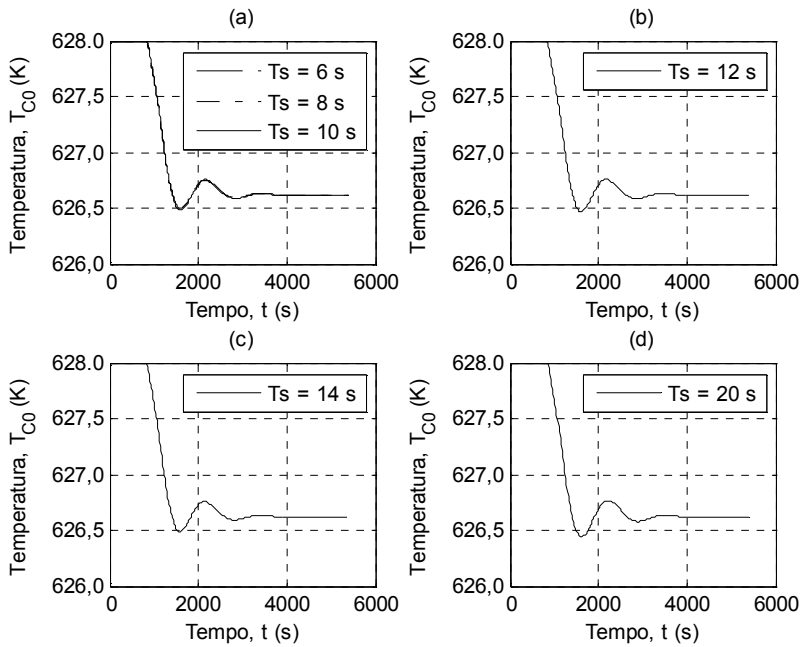


Figura 6.10 - Efeito do tempo de amostragem na variável manipulada (controlador PI).

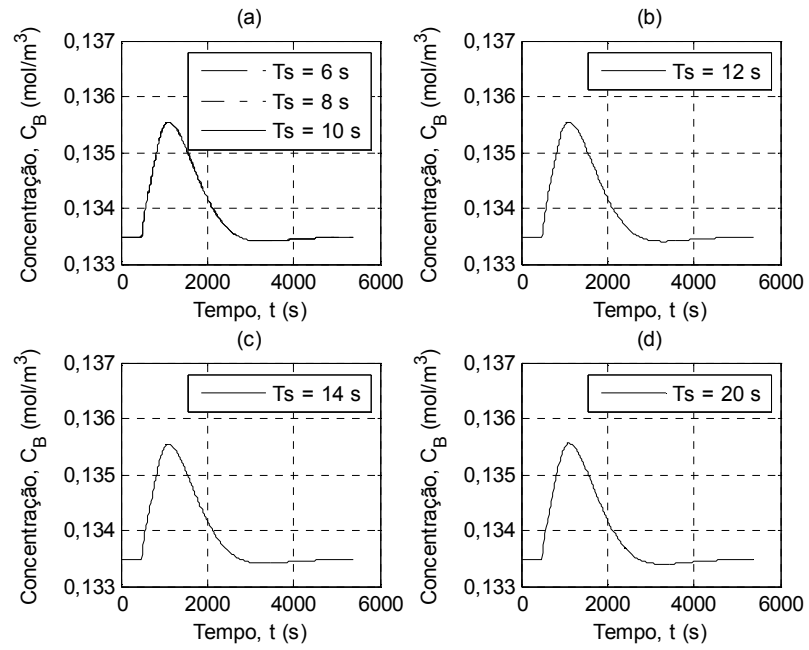


Figura 6.11 - Efeito do tempo de amostragem na variável controlada (controlador FZ-PI).

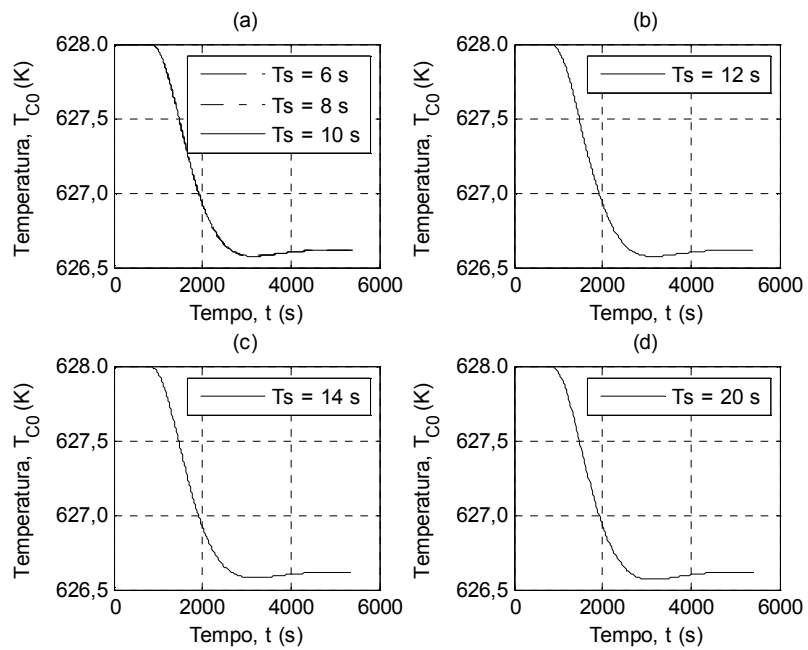


Figura 6.12 - Efeito do tempo de amostragem na variável manipulada (controlador FZ-PI).

Para o caso do controlador PI cascata (Figuras 6.13 e 6.14) verifica-se um comportamento equivalente àquele obtido para os controladores diretos, mas com a diferença de que o desempenho começa a apresentar problemas a partir de $T_s = 16$ segundos, ocorrendo oscilações mais intensas em determinados instantes na variável manipulada, como pode ser observado na Figura 6.14.

No caso do controlador FZ-PI cascata (Figuras 6.15 e 6.16), para $T_s = 16$ segundos verifica-se uma perda de desempenho do sistema, uma vez que a resposta da variável manipulada passa a ser permanentemente oscilatória.

Esses resultados mostram que o tempo de amostragem torna-se mais sensível quando se utiliza a estrutura de controle cascata, em que se utilizam quatro medidas simultâneas de temperatura juntamente com a medida de concentração. Neste caso, a sintonia feita para um tempo de amostragem de 10 segundos perde sua eficiência, proporcionando uma resposta inadequada da variável manipulada (Figuras 6.15d e 6.16d) quando este tempo é aumentado. Vê-se que para operar com um tempo de amostragem superior a 15 segundos os controladores com estrutura cascata deveriam ser resintonizados.

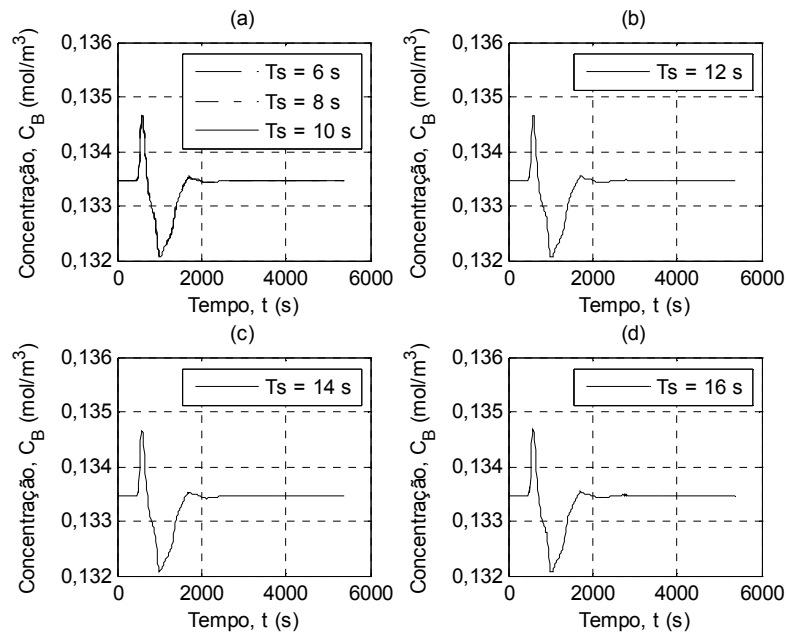


Figura 6.13 - Efeito do tempo de amostragem na variável controlada (controlador PI cascata).

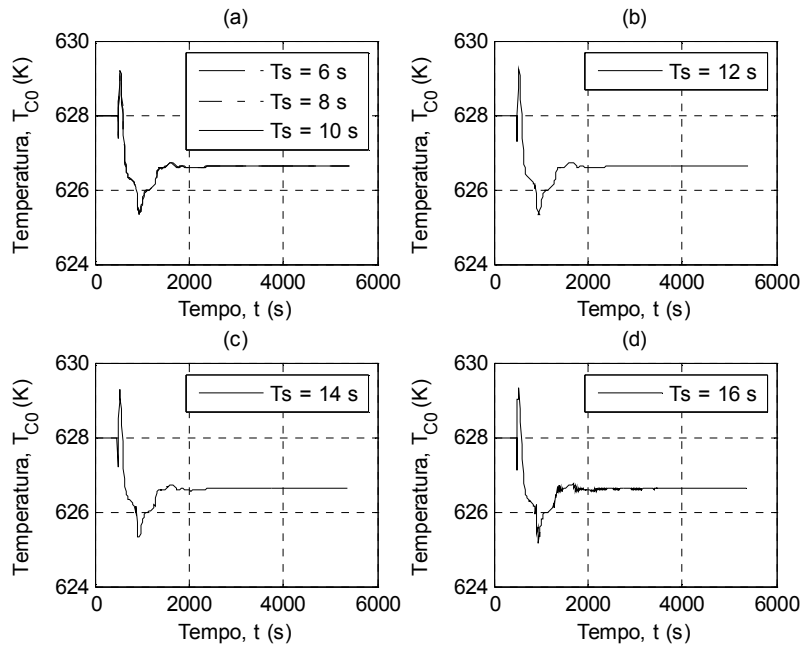


Figura 6.14 - Efeito do tempo de amostragem na variável manipulada (controlador PI cascata).

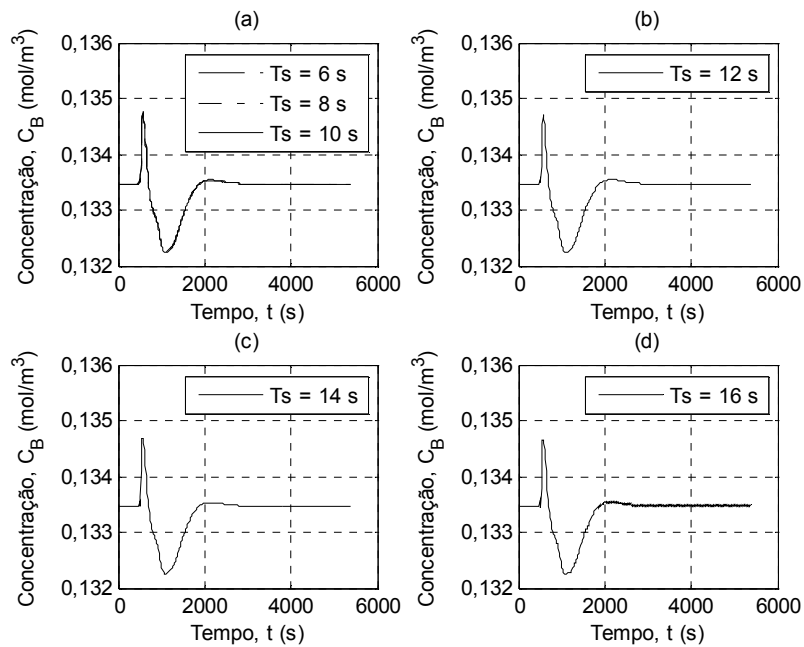


Figura 6.15 - Efeito do tempo de amostragem na variável controlada (controlador FZ-PI cascata).

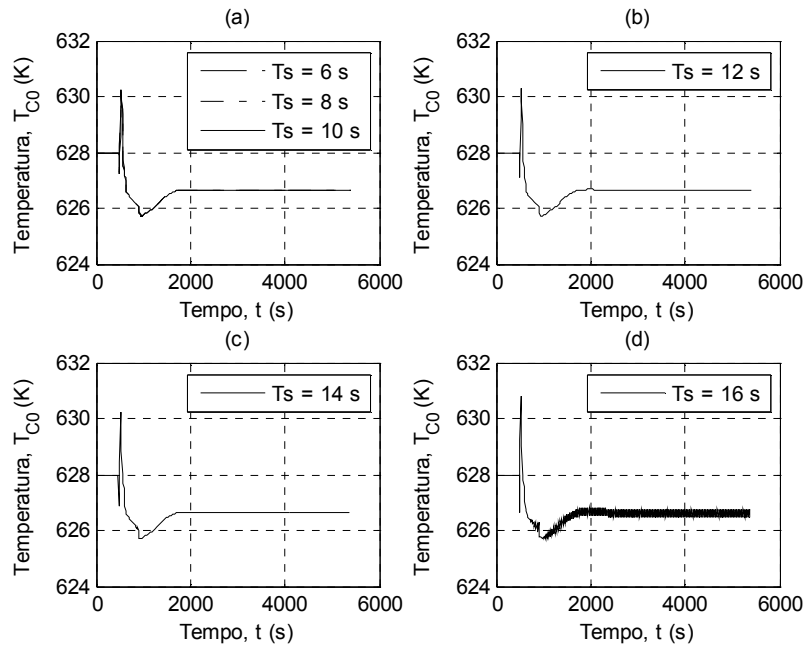


Figura 6.16 - Efeito do tempo de amostragem na variável manipulada (controlador FZ-PI cascata).

6.4 Parâmetros de Sintonia dos Controladores

Conforme descrito no capítulo anterior, foram propostas duas estruturas com estratégia do tipo *feedback* para o controle do reator: uma estrutura simples ou controle direto e uma estrutura cascata concentração-temperatura. Em ambas as estruturas foram consideradas as ações proporcional e integral no modo convencional e usando lógica *fuzzy*, obtendo-se quatro controladores diferentes: PI, FZ-PI, PI Cascata e FZ-PI Cascata.

A sintonia dos controladores foi feita por tentativa e erro, a partir de várias simulações, considerando-se como critério de sintonia o menor tempo de acomodação (T_a), a menor sobre-elevação (SE) e os menores valores dos índices de desempenho (ISE , IAE e $ITAE$). Para a sintonia, considerou-se um atraso de medida na concentração de saída da variável controlada (C_B) de 6 minutos, como propõem Chou e Wu (2007), de modo a dar conta do tempo médio necessário para medida desta variável através de um sistema *online* (cromatógrafo, por exemplo).

Fez-se a sintonia dos controladores mediante aplicação de uma perturbação degrau de +4% na temperatura de entrada do fluido reacional (T_0), com o seu valor passando de 628 K para 653,12 K. Após diversas simulações realizadas separadamente para cada controlador proposto, cujas expressões de cálculo foram detalhadas no capítulo anterior, resultaram os seguintes valores para os parâmetros: (i) Controlador PI – $K_c = 340 \text{ K m}^3 \text{ mol}^{-1}$; $\tau_i = 300 \text{ s}$; (ii) Controlador FZ-PI – $K_e = 2,559$; $K_d = 1,600$; $K = 0,156$; (iii) Controlador PI cascata – $K_{c1} = 268 \text{ K m}^3 \text{ mol}^{-1}$; $\tau_{i1} = 90 \text{ s}$; $K_{c2} = 4,8$; $\tau_{i2} = 82 \text{ s}$; (iv) Controlador FZ-PI cascata – $K_{e1} = 1,339$; $K_{d1} = 1,873$; $K_1 = 1,258$; $K_{e2} = 1,851$; $K_{d2} = 2,265$; $K_2 = 0,279$.

Os índices de desempenho correspondentes à sintonia para estes valores de parâmetros encontram-se indicados na Tabela 6.1, bem como os valores da sobre-elevação (SE), da temperatura máxima ($\max(T(t))$) que ocorre no reator depois da perturbação (pico máximo de temperatura), da temperatura máxima após atingir-se o estado estacionário ($\max(T_{est})$) e da temperatura final de estabilização da variável manipulada (T_{c0est}). O ponto de estabilização, conforme apresentado na Seção 5.6, foi tomado como sendo o instante em que a variável controlada (C_B) entra definitivamente no intervalo limitado pelos valores-limite calculados pelas Equações (5.62) e (5.63).

Tabela 6.1 - Parâmetros de desempenho – perturbação em T_0 de +4% ($T_0 = 653,12 \text{ K}$).

Parâmetro	PI	FZ-PI	PI CASCATA	FZ-PI CASCATA
T_a (min)	35,83	35,83	18,67	22,00
ISE ($\text{mol}^2 \text{ m}^{-6} \text{ min}^2$)	$2,68 \times 10^{-5}$	$5,91 \times 10^{-5}$	$1,31 \times 10^{-5}$	$1,37 \times 10^{-5}$
IAE ($\text{mol m}^{-3} \text{ min}$)	0,0218	0,0406	0,0139	0,0157
$ITAE$ ($\text{mol m}^{-3} \text{ min}^2$)	0,5555	1,1988	0,3336	0,4009
SE (mol m^{-3})	0,0018	0,0021	0,0014	0,0013
$\max(T(t))$ (K)	670,48	670,53	664,25	664,12
$\max(T_{est})$ (K)	663,94	663,95	663,94	663,94
T_{c0est} (K)	626,62	626,62	626,62	626,62

Os resultados mostram que os quatro controladores levam à mesma situação estabilizada, havendo uma equivalência entre as duas estruturas diretas (PI e FZ-PI) e as duas estruturas cascatas (PI e FZ-PI) quanto ao estado estacionário final que se atinge após a perturbação. Entretanto, estas últimas, além de apresentarem melhores índices de desempenho, garantem a manutenção de uma situação térmica com melhor controle da formação de picos elevados de temperatura no reator ao longo do tempo.

6.5 Análise de Desempenho das Estruturas de Controle

Nesta seção, faz-se a apresentação de uma série de gráficos que ilustram o desempenho dos quatro controladores. Nos testes realizados foram consideradas perturbações na temperatura de entrada do fluido reacional (T_0) e na concentração de entrada de o-xileno (C_{A0}). As perturbações degrau são aplicadas no instante de tempo igual a 8 minutos. Para a variável T_0 os valores considerados são $T_0 = 653,12$ K, $602,88$ K e 658 K, os quais correspondem, respectivamente, a perturbações de $\pm 4\%$ do valor de referência ($T_0 = 628$ K) e a uma perturbação de $+30$ K, a qual leva T_0 a um valor próximo do limite superior da faixa de operação desta variável. As perturbações impostas à variável C_{A0} foram de $\pm 3\%$ e $+5\%$ em relação ao valor de referência ($C_{A0} = 0,1811$ mol/m³), correspondendo aos valores $C_{A0} = 0,1865$ mol/m³, $0,1757$ mol/m³ e $0,1902$ mol/m³, respectivamente.

6.5.1 Perfil Evolutivo da Temperatura ao Longo do Reator

As Figuras 6.17 a 6.28 mostram o perfil evolutivo da temperatura ao longo do reator, após uma perturbação degrau de $+4\%$ na temperatura de entrada do fluido reacional, a qual passa ao valor $T_0 = 653,12$ K no instante $t = 8$ min.

As Figuras 6.17 e 6.18 exibem o comportamento evolutivo da temperatura para o sistema em malha aberta. Observa-se que 7,17 minutos após a perturbação tem-se o perfil mais elevado com o pico de temperatura atingindo um valor de $670,53$ K, e depois o perfil se encaminha para

um novo perfil estacionário com um pico de temperatura de 669,65 K, como pode ser visto na Figura 6.18.

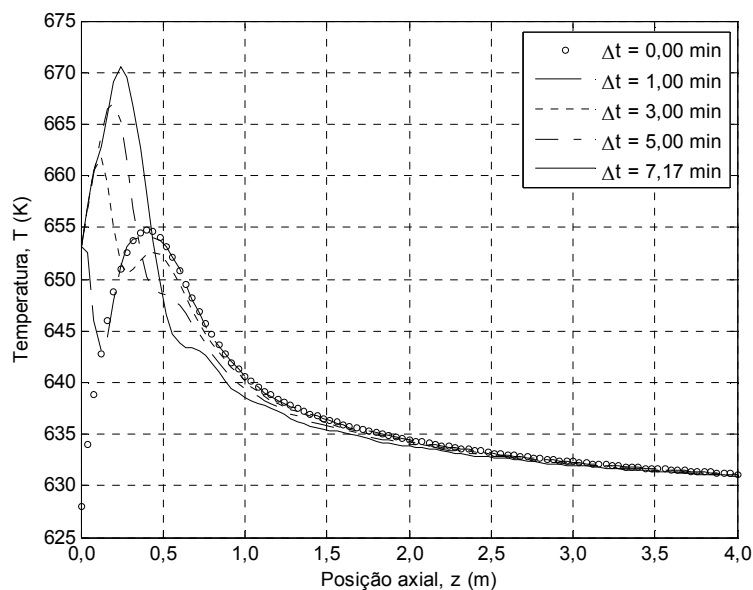


Figura 6.17 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator em malha aberta com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo.

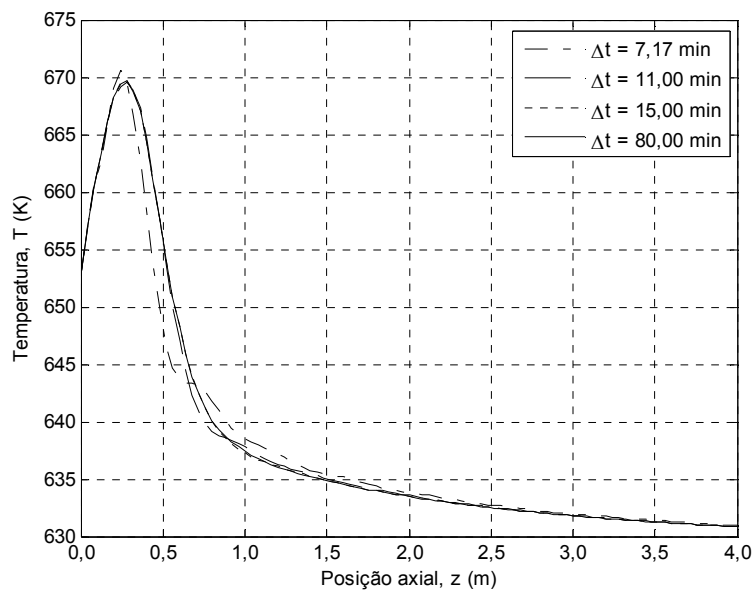


Figura 6.18 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator em malha aberta com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo.

As Figuras 6.19 a 6.26 apresentam a situação evolutiva dos perfis de temperatura em malha fechada para os quatro controladores considerados.

Os controladores PI (Figuras 6.19 e 6.20) e FZ-PI (Figuras 6.21 e 6.22), apesar de levarem o perfil de temperatura a um patamar menor, mais próximo da situação anterior à perturbação, comparativamente à situação que resultaria em malha aberta, mostram-se, contudo, ineficientes para evitar a elevação excessiva do pico de temperatura, o qual atinge, após 7,17 minutos, um valor próximo ao que ocorre em malha aberta (670,53 K), como pode ser verificado também a partir da Tabela 6.1.

Os controladores com estrutura cascata PI (Figuras 6.23 e 6.24) e FZ-PI (Figuras 6.25 e 6.26) não somente levam a um perfil final de temperatura mais próximo daquele de referência, como também garantem o controle do pico de temperatura, o qual é mantido em valores abaixo daquele em malha aberta (670,53 K) como pode ser constatado a partir dos gráficos e dos valores dados na Tabela 6.1.

Destaca-se ainda que, independentemente do tipo de controle aplicado, o perfil de temperatura final obtido no novo estado estacionário, após a imposição de uma perturbação degrau permanente na temperatura de alimentação do fluido reacional, é sempre o mesmo. Esse perfil tem a mesma temperatura de pico ($\max(T_{est})$) e o mesmo valor final da variável manipulada (T_{cest}) para os quatro controladores, conforme indicado na Tabela 6.1 e como pode ser observado também nos perfis de temperatura mostrados na Figura 6.27.

A Figura 6.28 ilustra a diferença entre os perfis de temperatura que são obtidos com as estruturas de controle direto e as estruturas cascatas, considerando-se o instante de tempo em que ocorre o pico de temperatura. Esses tempos são de 7,17 minutos para o PI e o FZ-PI e 6,17 e 6,33 minutos para o PI cascata e FZ-PI cascata, respectivamente, após a aplicação da perturbação degrau à variável T_0 .

Embora o objetivo básico seja a regulação da concentração de anidrido ftálico na saída do reator, em função do caráter fortemente exotérmico da reação de oxidação que ocorre no leito catalítico, já se destacou que se coloca também como questão crucial a manutenção de condições térmicas adequadas e seguras na operação do sistema. Nesse sentido, os resultados mostrados

evidenciam o melhor desempenho dos controladores com estrutura cascata quanto ao controle do pico de temperatura.

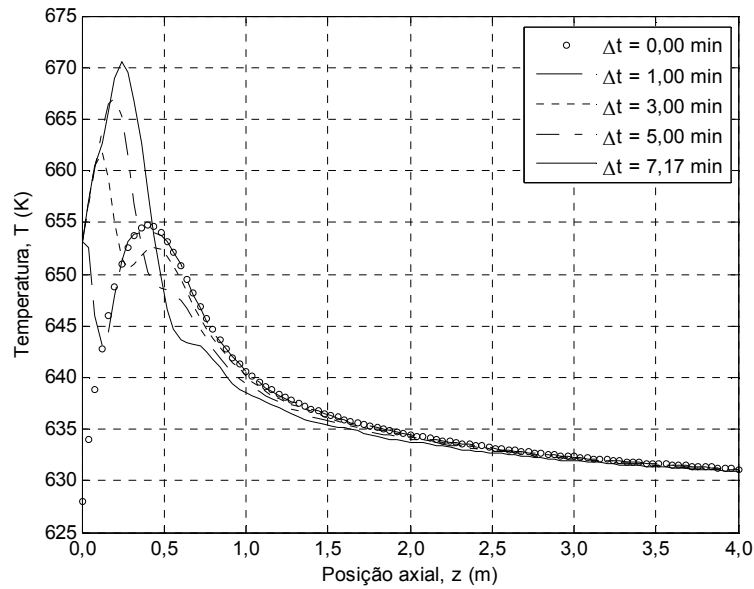


Figura 6.19 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo – Controlador PI.

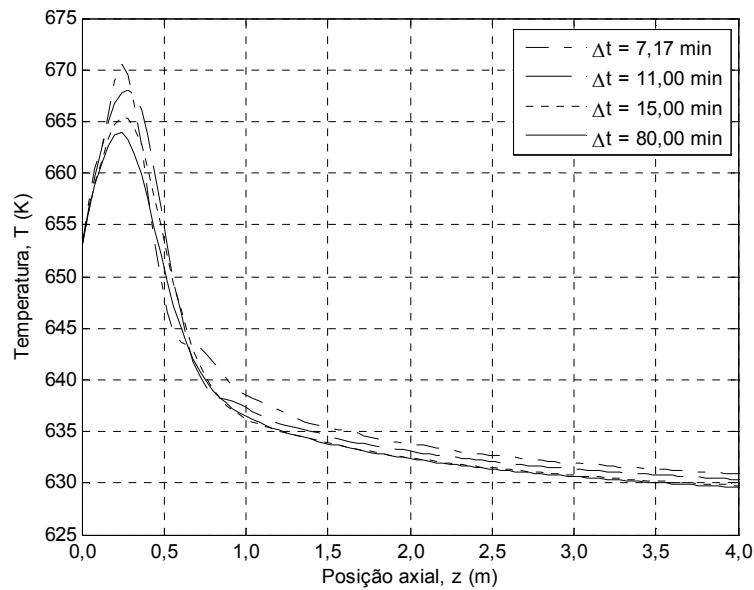


Figura 6.20 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo – Controlador PI.

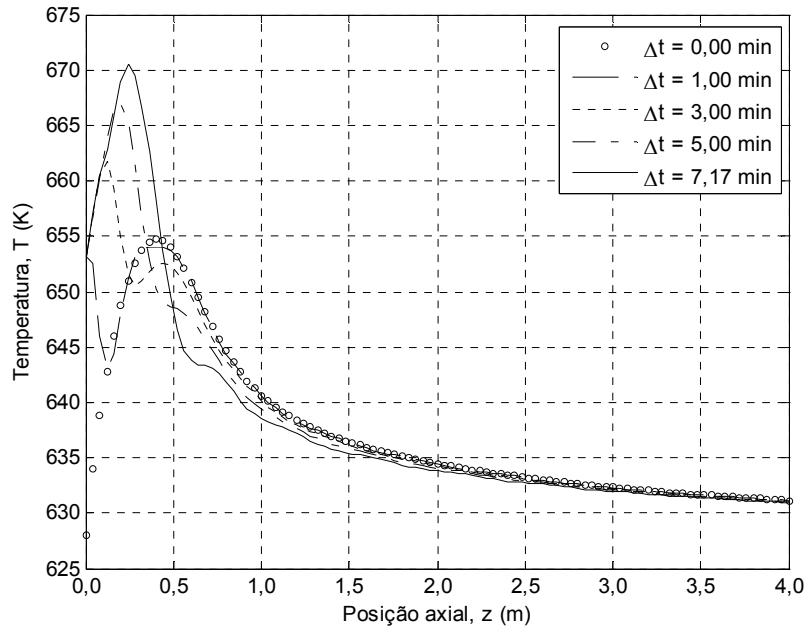


Figura 6.21 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo – Controlador FZ-PI.

