



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MECATRÔNICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: INTEGRAÇÃO DA MANUFATURA**

CLAUDIO WAKABAYASHI

**ANÁLISE E CONTROLE *FUZZY* DE PROCESSOS:
ESTUDO DE CASO EM UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO**

Salvador
2007

CLAUDIO WAKABAYASHI

**ANÁLISE E CONTROLE *FUZZY* DE PROCESSOS:
ESTUDO DE CASO EM UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Mecatrônica da Universidade Federal da Bahia, como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Mecatrônica.

Orientadores: Prof. Marcelo Embiruçu, D. Sc.
Prof. Cristiano Hora Fontes, D. Sc.

Salvador
2007

Wakabayashi, Claudio

Análise e controle *fuzzy* de processos: estudo de caso em um reator de polimerização

Wakabayashi. – Salvador: C. Wakabayashi, 2007

107 f

Orientadores: Prof. Marcelo Embiruçu, D. Sc.

Prof. Cristiano Hora Fontes, D. Sc.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal da Bahia – Escola Politécnica - 2007

1.Controle *fuzzy*. 2.Lógica nebulosa. 3.Nylon 6. 4.Cinética de reação. 5.Polimerização. 6.Controle PID

TERMO DE APROVAÇÃO

CLAUDIO WAKABAYASHI

ANÁLISE E CONTROLE *FUZZY* DE PROCESSOS: ESTUDO DE CASO EM UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO

Dissertação aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Mecatrônica, Universidade Federal da Bahia,
pela seguinte banca examinadora:

Cristiano Hora Fontes _____
Doutor em Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP
Universidade Federal da Bahia

Leizer Schnitman _____
Doutor em Ciência, Instituto Tecnológico da Aeronáutica - ITA
Universidade Federal da Bahia

Rubens Maciel Filho _____
PhD Department of Chemical Engineering- The University of Leeds-UK
Universidade Estadual de Campinas

Salvador, 22 de maio de 2007

Dedicatória

Dedico este trabalho aos meus pais, Masao Wakabayashi (*in memorium*) e Asako Wakabayashi (*in memorium*), que me ensinaram o sentido da vida, através de exemplos; à minha esposa Ivanize e meus filhos, Cristiane e Ricardo, todos, companheiros e amigos, sempre dando incentivos no decorrer do curso e realização deste trabalho.

Agradecimentos

Ao Departamento de Coordenação desta Instituição, pela oportunidade da realização do curso e pelo suporte dado durante essa jornada.

Aos orientadores Marcelo Embiruçu, D. Sc. e Cristiano Hora Fontes, D. Sc., pelas orientações prestadas para que eu pudesse concluir essa difícil etapa, além da confiança em mim depositada, compreensão, atenção e apoio dados nesse momento decisivo.

Aos Professores do curso, pela dedicação prestada durante as disciplinas, e necessidades curriculares.

Ao amigo Sergio Sameshima que me incentivou a fazer este curso.

Aos colegas do Programa em Mecatrônica, pelo companheirismo durante o curso, um verdadeiro desafio!

Muito obrigado!

De tudo ficam três coisas:

A certeza de que estamos sempre começando...

A certeza de que precisamos continuar...

A certeza de que seremos interrompidos antes de terminar...

Portanto, devemos:

Fazer da interrupção um caminho novo...

Da queda, um passo de dança...

Do medo, uma escada...

Do sonho, uma ponte...

Da procura, um encontro...

Fernando Pessoa

Sumário

Resumo e <i>Abstract</i> da Dissertação	x
Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xv
CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Preliminares	2
1.1.1 Motivação	2
1.2. Descrição do processo de produção de nylon 6	3
1.3. Organização da dissertação	6
CAPÍTULO 2. MODELAGEM.....	7
2.1. Preliminares	8
2.2. Cinética de reação do nylon 6	9
2.3. Constantes das taxas de reação e constantes de equilíbrio	11
2.3.1. Constantes cinéticas.....	11
2.3.2. Constantes termodinâmicas	12
2.4. Momentos estatísticos e pesos moleculares	13
2.5. Equações de balanço	15
2.5.1. Equilíbrio de fases e taxas de transferência.....	18
2.6. Relações constitutivas	21
2.6.1. Desorção quiescente	21
2.6.2. Desorção pela formação de bolhas	25
2.6.2.1. Região de baixo borbulhamento ($\sigma < \sigma_c$)	25
2.6.2.2. Região de alto borbulhamento ($\sigma > \sigma_c$)	26
2.6.3. Correlação da viscosidade	26
CAPÍTULO 3. SISTEMAS DE CONTROLE	29
3.1. Preliminares	30
3.2. O problema de controle.....	33
3.3. Controladores convencionais com algoritmo PID	36
3.4. Controladores baseados em lógica <i>fuzzy</i>	37
3.4.1. <i>Fuzzificação</i>	38
3.4.2. Base de conhecimento	39
3.4.3. Procedimento de inferência ou raciocínio <i>fuzzy</i>	39
3.4.4. <i>Defuzzificação</i>	40
3.4.5. Configuração das malhas de controle e sintonia	44
CAPÍTULO 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	46
4.1. Introdução	47
4.2. Projeto de controladores convencionais com algoritmo PID.....	48
4.2.1. Métodos clássicos de sintonia aplicados ao controlador PID de temperatura	48
4.2.1.1. Identificação do modelo reduzido do processo para o sistema de controle da temperatura	48
4.2.1.2. Aplicação do método Cohen-Coon para obtenção dos parâmetros do controlador de temperatura (óleo quente a 280 °C).....	51