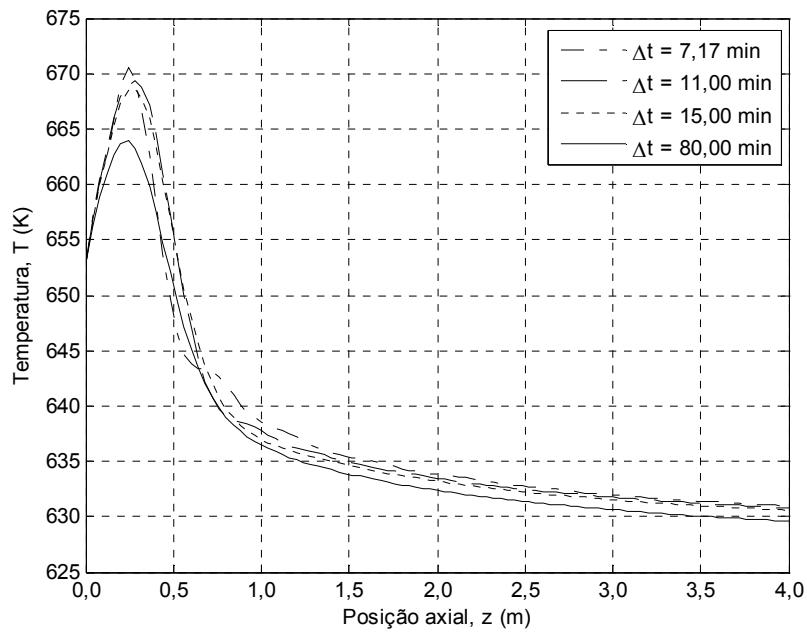


Figura 6.22 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo – Controlador FZ-PI.

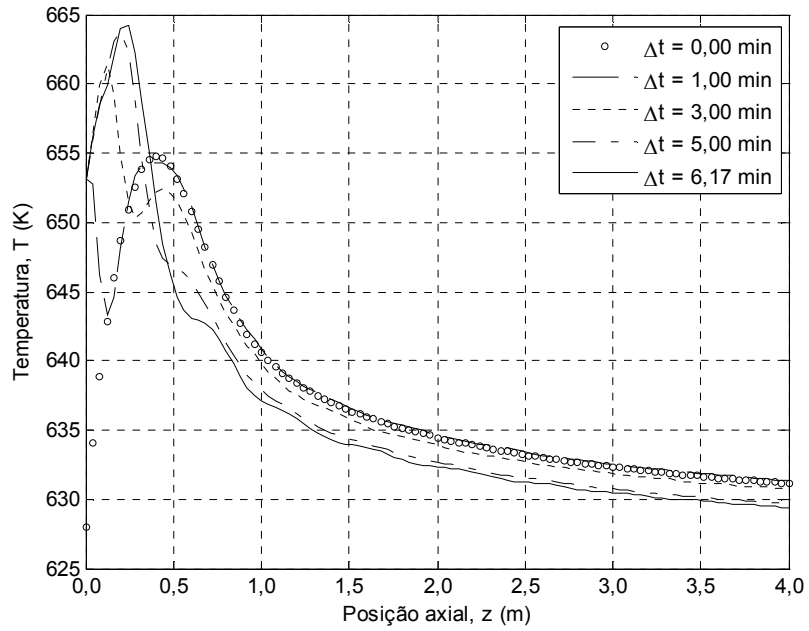


Figura 6.23 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo – Controlador PI cascata.

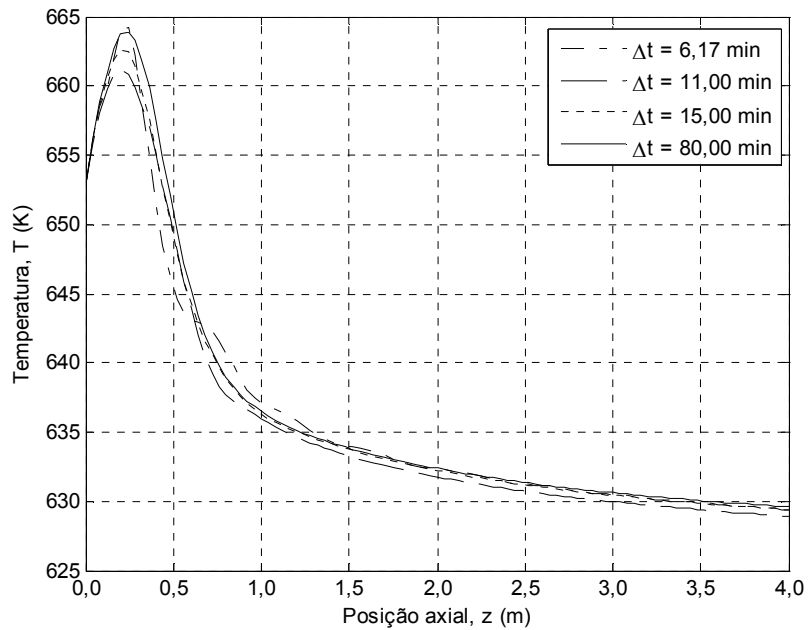


Figura 6.24 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo – Controlador PI cascata.

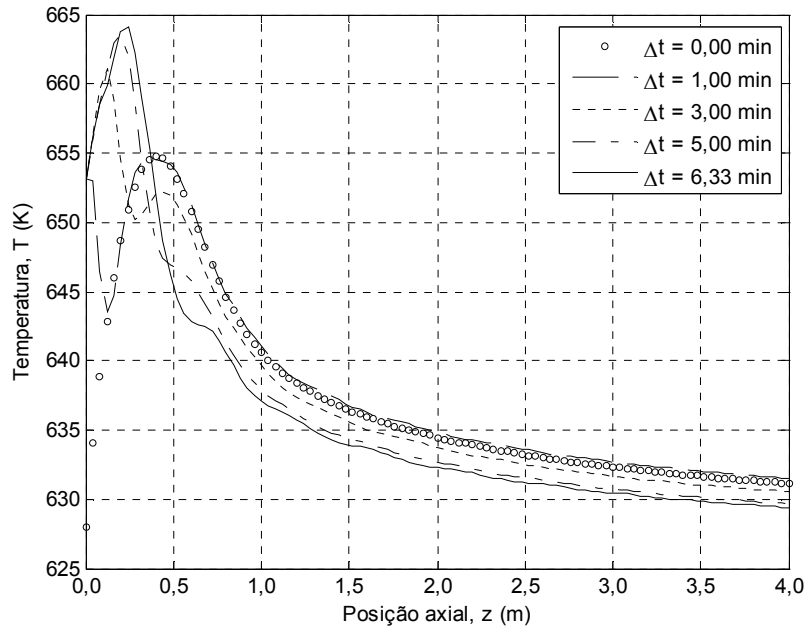


Figura 6.25 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, até o instante do pico máximo – Controlador FZ-PI cascata.

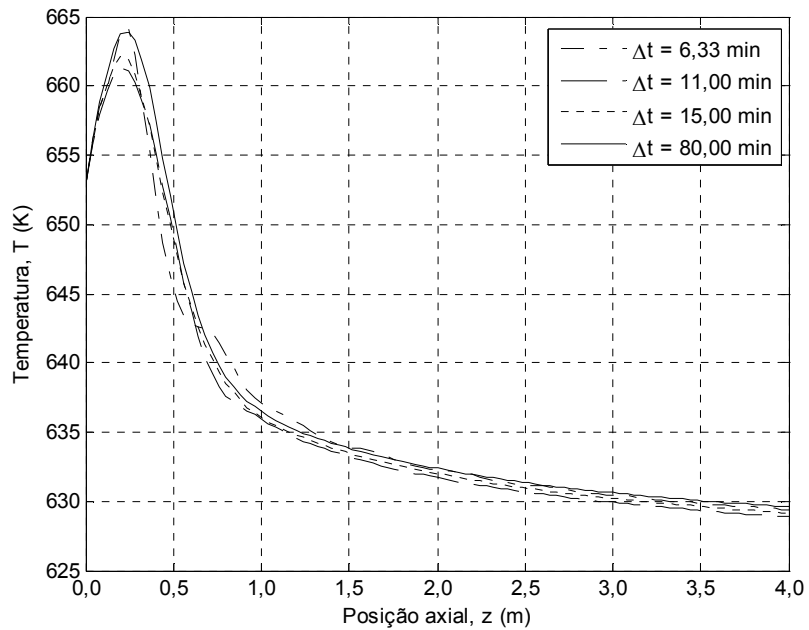


Figura 6.26 - Perfis evolutivos de temperatura ao longo do reator com perturbação em T_0 de +4%, após o instante do pico máximo – Controlador FZ-PI cascata.

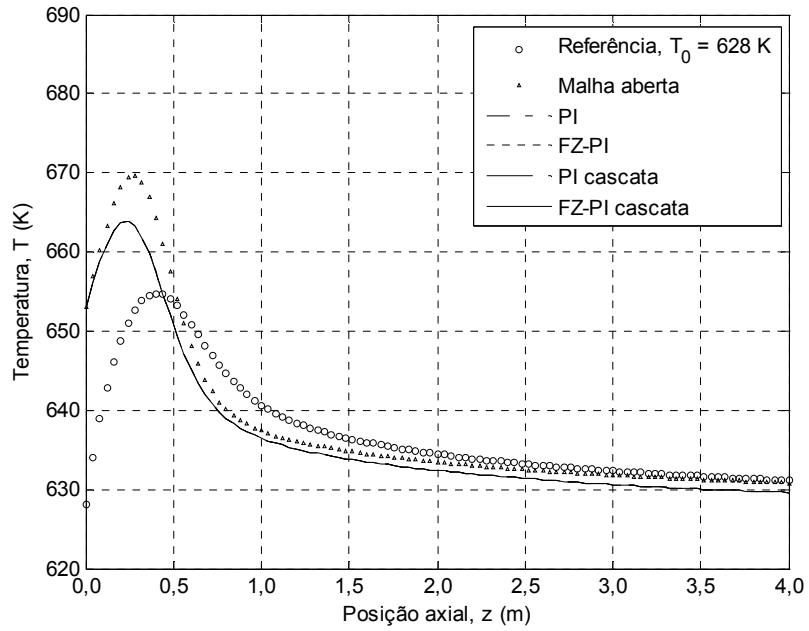


Figura 6.27 - Perfis de temperatura estacionários para uma perturbação em T_0 de +4%.

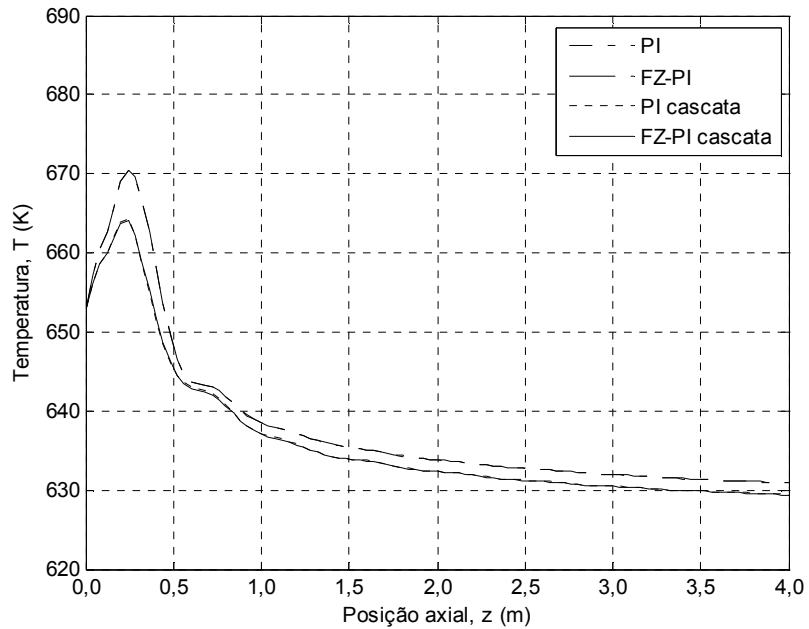


Figura 6.28 - Perfis de temperatura ao longo do reator no instante de tempo de máxima temperatura após a perturbação degrau de +4% em T_0 .

6.5.2 Perfis Comparativos de Controle para Perturbações em T_0

Nas Figuras 6.29 a 6.32 são indicados os perfis comparativos dos quatro tipos de estruturas de controle consideradas, obtidos a partir de uma perturbação degrau em T_0 de +4% ($T_0 = 653,12$ K). São mostrados os perfis resultantes para a variável controlada (C_B), para a variável manipulada (T_{c0}) e para as temperaturas nas posições $z = 0,20$ m, $0,40$ m, $0,60$ m e $0,80$ m, designadas como T_1 , T_2 , T_3 e T_4 , respectivamente.

Observando-se as curvas de resposta das variáveis controlada (Figura 6.29) e manipulada (Figura 6.30), nota-se que as estruturas cascatas apresentam uma nítida vantagem em relação àquelas de controle direto, o que fica demonstrado quantitativamente pelos valores que se obtêm para os parâmetros de desempenho dos controladores, indicados na Tabela 6.1. As curvas mostradas nas Figuras 6.31 e 6.32 permitem verificar que as temperaturas na região em que se forma o pico, e onde se localizam as quatro medidas tomadas, são bem controladas pelas estruturas cascatas. Por outro lado, estrutura de controle direto é focada apenas no objetivo de regular a concentração de anidrido ftálico na saída do reator, sem nenhum compromisso com a situação térmica que ocorre no sistema após perturbações nas variáveis de entrada.

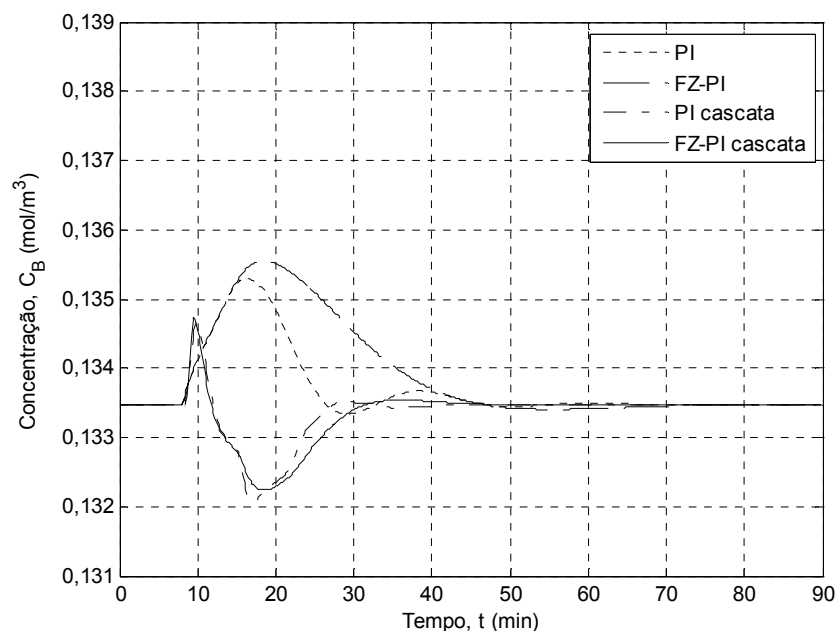


Figura 6.29 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em T_0 de +4%.

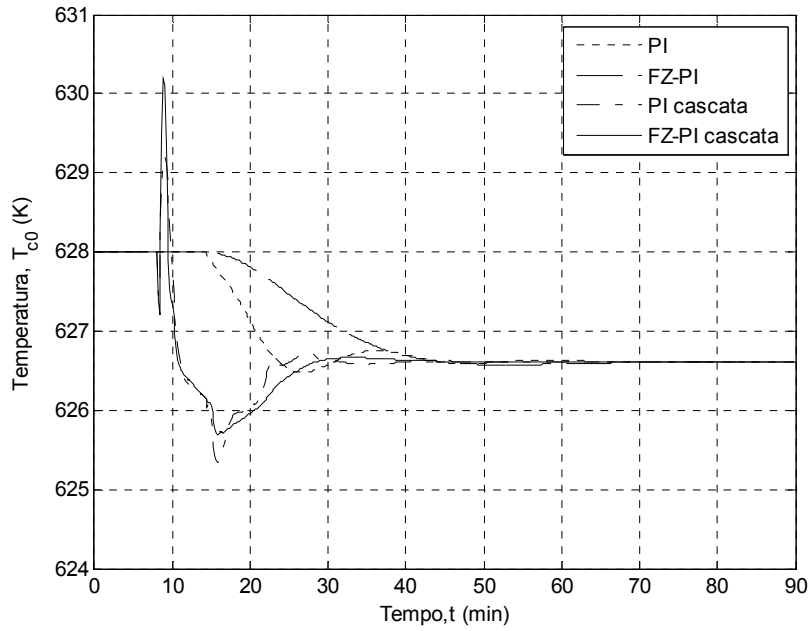


Figura 6.30 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em T_0 de +4%.

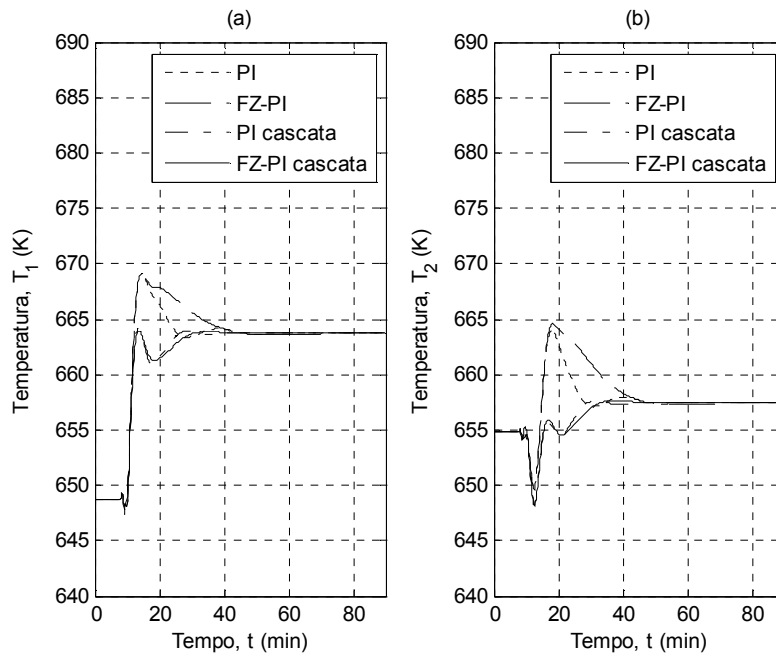


Figura 6.31 - Respostas das temperaturas em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em T_0 de +4%.

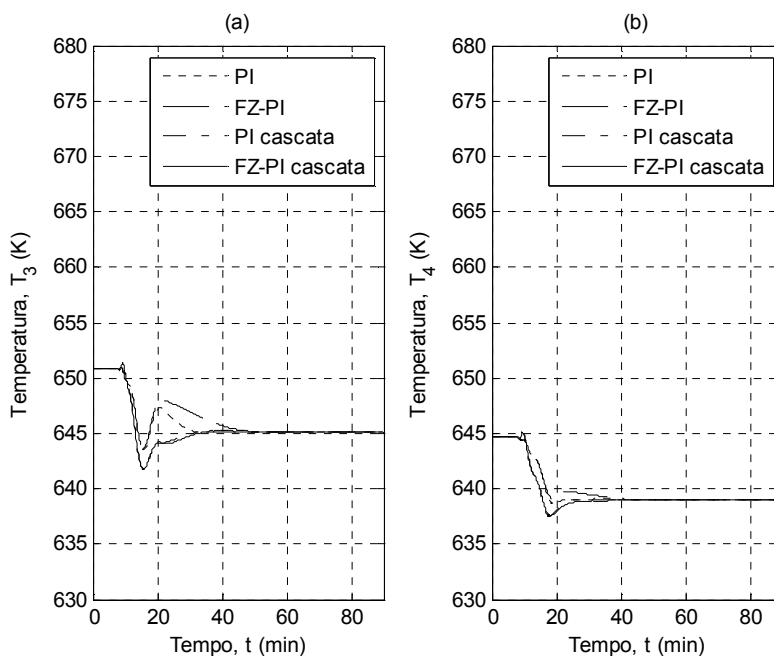


Figura 6.32 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em T_0 de $+4\%$.

Nas estruturas cascatas, além da medida da concentração de anidrido ftálico na saída do reator, consideram-se, também, medidas da temperatura em posições específicas ao longo do reator, o que faz com que a ação da malha secundária (malha de controle de temperatura) atue de forma antecipada, contribuindo assim para um controle mais rápido e para eliminar a ocorrência de picos elevados de temperatura.

As Figuras 6.33 a 6.36 mostram as respostas da variável controlada, da variável manipulada e da temperatura nas quatro posições consideradas, para uma perturbação degrau permanente em T_0 de -4% ($T_0 = 602,88$ K). Os correspondentes valores dos parâmetros de desempenho dos controladores são dados na Tabela 6.2.

Nesta situação, como a perturbação é negativa, então, para manter o nível global de conversão, o sistema de controle deve conduzir o reator a um perfil estacionário de temperatura que compense o rebaixamento das condições térmicas da mistura reacional na entrada.

Tabela 6.2 - Parâmetros de desempenho – perturbação em T_0 de -4% ($T_0 = 602,88$ K).

Parâmetros	PI	FZ-PI	PI CASCATA	FZ-PI CASCATA
T_a (min)	18,50	34,67	19,50	22,17
ISE ($\text{mol}^2 \text{m}^{-6} \text{min}^2$)	$2,35 \times 10^{-6}$	$5,61 \times 10^{-6}$	$3,49 \times 10^{-6}$	$4,18 \times 10^{-6}$
IAE ($\text{mol m}^{-3} \text{min}$)	0,0068	0,0129	0,0077	0,0092
$ITAE$ ($\text{mol m}^{-3} \text{min}^2$)	0,1705	0,3764	0,1839	0,2379
SE (mol m^{-3})	–	–	$6,78 \times 10^{-4}$	$7,10 \times 10^{-4}$
$\max(T(t))$ (K)	657,12	657,12	658,23	658,27
$\max(T_{est})$ (K)	654,34	654,34	654,34	654,34
T_{c0est} (K)	628,46	628,46	628,46	628,46

A questão da ocorrência de descontrole térmico neste caso não se coloca, tendo em vista a condição de menor entalpia dos reagentes que alimentam o reator.

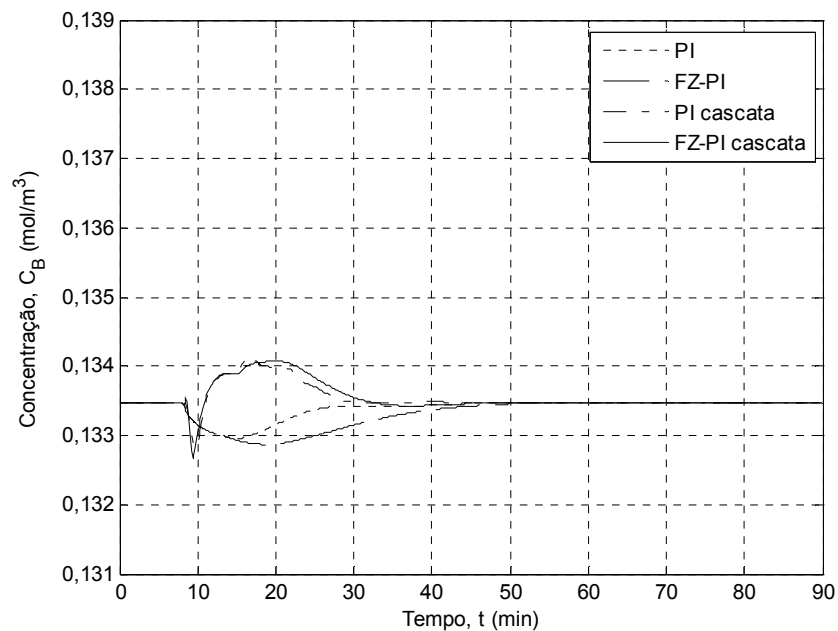


Figura 6.33 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em T_0 de -4%.

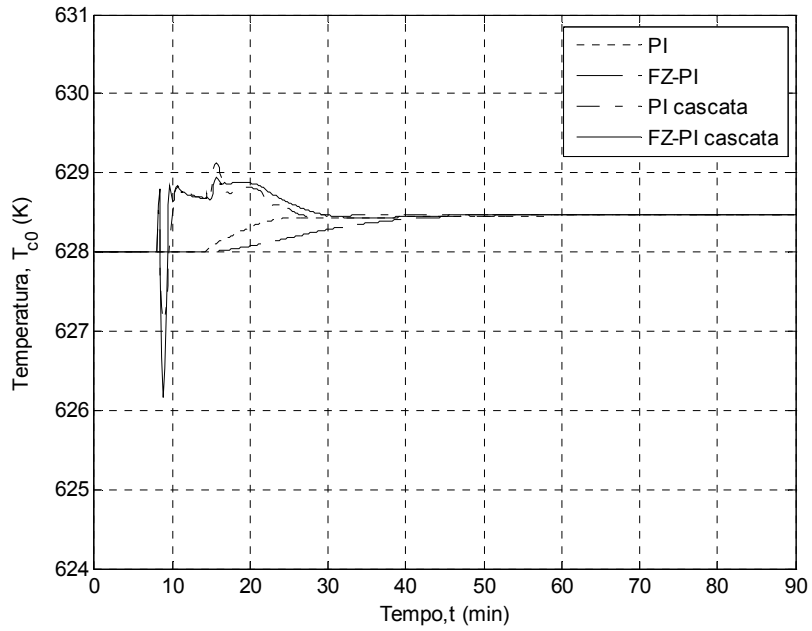


Figura 6.34 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em T_0 de -4%.

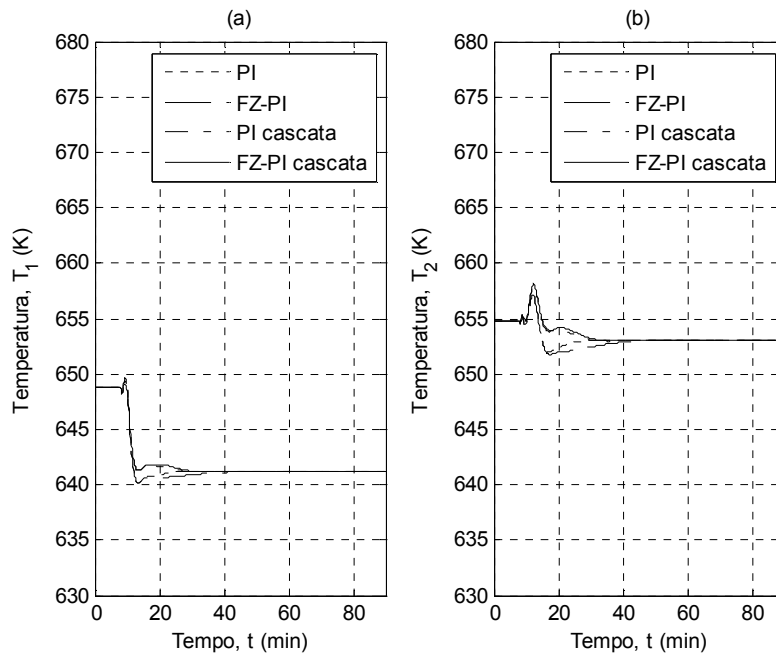


Figura 6.35 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em T_0 de -4%.

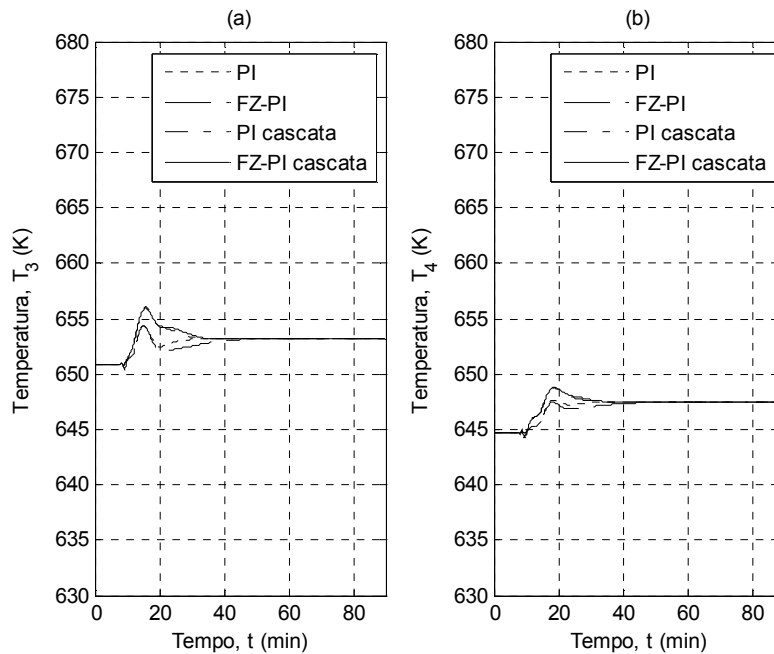


Figura 6.36 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em T_0 de -4%.

Uma análise dos gráficos com as respostas das variáveis controlada e manipulada (Figuras 6.33 e 6.34), bem como dos valores dos parâmetros de desempenho dos controladores para o caso de uma perturbação negativa em T_0 (Tabela 6.2), mostra que o controlador PI proporciona uma ação corretiva mais eficiente. Isso ocorre porque neste caso não há possibilidade de descontrole térmico do reator.

Para testar a robustez das estruturas de controle propostas, aplicou-se uma perturbação mais drástica, considerando-se um degrau permanente de +30 K na temperatura de entrada da mistura reacional. Neste caso, T_0 passa a ser igual a 658 K, valor próximo do limite máximo de operabilidade do sistema, conforme identificado no estudo de sensibilidade paramétrica apresentado no Capítulo 4.

As Figuras 6.37 a 6.40 mostram os perfis comparativos da resposta das variáveis controlada e manipulada e da temperatura nas quatro posições de medida considerando esta perturbação ($T_0 = 658$ K). Os parâmetros de desempenho dos controladores são dados na Tabela 6.3.

Tabela 6.3 - Parâmetros de desempenho – perturbação em T_0 de +30 K ($T_0 = 658$ K).

Parâmetro	PI	FZ-PI	PI CASCATA	FZ-PI CASCATA
T_a (min)	56,33	57,17	28,33	28,33
ISE ($\text{mol}^2 \text{m}^{-6} \text{min}^2$)	$9,11 \times 10^{-5}$	$1,79 \times 10^{-4}$	$2,47 \times 10^{-5}$	$2,52 \times 10^{-5}$
IAE ($\text{mol m}^{-3} \text{min}$)	0,0453	0,0700	0,0189	0,0210
$ITAE$ ($\text{mol m}^{-3} \text{min}^2$)	1,3012	2,1256	0,4498	0,5276
SE (mol m^{-3})	0,0034	0,0038	0,0020	0,0017
$\max(T(t))$ (K)	684,37	684,78	670,55	670,18
$\max(T_{est})$ (K)	669,26	669,29	669,26	669,26
T_{c0est} (K)	625,90	625,91	625,91	625,91

Como já se concluiu dos resultados anteriores, os distúrbios positivos na temperatura da corrente de alimentação dos reagentes constituem a situação mais problemática em termos de controle do reator. Nestas situações, faz-se necessário um mecanismo de regulação que dê conta de evitar uma elevação excessiva de temperatura na região de entrada do reator, decorrente do aumento da taxa de reação e conseqüente liberação de calor.