4.2.1.3.	Aplicação do método ITAE (<i>Integral of Time-weighted Absolute Error</i>) para obtenção dos parâmetros do controlador de temperatura (óleo quente a 280 °C)	52
4.2.1.4.	Aplicação do método ITAE para obtenção dos parâmetros do controlador de temperatura (óleo frio a 60 °C).....	53
4.2.2.	Métodos clássicos de sintonia aplicados ao controlador de pressão	56
4.2.2.1.	Determinação do modelo linear do processo	56
4.2.2.2.	Método IMC – Controle com modelo interno para determinação dos parâmetros de sintonia do controlador de pressão	58
4.2.3.	Sintonia ótima para controle de temperatura.....	62
4.2.4.	Sintonia ótima para o controle de temperatura (apenas sistema de aquecimento)	64
4.3.	Projeto de controladores baseados em lógica <i>fuzzy</i>	66
4.3.1.	Controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura (aquecimento e resfriamento).....	66
4.3.2.	Controlador PI- <i>fuzzy</i> de pressão (aquecimento e resfriamento).....	76
4.3.3.	Controle PI- <i>fuzzy</i> de temperatura. Sintonia ótima.....	81
4.3.4.	Controle PI- <i>fuzzy</i> de temperatura. Sintonia ótima e apenas sistema de aquecimento.....	85
4.4.	Análise comparativa dos desempenhos dos controladores	89
4.4.1.	Malha de temperatura com sistema de aquecimento e resfriamento – Análise comparativa entre o controlador convencional PI e o controlador PI- <i>fuzzy</i> , ambos ajustados pelo procedimento de sintonia ótima	91
4.4.2.	Malha de pressão com sistema de aquecimento e resfriamento – Análise comparativa entre o controlador convencional com ação proporcional, ajustado pelo método IMC, e com controlador PI- <i>fuzzy</i> sintonizado com parâmetros determinados heurísticamente.....	92
4.4.3.	Malha de temperatura apenas com sistema de aquecimento – Análise comparativa entre o controlador convencional PI e o controlador PI- <i>fuzzy</i> , ambos ajustados pelo procedimento de sintonia ótima	93
4.4.4.	Malha de pressão somente com sistema de aquecimento – Análise comparativa entre o controlador convencional PI e o controlador PI- <i>fuzzy</i>	94
Apêndice 4A:	Procedimento determinar a estimativa inicial dos parâmetros PID para o procedimento de sintonia ótima Análise comparativa dos desempenhos dos controladores	95

CAPÍTULO 5. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS

	FUTUROS.....	96
5.1.	Conclusões	97
5.2.	Recomendações para trabalhos futuros.....	98

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS.....99

Abreviaturas.....	100
Símbolos	100
Símbolos gregos	102

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 104

RESUMO

Este trabalho buscou dois objetivos principais. O primeiro deles consistiu em comprovar a potencialidade da aplicação de controladores PI-*fuzzy* em reatores de polimerização semi-batelada, com trajetórias de *setpoint's* (valor de referência) pré-definidas, tendo os parâmetros das funções de pertinência e fatores de escala determinados pelo método de sintonia ótima. O segundo objetivo compreendeu em possibilitar a utilização do programa de simulação em ambiente computacional, como ferramenta de trabalho para P & D de novos produtos.

O controle de reatores de polimerização é desafiante devido a vários fatores como a natureza multivariável e não linear, a existência de interações e tempos mortos, a cinética de reação complexa e a ausência de medições diretas das variáveis que caracterizam a estrutura macromolecular do polímero, dentre outros. Para o caso específico de reatores que operam em batelada ou semi-batelada, existem dificuldades adicionais associadas às necessidades de que algumas variáveis de processo obedeçam a trajetórias de *setpoints* pré-definidas e necessárias para a garantia das especificações do produto final.

O sistema em estudo deste trabalho compreende um reator semi-batelada, de escala comercial, para a produção de nylon a partir da ϵ -caprolactama. O problema de controle consiste em conduzir o sistema reacional ao longo de cada batelada, de modo que as trajetórias dos *setpoints* da temperatura da massa reacional e da pressão na fase gasosa sejam obedecidas por essas variáveis de processo, caracterizando-se, portanto, como um problema de controle tipicamente servo, com *setpoints* variáveis.

Dois estudos de caso foram testados e analisados. No primeiro caso, óleo quente e óleo frio são ambos disponibilizados e utilizados separadamente para o aquecimento ou resfriamento do meio reacional, respectivamente, conforme a temperatura esteja menor ou maior do que o valor do *setpoint* em um dado instante. No segundo caso, baseado em situações reais de unidades industriais, é disponibilizado apenas óleo quente ao longo de toda a batelada para o aquecimento da massa reacional. Para cada uma das configurações descritas, o sistema de controle compreendeu duas malhas de controle, sendo uma para o controle da temperatura na massa reacional e outra para o controle da pressão na fase vapor do reator. Para cada um dos estudos, foram comparadas duas estratégias de controle, quais sejam: controladores convencionais com algoritmo PID e controladores PI baseados em lógica *fuzzy* (nebulosa) (controle PI-*fuzzy*).

Para representar um caso real de um reator de escala comercial, foi adotado um modelo fenomenológico em todos os testes de simulação em malha fechada. O modelo é composto pelas equações da cinética de reação, balanços de massa e de energia, e correlações adicionais para a viscosidade e coeficientes de troca térmica. Foram consideradas as vaporizações da água e da ϵ -caprolactama presentes na massa reacional, e a variação da viscosidade na massa reacional, assim como o seu efeito sobre as taxas de transferência de massa e de energia. O modelo completo foi ajustado com base em um reator de nylon de escala comercial, já existente, e as condições do processo, assim como as trajetórias de pressão e temperatura, são equivalentes à realidade operacional praticada.