Os gráficos de resposta das variáveis controlada e manipulada (Figuras 6.37 e 6.38), e os valores dos parâmetros de desempenho dos controladores (Tabela 6.3), evidenciam a superioridade das estruturas de controle cascata. As estruturas de controle direto, baseadas apenas na medida da variável controlada, apresentam índices de desempenho piores. O restabelecimento da concentração de anidrido ftálico na saída do reator ao seu valor de *set point* demora mais para ser conseguido e, ao mesmo tempo, o pico de temperatura se eleva a patamares equivalentes aos que ocorreriam se o sistema operasse em malha aberta. Esse comportamento reflete marcadamente o atraso de 6 minutos considerado na medida da variável controlada.

As estruturas cascatas, por incluírem em sua lei de controle ações que são calculadas em função não só da medida da variável controlada, mas também das medidas da temperatura em

quatro posições na região de entrada do reator, proporcionam uma atuação antecipativa muito eficiente, impedindo a elevação excessiva do pico de temperatura.

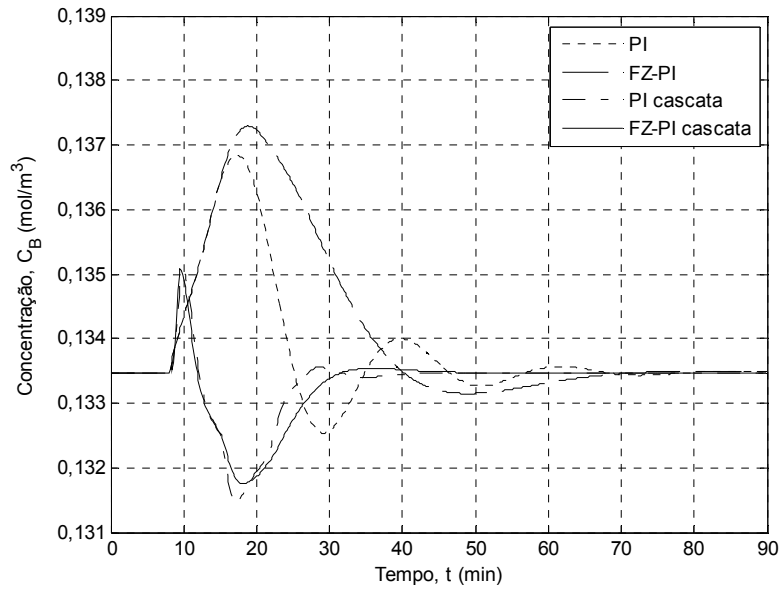


Figura 6.37 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em T_0 de +30 K.

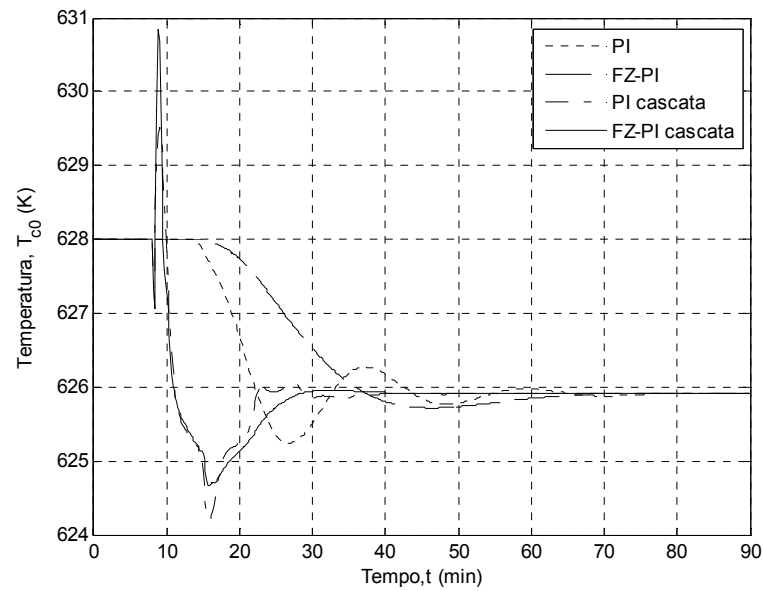


Figura 6.38 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em T_0 de +30 K.

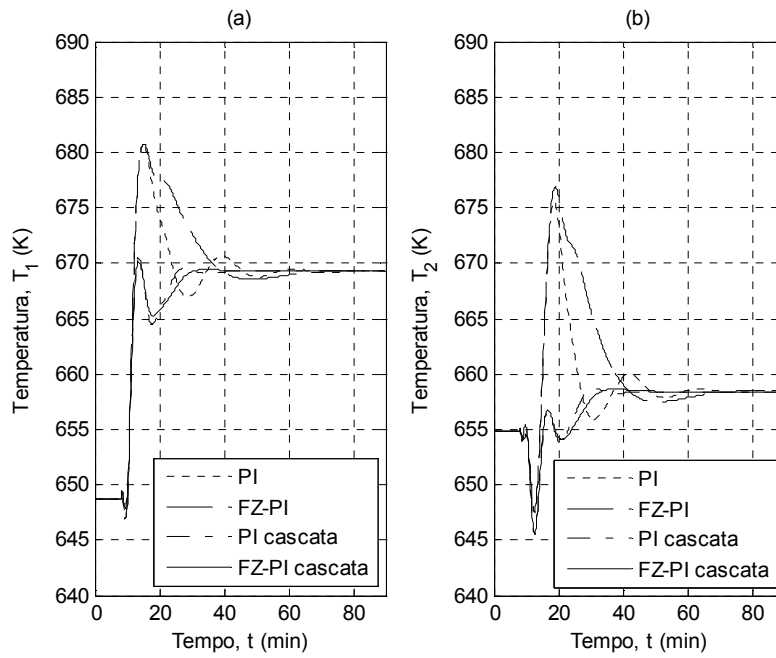


Figura 6.39 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em T_0 de +30 K.

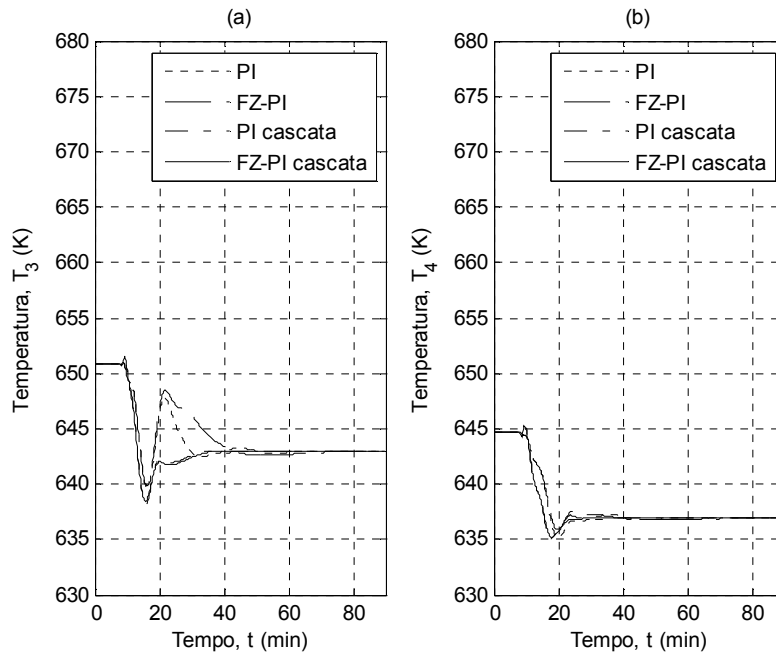


Figura 6.40 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em T_0 de +30 K.

A Figura 6.41 mostra os perfis estabilizados de temperatura obtidos para os diferentes controladores, evidenciando-se que todos eles levam o sistema para a mesma condição final. São mostrados também os perfis para $T_0 = 628$ K (referência) e para $T_0 = 658$ K em malha aberta. Comparando com o perfil de referência, tem-se que o perfil estacionário final que se obtém para $T_0 = 658$ K é mais elevado na região de entrada do reator e menos elevado após a posição $z \cong 0,48$ m. Esse perfil é aquele que, para a nova temperatura de entrada da mistura reacional ($T_0 = 658$ K), resulta no valor de *set point* para a concentração de anidrido ftálico na saída do reator. Isso significa que diferentes perfis de temperatura ao longo do leito podem levar à mesma concentração de anidrido ftálico na saída do reator.

Na Figura 6.42 são mostrados os perfis de temperatura que ocorrem nos instantes em que se formam os picos máximos de temperatura para uma perturbação em T_0 de +30 K. Estes instantes ocorrem 7,83 minutos e 8,33 minutos depois da perturbação para os controladores PI e FZ-PI, respectivamente, e 5,67 minutos depois para ambas as estruturas cascata PI e FZ-PI. Da visualização direta dos perfis, conclui-se que os controladores que empregam a estrutura cascata apresentam desempenho superior em relação àquela em que se faz o controle direto da concentração.

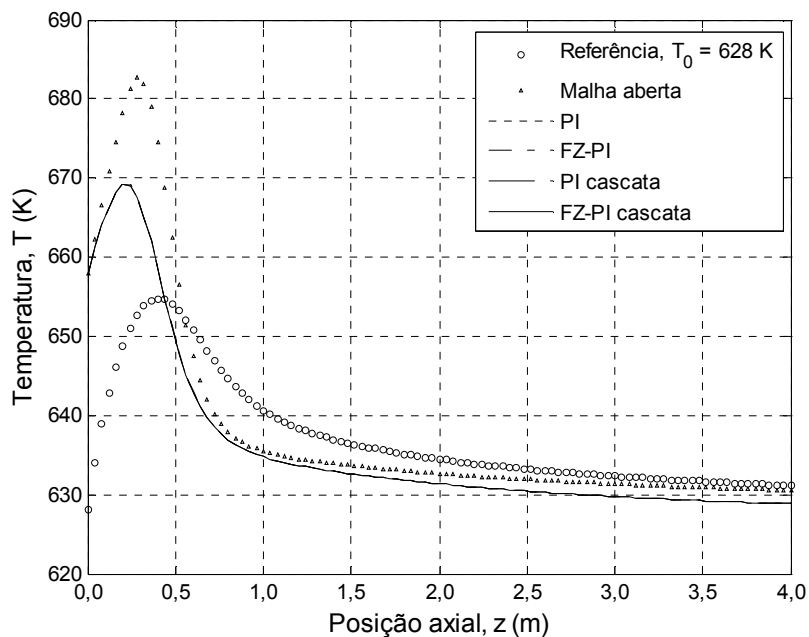


Figura 6.41 - Perfis estacionários de temperatura para uma perturbação em T_0 de +30 K.

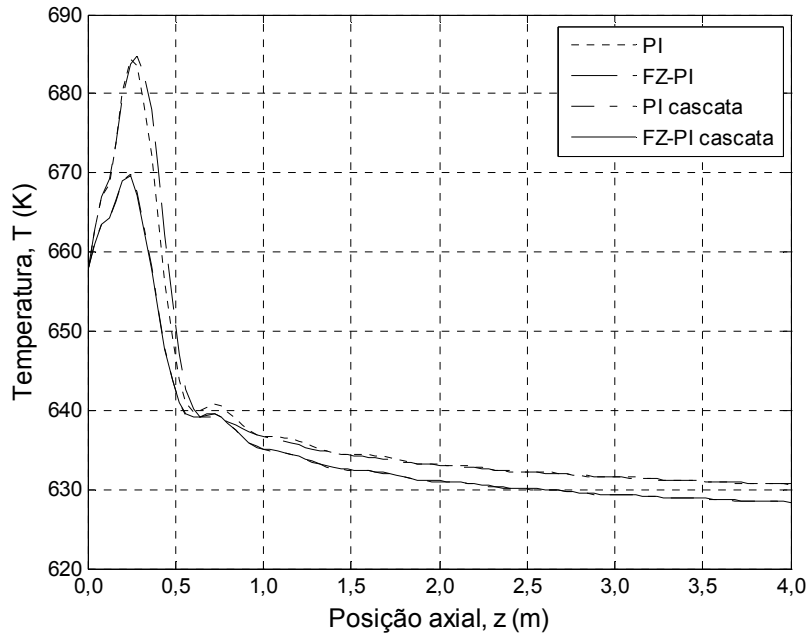


Figura 6.42 - Perfis de temperatura nos instantes em que ocorrem os picos máximos para uma perturbação em T_0 de +30 K.

6.5.3 Perfis Comparativos de Controle para Perturbações em C_{A0}

Também foram realizadas diversas simulações comparativas para os quatro controladores, sintonizados conforme descrito na Seção 6.4, considerando-se perturbações degrau na concentração de o-xileno na alimentação de +3% ($C_{A0} = 0,1865 \text{ mol/m}^3$), -3% ($C_{A0} = 0,1757 \text{ mol/m}^3$) e +5% ($C_{A0} = 0,1902 \text{ mol/m}^3$). A perturbação é aplicada no instante $t = 8$ minutos.

As Figuras 6.43 a 6.46 mostram as respostas das variáveis controlada e manipulada e das temperaturas nas posições de medidas para os quatro controladores estudados, considerando-se uma perturbação em C_{A0} de +5%. Os valores dos parâmetros de desempenho para os controladores são dados na Tabela 6.4.

Em função do atraso de 6 minutos, considerado para a medida da concentração de anidrido ftálico na saída do reator, os controladores diretos PI e FZ-PI, cuja ação de controle é projetada apenas em função do erro no valor da variável controlada, só atuam 6 minutos depois

da perturbação, isto é, no instante $t = 14$ minutos. Isso faz com que o sistema se comporte inicialmente como se estivesse em malha aberta, pois o controle atrasa sua ação regulatória, o que, a depender da amplitude de perturbação, pode conduzir o sistema a uma situação de fuga (*runaway*) para perturbações de maior magnitude em C_{A0} , similarmente ao que ocorre com o aumento em T_0 .

Tabela 6.4 - Parâmetros de desempenho – Perturbação em C_{A0} de +5% ($C_{A0} = 0,1902 \text{ mol/m}^3$).

Parâmetro	PI	FZ-PI	PI CASCATA	FZ-PI CASCATA
T_a (min)	66,67	55,67	47,00	52,17
ISE ($\text{mol}^2 \text{m}^{-6} \text{min}^2$)	$4,74 \times 10^{-4}$	$8,44 \times 10^{-4}$	$2,81 \times 10^{-4}$	$3,27 \times 10^{-4}$
IAE ($\text{mol m}^{-3} \text{min}$)	0,0954	0,1445	0,0660	0,0789
$ITAE$ ($\text{mol m}^{-3} \text{min}^2$)	2,4867	3,7569	1,5343	1,9715
SE (mol m^{-3})	0,0077	0,0077	0,0068	0,0068
$\max(T(t))$ (K)	659,33	659,39	655,45	655,38
$\max(T_{est})$ (K)	645,74	645,74	645,74	645,74
T_{c0est} (K)	623,50	623,50	623,50	623,50

No caso dos controladores com estrutura cascata, em que a medida de temperatura é considerada sem atraso, observa-se que há uma atuação sobre a variável manipulada logo após o instante da perturbação ($t = 8$ minutos). Isso se deve, como já mencionado, à característica antecipatória da malha secundária da estrutura cascata, que faz com que haja uma ação antes da detecção de erro pela malha de controle da concentração (malha primária). Por isso, os controladores PI e FZ-PI com estrutura cascata apresentam, em termos globais, um melhor desempenho, como pode ser visto pelos valores dos parâmetros na Tabela 6.4.

Em termos das estruturas de controle direto deve-se destacar que o controlador FZ-PI apresenta respostas menos oscilatórias para as variáveis controlada (Figura 6.43) e manipulada

(Figura 6.44), bem como para os perfis de temperatura nas posições de medida (Figuras 6.45 e 6.46).

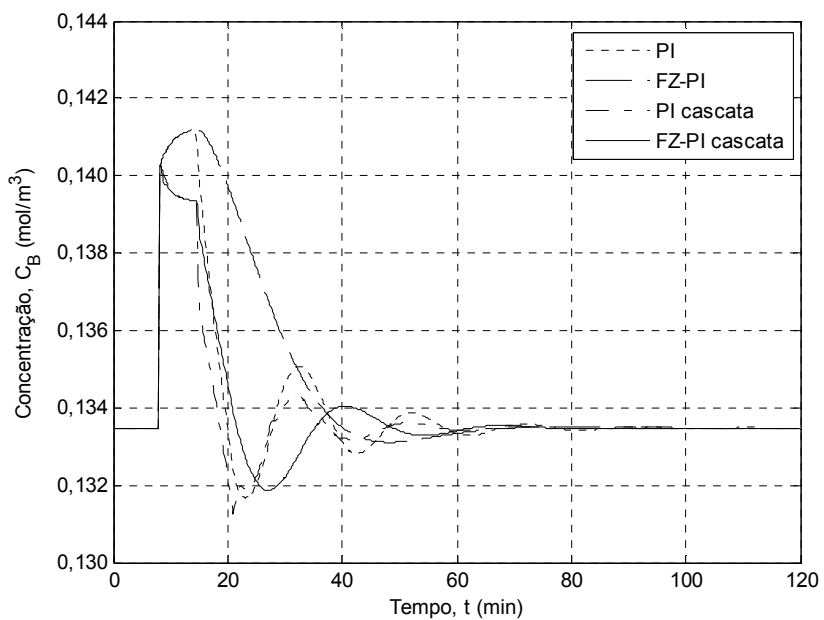


Figura 6.43 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em C_{A0} de +5%.

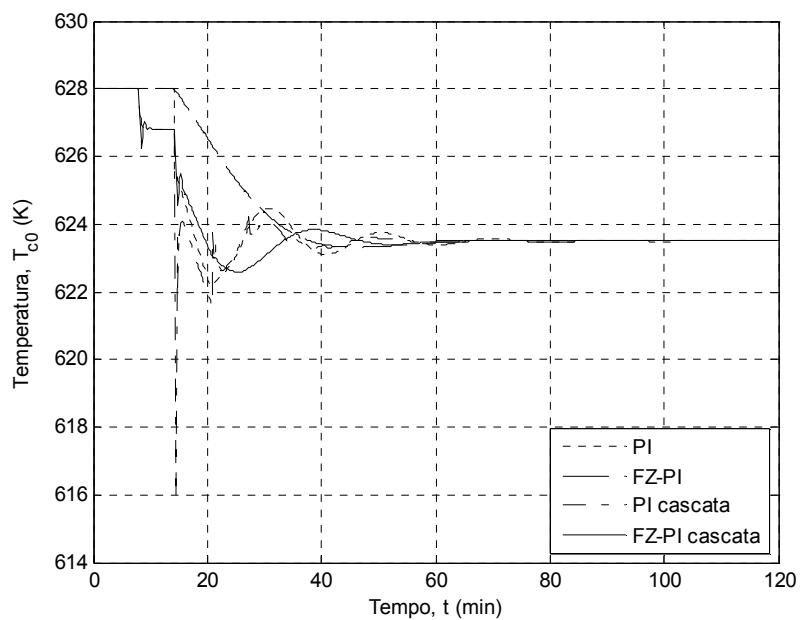


Figura 6.44 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em C_{A0} de +5%.

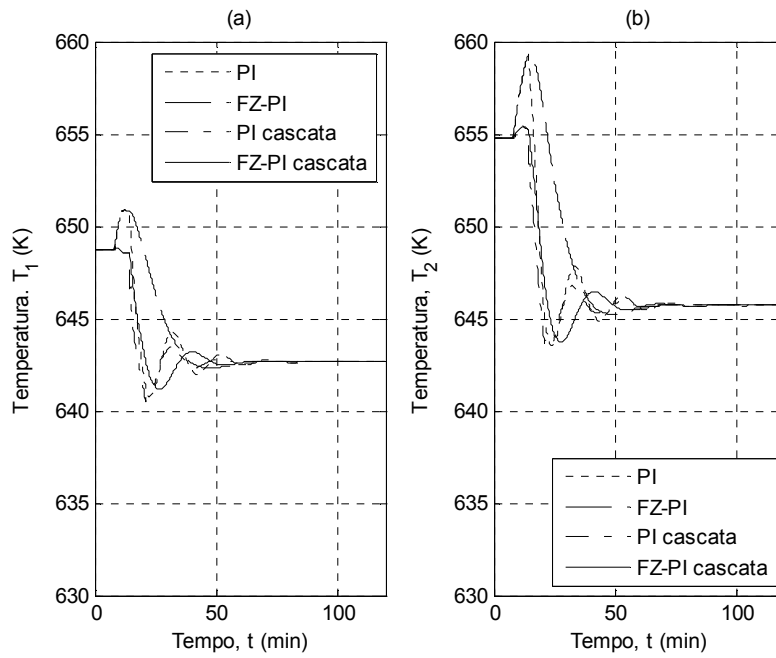


Figura 6.45 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de +5%.

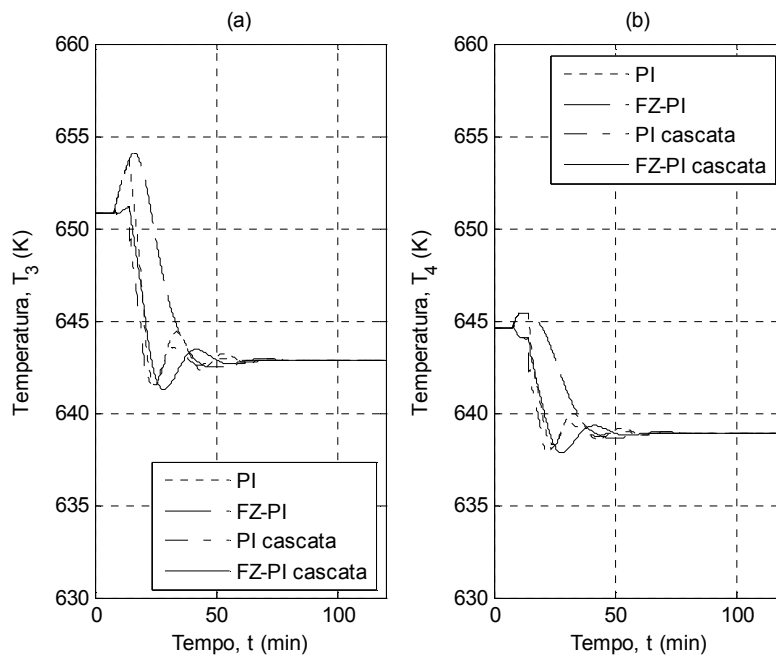


Figura 6.46 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de +5%.

As Figuras 6.47 a 6.50 mostram as respostas das variáveis controlada e manipulada e das temperaturas nas posições de medidas para os quatro controladores, considerando-se uma perturbação em C_{A0} de +3%. Os valores dos parâmetros de desempenho para os controladores são dados na Tabela 6.5.

Tabela 6.5 - Parâmetros de desempenho – Perturbação em C_{A0} de +3% ($C_{A0} = 0,1865 \text{ mol/m}^3$).

Parâmetro	PI	FZ-PI	PI CASCATA	FZ-PI CASCATA
T_a (min)	48,17	53,67	35,50	39,67
ISE ($\text{mol}^2 \text{m}^{-6} \text{min}^2$)	$1,62 \times 10^{-4}$	$2,96 \times 10^{-4}$	$9,70 \times 10^{-5}$	$1,14 \times 10^{-4}$
IAE ($\text{mol m}^{-3} \text{min}$)	0,0510	0,0856	0,0351	0,0431
$ITAE$ ($\text{mol m}^{-3} \text{min}^2$)	1,2077	2,2155	0,7391	0,9915
SE (mol m^{-3})	0,0046	0,0046	0,0040	0,0040
$\max(T(t))$ (K)	657,30	657,33	656,16	655,12
$\max(T_{est})$ (K)	648,86	648,86	648,86	648,86
T_{c0est} (K)	625,17	625,18	625,18	625,18

Os resultados mostram um comportamento equivalente àquele já verificado para uma perturbação positiva de +5% em C_{A0} , sendo que neste caso, por se ter uma perturbação de menor magnitude, a regulação da concentração de anidrido ftálico na saída do reator ocorre em um tempo menor. Igualmente, as respostas das temperaturas nas posições de medidas mostram variações mais fracas (Figuras 6.49 e 6.50), comparativamente ao caso anterior, significando que o reator retoma muito mais facilmente uma nova condição estabilizada.

Conforme esperado, tendo em vista mais uma vez que a elevação do valor de C_{A0} é em tudo equivalente a um aumento em T_0 , implicando em um aumento na entalpia da corrente de alimentação, os controladores com estrutura cascata, por darem conta do controle térmico do reator, apresentam melhor desempenho em relação aos controladores diretos que empregam em sua ação de controle apenas os valores medidos da variável controlada.

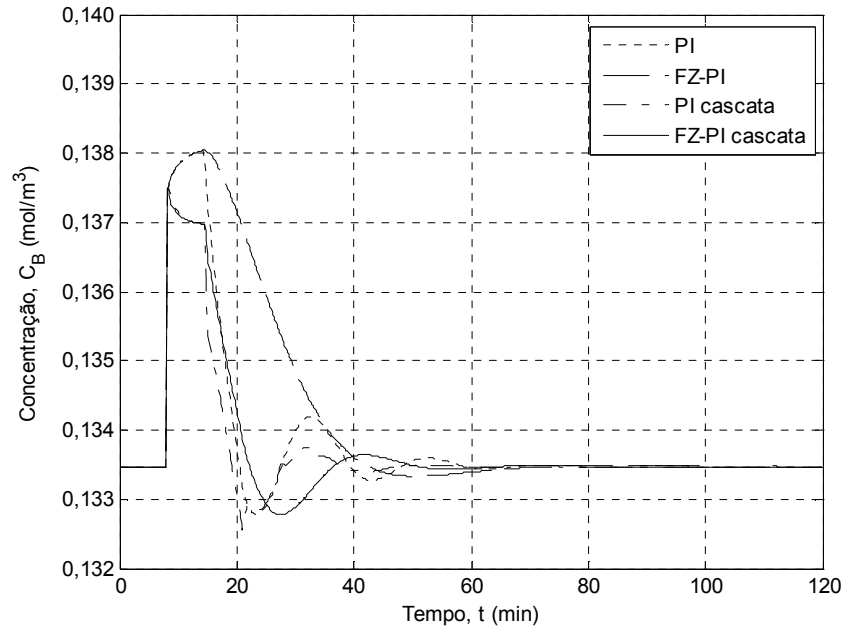


Figura 6.47 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em C_{A0} de +3%.

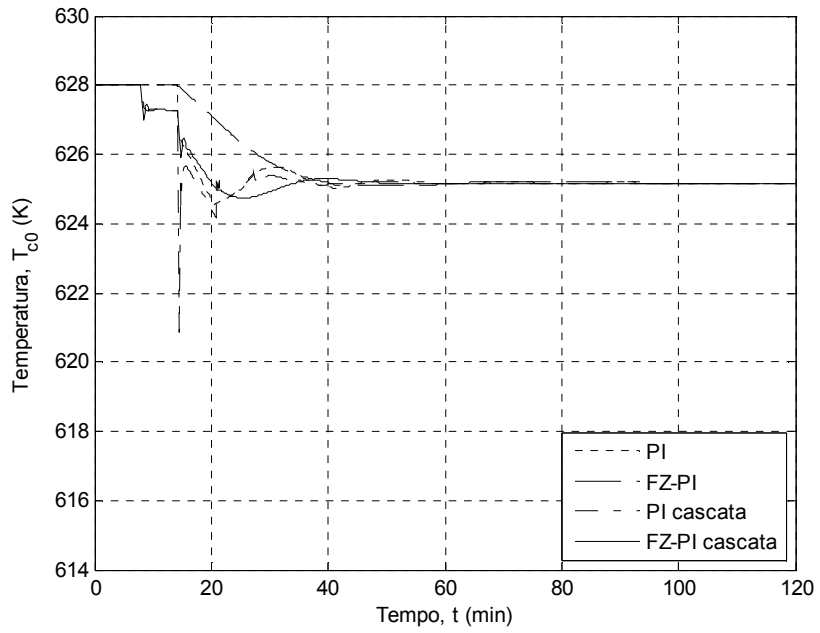


Figura 6.48 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em C_{A0} de +3%.

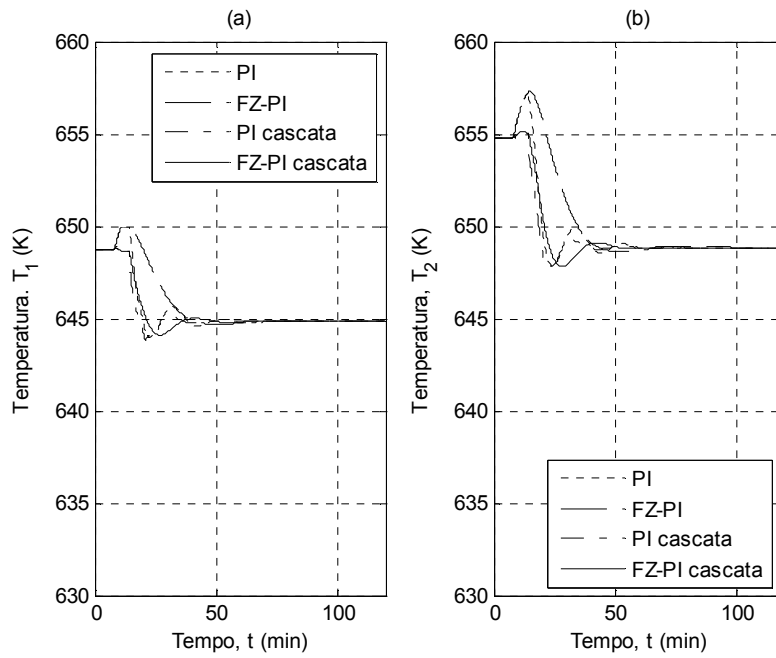


Figura 6.49 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de +3%.

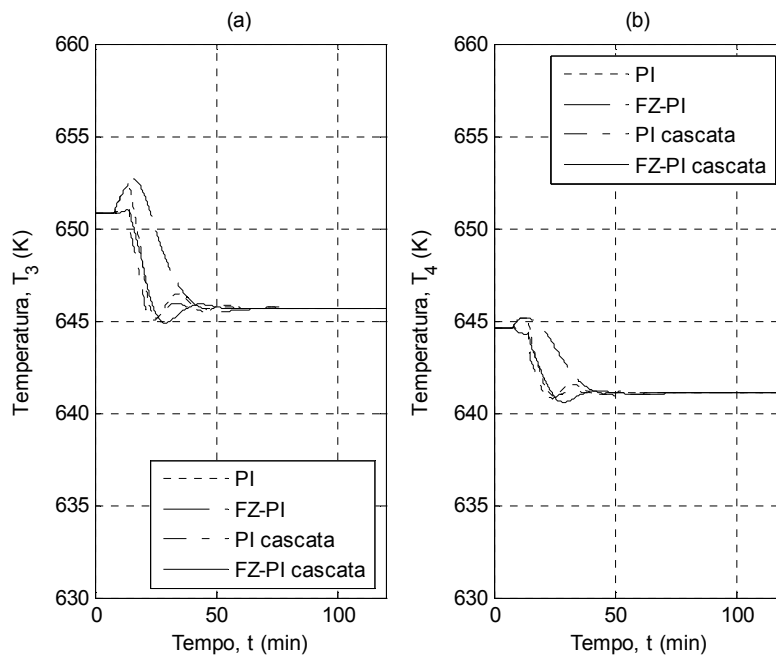


Figura 6.50 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de +3%.

As Figuras 6.51 a 6.54 mostram as respostas das variáveis controlada e manipulada e da temperatura nas posições de medidas para os quatro controladores, considerando-se uma perturbação em C_{A0} de -3%. Os valores dos parâmetros de desempenho para os controladores são dados na Tabela 6.6.

Tabela 6.6 - Parâmetros de desempenho – Perturbação em C_{A0} de -3% ($C_{A0} = 0,1757 \text{ mol/m}^3$).

Parâmetro	PI	FZ-PI	PI CASCATA	FZ-PI CASCATA
T_a (min)	44,17	62,00	30,50	30,17
ISE ($\text{mol}^2 \text{m}^{-6} \text{min}^2$)	$1,64 \times 10^{-4}$	$3,16 \times 10^{-4}$	$1,03 \times 10^{-4}$	$1,21 \times 10^{-4}$
IAE ($\text{mol m}^{-3} \text{min}$)	0,0522	0,1009	0,0371	0,0433
$ITAE$ ($\text{mol m}^{-3} \text{min}^2$)	1,2229	2,9517	0,7838	0,9336
SE (mol m^{-3})	0,0045	0,0045	0,0040	0,0040
$\max(T(t))$ (K)	663,97	663,96	663,97	663,97
$\max(T_{est})$ (K)	663,97	663,96	663,97	663,97
T_{c0est} (K)	631,55	631,55	631,55	631,55

Neste caso, envolvendo uma perturbação negativa em C_{A0} , verifica-se um comportamento mais suave das ações de controle, pois o sistema passa a operar sob uma condição de maior diluição dos reagentes, o que caracteriza uma situação onde não há a possibilidade de formação de perfis de temperatura com picos elevados. De fato, operar este tipo de reator em condições de diluição do reagente representa uma das estratégias adotadas na prática para superar questões relativas ao controle térmico e à segurança do sistema.

A observação das curvas de resposta das variáveis controlada (Figura 6.51) e manipulada (Figura 6.52) e da temperatura nas posições de medida (Figura 6.53 e 6.54), bem como dos valores dos parâmetros de desempenho (Tabela 6.6), mostram mais uma vez a eficiência dos controladores com estrutura cascata em sua ação regulatória.

Também se verifica que há um maior atraso na estabilização do controlador direto FZ-PI em sua resposta regulatória (Tabela 6.2).

A situação operacional de uma perturbação negativa em C_{A0} é equivalente àquela em que ocorre uma redução em T_0 . A ação de controle deve se dar no sentido de aumentar a temperatura de entrada do fluido térmico (variável manipulada) para levar a um novo perfil de temperatura ao longo do leito catalítico que, para concentrações mais baixas de o-xileno na corrente de alimentação (C_{A0}), corresponda a uma conversão que garanta a composição de anidrido ftálico na saída do reator (variável controlada) no seu valor de *set point*. Os controladores com estrutura cascata fornecem um bom desempenho para a questão de reajustar o perfil de temperatura no leito em função de modificações nas condições de alimentação do reator.

Na prática dos reatores de leito fixo, para aumentar o tempo de campanha do reator pode-se utilizar como estratégia a imposição de perfis de temperatura mais elevados como forma de compensar a desativação do catalisador (SMITH e CORRIPIO, 2008). Isso pode ser facilmente alcançado com o emprego de uma estratégia de controle que inclua medidas de temperatura ao longo do leito.

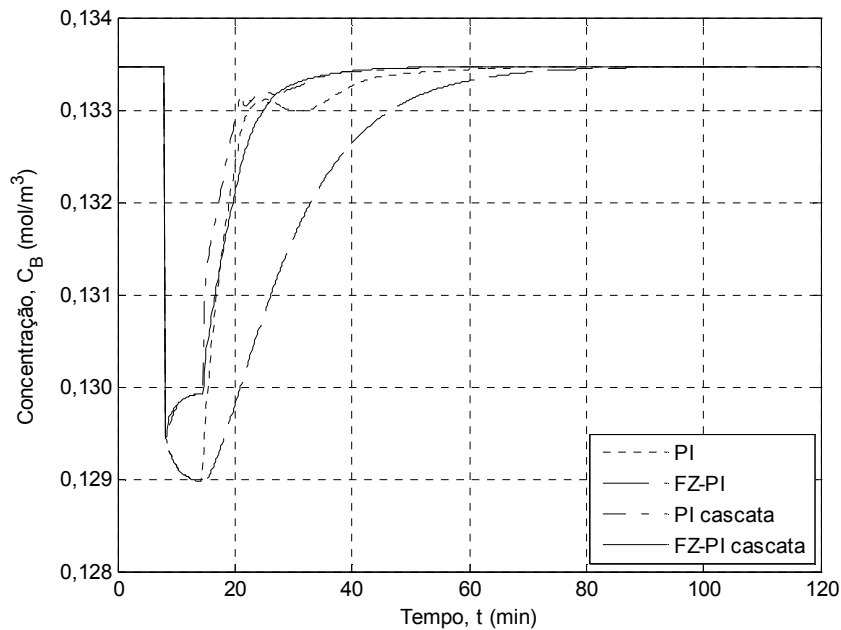


Figura 6.51 - Resposta da variável controlada para uma perturbação em C_{A0} de -3%.

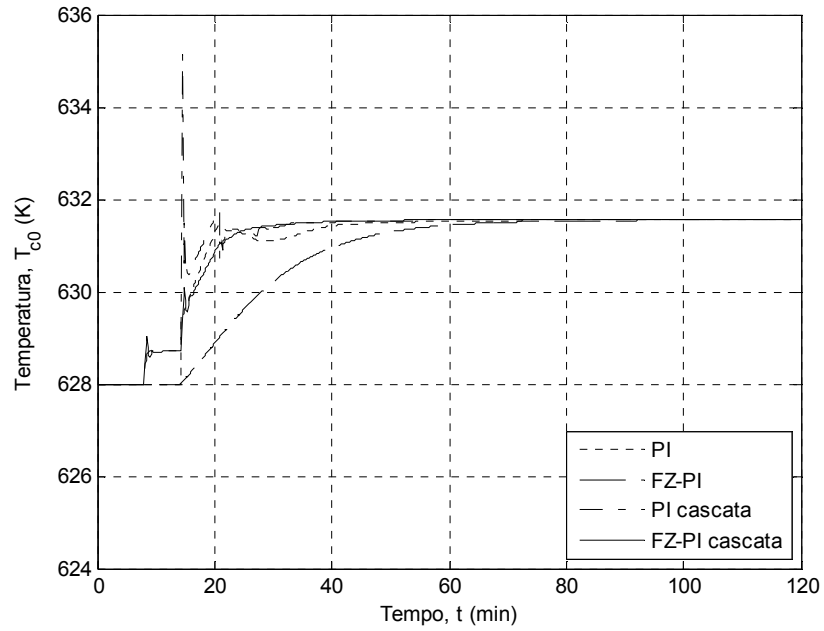


Figura 6.52 - Resposta da variável manipulada para uma perturbação em C_{A0} de -3%.

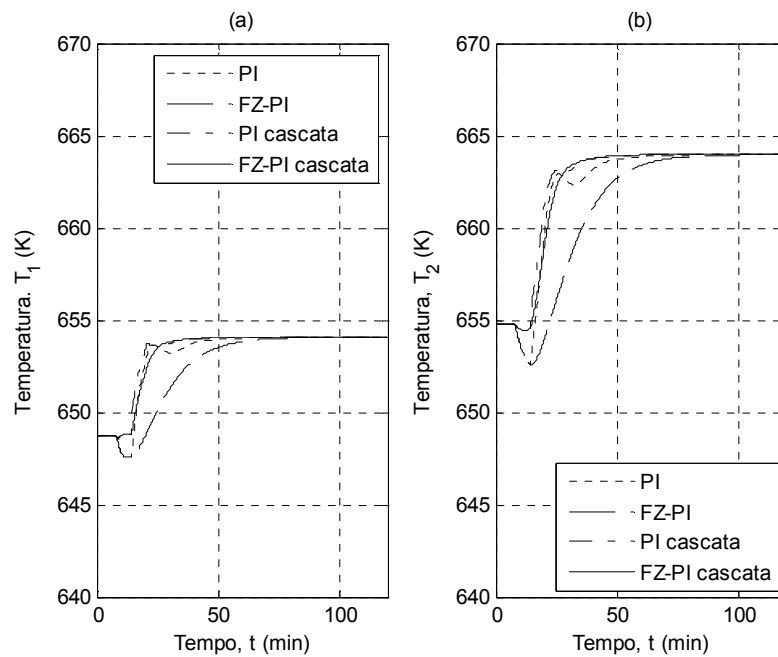


Figura 6.53 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de -3%.

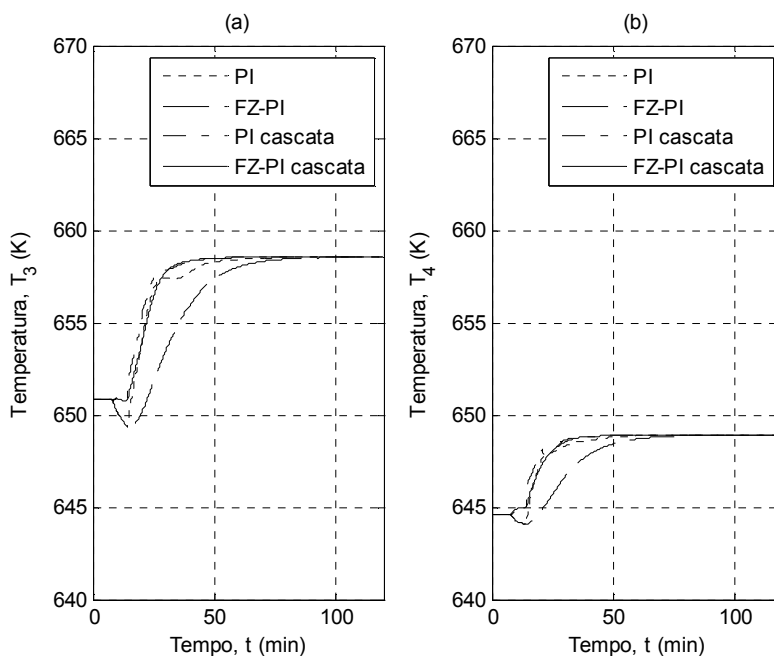


Figura 6.54 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para uma perturbação em C_{A0} de -3%.

6.5.4 Perturbações Sucessivas – Controladores PI e FZ-PI Cascata

Do ponto de vista duplo do controle da concentração de anidrido ftálico na saída do reator e do controle térmico do reator, os resultados acima apresentados, para perturbações na temperatura de entrada (T_0) e na concentração de alimentação do reagente (C_{A0}), mostram uma nítida vantagem dos controladores com estrutura cascata. Foram realizadas simulações adicionais considerando-se os controladores PI cascata e FZ-PI cascata, para o caso de perturbações sucessivas nas variáveis de distúrbio.

Os resultados dessas simulações são apresentados nas Figuras 6.55 a 6.64, em termos das curvas do *input* da variável de distúrbio e das respostas das variáveis controlada e manipulada e das temperaturas nas posições de medidas. Da observação direta das curvas, conclui-se que os dois controladores respondem de modo equivalente aos distúrbios na corrente de alimentação do reator.

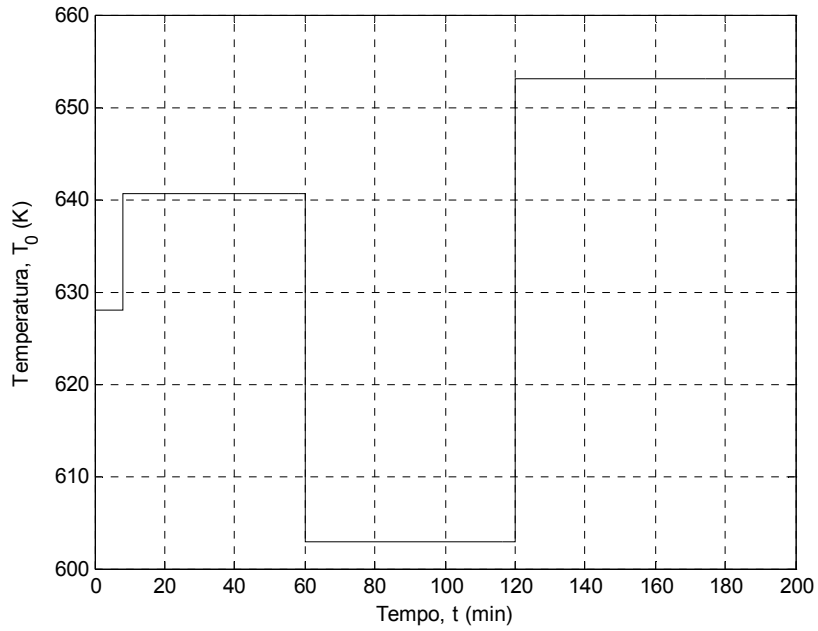


Figura 6.55 - Input da variável T_0 (+2%, -4% e +4% de T_0 de referência).

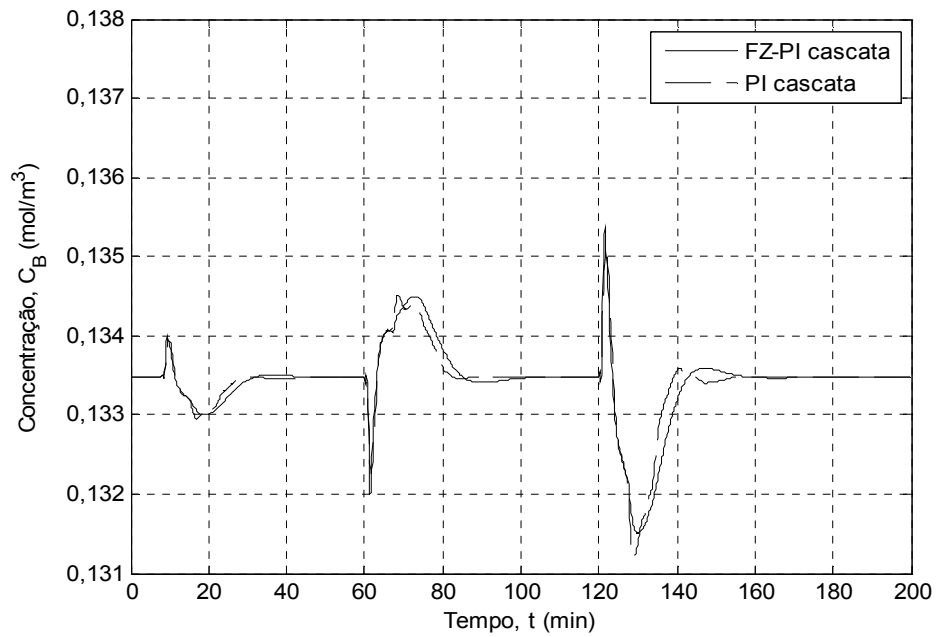


Figura 6.56 - Resposta da variável controlada para perturbações sucessivas em T_0 .

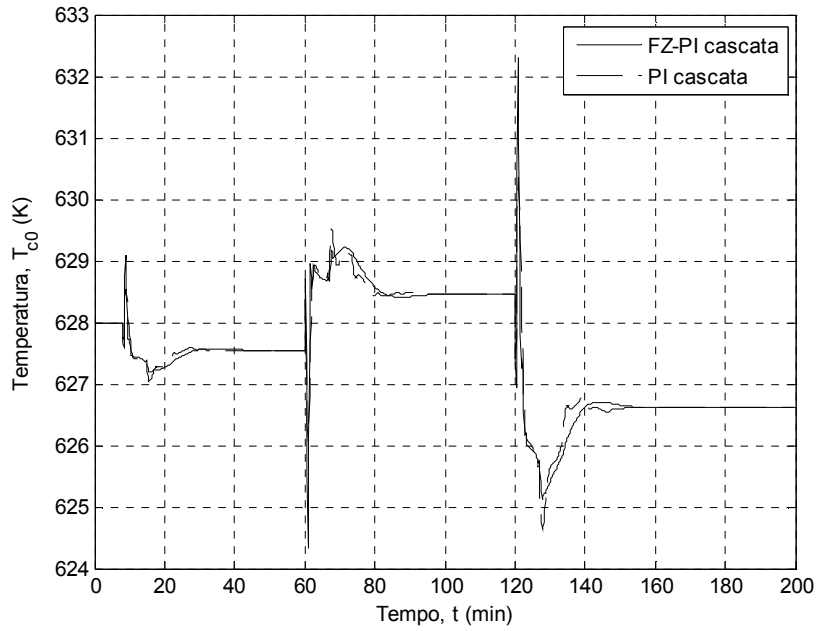


Figura 6.57 - Resposta da variável manipulada para perturbações sucessivas em T_θ .

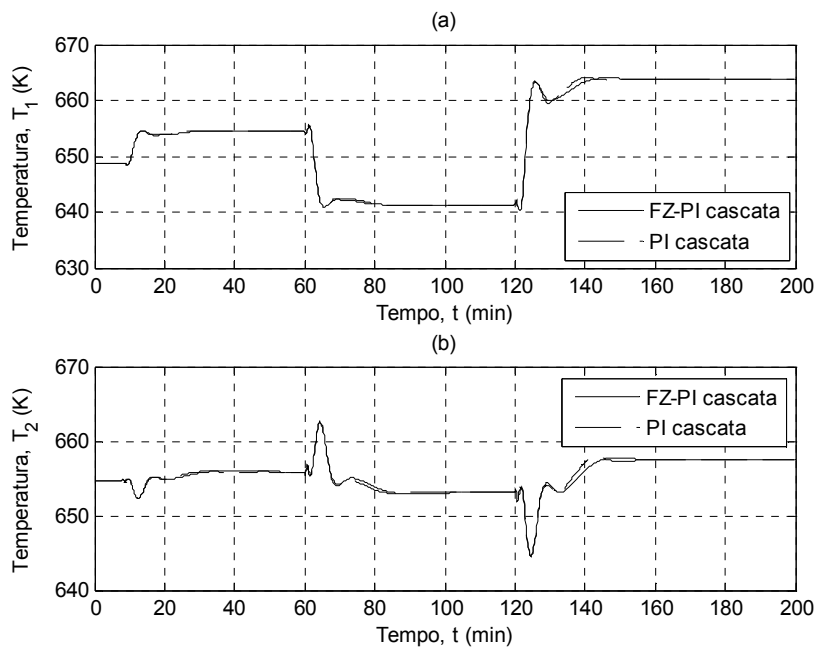


Figura 6.58 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para perturbações sucessivas em T_θ .

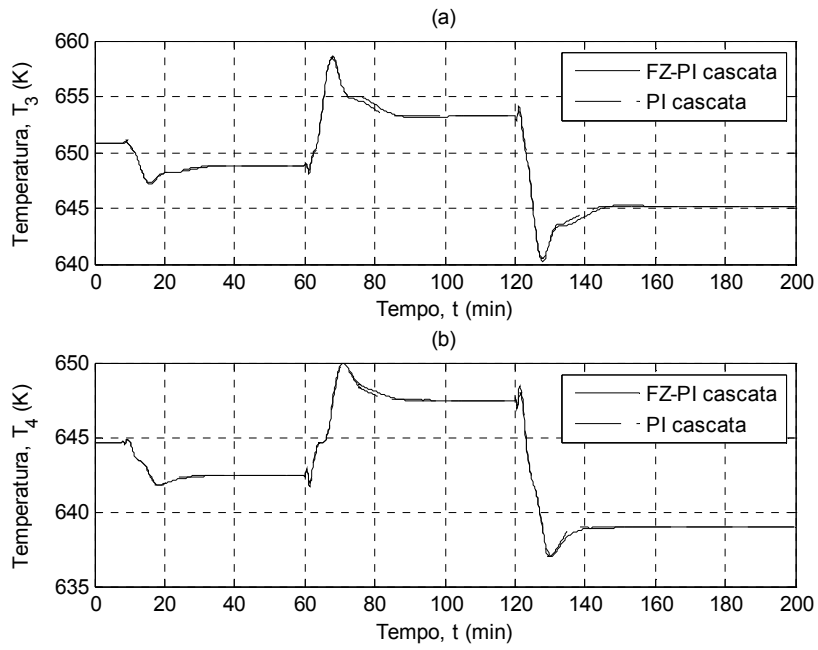


Figura 6.59 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para perturbações sucessivas em T_0 .

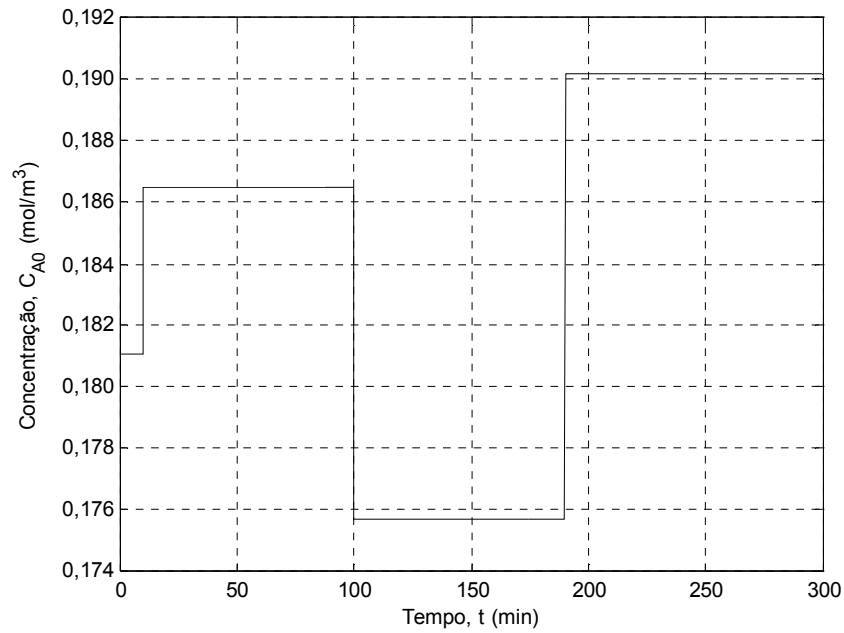


Figura 6.60 - Input da variável C_{A0} (+3%, -3% e +5% de C_{A0} de referência).

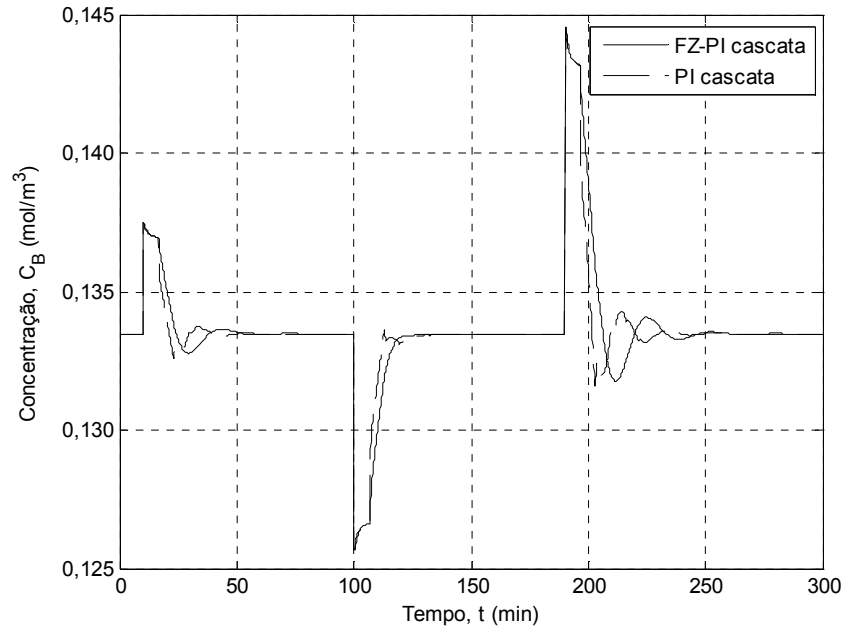


Figura 6.61 - Resposta da variável controlada para perturbações sucessivas em C_{A0} .

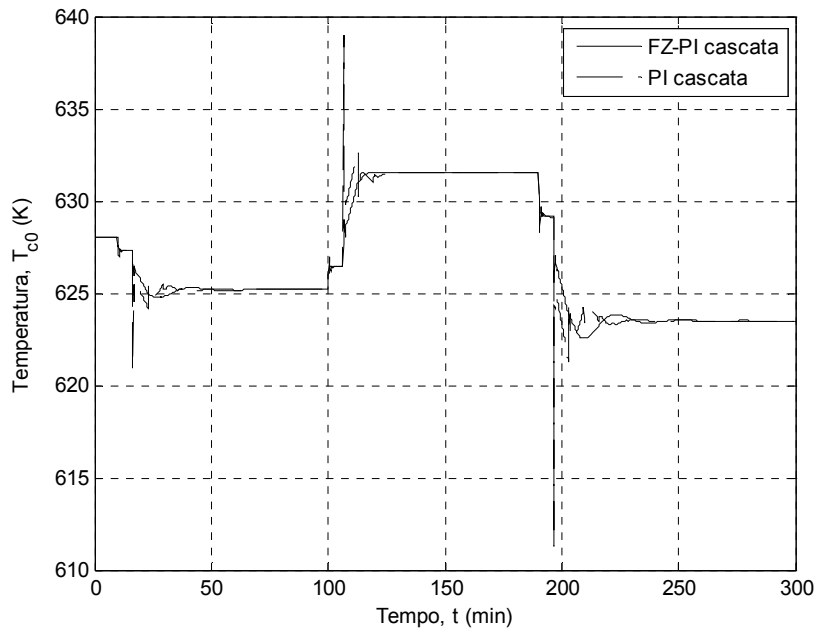


Figura 6.62 - Resposta da variável manipulada para perturbações sucessivas em C_{A0} .

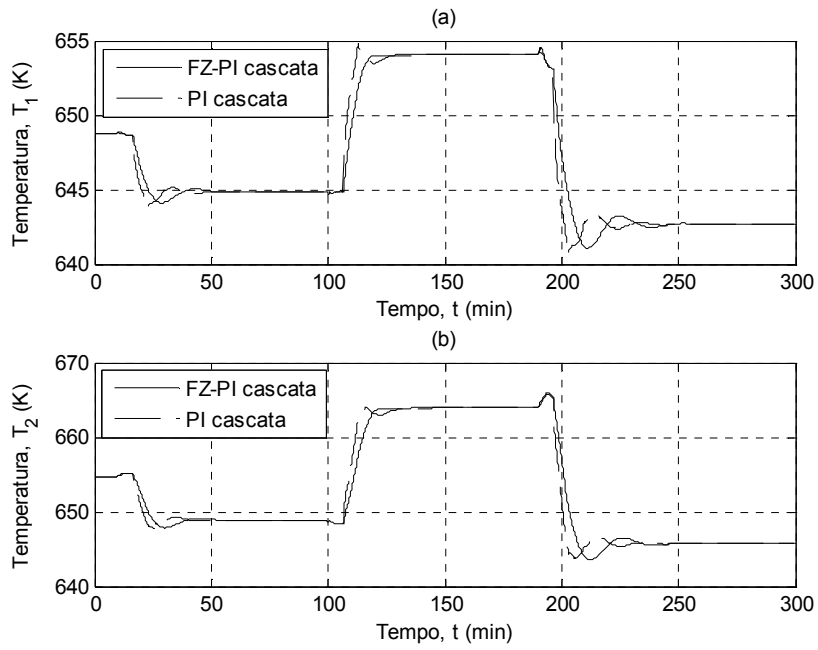


Figura 6.63 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $0,40$ m (b) para perturbações sucessivas em C_{A0} .

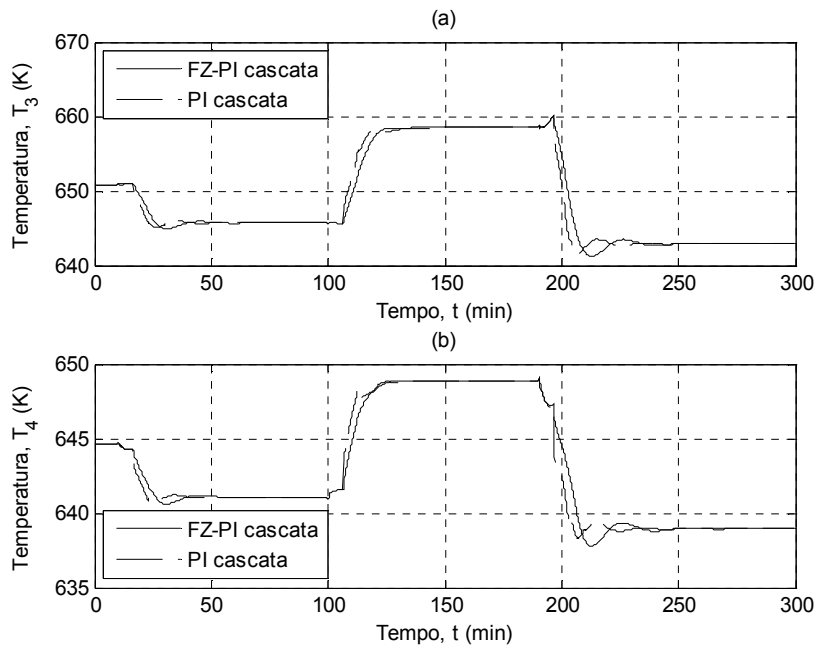


Figura 6.64 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $0,80$ m (b) para perturbações sucessivas em C_{A0} .