Os resultados obtidos comprovam a potencialidade da abordagem do controle PI-*fuzzy* para reatores de polimerização semi-batelada com *setpoint* variável. Os ajustes das regras e dos parâmetros das funções de pertinência mostraram-se capazes de produzir um bom desempenho em relação às trajetórias de *setpoint* especificadas, tendo-se, inclusive, redução de *overshoot* (sobre-sinal) na temperatura.

Palavras-chave: Controle *fuzzy*; Lógica nebulosa; Nylon 6; Cinética de reação; Polimerização; Controle PID.

ABSTRACT

This work was intended to achieve two goals. The first was to confirm the PI-*fuzzy* controller potential applicability in polymerization batch reactors. The second goal was to allow the simulation program as a tool in new products search and development.

The difficulty with measuring controlled variables, the existence of interactions, dead time and constraints, added to the nonlinear and multivariable nature of the system, poses a challenging problem for the control of polymerization reactors. For the batch and semi-batch reactors in particular, additional difficulties arise concerning process variables, such as reactor temperature and pressure, which have to follow setpoint trajectories to assure the quality of the final product.

The system analyzed in this work comprises a semi-batch reactor for the production of nylon 6 using the caprolactam as monomer. The control problem consists of tracking the temperature and pressure setpoint trajectories established for these variables. These trajectories are directly associated with each step of the process and their objectives. Therefore, there is a servo problem with variable setpoints.

Two case studies were analyzed. In the first, hot oil and cold oil are both available throughout the process and they are used separately for reactor heating or cooling procedures, while temperature increases or decreases from its setpoint value. In the second case, only hot oil is available during the entire batch. In each case study, the control system is performed with two loops, one for temperature and another for pressure control. For each simulation, two control strategies were analyzed and compared: conventional PID and PI-*fuzzy* control.

A complete phenomenological model represents the process, including the kinetic mechanism, the reaction rate equations of the caprolactam and amino-caproic acid together with moment balances and macro-scale equations (mass and energy balances). The operational conditions and the design variables were selected according to an industrial unit installed in Brazil and some model parameters were adjusted to resemble these operational conditions.

The PI-*fuzzy* control strategy showed better results, considering the nonlinearities, the multivariable and the interactive behavior of the system. The adjustments in heuristic rules and in membership function parameters provide better control performance, considering the setpoint trajectories specified, with overshoot reduction in the temperature.

Key words: Fuzzy controller; Nylon; Polymerization; PID.

Lista de Figuras

CAPÍTULO 1

Figura 1.1. Reator semibatelada para produção de nylon 6 com sistema de aquecimento e resfriamento	3
Figura 1.2. Reator semibatelada para produção de nylon 6 apenas com o sistema de aquecimento	4

CAPÍTULO 2

Figura 2.1. Molécula do monômero ϵ – caprolactama.....	9
Figura 2.2. Estrutura molecular do nylon 6	9
Figura 2.3. Gráfico da distribuição dos pesos moleculares	13
Figura 2.4. Número médio do comprimento da cadeia polimérica	22
Figura 2.5. Conversão de monômero.....	22
Figura 2.6. Viscosidade (poise)	23

CAPÍTULO 3

Figura 3.1. <i>Setpoints</i> dos controladores de temperatura e pressão	33
Figura 3.2. Controladores de temperatura (<i>split-range</i>), e de pressão, operando com sistema de aquecimento e resfriamento	34
Figura 3.3. Controlador de temperatura e pressão, operando apenas com o sistema de aquecimento	35
Figura 3.4. Estrutura de um controlador <i>fuzzy</i> proporcional	42
Figura 3.5. Estrutura de um controlador <i>fuzzy</i> PI	43

CAPÍTULO 4

Figura 4.1. Curva de resposta do processo para uma perturbação do tipo degrau na variável manipulada, de zero para 2 m ³ /h, em malha aberta	49
Figura 4.2. Diagrama esquemático para aplicação do método de identificação em malha aberta.....	50
Figura 4.3. Gráfico do perfil da temperatura, do sinal na saída do controlador, e abertura das válvulas de aquecimento e resfriamento, obtidos pelo método “Cohen-Coon”	51
Figura 4.4. Malha de temperatura. Método ITAE (óleo quente).....	53
Figura 4.5. Curva de resposta do sistema para uma perturbação degrau na variável manipulada (óleo a 60 °C), em malha aberta.....	54
Figura 4.6. Temperatura do reator em °C e abertura das válvulas de aquecimento e resfriamento (%), com óleo frio	55
Figura 4.7. Curva de reação para a malha de pressão na fase gasosa.....	56
Figura 4.8. Diagrama para identificação de modelo e sintonia para a malha de controle de pressão	58
Figura 4.9. Diagrama de blocos para o método IMC – Internal Model Control	59
Figura 4.10. Diagrama de blocos de controlador PID	59
Figura 4.11. Diagrama de blocos de controlador IMC em uma forma do tipo PID	60
Figura 4.12. Controlador de pressão com ação proporcional, sintonizado pelo método IMC.....	61
Figura 4.13. Controlador PID de temperatura, com parâmetros otimizados.....	62
Figura 4.14. Controlador PI de temperatura, com parâmetros otimizados.....	63
Figura 4.15. Controlador de pressão com o parâmetro proporcional, otimizado	63