Com o objetivo de explorar mais ainda a resposta dos controladores com estrutura cascata, foram feitas simulações para perturbações degrau sucessivas e simultaneamente impostas à temperatura de entrada do fluido reacional (T_0) e à concentração de alimentação do o-xileno (C_{A0}), conforme as curvas de *input* mostradas na Figura 6.65.

Os resultados apresentados nas Figuras 6.66 a 6.69 mostram que após a ocorrência de perturbações simultâneas nas variáveis de entrada (T_0 e C_{A0}) a estrutura cascata é hábil para levar o sistema a um novo patamar de estabilização da variável manipulada, de modo a buscar permanentemente a regulação da concentração de anidrido ftálico na saída do reator em seu valor de *set point*.

Nota-se mais uma vez o bom desempenho dos controladores com estrutura cascata para manter o controle térmico do sistema, o que fica evidenciado a partir das curvas de evolução da temperatura nas posições consideradas para as medidas desta variável.

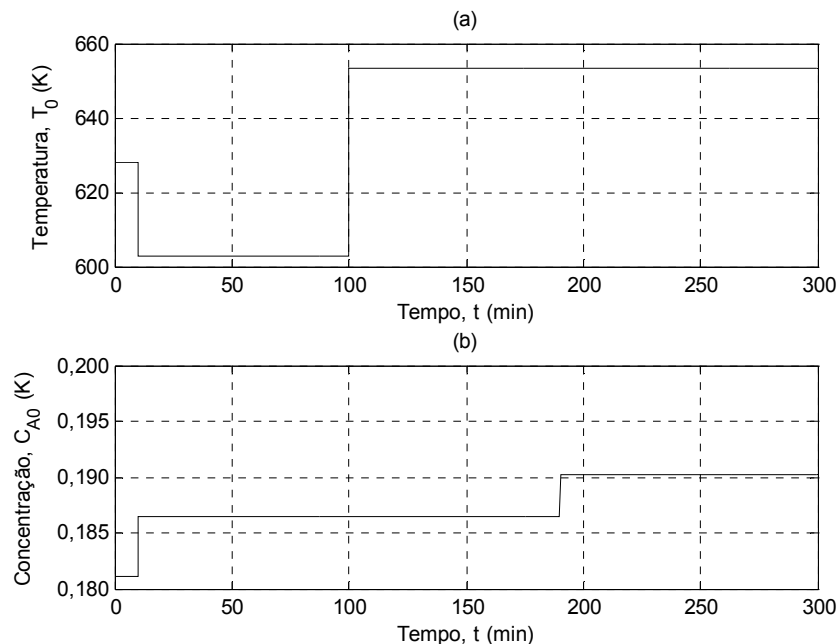


Figura 6.65 - Inputs das variáveis de distúrbio: (a) T_0 (-4% e +4% de T_0 de referência) e (b) C_{A0} (+3% e +5%, de C_{A0} de referência).

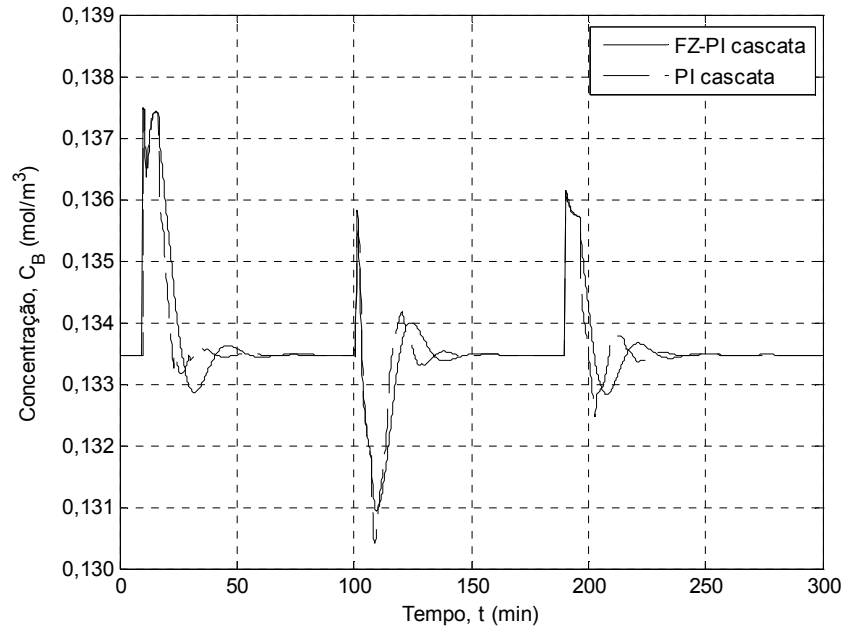


Figura 6.66 - Resposta da variável controlada a perturbações sucessivas e simultâneas em T_0 e C_{A0} .

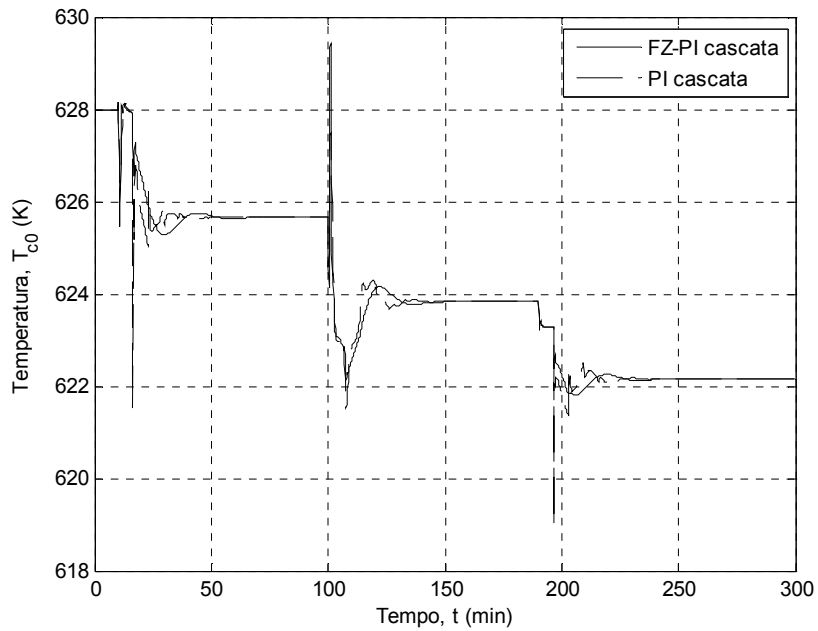


Figura 6.67 - Resposta da variável manipulada a perturbações sucessivas e simultâneas em T_0 e C_{A0} .

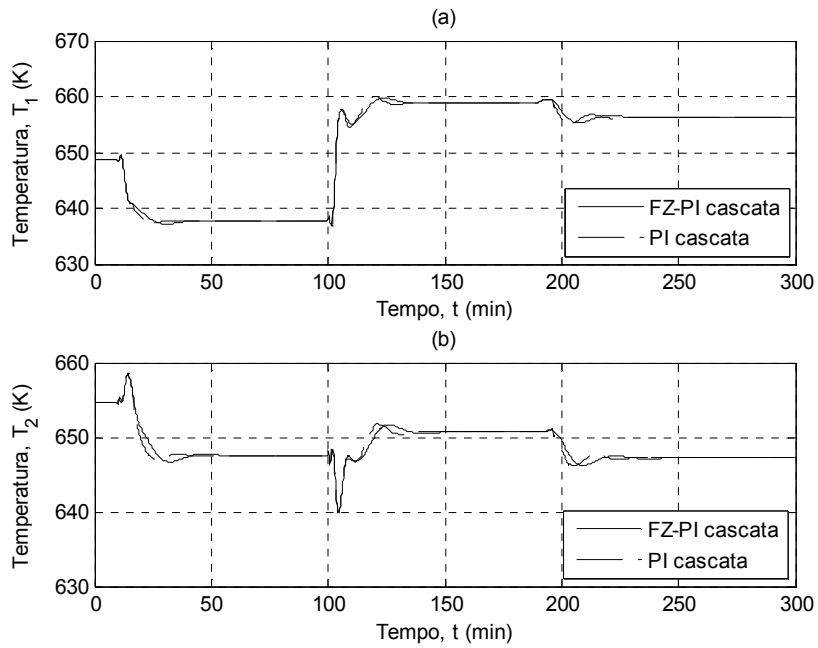


Figura 6.68 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a) e $z = 0,40$ m (b) para perturbações sucessivas e simultâneas em T_0 e C_{A0} .

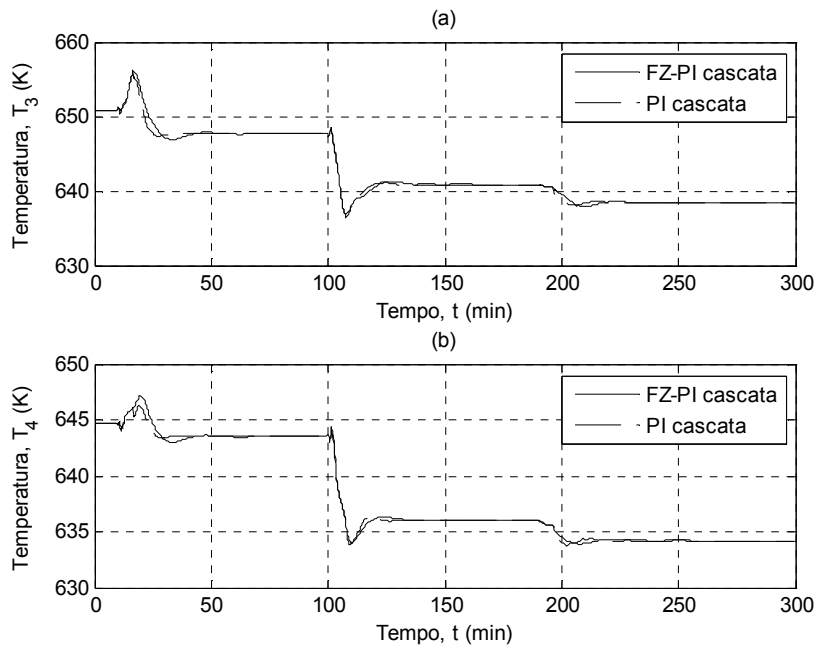


Figura 6.69 - Resposta da temperatura em $z = 0,60$ m (a) e $z = 0,80$ m (b) para perturbações sucessivas e simultâneas em T_0 e C_{A0} .

6.5.5 Controle com Ruído de Medida

As medidas realizadas por sensores estão sujeitas a erros, de modo que para levar em conta essa situação foram realizadas simulações com adição de ruído nas variáveis medidas que são utilizadas para projetar as ações de controle.

Ao valor obtido a partir do modelo matemático foram adicionados ruídos gaussianos com média nula e um dado desvio padrão. Para a concentração (C_B) foram considerados dois níveis de ruído, com desvio padrão (σ) de 0,00022 e 0,00043, os quais conduzem a valores que se situam nas faixas de $\pm 0,0007 \text{ mol/m}^3$ e $\pm 0,0014 \text{ mol/m}^3$, respectivamente, como pode ser verificado nos espectros mostrados nas Figuras 6.70 e 6.71. A adição desses ruídos corresponderia a erros de medidas em torno de 0,5% e 1% do valor da concentração C_B .

Quanto às temperaturas, aos valores obtidos a partir do modelo matemático foram adicionados ruídos gaussianos com média nula e desvio padrão de 0,1 e 0,2, correspondentes a valores na faixa de $\pm 0,4 \text{ K}$ e $\pm 0,8 \text{ K}$, conforme espectros indicados nas Figuras 6.72 e 6.73. A adição desses ruídos corresponderia a erros em torno de 0,06% e 0,12% do valor da temperatura.

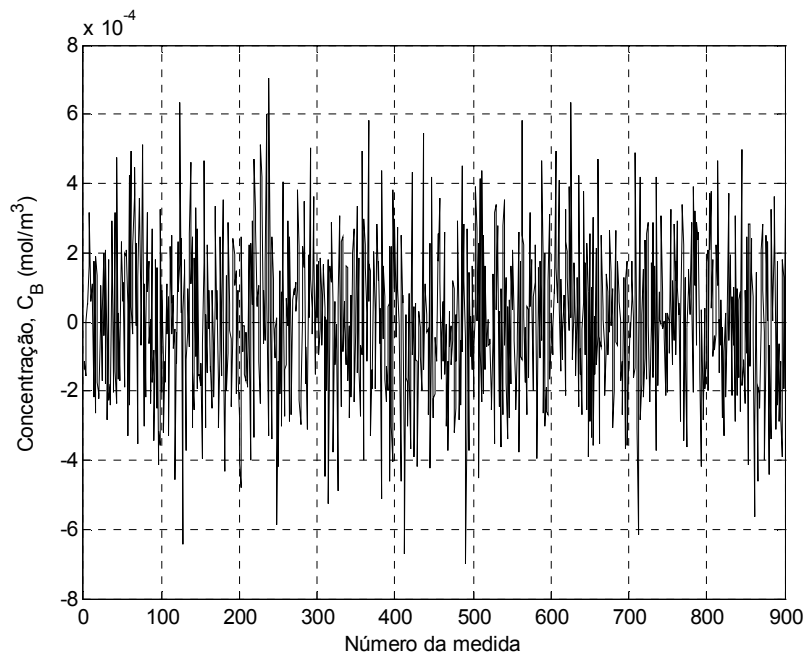


Figura 6.70 - Espectro do ruído adicionado à concentração ($\sigma = 0,00022$).

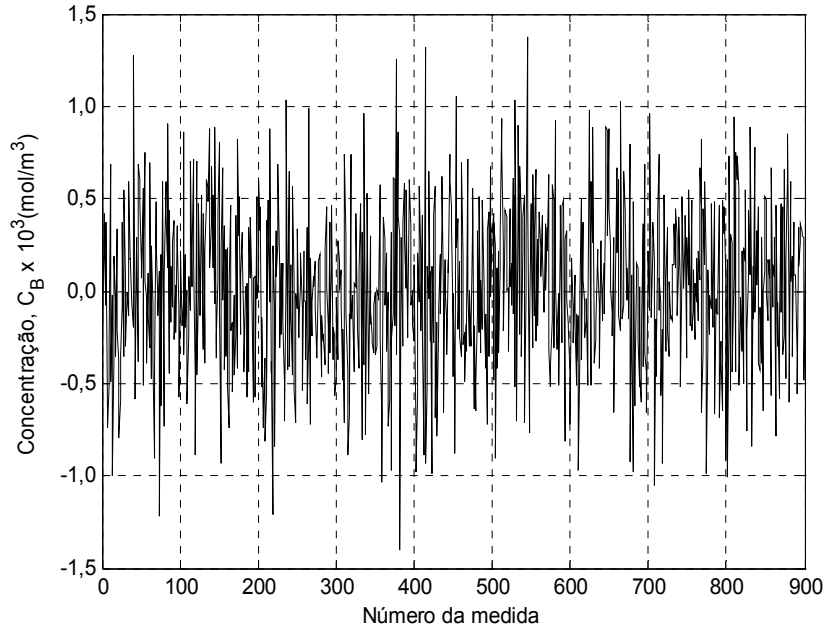


Figura 6.71 - Espectro do ruído adicionado à concentração ($\sigma = 0,00043$).

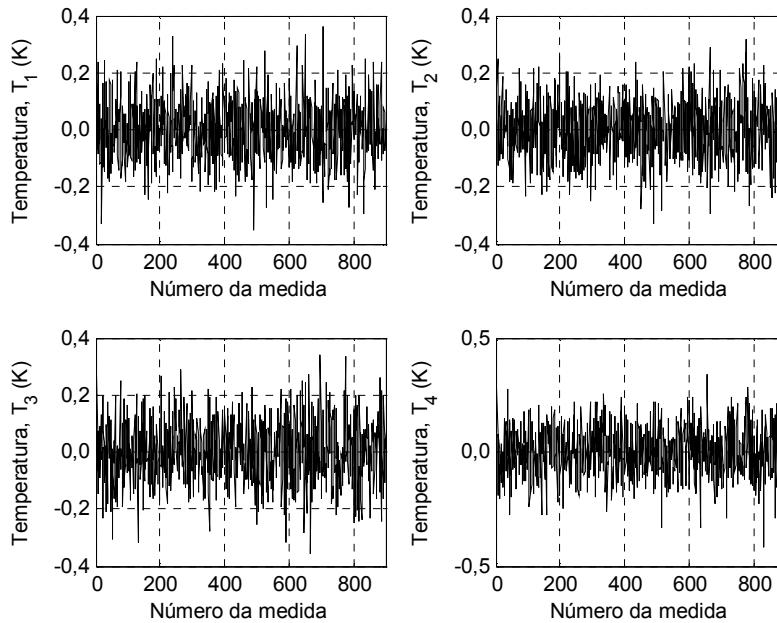


Figura 6.72 - Espectros dos ruídos adicionados às medidas de temperatura ($\sigma = 0,1$).

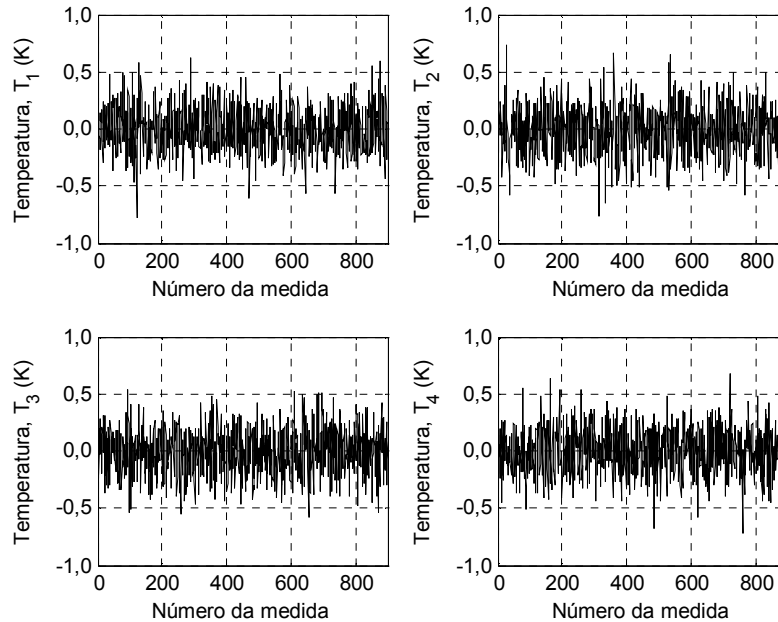


Figura 6.73 - Espectros dos ruídos adicionados às medidas de temperatura ($\sigma = 0,2$).

As Figuras 6.74 a 6.77 mostram as curvas de resposta dos quatro controladores considerando a adição de ruído, para uma perturbação de +4% em relação ao valor de referência de T_0 (628 K), ou seja, para $T_0 = 653,12$ K.

Para o caso dos controladores diretos, como apenas a variável C_B é medida, os resultados repercutem a presença de ruído somente na concentração, enquanto que para os controladores PI e FZ-PI com estrutura cascata, em que são simultaneamente medidas as variáveis C_B , T_1 , T_2 , T_3 e T_4 , os resultados repercutem a presença de ruídos na concentração e nas temperaturas.

As Figuras 6.74 e 6.75 mostram as respostas das variáveis controlada e manipulada dos controladores diretos com adição de ruído de nível menor, de acordo com espectro indicado na Figura 6.70, enquanto que as Figuras 6.76 e 6.77 mostram estas respostas quando a adição de ruído na medida de C_B se dá em um maior nível, de acordo com o espectro indicado na Figura 6.71. As curvas de resposta evidenciam que o controlador FZ-PI, utilizando lógica *fuzzy*, tem melhor capacidade para absorver o ruído na medida de C_B do que o PI.

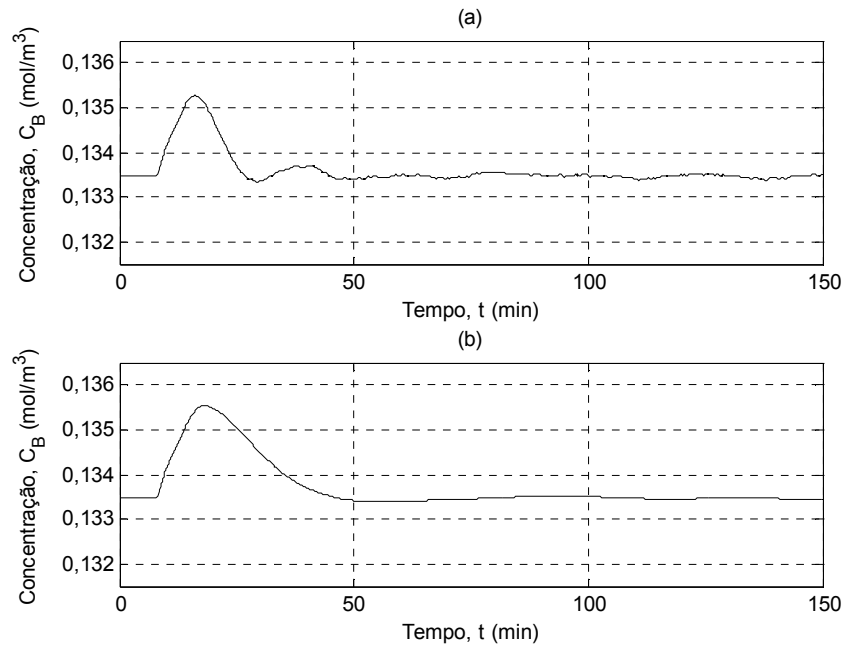


Figura 6.74 - Resposta da variável controlada com adição de ruído na medida de C_B ($\sigma = 0,00022$) – Controladores: (a) PI e (b) FZ-PI.

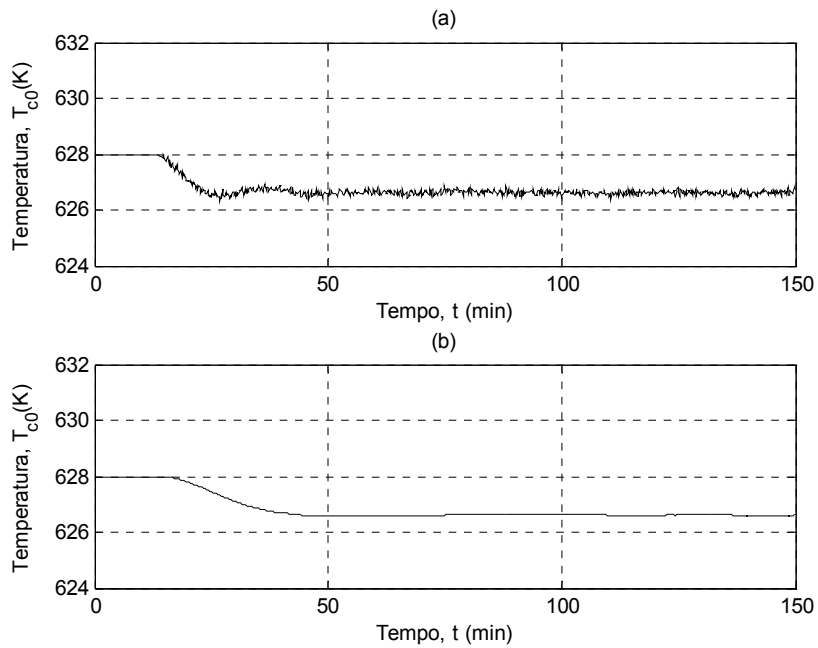


Figura 6.75 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído na medida de C_B ($\sigma = 0,00022$) – Controladores: (a) PI e (b) FZ-PI.

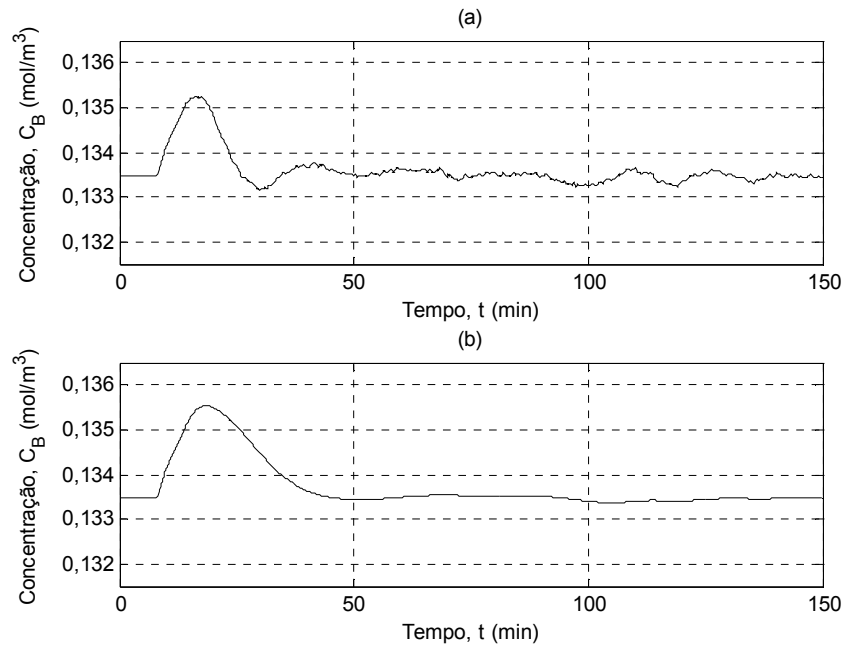


Figura 6.76 - Resposta da variável controlada com adição de ruído na medida de C_B ($\sigma = 0,00043$) – Controladores: (a) PI e (b) FZ-PI.

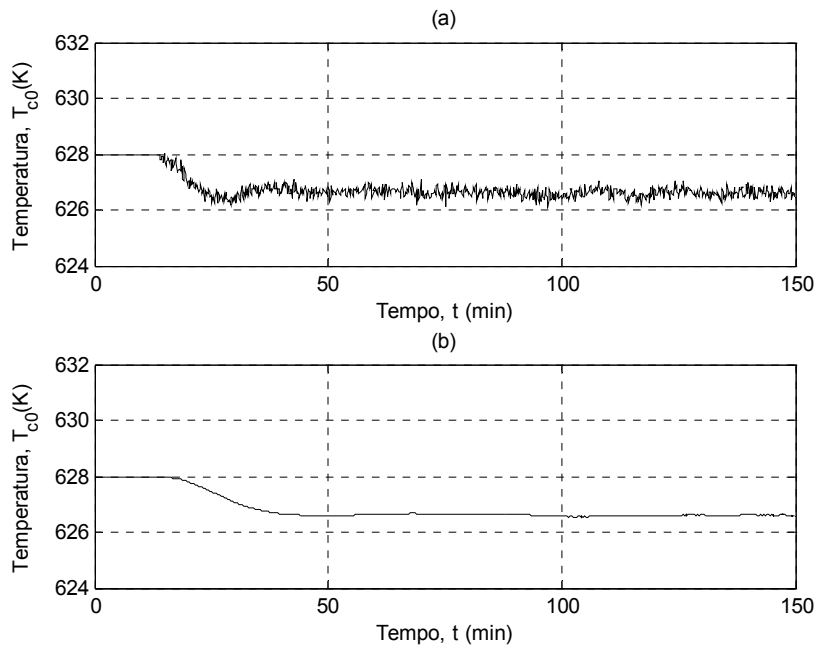


Figura 6.77 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído na medida de C_B ($\sigma = 0,00043$) – Controladores: (a) PI e (b) FZ-PI.

As Figuras 6.78 a 6.87 mostram os resultados obtidos para os controladores com estrutura cascata. Para esses controladores, cuja ação de controle é projetada com base na medida de concentração da variável controlada e na medida de temperatura em quatro posições especificadas ao longo do reator, são adicionados ruídos em cada uma dessas medidas. O que se verifica em termos globais é que a inclusão de ruído nas temperaturas torna mais difícil a estabilização das variáveis, mas obtêm-se respostas estabilizadas com uma característica oscilatória em torno de um valor médio para cada variável.

Tomando-se comparativamente as curvas de resposta das variáveis controlada e manipulada, verifica-se que o controlador FZ-PI cascata, absorve melhor os ruídos de medidas, conduzindo a um perfil estabilizado com oscilações de menor amplitude comparativamente ao controlador PI cascata. Como é de se esperar, o desempenho é piorado com o aumento no nível de ruído presente nas medidas de concentração e temperatura.

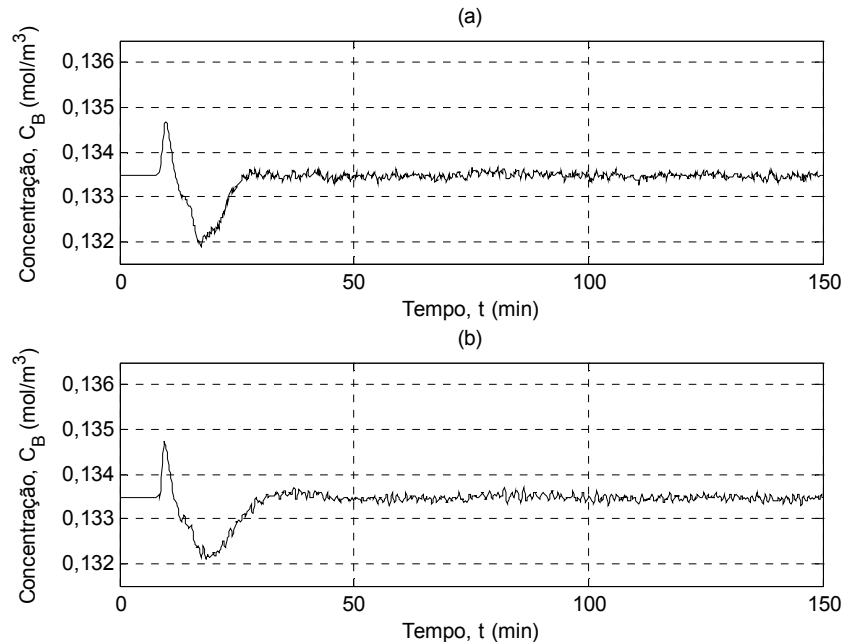


Figura 6.78 - Resposta da variável controlada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00022$) e de temperatura ($\sigma = 0,1$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.

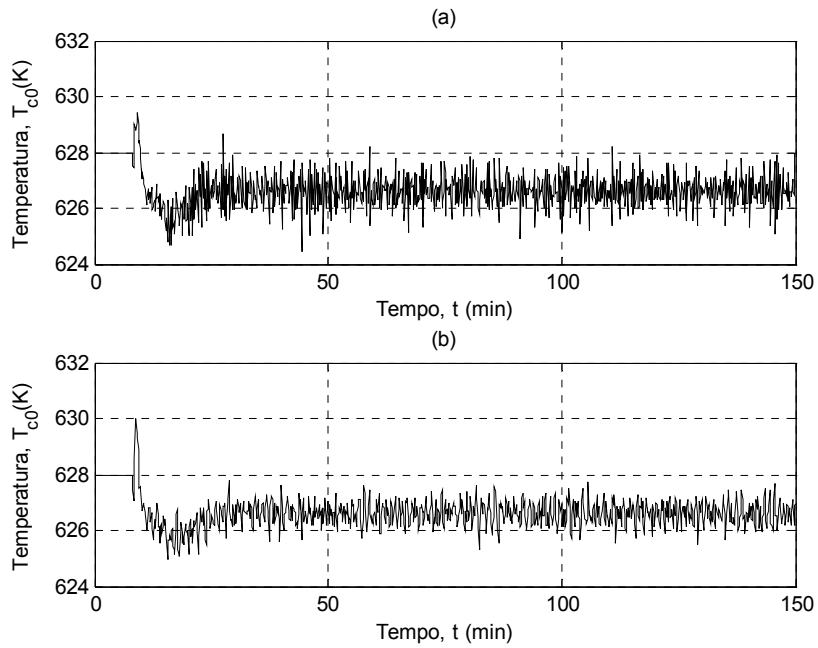


Figura 6.79 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00022$) e de temperatura ($\sigma = 0,1$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.

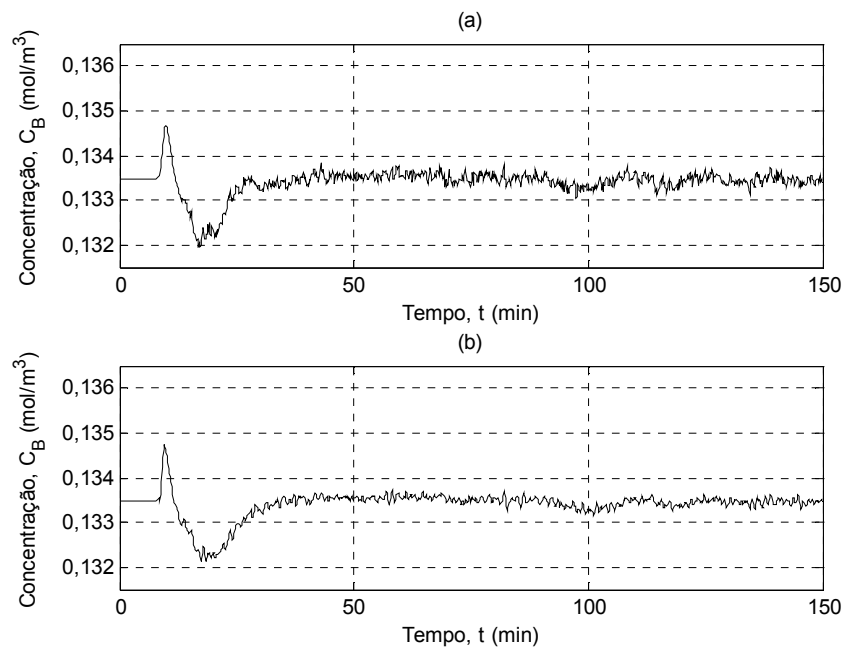


Figura 6.80 - Resposta da variável controlada com adição de ruído na medida de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,1$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.

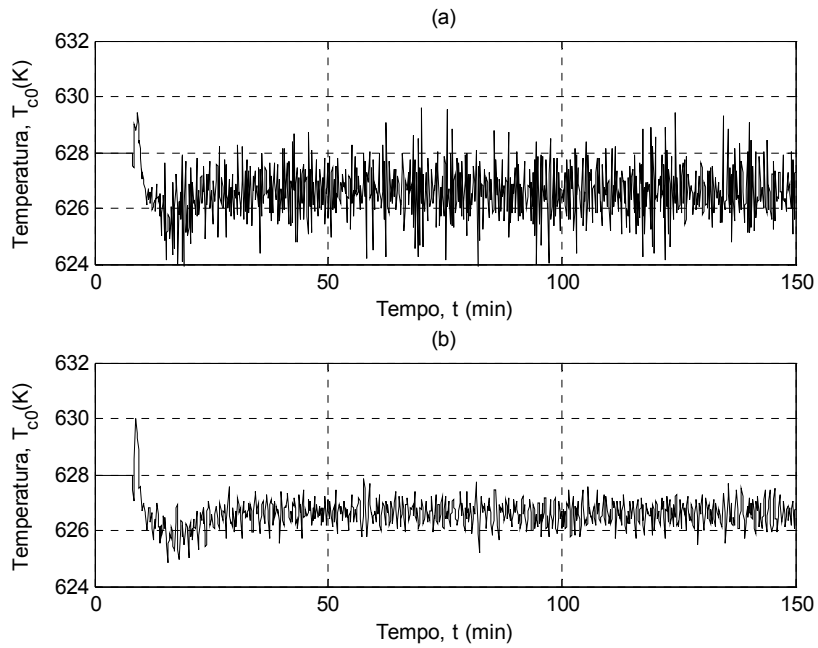


Figura 6.81 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,1$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.

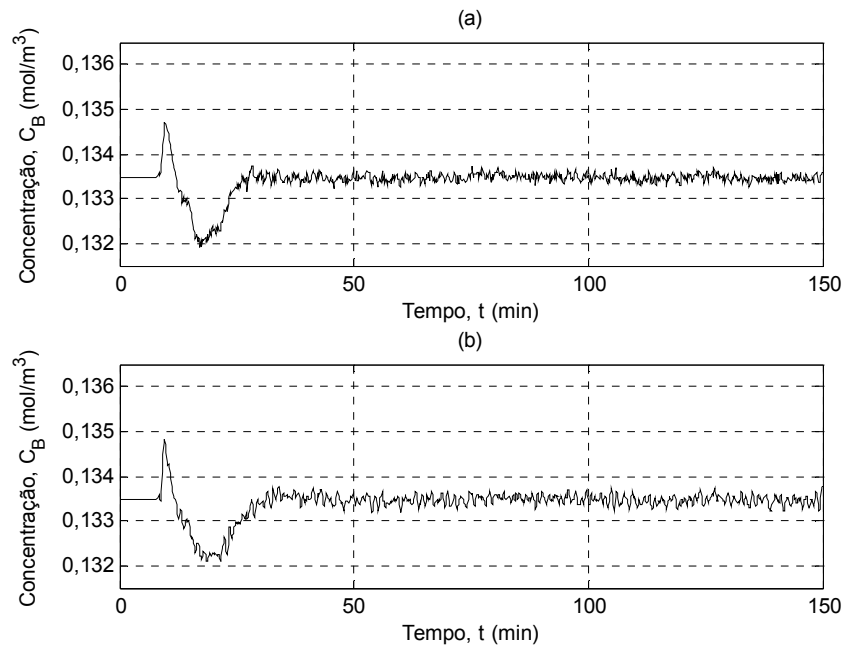


Figura 6.82 - Resposta da variável controlada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00022$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.

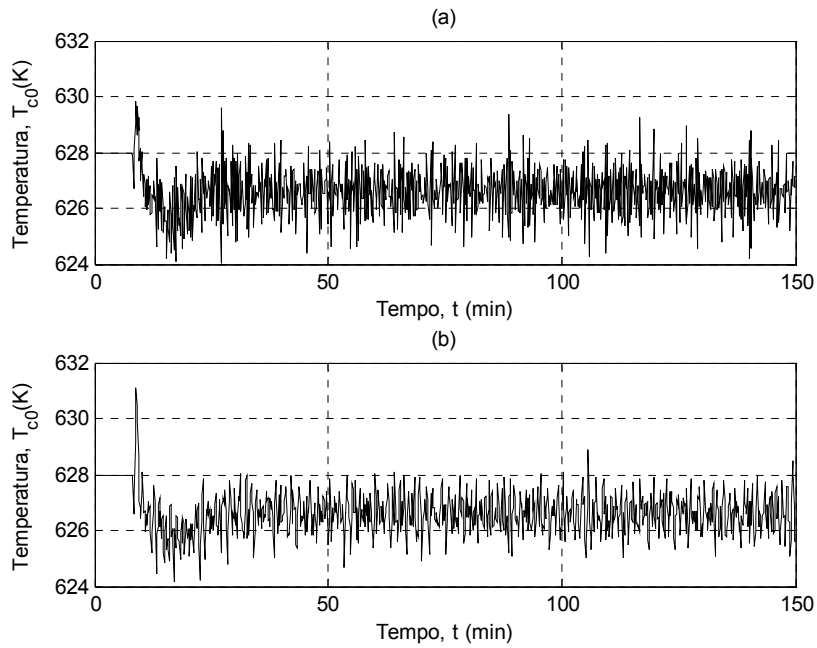


Figura 6.83 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00022$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.

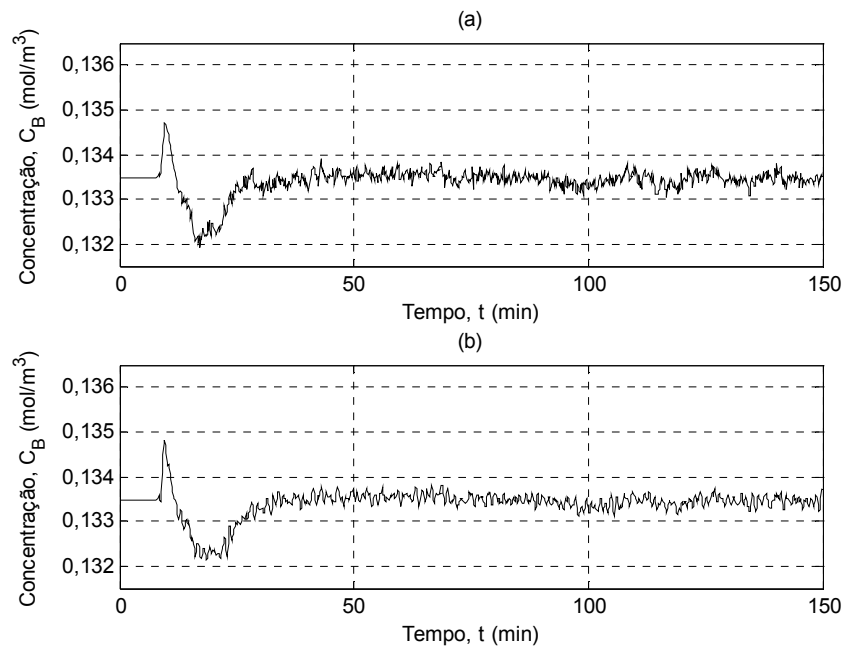


Figura 6.84 - Resposta da variável controlada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.

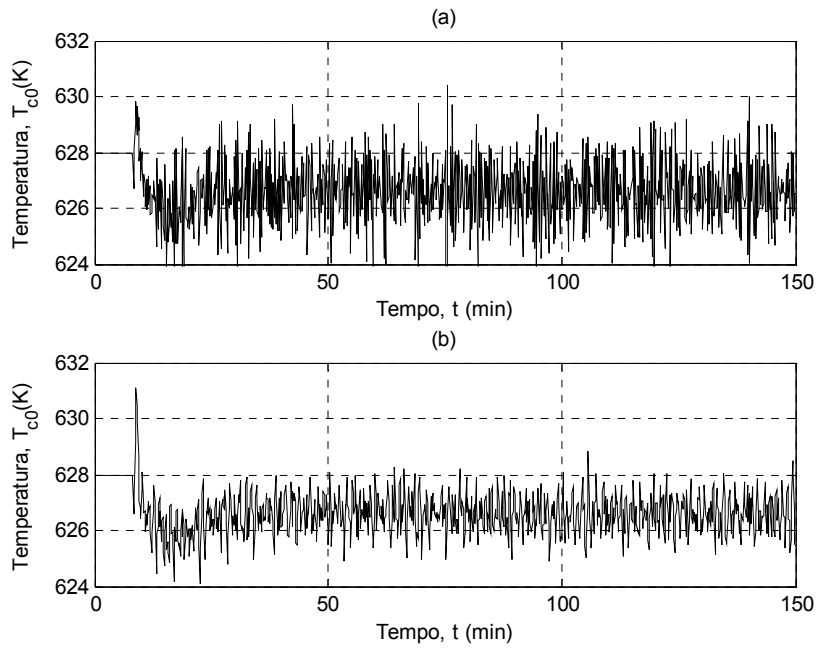


Figura 6.85 - Resposta da variável manipulada com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controladores: (a) PI cascata e (b) FZ-PI cascata.

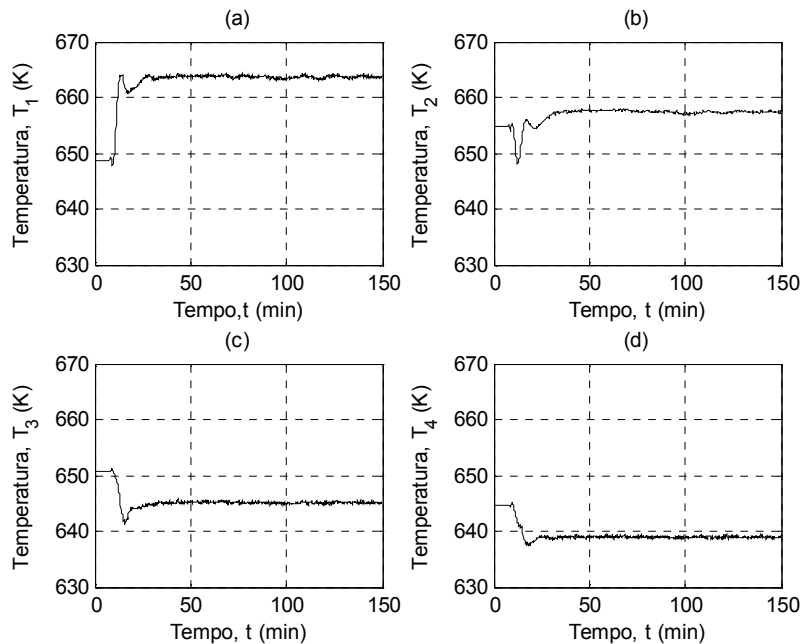


Figura 6.86 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a), $z = 0,40$ m (b), $z = 0,60$ m (c) e $z = 0,80$ m (d) com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controlador PI cascata.

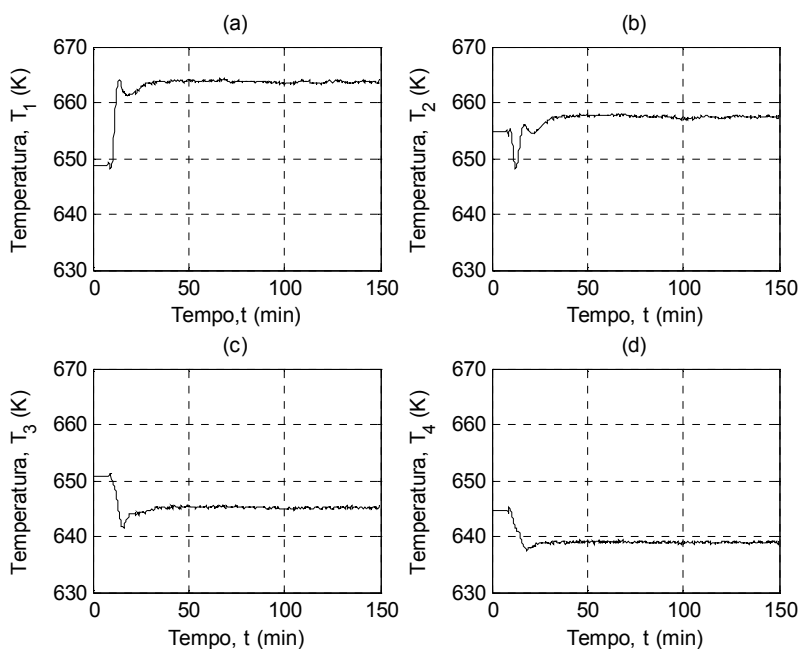


Figura 6.87 - Resposta da temperatura em $z = 0,20$ m (a), $z = 0,40$ m (b), $z = 0,60$ m (c) e $z = 0,80$ m (d) com adição de ruído nas medidas de concentração ($\sigma = 0,00043$) e de temperatura ($\sigma = 0,2$) – Controlador FZ-PI cascata.

6.6 Conclusões

Neste capítulo foi apresentado um amplo conjunto de resultados de simulações realizadas para analisar o desempenho dos quatro controladores propostos para o controle do reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico.

Os resultados obtidos evidenciaram o bom desempenho dos controladores com estrutura cascata, tendo em vista que os mesmos apresentam um comportamento antecipatório que garante um melhor controle do perfil de temperatura ao longo do leito, evitando-se, com isso, a formação de picos elevados na região de entrada do reator, e ao mesmo tempo proporcionam a regulação da concentração de anidrido ftálico na saída do reator, tomada como sendo o objetivo básico do controle.

As estruturas de controle por lógica *fuzzy* apresentaram melhor capacidade de absorver ruídos de medidas, exibindo perfis de resposta das variáveis controlada e manipulada com menor amplitude de oscilação do que as estruturas com controladores PI convencionais.

Esses resultados reforçam a importância de explorar as potencialidades de estruturas de controle que utilizam estratégia *feedback* para o controle de reatores de leito fixo, bem como de analisar de forma mais ampla e sistemática o emprego da lógica *fuzzy* no projeto desses controladores.

Além dos resultados mostrados nesta parte do trabalho, foram também realizadas simulações para verificar o efeito de considerar que a variável manipulada (temperatura de entrada do fluido térmico, T_{c0}) responde a uma dinâmica de primeira ordem com atraso no tempo (modelo FOPDT, “*first order plus dead time*”). Os resultados desse estudo específico encontram-se relatados no Apêndice C.

CAPÍTULO 7: CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Os reatores de leito fixo são equipamentos fundamentais na indústria de transformações químicas, sendo aplicados a um grande número de processos em que a etapa de reação demanda a presença de um catalisador sólido.

O trabalho aqui apresentado teve como objetivos básicos: (i) estudar o comportamento de um reator de leito fixo para a síntese de anidrido ftálico a partir da oxidação de o-xileno e (ii) propor estratégias de controle capazes de dar conta da regulação da composição do produto na corrente efluente e da manutenção de uma condição térmica adequada à reação catalisada e segura. Essa questão é crucial para a operação devido à forte exotermicidade das reações envolvidas no processo.

O modelo matemático proposto para representar o reator contemplou a reação química e os processos de transporte de massa e energia, tendo em vista que a reação ocorre na superfície de catalisadores não porosos. O modelo levou a resultados representativos, compatíveis com o conhecimento disponível sobre o processo, a partir de informações da literatura.

A análise de sensibilidade paramétrica apresentada no Capítulo 4, realizada a partir de simulações com o modelo matemático proposto, mostrou a influência marcante das condições da corrente de alimentação, em termos da temperatura e da composição de o-xileno, bem como da temperatura do fluido térmico, sobre o desempenho do sistema. Estas variáveis exercem uma forte influência no perfil de temperatura ao longo do leito, sendo definidoras da magnitude do pico de temperatura que se desenvolve na região de entrada do reator. Com base neste conhecimento obtido do estudo de sensibilidade paramétrica, foram propostas e analisadas estratégias *feedback* para o controle eficiente do reator.

Na indústria, uma tática de controle usualmente aplicada a reatores de leito fixo envolvendo reações fortemente exotérmicas é o controle seletivo, também conhecido como controle leiloeiro. Neste tipo de controle, a atuação sobre a variável manipulada é definida em

função de algumas medidas de temperatura tomadas ao longo do leito. O resultado é um sistema de regulação capaz de manter o regime térmico do reator numa condição ótima do ponto de vista da conversão desejada.

Com o propósito de verificar a aplicabilidade de novas sistemáticas de controle ao reator de leito fixo para síntese de anidrido ftálico, considerou-se a aplicação de estratégias de controle *feedback* simples envolvendo medidas de concentração na saída do reator e quatro medidas da temperatura em posições próximas à entrada do reator, onde normalmente ocorre a formação do ponto quente. As leis de controle foram definidas em termos das ações proporcional e integral na forma clássica e utilizando lógica *fuzzy* com o método de inferência do tipo Mamdani.

O objetivo definido para o controle foi estabelecido como sendo regular a concentração de anidrido ftálico na saída do reator e manter um perfil térmico compatível com os requisitos técnicos (desempenho da reação principal e redução de problemas desativação dos catalisadores, por exemplo) e de segurança (eliminação de condições de ignição da mistura reacional).

Os resultados obtidos mostraram que as estruturas diretas proporcionam a estabilização da variável controlada no seu valor de *set point*, mas são incapazes de reduzir o pico de temperatura, o qual pode atingir valores que se aproximam da situação em malha aberta, não satisfazendo, portanto, ao requisito básico de evitar a formação de picos elevados de temperatura, e o conseqüente descontrole que pode ocorrer em razão da reação fortemente exotérmica. As estruturas cascatas, por sua vez, se mostraram eficientes para estabilizar a variável controlada e garantir também um melhor controle térmico do sistema.

Em relação ao modo de formulação da lei de controle, verificou-se que na presença de ruído de medida os controladores PI por lógica *fuzzy* apresentaram um desempenho superior ao dos controladores PI convencionais.

O reator de síntese de anidrido ftálico apresenta complexidades fenomenológicas que admitem novas investigações, tanto do ponto de vista da modelagem matemática quanto do desafiante problema de controle do sistema. A seguir são enumeradas algumas sugestões para continuação deste trabalho.

Do ponto de vista do controle do processo:

- 1) Desenvolver uma metodologia de sintonia que leve em conta a otimização de uma associação de índices de desempenho dos controladores, tais como *ITAE* e tempo de acomodação. Isso se faz importante em razão da dificuldade na determinação dos parâmetros de sintonia nas estruturas cascatas, tendo em vista o número de parâmetros que devem ser sintonizados, e o fato de que nem sempre os menores valores de índices como *ISE*, *IAE* e *ITAE*, resultam no melhor desempenho dos controladores.
- 2) Incluir a ação derivativa, para verificar o efeito desta ação comparativamente no desempenho dos controladores convencionais e por lógica *fuzzy*.
- 3) Estudar a influência das funções de pertinência e do range de cada rótulo no desempenho dos controladores *fuzzy*.
- 4) A partir de testes de sensibilidade paramétrica, criar uma heurística própria com regras particulares e/ou funções de pertinência para o sistema específico.
- 5) Investigar o desempenho das estruturas de controle propostas para situações de controle servo.
- 6) Estender o estudo a sistemas em que a faixa de variação operacional da variável controlada (concentração do produto na saída do reator) seja mais ampla do que no caso do reator de síntese de anidrido ftálico.

Do ponto de vista da modelagem matemática:

- 1) Aperfeiçoar o modelo matemático, superando hipóteses e simplificações assumidas para os propósitos deste trabalho, de modo a contemplar mais aspectos fenomenológicos do processo (queda de pressão através do leito poroso, correção de parâmetros de transferência e propriedades físicas, dispersão, etc.).
- 2) Analisar sistematicamente as características numéricas do modelo matemático, tendo em vista que a inclusão das resistências difusionais à transferência de massa e calor da fase fluida para a partícula introduz uma paramétrica mais rígida nas equações diferenciais resultantes dos balanços de conservação.
- 3) Considerando que a formação do ponto quente é uma questão crucial na operação do reator de síntese de anidrido ftálico, propor e analisar esquemas de refrigeração ou de

distribuição de catalisador ao longo do leito como estratégia para o controle do perfil de temperatura. Pode-se, por exemplo, verificar o efeito de uma distribuição de catalisador com diluição deste na região de entrada do reator, o que permitiria propor inovações tecnológicas no processo.

REFERÊNCIAS

AGUIAR, H., JUNIOR O. Lógica Difusa: Aspectos práticos e aplicações. Rio de Janeiro: Editora Interciência Ltda., 1999.

ANASTASOV, A. S., ELENKOV, D., NIKOLOV, V. A model study of a conventional fixed bed tubular reactor with a catalyst layer on the inside tube wall. *Chemical Engineering and Processing*, v. 23, p. 203-211, 1988.

ANASTASOV, A. I. A study of the influence of the operating parameters on the temperature of the hot spot in a fixed bed reactor. *Chemical Engineering Journal*, v. 86, p. 287-297, 2002.

ANASTASOV, A. I. Deactivation of an industrial V_2O_5 - TiO_2 catalyst for oxidation of o-xylene into phthalic anhydride. *Chemical Engineering and Processing*, v. 42, p. 449-460, 2003.

ASSIS, A. J. Identificação e Controle de Processos não Lineares Utilizando Redes Neurais Artificiais. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 2001. Tese (Doutorado).

ÅSTRÖM, K. J., HÄGGLUND, T. The future of PID control. *Control Engineering Practice*, v. 9, p. 1163-1175, 2001.

AUTHAYANUM, S., POTHONG, W., SAEBEA, D., PATCHARAVORACHOT, Y., ARPORNWICHANOP, A. Modeling of an industrial fixed bed reactor based on lumped kinetic models for hydrogenation of pyrolysis gasoline. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, v. 14, p. 771-778, 2008.

BARRIO, V. L., SCHAUB, G., ROHDE, M., RABE, S., VOGEL, F., CAMBRA, J. F., ARIAS, P. L., GÜEMEZ, M. B. Reactor modeling to simulate catalytic partial oxidation and steam reforming of methane. Comparison of temperature profiles and strategies for hot spot minimization. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 32, p. 1421-1428, 2007.

BOUBERTAKH, H., TADJINE, M., GLORENNEC, P. Y., LABIOD, S. Tuning fuzzy PD and PI controllers using reinforcement learning. *ISA Transactions*, v. 49, p. 543-551, 2010.

BUDMAN, H. M., WEBB, C. HOLCOMB, T. R., MORARI, M. Robust inferential control for a packed-bed reactor. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 31, n. 7, p. 1665-1679, 1992.

BURDEN, R. L., FAIRES, J. D. Análise Numérica. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003.

CAMPOS, M. M., SAITO, K. Sistemas Inteligentes em Controle e Automação de Processos. Rio de Janeiro: Editora Ciência Moderna Ltda., 2004.

CASTILLO-ARAIZA, C. O., LÓPEZ-ISUNZA, F. Modeling the partial oxidation of o-xylene in an industrial packed-bed catalytic reactor: the role of hydrodynamics and catalyst activity in the heat transport. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, p. 6845-6853, 2010.

CHEN, C. Y., SUN, C. C. Adaptive inferential control of packed-bed reactors. *Chemical Engineering Science*, v. 46, n. 4, p. 1041-1054, 1991.

CHENG, Y. S., ABI, C. F., KERSHENBAUM, L. S. On-line estimation for a fixed-bed reactor with catalyst deactivation using nonlinear programming techniques. *Computers & Chemical Engineering*, v. 20, p. S793-S798, 1996.

CHIN, I. S., CHUNG, J. W, LEE, K. S. Model predictive control of a fixed-bed reactor with nonlinear quality inference. *Korean Journal of Chemical Engineering*, v. 19, n. 2, p. 213-220, 2002.

CHOU, Y. S., WU, C. H. Passivity-based control of the phthalic anhydride fixed-bed reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 62, p.1282-1297, 2007.

DIAS, C. R., PORTELA, M. F., BOND, G. C. Oxidation of o-xylene to phthalic anhydride over V₂O₅-TiO₂ catalysts. II. Transient catalytic behavior. *Journal of Catalysis*, v. 157, p. 353-358, 1995.

DOYLE III, F. J., BUDMAN, H. M., MORARI, M. Linearizing controller design for a packed-bed reactor using a low-order wave propagation model. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 35, p. 3567-3580, 1996.

ELNASHAIE, S. S. H., ELSHISHINI, S. S. Modelling, Simulation and Optimization of Industrial Fixed Bed Catalytic Reactors. Amsterdam: Gordon and Breach Science Publishes, 1993.

ENDER, L., MACIEL FILHO, R. Design of multivariable controller based on neural networks. *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, p. 937-943, 2000.

FARSI, M., ESLAMLOUEYAN, R., JAHANMIRI, A. Modeling, simulation and control of dimethyl ether synthesis in an industrial fixed-bed reactor. *Chemical Engineering and Processing*, v. 50, p. 85-94, 2011.

FENG, G. A survey on analysis and design of model-based fuzzy control systems. *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*, v. 14, n. 5, p. 676-697, 2006.

FINLAYSON, B. A. Nonlinear Analysis in Chemical Engineering. New York: McGraw-Hill International Book Company, 1980.

FROMENT, G. F. Fixed bed catalytic reactors – current design status. *Industrial & Engineering Chemistry*, v. 59, n. 2, p. 18-27, 1967.

FROMENT, G. F., BISCHOFF, K. B. Chemical reactor analysis and design. Singapore: Wiley Series in Chemical Engineering, 2 ed., 1990.

GALLUZZO, M., COSENZA, B. Control of a non-isothermal continuous stirred tank reactor by a feedback-feedforward structure using type-2 fuzzy logic controllers. *Information Sciences*, v. 181, p. 3535-3550, 2011.

GARCÍA, J., FERNÁNDEZ-ANAYA, G., VARGAS-VILLAMIL, F. D., ROSALES-QUINTERO, A. Interpolated control of a fixed-bed reactor with cold-shot cooling. *Chemical Engineering Communications*, v. 196, p. 1262-1277, 2009.

GHASEM, N. M. Design of a fuzzy logic controller for regulating the temperature in industrial polyethylene fluidized bed reactor. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 84, p. 97-106, 2006.

GLAN DEVADHAS, G., PUSHPAKUMAR, S. Intelligent Controller Design for a Chemical Process. *International Journal of Chemical Engineering*, v. 4, p. 399-410, 2010.

GROPPI, G., TRONCONI, E. Design of novel monolith catalyst supports for gas/solid reactions with heat exchange. *Chemical Engineering Science*, v. 55, p. 2161-2171, 2000.

HAJ-ALI, A, YING, H. Structural analysis of fuzzy controllers with nonlinear input fuzzy sets in relation to nonlinear PID control with variable gains. *Automatica*, v. 40, p. 1551-1559, 2004.

HALABI, M. H., DE CROON, M. H. J. M., VAN DER SCHAAF, J., COBDEN, P. D., SCHOUTEN, J. C. Modeling and analysis of autothermal reforming of methane to hydrogen in a fixed bed reformer. *Chemical Engineering Journal*, v. 137, p. 568-578, 2008.