Figura 4.16. Controlador PID de temperatura com os parâmetros otimizados, apenas com sistema de aquecimento	64
Figura 4.17. Controlador de pressão convencional com ação proporcional. Sintonia ótima, apenas com sistema de aquecimento	65
Figura 4.18. Configurações para sinais do erro e da variação do erro (controle da temperatura).....	66
Figura 4.19. Funções de pertinência da variável lingüística “erro”, para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura – aquecimento.....	70
Figura 4.20. Funções de pertinência da variável lingüística “variação do erro” para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura – aquecimento.....	70
Figura 4.21. Funções de pertinência da variável lingüística “variação na ação de controle” para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura – aquecimento.....	71
Figura 4.22. Funções de pertinência da variável lingüística “erro”, para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura –resfriamento.....	71
Figura 4.23. Funções de pertinência da variável lingüística “variação do erro” para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura – resfriamento.....	71
Figura 4.24. Funções de pertinência da variável lingüística “variação na ação de controle” para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura e resfriamento	72
Figura 4.25. Temperatura. Simulação em malha fechada (controle PI- <i>fuzzy</i> , configuração com aquecimento e resfriamento).....	72
Figura 4.26. Temperatura (controle PI- <i>fuzzy</i> com regras conforme a Tabela 4.3).....	73
Figura 4.27. Temperatura (controle PI- <i>fuzzy</i> com regras conforme a Tabela 4.4).....	75
Figura 4.28. Configurações para sinais do erro e da variação do erro (controle da pressão).....	76
Figura 4.29. Funções de pertinência da variável lingüística erro, para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de pressão.....	77
Figura 4.30. Funções de pertinência da variável lingüística variação do erro, para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de pressão	77
Figura 4.31. Funções de pertinência da variável lingüística “variação na ação de controle”, para o controlador PI- <i>fuzzy</i> de pressão	77
Figura 4.32. Pressão. Controle PI- <i>fuzzy</i> (configuração com aquecimento e resfriamento).....	78
Figura 4.33. Controle pressão. Regras conforme a Tabela 4.6.....	79
Figura 4.34. Controle pressão. Parâmetros de Abertura pequena alterados de [0; 0.05; 0.1] para [0; 0.1; 0.2]	80
Figura 4.35. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para o erro	83
Figura 4.36. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação do erro	83
Figura 4.37. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação da ação de controle	83
Figura 4.38. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para o erro	84
Figura 4.39. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação do erro	84
Figura 4.40. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação da ação de controle	84
Figura 4.41. Temperatura - Controlador PI- <i>fuzzy</i> - Sintonia ótima (aquecimento e resfriamento).....	85
Figura 4.42. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para o erro	87
Figura 4.43. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação do erro	87
Figura 4.44. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação da ação de controle	87
Figura 4.45. Temperatura. Parâmetros ajustados pelo procedimento de sintonia ótima	88
Figura 4.46. Pressão. Parâmetros ajustados pelo procedimento de sintonia ótima	88

Figura 4.47. Variáveis controladas do sistema de produção de nylon de uma planta industrial real	90
Figura 4.48. Temperatura. Controle PI convencional e PI- <i>fuzzy</i> (aquecimento e resfriamento). Vazões de óleo quente e frio (m ³ /h).....	91
Figura 4.49. Pressão. Controlador P convencional (método IMC), e controlador PI <i>fuzzy</i> (parâmetros determinados heurísticamente) - (Vazões das retiradas dos vapores, em moles/h).....	92
Figura 4.50. Temperatura. Controle PID convencional e PI- <i>fuzzy</i> (apenas com sistema de aquecimento). Vazões de óleo quente e frio (m ³ /h).....	93
Figura 4.51. Pressão. Controlador P convencional (sintonia ótima), e controlador PI <i>fuzzy</i> (parâmetros determinados heurísticamente) - (Vazões das retiradas dos vapores, em moles/h).....	94
Figura 4.52. Fluxograma do procedimento adotado para a determinação dos parâmetros da estimativa inicial que servirão para a aplicação do procedimento de sintonia ótima.....	95

Lista de Tabelas

CAPÍTULO 2

Tabela 2.1. Constantes das taxas de reação e constantes de equilíbrio	12
-----------------------------------------------------------------------------	----

CAPÍTULO 4

Tabela 4.1. Desempenhos dos controladores PID de temperatura, sintonizados conforme o método ITAE	56
Tabela 4.2. Conjunto de regras do controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura	68
Tabela 4.3. Conjunto de regras do controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura (1ª. alteração)	73
Tabela 4.4. Conjunto de regras do controlador PI- <i>fuzzy</i> de temperatura (2ª. alteração)	74
Tabela 4.5. Alterações nas regras do controle de temperatura	75
Tabela 4.6. Conjunto de regras do controlador PI- <i>fuzzy</i> de pressão.....	76
Tabela 4.7. Conjunto de regras do controlador PI- <i>fuzzy</i> de pressão (primeira alteração)	79
Tabela 4.8. Alterações nas regras do controlador de pressão.....	80
Tabela 4.9. Resultados iniciais dos parâmetros do controlador de temperatura – Sintonia ótima.....	81
Tabela 4.10. Resultados da segunda etapa de otimização dos parâmetros do controlador de temperatura – Sintonia ótima	82
Tabela 4.11. Regras para o controlador de temperatura (apenas aquecimento).....	85
Tabela 4.12. Parâmetros otimizados para o controlador de temperatura (apenas aquecimento)	86
Tabela 4.13. Desempenhos dos controladores de temperatura.....	91
Tabela 4.14. Desempenhos dos controladores de pressão.....	92
Tabela 4.15. Desempenhos dos controladores de temperatura – apenas com sistema de aquecimento	93
Tabela 4.16. Desempenhos dos controladores de pressão – apenas com sistema de aquecimento.....	94

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Preliminares

O controle de reatores de polimerização é desafiante devido à natureza multivariável e não linear do problema, existência de interações e tempos mortos, cinética de reação complexa e ausência de medições freqüentes das variáveis controladas (Schork *et al.*, 1993).

Processos de polimerização que operam em batelada ou semi-batelada são típicos de algumas tecnologias, a exemplo da produção de PVC e nylon, e o problema de controle possui metas e dificuldades adicionais associadas à necessidade de que algumas variáveis de processos, tais como temperatura e pressão, obedeçam a trajetórias de *setpoints* (valores de referência) pré-definidas, cujo seguimento é importante para a garantia das especificações do produto final. Yabuki *et al* (2002) comentam que, em alguns casos, o controle é realizado em malha aberta.

As variações na viscosidade da massa reacional ao longo do processo de produção, e as variações nos valores dos coeficientes de transferência de massa e variações da capacidade de troca térmica, provocadas pela aderência dos polímeros que se acumulam nas paredes internas do reator a cada processo de produção, somam-se à lista de dificuldades (Antunes *et al.*, 2005; Russell *et al.*, 1998; Clarke-Pringle e MacGregor, 1997; Embiruçu, 1996; Friedrich e Perne, 1995; Chylla e Haase, 1993). Essas questões fazem com que muitas das estratégias de controle convencional utilizadas em processos contínuos não sejam aplicáveis a processos em batelada e semi-batelada (Kozub e MacGregor, 1992).

Neste trabalho, foi adotado um modelo fenomenológico baseado na cinética de polimerização hidrolítica da ϵ – caprolactama para produção de nylon 6 em um reator semi-batelada, para representar o processo e seus parâmetros (Wajge *et al.*, 1994; Gupta, A. e Gupta, S.K., 1992, Gupta, S.K. e Kumar, A., 1987; Tai e Tagawa, 1983; Reimschuessel, 1977, 1969). Em seguida, foram realizadas simulações com esse modelo e foram implementados controladores de temperatura e pressão em malha fechada, adotando estratégias de controle PID (Proporcional Integral Derivativo) convencional e PI (Proporcional Integral)-*fuzzy* (nebuloso), comparando-se os resultados de desempenho alcançados.

1.1.1. Motivação

Este trabalho tem por objetivos comprovar a potencialidade de aplicação de controladores PI-*fuzzy* em reatores de polimerização semi-batelada, com trajetórias de *setpoint's* pré-definidas, tendo os parâmetros das funções de pertinência e fatores de escala determinados pelo método de sintonia ótima, e possibilitar a utilização do programa de simulação em ambiente computacional, como ferramenta de trabalho para P & D de novos produtos.

1.2. Descrição do processo de produção de nylon 6

Existem dois tipos de processos industriais para a produção de nylon 6 a partir do monômero ϵ -caprolactama, que são a polimerização hidrolítica da ϵ -caprolactama, onde ela é misturada com água e a reação de polimerização acontece em uma faixa de temperatura entre 220 e 270 °C, e um segundo tipo de processo que é baseado no mecanismo de crescimento da cadeia iônica, usando como iniciador, por exemplo, o hidróxido de sódio e lactamatos de metais alcalinos.

Neste estudo, foi utilizado o primeiro tipo de processo, em um reator semi-batelada com volume de 2.7 m³, igual ao de uma unidade comercial existente, sendo provido de jaqueta por onde circula óleo quente ou óleo frio, para aquecimento ou resfriamento do meio reacional, e um agitador de baixa velocidade.(Figura 1.1).

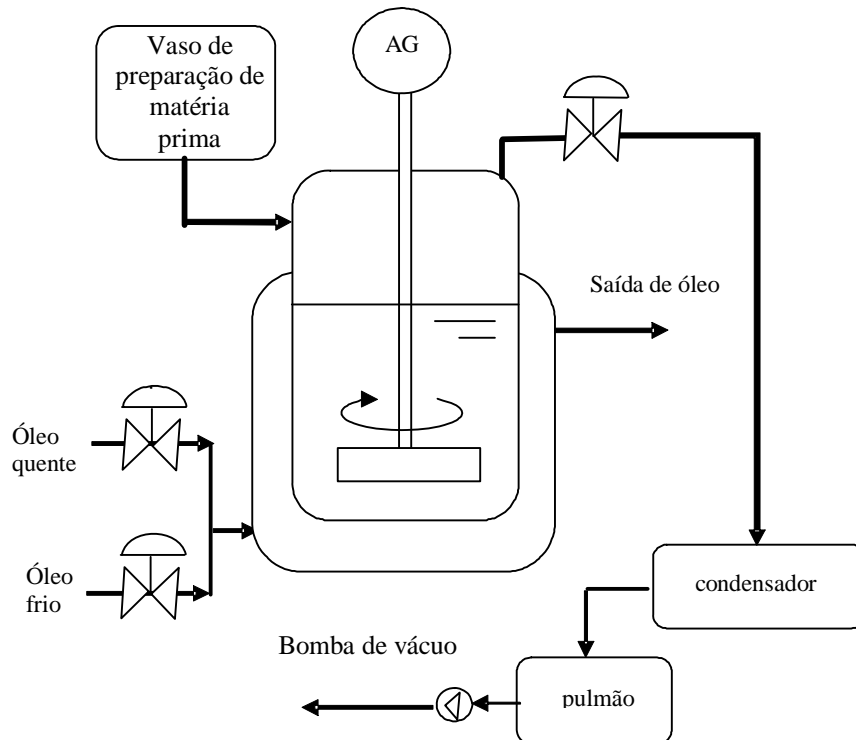


Figura 1.1. Reator semi-batelada para produção de nylon 6 com sistema de aquecimento e resfriamento.