HERNANDEZ-MARTINEZ, E., PUEBLA, H., ALVAREZ-RAMIREZ, J. Cascade control scheme for tubular reactors with multiple temperature measurements. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, v. 8, note s3, 2010.

HERTEN, J. FROMENT, G. F. Kinetics and product distribution in the oxidation of o-xylene on a vanadium pentoxide catalyst. *I&EC Process Design and Development*, v. 7, n. 4, p. 516-526, 1968.

HOFMANN, H. Progress in modelling of catalytic fixed-bed reactors. *German Chemical Engineering*, v.2, p.258-267, 1979.

HUA, X., MANGOLD, M., KIENLE, A., GILLES, E. D. State profile estimation of an autothermal periodic fixed-bed reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 1, p. 47-58, 1998.

HUA, X., JUTAN, A. Nonlinear inferential cascade control of exothermic fixed-bed reactors. *AIChE Journal*, v. 46, n. 5, p. 980-996, 2000.

INCROPERA, F. P., DeWITT, D. P. Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa. Rio de Janeiro: LTC, 6 ed., 2008.

JANG, J. S. R. Adaptive-network-based fuzzy inference system. IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, v. 23, n. 3, p. 665-685, 1993.

KARAFYLLIS, I., DAOUTIDIS, P. Control of hot spots in plug flow reactor. Computers and Chemical Engineering, v. 26, p. 1087-1094, 2002.

KARANTH, N. G., HUGHES, R. Simulation of an adiabatic packed bed reactor. Chemical Engineering Science, n. 29, p. 197, 1974.

KOZUB, D. J., MACGREGOR, J. F., WRIGHT, J. D. Application of LQ and IMC controllers to a packed-bed reactor. AIChE Journal, v. 33, n. 9, p. 1496-1506, 1987.

KUMAR, V., RANA, K. P. S., GUPTA, V. Real-time performance evaluation of a fuzzy PI+fuzzy PD controller for liquid-level process. International Journal of Intelligent Control and Systems, v. 13, n. 2, p. 89-96, 2008.

LEE, C. C. Fuzzy logic in control systems: fuzzy logic controller – Part I. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, v. 20, n. 2, p. 404-418, 1990.

LI, H. X., GATLAND, H. B. Conventional fuzzy control and its enhancement. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics – Part B: Cybernetics, v. 26, n. 5, p. 791-797, 1996.

LI, H. X. A comparative design and tuning for conventional fuzzy control. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics – Part B: Cybernetics, v. 27, n. 5, p. 884-889, 1997.

LOPES, M. F. S. Modelagem Matemática e Simulação de Reatores Catalíticos: Aplicação para a Reação de Oxidação do Orto-Xileno. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 1994. Tese (Doutorado).

LUYBEN, W. L. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers. Singapore: McGraw-Hill International Editions, 2 ed., 1990.

MANENTI, F., CIERI, S., RESTELLI, M. Considerations on the steady-state modeling of methanol synthesis fixed-bed reactor. Chemical Engineering Science, v. 66, p. 152-162, 2011.

MANENTI, F., CIERI, S., RESTELLI, M., BOZZANO, G. Dynamic modeling of the metanol synthesis fixed-bed reactor. Computers and Chemical Engineering, v. 48, p. 325-334, 2013.

MORAIS, E. R., TOLEDO, E. C. V., MACIEL FILHO, R. Mixed coolant flow for optimal design of fixed bed catalytic reactors. Proceedings of the 8th International Symposium on Process Systems Engineering, p. 978-983, 2003.

NASCIMENTO JUNIOR, C. L., YONEYAMA, T. Inteligência Artificial em Controle e Automação. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda., 2000.

OGATA, K. Engenharia de Controle Moderno. Rio de Janeiro: Prentice Hall do Brasil, 1982.

PAPAGEORGIU, J. N., FROMENT, G. F. Phthalic anhydride synthesis. Reactor optimization aspects. Chemical Engineering Science, v. 51, n. 10, p. 2091-2098, 1996.

PEDERNERA, M., BORIO, D. O., PORRAS, J. A. A new cocurrent reactor for ammonia synthesis. Chemical Engineering Science, v. 51, n. 11, p. 2927-2932, 1996.

PETERA, J., NOWICKI, L., LEDAKOWICZ, S. New numerical algorithm for solving multidimensional heterogeneous model of the fixed bed reactor. Chemical Engineering Journal, v. 214, p. 237-246, 2013.

PINTO, J. C., LAGE, P. L. C. Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química. Rio de Janeiro: E-papers, 2001.

REID, C. R., PRAUSNITZ, J. M., POLING, B. E. The Properties of Gases and Liquids. Singapore: McGraw-Hill International Editions, 4 ed., 1988.

REZAIE, N., JAHANMIRI, A., MOGHTADERI, B., RAHIMPOUR, M. R. A comparison of homogeneous and heterogeneous dynamic models for industrial methanol reactors in the presence of catalyst deactivation. Chemical Engineering and Processing, v. 44, p. 911-921, 2005.

REZNIK, L., GHANAYEM, O., BOURMISTROV, A. PID plus fuzzy controller as a design base for industrial applications. Engineering Applications of Artificial Intelligence, v. 13, p. 419-430, 2000.

ROSA, I. S., Modelagem e Simulação de Reator Catalítico de Leito Fixo para a Produção de Anidrido Ftálico a Partir da Oxidação Controlada de o-Xileno: Estratégias de Diluição do Catalisador e Sensibilidade Paramétrica. Lorena: Escola de Engenharia de Lorena, 2007. Tese (Mestrado)

SABURA BANU, U., UMA, G. Fuzzy gain scheduled CSTR with GA-based PID. Chemical Engineering Communications, v. 195, p. 1213-1226, 2008.

SEBORG, D. E., EDGAR, T. F., MELLICHAMP, D. A. Process Dynamic Control. Singapore: John Wiley and Sons, 1989.

SHAHROKHI, M., BAGHMISHEH, G. R. Modeling, simulation and control of a methanol synthesis fixed-bed reactor. Chemical Engineering Science, v. 60, p. 4275-4286, 2005.

SHAW, I. S., SIMÕES, M. G. Controle e Modelagem *Fuzzy*. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda., 2ª reimpressão da 1ª edição, 2004.

SHEIKHZADEH, M., TRIFKOVIC, M., ROHANI, S. Fuzzy logic and rigid control of a seeded semi-batch, anti-solvent, isothermal crystallizer. *Chemical Engineering Science*, v. 63, p. 991-1002, 2008.

SILVA, F. V., NEVES FILHO, L. C., SILVEIRA JR., V. Experimental evaluation of fuzzy controllers for the temperature control of the secondary refrigerant in a liquid chiller. *Journal of Food Engineering*, v. 75, p. 349-354, 2006.

SMITH, C. A., CORRIPIO, A. *Princípios e Prática do Controle Automático de Processo*. Rio de Janeiro: LTC, 3 ed., 2008.

SZUKIEWICZ, M., KACZMARSKI, K., PETRUS, R. Modelling of fixed-bed reactor: two models of industrial reactor for selective hydrogenation of acetylene. *Chemical Engineering Science*, v. 53, n. 1, p. 149-155, 1998.

TAKAGI, T., SUGENO, M. Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, v. smc-15, n. 1, p. 116-143, 1985.

TANSCHKEIT, R., GOMIDE, F., TEIXEIRA, M. M. Modelagem e controle nebuloso. In: AGUIRRE, L. A. (Ed.). *Enciclopédia de Automática: Controle & Automação*. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda., v. 3, 2007.

TOLEDO, E. C. V. *Modelagem, Simulação e Controle de Reatores Catalíticos de Leito Fixo*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, 1999. Tese (Doutorado).

URREA, R., ALVAREZ, J., ALVAREZ-RAMIREZ, J. Linear PI temperature-concentration cascade control for tubular reactors. *Chemical Engineering Communications*, v. 195, p. 803-820, 2008.

TYE, C. T., MOHAMED, A. R., BHATIA, S. Modeling of catalytic reactor for oxidative coupling of methane using La_2O_3 -CaO catalyst. *Chemical Engineering Science*, v. 87, p. 49-59, 2002.

VILLADSEN, J., MICHELSEN, M. L. *Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation*. New Jersey: Prentice-Hall Inc., 1978.

VILLADSEN, J. V., STEWART, W.E. Solution of boundary-value problems by orthogonal collocation. *Chemical Engineering Science*, n. 22, p.1483-1501, 1967.

WANG, J.-W, WU, H.-N, LI, H.-X. Distributed fuzzy control design of nonlinear hyperbolic PDE systems with application to non-isothermal plug-flow reactor. *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*, v. 19, n. 3, p. 514-526, 2011.

WANG, Y.-N., XU, Y.-Y., LI, Y.-W., ZHAO Y.-L., ZHANG, B.-J. Heterogeneous modeling for fixed-bed Fischer-Tropsch synthesis: Reactor model and its applications. *Chemical Engineering Science*, v.58, p.867-875, 2003.

WU, W., CHEN, C. W. Measurement-based optimization and predictive control for an exothermic tubular reactor system. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 46, p. 2064-2076, 2007.

WU, W., HUANG, M. Y. Nonlinear inferential control for an exothermic packed-bed reactor: geometric approaches. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 2023-2034, 2003.

ZADEH, L. A. Fuzzy sets. *Information and Control*, v. 8, p. 338-353, 1965.

ZANATA, D. R. P. Desenvolvimento de Sensor Virtual Empregando Redes Neurais para Medição da Composição de uma Coluna de Destilação. São Paulo: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2005. Tese (Mestrado).

ZAVARUKHIN, S. G., KUVSHINOV, G. G. Mathematic modeling of the process of production of nanofibrous carbon from methane in an isothermal reactor with a fixed bed of the $\text{Ni-Al}_2\text{O}_3$ catalyst. *Chemical Engineering Journal*, v. 120, p. 139-147, 2006.

ZHOU, X. G., LIU, L. H., DAI, Y. C., YUAN, W. K. Optimizing control of a wall-cooled fixed-bed reactor. *Chemical Engineering Science*, v. 54, p. 2739-2744, 1999.

APÊNDICE A: CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA E CALOR

Na modelagem de reatores de leito fixo envolvendo reações gás-sólido, quando se utilizam modelos heterogêneos, faz-se necessário dispor dos coeficientes de transferência de massa e calor entre a fase gasosa que constitui a mistura reacional e a fase sólida catalítica. Esses parâmetros são de difícil predição em função das complexidades fenomenológicas envolvidas. A literatura apresenta correlações que permitem calcular separadamente o coeficiente de transporte e a área superficial específica da fase sólida, sendo o produto destes dois parâmetros designado como coeficiente volumétrico de transporte. Como destaca Froment e Bischoff (1990), salvo para condições muito rígidas, esses parâmetros podem ser estimados com precisão suficiente.

O estudo desenvolvido neste trabalho baseou-se em um modelo heterogêneo para o reator de síntese de anidrido ftálico, fazendo-se necessário prever os coeficientes de transferência de massa e calor gás-sólido. Para isso, foram utilizadas as correlações consideradas por Anastasov et al. (1988) em seu estudo sobre o processo de oxidação de o-xileno a anidrido ftálico, juntamente com dados e/ou correlações para predição de propriedades físicas disponíveis em Reid et al. (1988) e Incropera e DeWitt (2008).

A.1 Coeficiente de transferência de massa entre o gás e a partícula

Correlação utilizada por Anastasov et al. (1988):

$$k_{gp} = \frac{0,357 v_g}{\text{Re}^{0,36} \text{Sc}^{0,67} \varepsilon} \quad (\text{A.1})$$

Sendo:

k_{gp} coeficiente de transferência de massa gás-sólido (m s^{-1});

v_g velocidade do gás (m s^{-1});

Re número de Reynolds;
 Sc número de Schmidt;
 ε porosidade do leito catalítico.

$$Re = \frac{d_p v_g}{\nu_g} \quad (\text{A.2})$$

Sendo:

d_p diâmetro da partícula catalítica (m);
 ν_g viscosidade cinemática do gás ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$);

$$Sc = \frac{\nu_g}{D_m} \quad (\text{A.3})$$

Sendo D_m o coeficiente de difusividade molecular ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$).

A.1.1 Coeficiente de difusividade

Foram considerados os coeficientes de difusividade do o-xileno e do anidrido ftálico no ar, utilizando-se a correlação de Wilke-Lee (REID et al., 1988):

$$D_{AB} = \frac{\left[3,03 - \frac{0,98}{\sqrt{M_{AB}}} \right] (10^{-3}) T^{1,5}}{P \sqrt{M_{AB}} \sigma_{AB}^2 \Omega_D} \quad (\text{A.4})$$

Sendo:

D_{AB} coeficiente de difusão binária ($\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$);
 T temperatura (K);
 M_A massa molar de A (g mol^{-1});
 M_B massa molar de B (g mol^{-1});

P	pressão (bar);
σ_{AB}	comprimento característico (Å);
Ω_D	integral de colisão para a difusão molecular;
M_{AB}	massa molar para a mistura binária A-B (g mol ⁻¹).

$$M_{AB} = \frac{2}{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}} \quad (\text{A.5})$$

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \quad (\text{A.6})$$

$$\sigma = 1,18 v_b^{1/3} \quad (\text{A.7})$$

Sendo v_b o volume molar líquido para cada componente (cm³ mol⁻¹).

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (\text{A.8})$$

A, B, C, D, F, G e H são constantes empíricas, cujos valores são dados por Reid et al. (1988):

$A = 1,06036$	$B = 0,15610$	$C = 0,19300$	$D = 0,47635$
$E = 1,03587$	$F = 1,52996$	$G = 1,76474$	$H = 3,89411$

$$T^* = \frac{T}{\frac{\varepsilon_{AB}}{k}} \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{\varepsilon_{AB}}{k} = \left(\frac{\varepsilon_A}{k} \times \frac{\varepsilon_B}{k} \right)^{1/2} \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\varepsilon}{k} = 1,15T_b \quad (\text{A.11})$$

Sendo T_b (K) a temperatura do ponto de ebulição a 1 atm.

Para um sistema binário em que um dos componentes é o ar (B), têm-se: $\sigma_B = 3,62 \text{ \AA}$, $(\varepsilon/k)_B = 97,0 \text{ K}$ e $M_B = 28,84 \text{ g/mol}$.

A.2 Coeficiente de transferência de calor

Correlação utilizada por Anastasov et al. (1988):

$$h_{gp} = \frac{0,384 v_g c_{pg}}{\text{Re}^{0,36} \text{Pr}^{0,67} \varepsilon} \quad (\text{A.12})$$

Sendo:

h_{gp} coeficiente de transferência de calor gás-sólido ($\text{W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$);
 c_{pg} capacidade calorífica do gás ($\text{J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$);
 Pr número de Prandtl para o gás.

$$\text{Pr} = \frac{C_p \mu}{k} \quad (\text{A.13})$$

Sendo k a condutividade térmica do gás ($\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$).

A.3 Área superficial da partícula

Correlação disponível em Froment e Bischoff (1990):

$$a_s = \frac{6(1-\varepsilon)}{d_p} \quad (\text{A.14})$$

Sendo a_s a área superficial específica ($\text{m}^2 \text{m}^{-3}$).

A.4 Cálculos para o sistema de síntese de anidrido ftálico por oxidação de o-xileno

Consideram-se dois sistemas binários: 1) A – o-Xileno e B – Ar; e, 2) A – anidrido ftálico e B – Ar.

Na Tabela A.1 são dados os parâmetros para o cálculo da difusividade molecular do o-xileno e do anidrido ftálico: V_b (volume molar) estimado pelo método de Le Bas, T_b (temperatura normal de ebulição) e M_A (massa molar), conforme Reid et al. (1988).

Tabela A.1 - Parâmetros para o-Xileno e Anidrido ftálico.

Parâmetro	o-Xileno	Anidrido ftálico
T_b (K)	417,6	560,0
V_b ($\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$)	155,4	155,4
M_A (g mol^{-1})	106,17	148,12

Como o sistema é diluído, as propriedades físicas da mistura reacional foram consideradas iguais àsquelas do ar, dadas na Tabela A.2 (INCROPERA e DeWITT, 2008).

Tabela A.2 - Propriedades físicas do ar.

T (K)	ν ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)	μ (N s m^{-2})	c_p ($\text{kJ kg}^{-1} \text{K}$)	k ($\text{J s}^{-1} \text{m K}$)
600	$52,69 \times 10^{-6}$	$305,8 \times 10^{-7}$	1,051	$46,9 \times 10^{-3}$
650	$60,21 \times 10^{-6}$	$322,5 \times 10^{-7}$	1,063	$49,7 \times 10^{-3}$
700	$68,10 \times 10^{-6}$	$338,8 \times 10^{-7}$	1,075	$52,4 \times 10^{-3}$

Considerando-se um diâmetro de partícula no leito: $d_p = 0,006 \text{ m}$, condição de pressão: $P = 1,86 \text{ bar}$ e porosidade do leito: $\varepsilon = 0,35$, a partir das equações e dos valores de propriedades e parâmetros descritos acima foram realizados os cálculos dos coeficientes de transporte que aparecem nas equações de conservação, a saber: os coeficientes volumétricos de transferência de massa gás-sólido para o o-xileno e o anidrido ftálico e o coeficiente volumétrico de transferência

de calor gás-sólido. Estes valores são mostrados na Tabela A.3, e foram utilizados nas simulações com o modelo matemático.

Tabela A.3 - Valores dos coeficientes de transferência de massa e calor.

T (K)	$(k_{gp}a_s)_A$ (s^{-1})	$(k_{gp}a_s)_B$ (s^{-1})	$h_{gp}a_s$ ($J s^{-1} m^{-3} K^{-1}$)
600	78,88	75,12	$2,79 \times 10^5$
650	83,24	79,38	$2,95 \times 10^5$
700	87,44	83,49	$3,10 \times 10^5$

A magnitude dos valores obtidos indica que para as condições consideradas não há forte efeito de limitações difusionais na operação do reator de síntese de anidrido ftálico, o que constitui uma condição que realmente ocorre na prática industrial de reatores de leito fixo (FROMENT e BISCHOFF, 1990).

APÊNDICE B: ANÁLISE DE DIFERENTES ESTRUTURAS DE CONTROLE CASCATA

As medidas de temperatura ao longo do leito são indispensáveis ao controle do perfil de temperatura em um reator de leito fixo operando reações fortemente exotérmicas, e a localização dos sensores torna-se uma questão importante a ser considerada no projeto do sistema de controle.

São possíveis diferentes estruturas de controle cascata tendo como variáveis medidas a concentração de anidrido ftálico na saída do reator (associada à malha primária) e a temperatura nas posições $z_1 = 0,20$ m, $z_2 = 0,40$ m, $z_3 = 0,60$ m e $z_4 = 0,80$ m (associada à malha secundária). A sistemática adotada para o projeto de cada estrutura de controle cascata concentração-temperatura foi a seguinte:

Estrutura de controle 1: Medida da variável controlada e da temperatura em $z = 0,20$ m;

Estrutura de controle 2: Medida da variável controlada e da temperatura em $z = 0,40$ m;

Estrutura de controle 3: Medida da variável controlada e da temperatura em $z = 0,60$ m;

Estrutura de controle 4: Medida da variável controlada e da temperatura em $z = 0,80$ m;

Estrutura de controle 5: Medida da variável controlada e das quatro temperaturas nas posições referidas, com a ação da malha secundária estabelecida em função da média aritmética das temperaturas medidas;

Estrutura de controle 6: Medida da variável controlada e das quatro temperaturas nas quatro posições referidas, com a ação da malha secundária estabelecida em função do maior valor de temperatura (controle seletivo).

As Figuras B.1 a B.6 que seguem mostram o desempenho do controlador PI cascata com as seis estruturas de controle, para uma perturbação degrau na temperatura de alimentação dos reagentes ($T_0 = 653,12$ K). Na Tabela B.1 são dados os valores dos parâmetros de sintonia e de desempenho dos controladores. As curvas foram obtidas sem a adição de ruído de medida, e as mesmas evidenciam o melhor desempenho da Estrutura de controle 5, na qual a ação do

controlador secundário é projetada com base na média dos valores das quatro medidas de temperatura. Ao considerar a média, tem-se uma melhor representatividade da situação térmica existente na região do pico de temperatura, obtendo-se um melhor desempenho da variável controlada, mas implicando isso, também, em um maior esforço na variável manipulada.

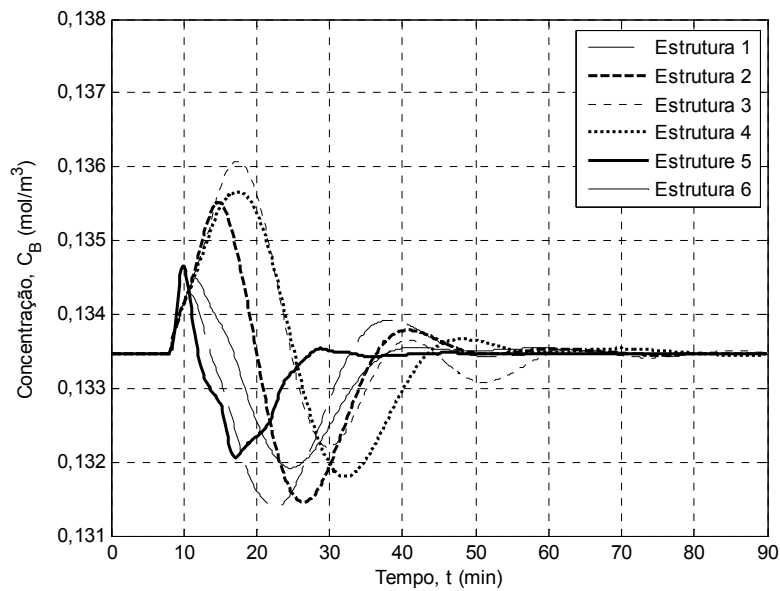


Figura B.1 - Resposta da variável controlada.

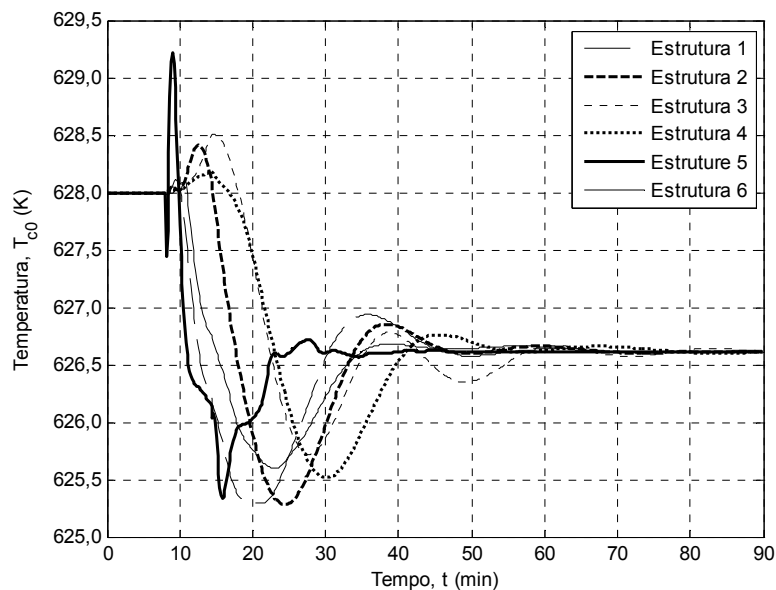


Figura B.2 - Resposta da variável manipulada.

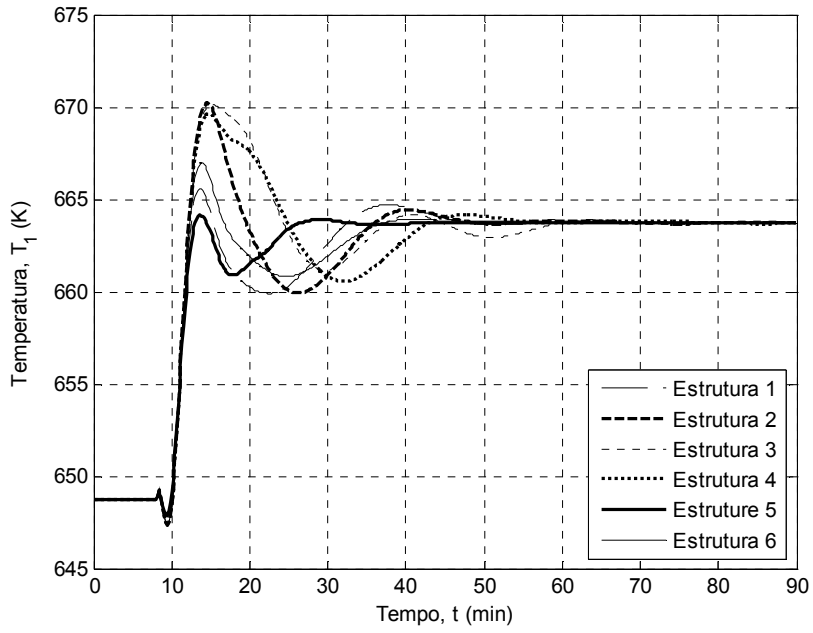


Figura B.3 - Resposta da temperatura no ponto $z = 0,20$ m (T_1).

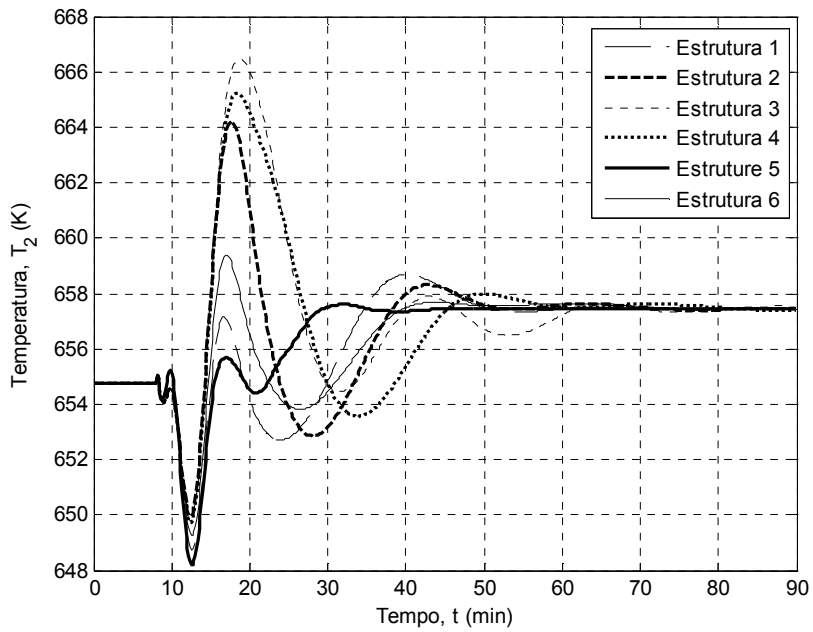


Figura B.4 - Resposta da temperatura no ponto $z = 0,40$ m (T_2).

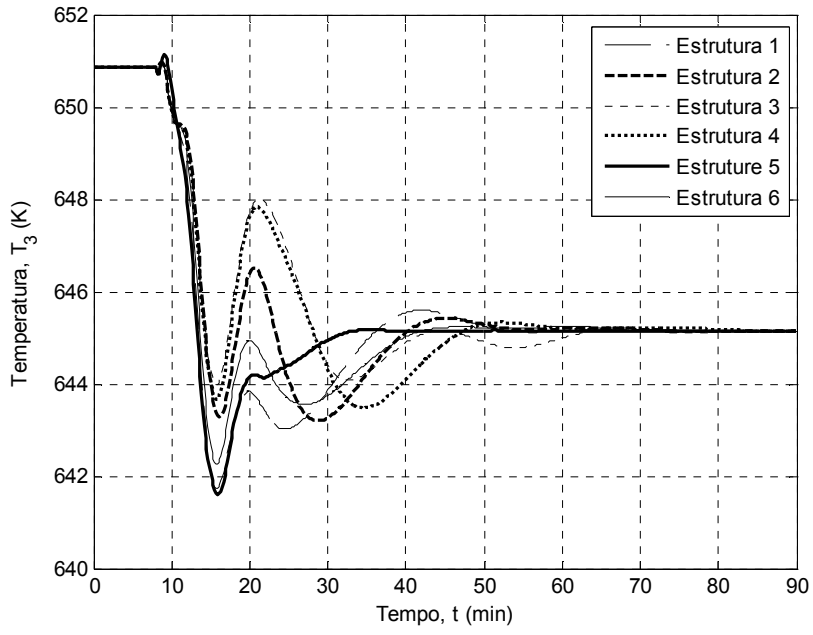


Figura B.5 - Resposta da temperatura no ponto $z = 0,60$ m (T_3).

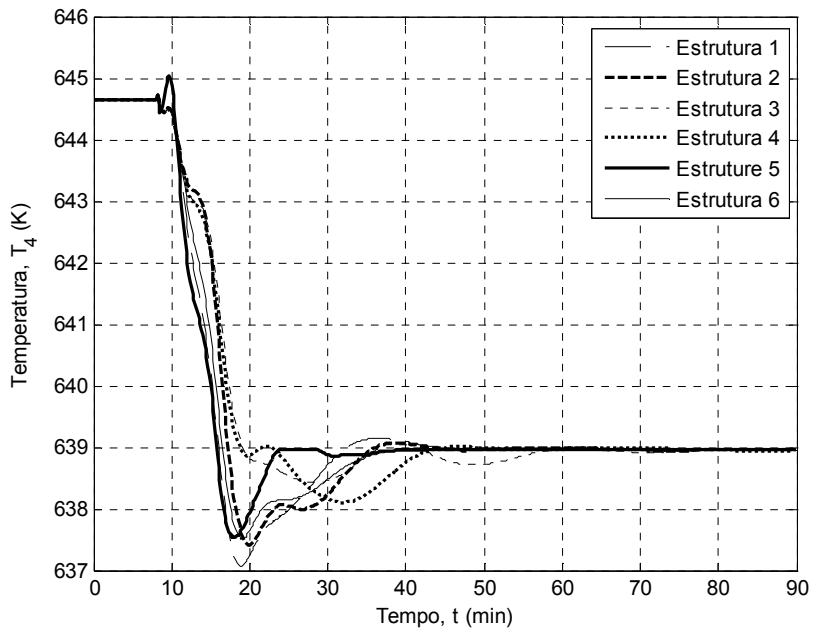


Figura B.6 - Resposta da temperatura no ponto $z = 0,80$ m (T_4).