Uma batelada ou corrida completa, através da utilização do método da polimerização hidrolítica da ϵ -caprolactama, tem a duração aproximada de 6 horas e compreende basicamente as seguintes etapas:

1. **Abertura dos anéis da ϵ -caprolactama:** O reator semi-batelada é inicialmente inertizado com nitrogênio, e a ϵ -caprolactama sólida, com cerca de 1% de água desmineralizada e outros aditivos, são alimentados no reator através de um filtro, sendo aquecidos de uma temperatura inicial de 90 °C até 260 °C em 3 horas, pois a reação é endotérmica nessa etapa. Ocorre então a abertura dos anéis da ϵ -caprolactama, com a formação do ácido amino-capróico;
2. **Reação de poliadição:** Nas 3 horas seguintes, a temperatura no reator é mantida em 260 °C sob agitação. Nessa temperatura, a massa reacional líquida torna-se superaquecida e, além da desorção pela superfície livre do líquido, ocorre também a desorção pela formação de bolhas, provocando a vaporização da água e de uma pequena quantidade da ϵ -caprolactama, aumentando a pressão inicial de 2 atmosferas até atingir um valor pré-determinado de 5 atmosferas em 3 horas, com a

utilização de uma válvula de controle para aliviar a pressão, sempre que a mesma ultrapassar o valor previamente estabelecido. O sistema é mantido nessa condição por uma hora, ocorrendo, então, a reação exotérmica de poliadição do ácido aminocapróico linear;

3. **Reação de policondensação:** Após a etapa anterior, inicia-se uma lenta despressurização da fase gasosa do reator, no intervalo de uma hora, até atingir a pressão atmosférica. Na seqüência, inicia-se a despressurização pelo acionamento da bomba de vácuo por uma hora, atingindo uma pressão de aproximadamente 0,55 atmosferas. Essa pressão é mantida por mais uma hora sem agitação, para que ocorra a retirada da água, propiciando a reação de policondensação, na qual ocorrem as junções das cadeias formadas na etapa anterior, minimizando a dispersão;
4. **Retirada do polímero:** O polímero é retirado do reator na forma pastosa pela abertura da válvula localizada no fundo do reator, mediante pressurização com nitrogênio, e, em seguida, solidificado por resfriamento com água e enviado para posterior lavagem, secagem e peletização.

Duas diferentes configurações foram testadas e analisadas no atendimento dos objetivos de controle delineados. Na primeira configuração, os óleos quente e frio são disponibilizados e utilizados separadamente para o aquecimento ou resfriamento do meio reacional, conforme a temperatura fique menor ou maior do que o valor do *setpoint* em um dado instante, permitindo uma melhor controlabilidade da temperatura. Na segunda configuração, apenas óleo quente é disponibilizado ao longo de toda a batelada para o aquecimento da massa reacional (Figura 1.2), limitando a controlabilidade da temperatura, em virtude de algumas unidades industriais adotarem essa estratégia de controle.

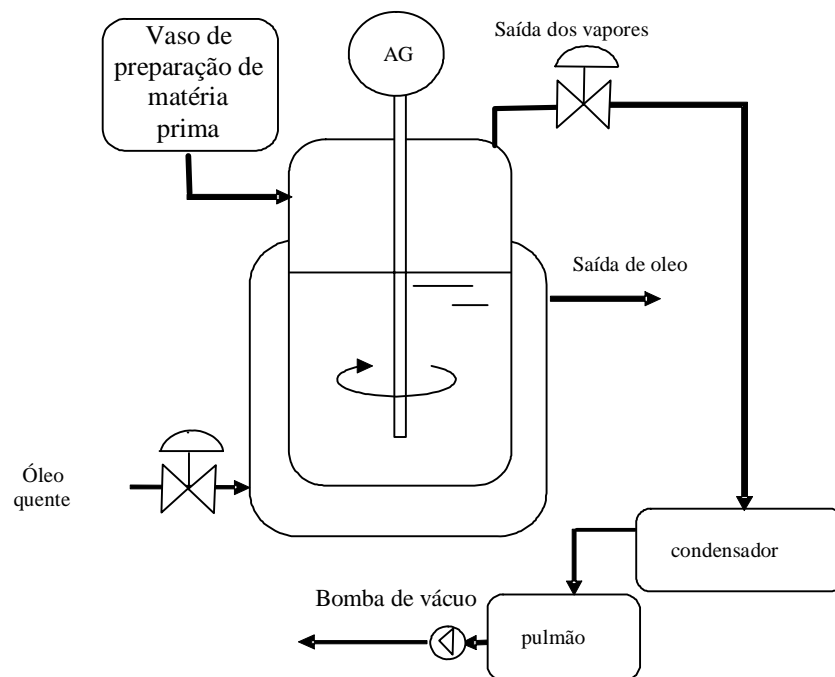


Figura 1.2. Reator semi-batelada para produção de nylon 6 apenas com o sistema de aquecimento.

Para realizar os testes e a simulação em malha fechada, a primeira etapa deste trabalho compreendeu o estudo detalhado e a implementação de um modelo fenomenológico, considerando as equações de balanço do reator, integradas às equações do modelo cinético e às relações constitutivas.

Visando dar uma conotação realista ao trabalho, foram adotadas as condições operacionais, as dimensões, as variáveis de projeto e as trajetórias de *setpoints*, assim como o ajuste dos parâmetros do modelo, de uma unidade comercial de produção de nylon 6 em reator semi-batelada, já existente no Brasil.

Um dos objetivos de controle para este tipo de processo é manter o valor desejado para o número médio do peso molecular, assim como para a distribuição do peso molecular. Como isso não é possível de se obter por uma medição direta durante o processo de produção, uma vez que as determinações dessas propriedades são feitas em laboratório, escolhem-se variáveis secundárias para serem controladas.

O controle da temperatura durante a reação de polimerização tem uma importância muito grande sobre as propriedades do polímero, com destaque para o peso molecular médio que, por sua vez, está fortemente relacionado com as características físicas e mecânicas do polímero nas aplicações comerciais. Essa é a variável de processo mais comumente escolhida para ser controlada. Antunes *et al.*, 2005; e Russell *et al.*, 1998, comentam que o objetivo real não é fazer com que o controlador siga a trajetória do *setpoint*, mas sim, conseguir obter as especificações desejadas para o produto final.

1.3. Organização da dissertação

O capítulo 2 descreve o modelo fenomenológico do sistema, constituído pelas equações de estado, através da cinética de reação, dos balanços de massa e energia, momentos da distribuição dos pesos moleculares, e relações constitutivas.

O capítulo 3 faz uma revisão bibliográfica sobre os assuntos relacionados aos sistemas de controle aplicados aos processos de polimerização em batelada e apresenta o problema de controle. Descreve a estratégia de controle baseada em lógica *fuzzy*.

O capítulo 4 apresenta os resultados comparativos das simulações em malha fechada usando as estratégias de controle convencional e *PI-fuzzy*, discutindo os métodos de sintonia aplicados em cada caso, ou seja, com sistema de aquecimento e resfriamento, e apenas com sistema de aquecimento.

O capítulo 5 apresenta as conclusões finais e as recomendações para a continuidade deste trabalho.

CAPÍTULO 2

MODELAGEM

2.1. Preliminares

Segundo Aguirre (2004), modelagem matemática é a área do conhecimento que estuda maneiras de desenvolver e implementar modelos matemáticos de sistemas reais. Há várias formas e técnicas de se obter modelos matemáticos. Uma delas é a modelagem tipo “caixa transparente”, também conhecida como modelagem fenomenológica ou conceitual. Nesse caso, faz-se necessário conhecer o sistema a ser modelado, e estudar as relações matemáticas que descrevem os fenômenos envolvidos. A identificação de sistemas, por outro lado, é a área do conhecimento que estuda técnicas alternativas de modelagem matemática. Uma das características dessa técnica é a necessidade de pouco ou nenhum conhecimento prévio do sistema e, conseqüentemente, esse método é também referido como modelagem “caixa preta”, ou modelagem empírica.

As equações envolvidas na modelagem matemática apresentada neste trabalho foram estudadas por Wajge *et al.* (1994), Gupta, A. *et al.* (1992), Tai e Tagawa (1983) e Reimschuessel (1977; 1969).

O sistema estudado compreende a reação hidrolítica da ϵ – caprolactama, conforme o mecanismo da policondensação. O modelo adotado e analisado compreende a integração das equações da cinética de reação (microescala de modelagem) juntamente com as equações de balanço do reator (macroescala) e da descrição dos fenômenos de transferência de calor e de massa entre as fases existentes (mesoescala).

2.2. Cinética de reação do nylon 6

Os monômeros são pequenas moléculas que podem reagir quimicamente com outras do mesmo tipo para formarem moléculas bem maiores, denominadas de polímeros. A propriedade fundamental de um polímero é o tamanho da cadeia, que o diferencia dos compostos tradicionais, por apresentar tamanho muito grande e variável. O comprimento dessa cadeia determina, em grande parte, variações significativas nas propriedades desse componente (Embiruçu, 2001).

O nylon 6 é um polímero com estrutura molecular $(-[\text{NH}-(\text{CH}_2)_5-\text{CO}]_n)$, com peso molecular ao redor de 15000 g/mol no final da corrida, com aproximadamente 90% de conversão, e viscosidade em torno de 10 a 30 poise (Gupta, A. *et al.* 1992), tendo como monômero a ε -caprolactama, conhecido também como 6-caprolactama (Figura 2.1).

As aplicações mais comuns junto ao mercado consumidor estão na forma de fibras sintéticas encontradas nos tecidos dos vestuários de um modo geral, na fabricação de cordas, pára-quadras, cerdas de escovas de dente, tecidos de reforço para pneus, linhas e redes de pesca, tapeçarias, assim como na forma de termoplásticos.

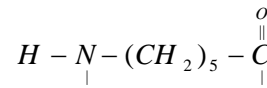
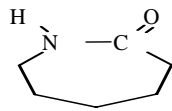


Figura 2.1. Molécula do monômero ε -caprolactama.

A molécula do nylon 6 é formada por ligações amida $(-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}-)$, e, por causa disso, é também conhecida como poliamida. A Figura 2.2 ilustra sua representação química.