Tabela B.1 - Parâmetros de desempenho para o controlador PI cascata concentração-temperatura – perturbação em T_0 de +4% ($T_0 = 653,12$ K).

Parâmetros	Estrutura 1	Estrutura 2	Estrutura 3	Estrutura 4	Estrutura 5	Estrutura 6
K_{c1} (K mol m ⁻³)	5300,00	5000,00	6000,00	5800,00	268,00	*
τ_{i1} (s)	350,00	300,00	800,00	470,00	90,00	*
K_{c2}	0,075	0,070	0,065	0,065	4,80	*
τ_{i2} (s)	400,00	450,00	350,00	400,00	82,00	*
T_a (min)	46,67	47,33	58,50	54,17	18,67	48,33
ISE (mol ² m ⁻⁶ min ²)	4,01x10 ⁻⁵	5,22x10 ⁻⁵	6,07x10 ⁻⁵	6,24x10 ⁻⁵	1,31x10 ⁻⁵	2,72x10 ⁻⁵
IAE (mol m ⁻³ min)	0,0308	0,0369	0,0406	0,0435	0,0139	0,0267
$ITAE$ (mol m ⁻³ min ²)	0,9539	1,1170	1,2617	1,3899	0,3336	0,8489
SE (mol m ⁻³)	0,0021	0,0020	0,0026	0,0022	0,0014	0,0017
$\max(T(t))$ (K)	665,85	671,68	671,97	671,12	664,25	667,62
$\max(T_{est})$ (K)	663,96	663,95	663,98	663,91	663,94	663,95

*Assumem-se os valores dos parâmetros das Estruturas 1, 2, 3 ou 4, dependendo da posição em que se encontra a máxima temperatura selecionada em um dado instante.

APÊNDICE C: DINÂMICA DE PRIMEIRA ORDEM COM ATRASO NO TEMPO APLICADA À VARIÁVEL MANIPULADA

Neste apêndice, apresenta-se um estudo comparativo relacionado à variável manipulada T_{c0} (variável de saída do controlador) considerando duas situações: (i) que o valor de saída do controlador é o valor de entrada no processo, o que corresponde aos resultados mostrados no Capítulo 6; e, (ii) que o valor de entrada no processo é o valor de saída do controlador modificado por uma dinâmica de primeira ordem com atraso no tempo.

Um modelo de primeira ordem com atraso de tempo é representado por uma equação diferencial do tipo:

$$\tau \frac{dy}{dt} + y = K_p f(t - t_0) \quad (\text{C.1})$$

Sendo τ a constante de tempo, K_p o ganho, t_0 o tempo de atraso e $f(t - t_0)$ o sinal de entrada do processo modificado com o atraso.

Considerando que no equilíbrio (estado estacionário) $y_s = f_s$, pode-se representar a Equação (C.1) em termos das variáveis de desvio, obtendo-se:

$$\tau \frac{dY}{dt} + Y = K_p F(t - t_0) \quad (\text{C.2})$$

Sendo $Y = y - y_s$ e $F = f - f_s$.

Aplicando a transformada de Laplace na Equação (C.2) resulta a Equação (C.3), denominada função de transferência de primeira ordem com atraso de tempo.

$$\frac{\bar{Y}(s)}{\bar{F}(s)} = \frac{K_p e^{-t_0 s}}{\tau s + 1} \quad (\text{C.3})$$

Introduzindo uma perturbação degrau de amplitude $Au(t - t_0)$, sendo $u(t - t_0)$ um degrau unitário, resulta em:

$$\bar{Y}(s) = \frac{K_p e^{-t_0 s}}{\tau s + 1} \times \frac{A}{s} \quad (\text{C.4})$$

A transformada inversa de Laplace da Equação (C.4) é:

$$\bar{Y}(t) = K_p A u(t - t_0) \left[1 - e^{-\frac{-(t-t_0)}{\tau}} \right] \quad (\text{C.5})$$

onde a presença de $u(t - t_0)$, a função degrau unitário, implica que a resposta de $\bar{Y}(t)$ é zero para $t < t_0$.

Adaptando as relações acima à temperatura do fluido térmico, variável manipulada T_{c0} , em que:

$$\bar{Y} = T_{c0}^* - T_{c0,ref} \quad (\text{C.6})$$

$$A = T_{c0} - T_{c0,ref} \quad (\text{C.7})$$

Tem-se:

$$T_{c0}^* = T_{c0,ref} + K_p (T_{c0} - T_{c0,ref}) u(t - t_0) \left[1 - e^{-\frac{-(t-t_0)}{\tau}} \right] \quad (\text{C.8})$$

Sendo:

T_{c0} saída do controlador sem atraso

T_{c0}^* valor com atraso (sinal que entra no processo)

$T_{c0,ref}$ valor de referência (estado estacionário inicial).

Para o problema em questão, o ganho K_p é igual à unidade, uma vez que para $t \rightarrow \infty$ o valor com atraso (T_{c0}^*) deve igualar aquele sem atraso (T_{c0}).

Como valores para o tempo de atraso e a constante de tempo, foram considerados, respectivamente, $t_0 = 30$ s e $\tau = 200$ s. Esses valores, em princípio, representariam um processo de mistura de duas correntes de um mesmo fluido em níveis térmicos diferentes (T_{c1} e T_{c2}), de modo a obter uma corrente desse fluido em uma condição térmica intermediária (T_{c0}) para ser usada como meio refrigerante.

As quatro estruturas de controle foram sintonizadas para essa nova situação em que se inclui uma dinâmica de primeira ordem com atraso de tempo para a variável manipulada, considerando a mesma perturbação degrau em T_0 , passando esta temperatura de 628 K para 653,12 K. Foram obtidos os seguintes valores para os parâmetros dos controladores: (i) Controlador PI – $K_c = 300 \text{ Km}^3 \text{ mol}^{-1}$; $\tau_i = 300$ s; (ii) Controlador FZ-PI – $K_e = 2,659$; $K_d = 2,7$; $K = 0,145$; (iii) Controlador PI cascata – $K_{c1} = 268 \text{ K m}^3 \text{ mol}^{-1}$; $\tau_{i1} = 90$ s; $K_{c2} = 5,2$; $\tau_{i2} = 82$ s; (iv) Controlador FZ-PI cascata – $K_{e1} = 1,339$; $K_{d1} = 1,873$; $K_1 = 1,258$; $K_{e2} = 0,80$; $K_{d2} = 4,0$; $K_2 = 0,45$.

A seguir são apresentados resultados comparativos das respostas dos controladores, considerando-se a variável manipulada sem e com uma dinâmica de primeira ordem com atraso de tempo (Equação (C.8)), para uma perturbação degrau permanente de +30 K, isto é, $T_0 = 658$ K.

Nas Figuras C.1 a C.4 são apresentados os perfis com as respostas das variáveis manipulada e controlada para as estruturas de controle direto PI e FZ-PI. Observa-se em relação ao controlador PI que a variável manipulada apresenta inicialmente um atraso na atuação, porém em seguida assume o mesmo perfil da situação sem atraso, estabilizando-se em um tempo equivalente. Esse atraso se reflete na variável controlada (Figura C.2), levando a uma maior sobrelevação, mas apresentando um tempo de estabilização desta variável semelhante àquele que se obtém sem atraso. Para o controlador FZ-PI as respostas das variáveis manipulada (Figura C.3) e controlada (Figura C.4) são praticamente as mesmas, considerando-se ou não a dinâmica de primeira ordem com atraso de tempo.

As respostas dos controladores com estrutura cascata são mostradas nas Figuras C.5 a C.12. Para o caso do controlador PI cascata as respostas sem e com uma dinâmica de primeira ordem com atraso de tempo são equivalentes em termos das variáveis manipulada (Figura C.5) e controlada (Figura C.6), bem como das temperaturas nas quatro posições de medida (Figuras C.7 e C.8). Quanto ao controlador FZ-PI cascata tem-se também uma equivalência em termos do comportamento das respostas das variáveis manipulada (Figura C.9) e controlada (Figura C.10) e das temperaturas nos pontos de medida (Figura C.9 e C.10), mas notando-se um comportamento mais oscilatório para as variáveis manipulada e controlada, sem, contudo, modificação sensível no tempo de estabilização da variável controlada.

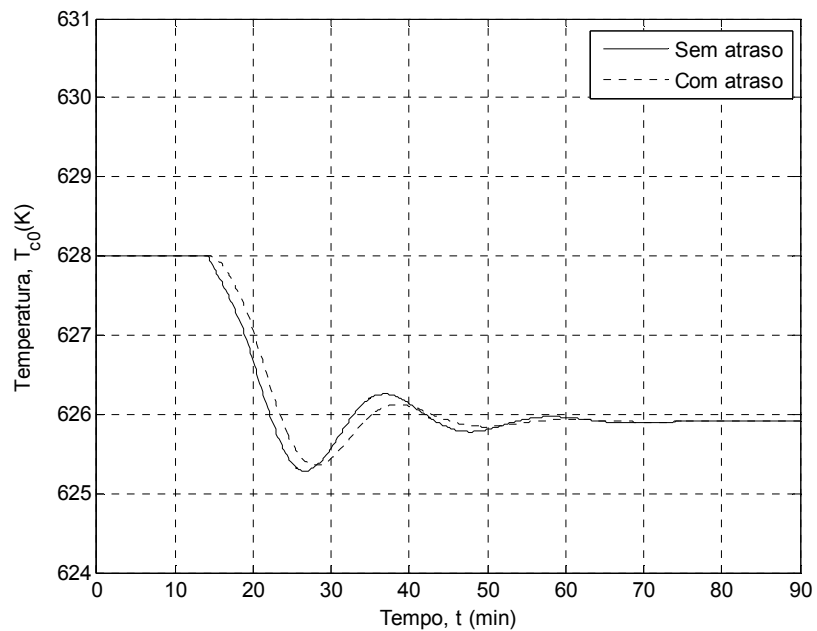


Figura C.1 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador PI).

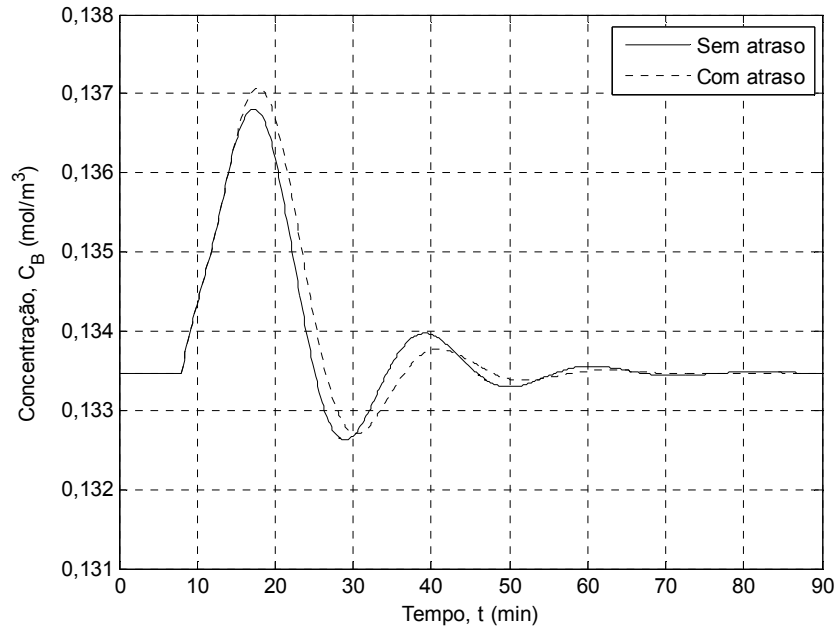


Figura C.2 - Perfil da variável controlada na saída do processo (Controlador PI).

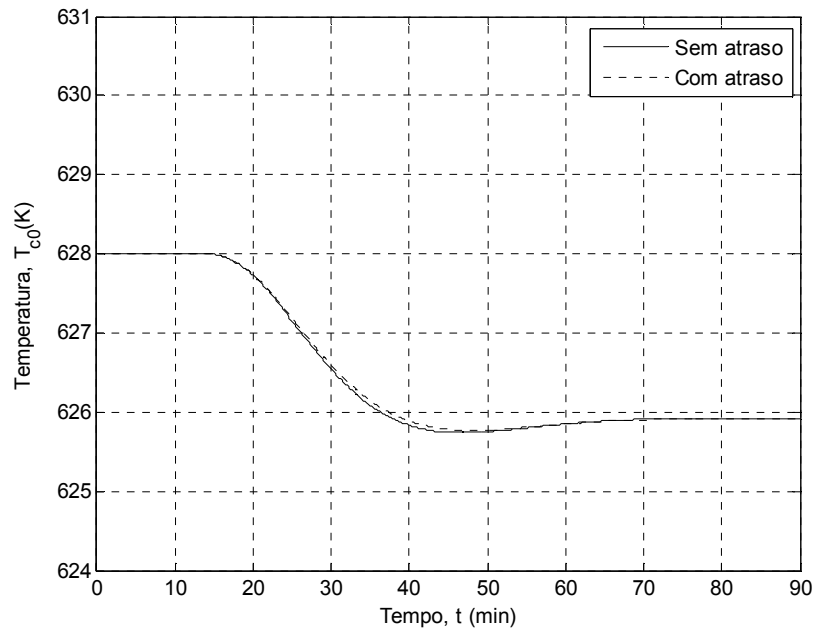


Figura C.3 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador FZ-PI).

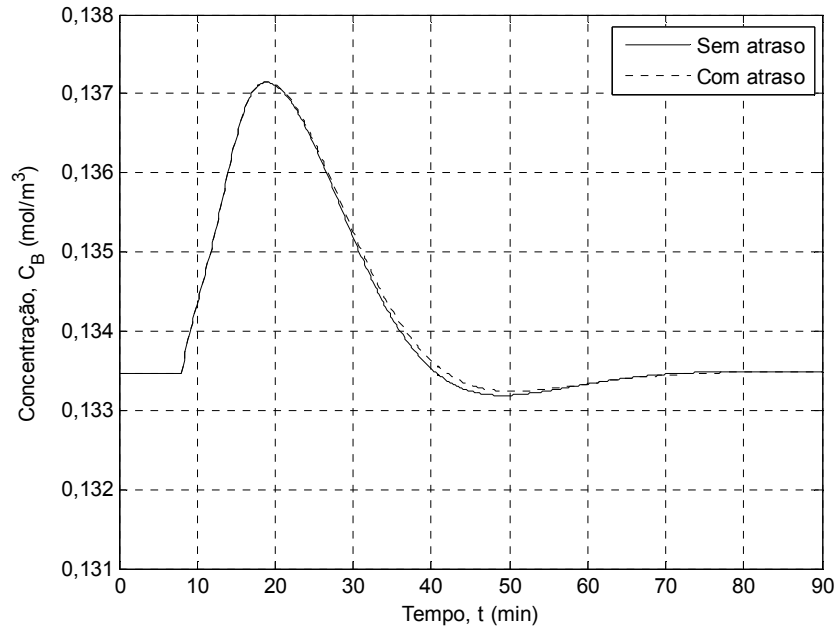


Figura C.4 - Perfil da variável controlada na saída do processo (Controlador FZ-PI).

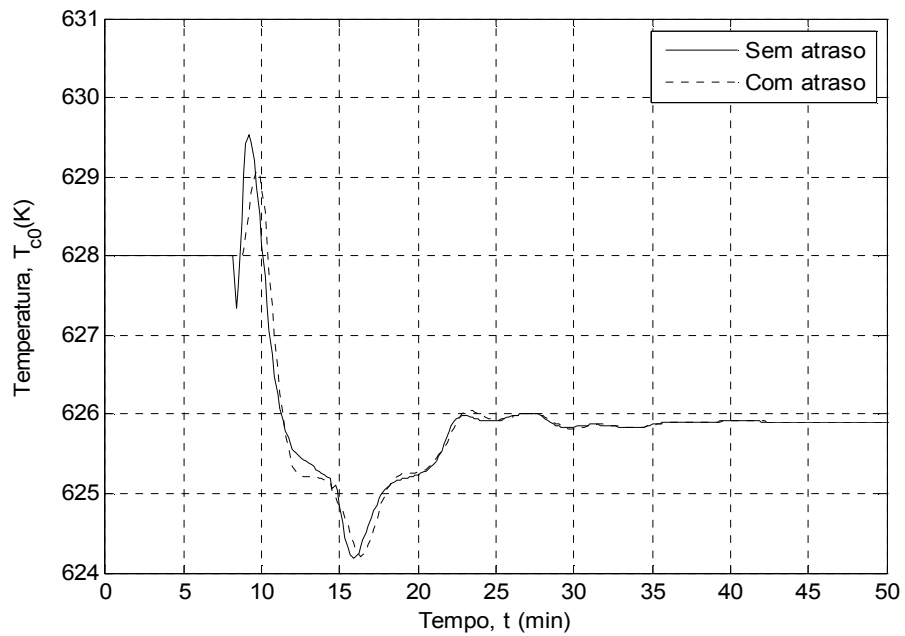


Figura C.5 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador PI cascata).

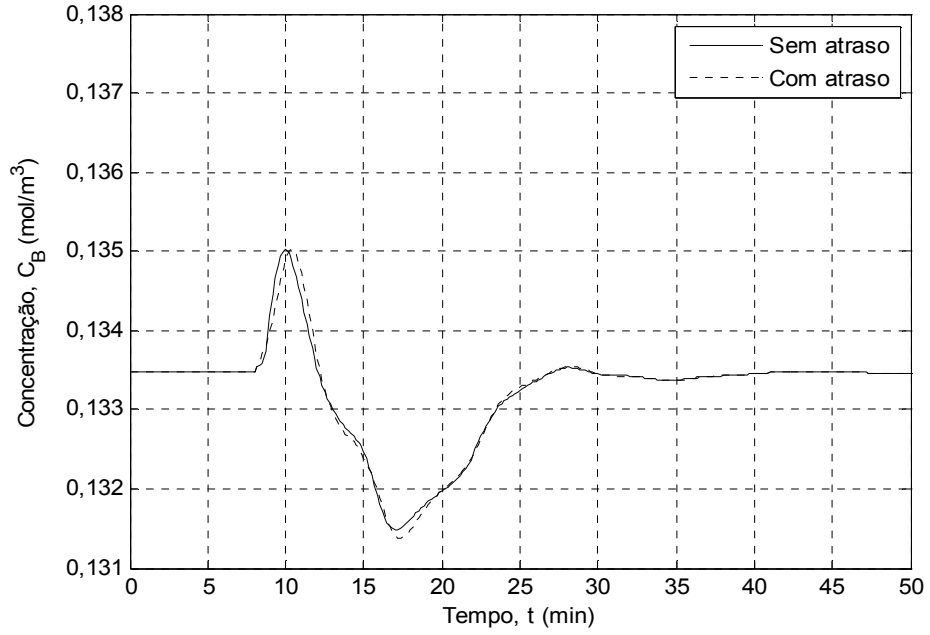


Figura C.6 - Perfil da variável controlada na saída do processo (Controlador PI cascata).

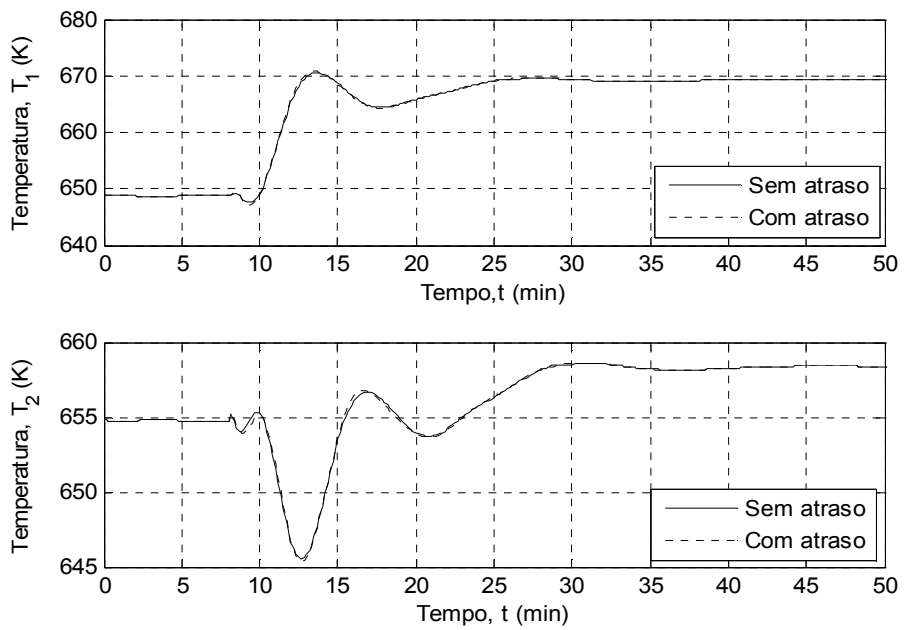


Figura C.7 - Perfis de temperatura em z_1 e z_2 (Controlador PI cascata).

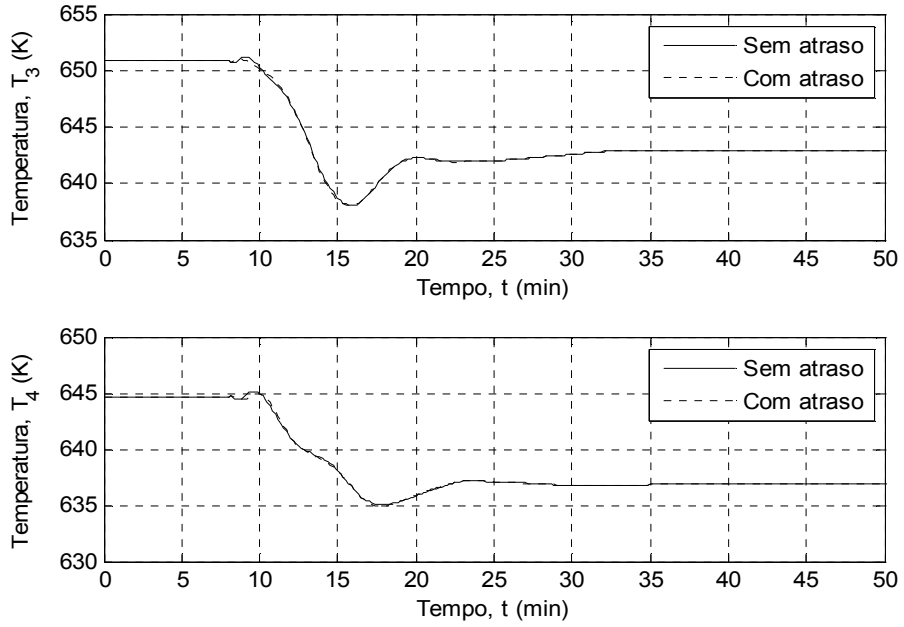


Figura C.8 - Perfis de temperatura em z_3 e z_4 (Controlador PI cascata).

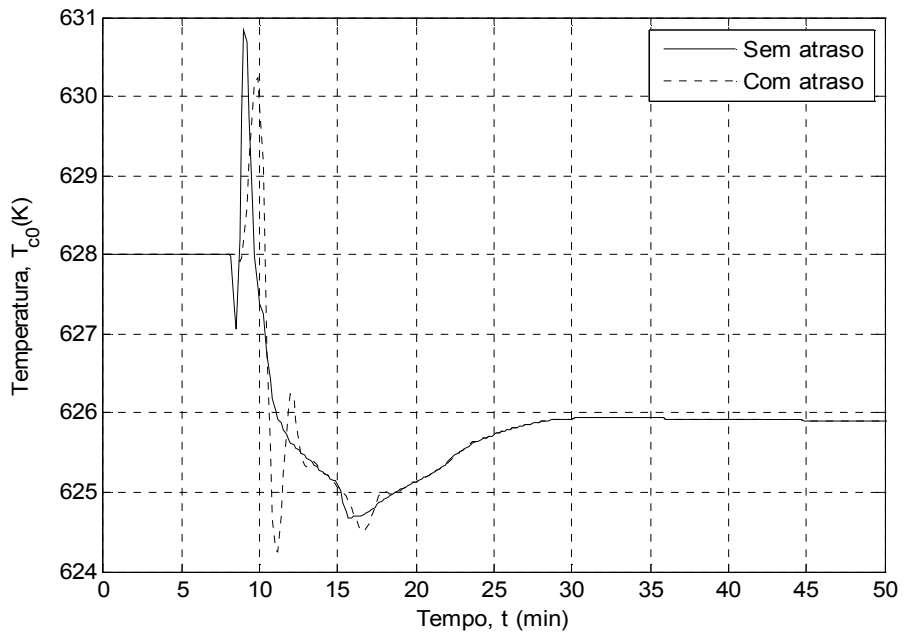


Figura C.9 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador FZ-PI cascata).

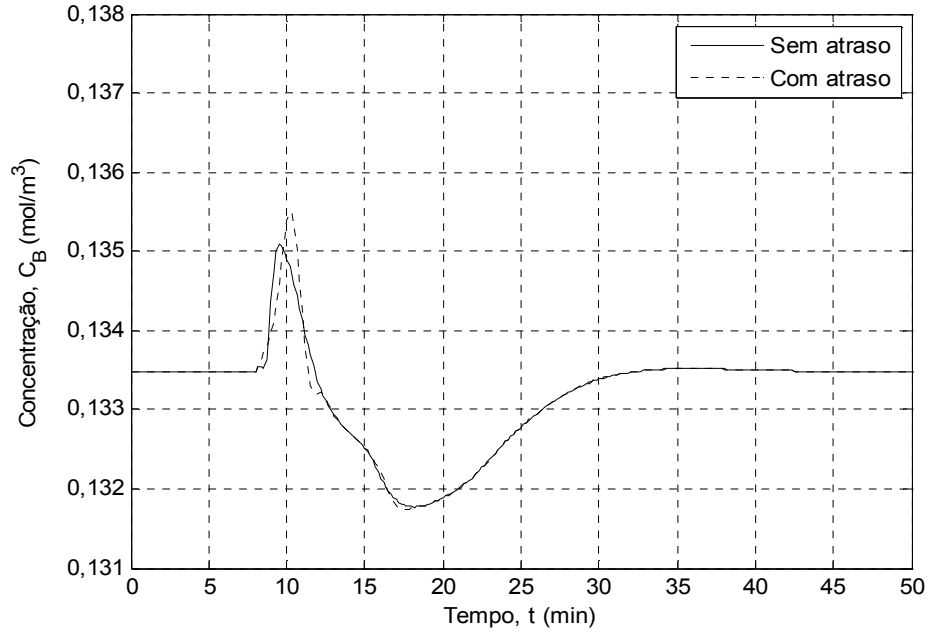


Figura C.10 - Perfil da variável manipulada na entrada do processo (Controlador FZ-PI cascata).

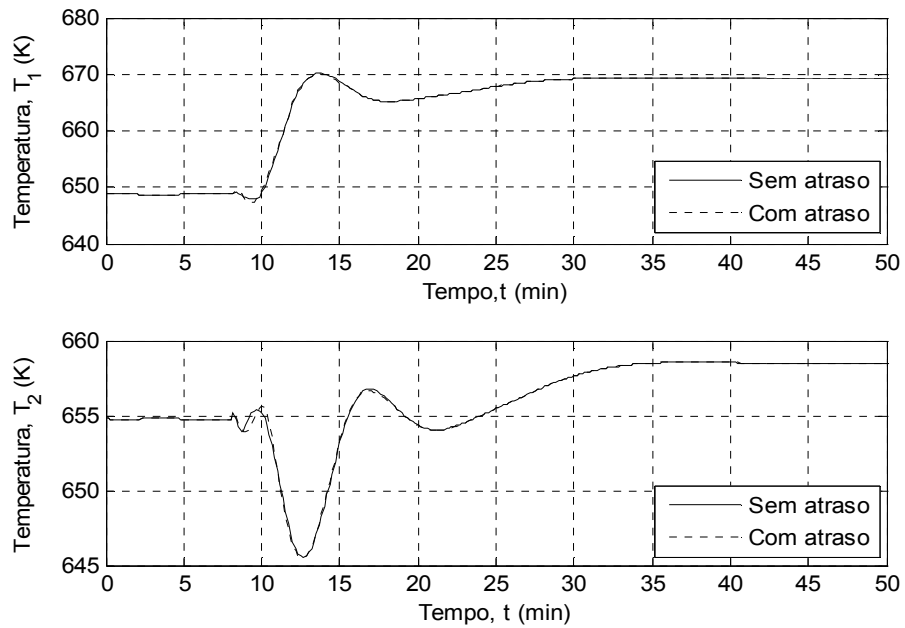


Figura C.11 - Perfis de temperatura em z_1 e z_2 (Controlador FZ-PI cascata).

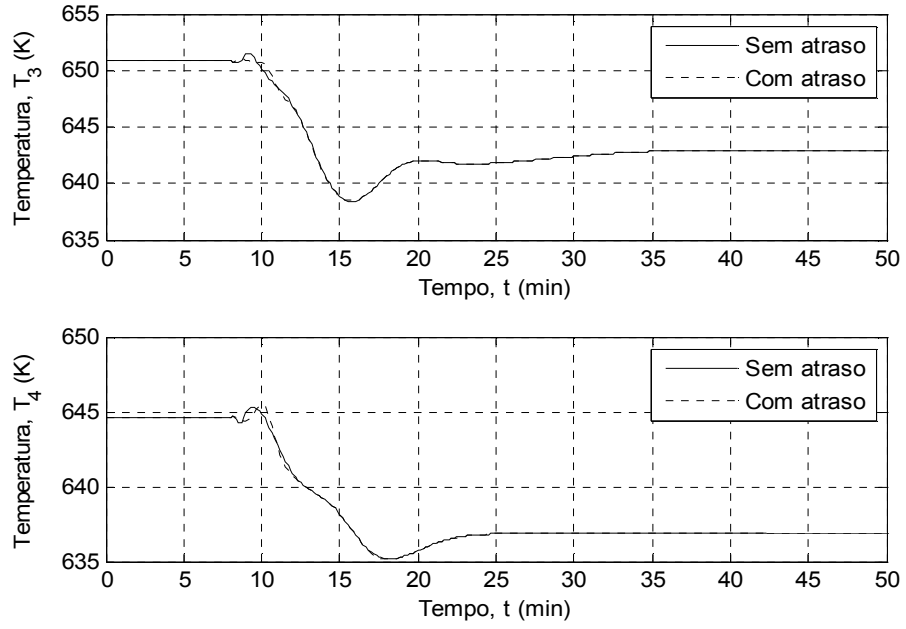


Figura C.12 - Perfis de temperatura em z_3 e z_4 (Controlador FZ-PI cascata).