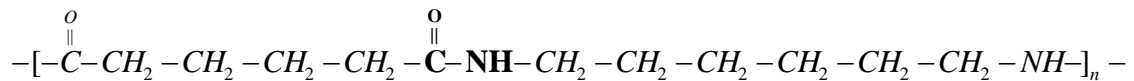


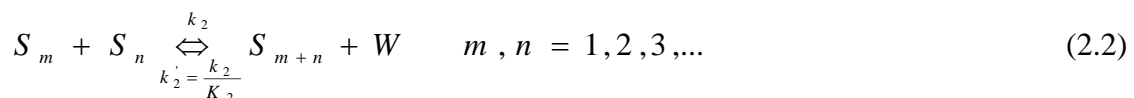
Figura 2.2. Estrutura molecular do nylon 6.

As reações consideradas estão apresentadas em seguida, com as respectivas espécies químicas.

Reação de abertura do anel do monômero ε -caprolactama (C_1), formando o ácido amino-capróico (S_1), onde W simboliza uma molécula de água:

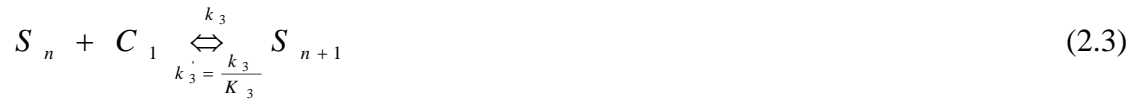


Reação de polimerização por policondensação:



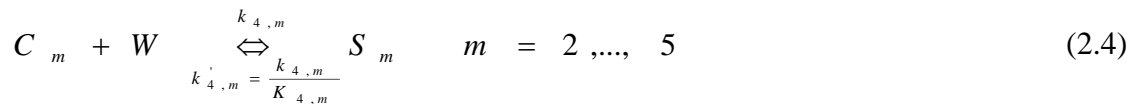
onde S_m , S_n e S_{m+n} são moléculas de polímero, para m e $n = 1, 2, 3, \dots$, tendo a água como um subproduto da reação, e S_{m+n} é a molécula do polímero com comprimento $(m+n)$ formado como resultado da reação entre S_m e S_n .

Reação de polimerização por poliadição:

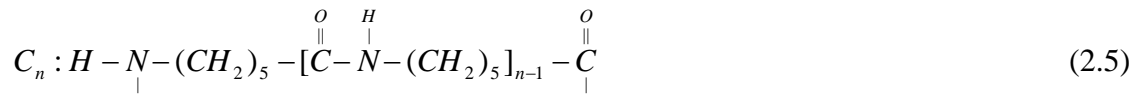


onde S_n é um polímero em fase de crescimento e C_1 é o monômero ε -caprolactama que está sendo adicionado a S_n , para formar o polímero S_{n+1} .

Reação de abertura do anel do oligômero cíclico:



O dímero cíclico é um oligômero cíclico contendo apenas dois grupos monoméricos na molécula. A representação de um oligômero de n unidades monoméricas pode ser feita da seguinte forma:



Reação de poliadição do oligômero:



2.3. Constantes das taxas de reação e constantes de equilíbrio

Para que as reações de polimerização entre pequenas moléculas A e B aconteçam, elas primeiramente se difundem na massa reacional buscando aproximação umas das outras, e, então, interagir para formarem ligações químicas entre si.

O mecanismo é um pouco diferente na polimerização por reação de policondensação. As moléculas de cadeias longas dos polímeros, dissolvidas na massa reacional, encontram-se bastante emaranhadas. Os grupos funcionais, normalmente situados nas extremidades dessas moléculas ficam dispersos dentro desse emaranhado. Então, a reação química entre os grupos funcionais pode não ocorrer, mesmo quando duas moléculas colidem. É necessária uma etapa adicional de coordenação de movimentos dos segmentos próximos que estão colidindo, aproximando os grupos funcionais para permitir que a reação química ocorra. Essa coordenação de movimentos dos segmentos é chamada de difusão segmental.

Como as difusões na massa reacional e segmental são dependentes dos comprimentos das cadeias das duas moléculas poliméricas envolvidas na reação, deve-se esperar que as constantes de reação também sejam dependentes dos comprimentos das cadeias dessas moléculas (Gupta e Kumar, 1987). Então, as constantes das taxas de reação direta são funções das concentrações dos terminais ácidos, e podem ser obtidas empiricamente através das equações mostradas na seção a seguir.

2.3.1. Constantes cinéticas

As constantes k_i das taxas de reação $i = 1, 2, 3, 4, 5$ podem ser representadas empiricamente pela seguinte expressão:

$$k_i = k_i^0 + k_i^c \cdot [-COOH] = k_i^0 + k_i^c \cdot \sum_{n=1}^{\infty} ([S_n]) \quad (2.7)$$

$$k_i = A_i^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_i^0}{R \cdot T}\right) + A_i^c \cdot \exp\left(-\frac{E_i^c}{R \cdot T}\right) \cdot [-COOH]$$

onde A_i^j são os fatores de freqüência, E_i^j são as energias de ativação, $j (= 0, c)$ representa as parcelas independente e dependente das concentrações dos terminais ácidos, respectivamente, e $[-COOH]$ representa a concentração molar total do grupo funcional ácido na massa reacional, que pode ser facilmente medida por titulação.

Conforme se pode deduzir das equações anteriores, as constantes k_i^0 e k_i^c podem ser representadas pela expressão de Arrhenius:

$$k_i^0 = A_i^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_i^0}{R \cdot T}\right) \quad (2.8)$$

$$k_i^c = A_i^c \cdot \exp\left(-\frac{E_i^c}{R \cdot T}\right) \quad (2.9)$$

Para a reação de policondensação, espera-se que a constante de reação direta k_2 seja uma função complexa dos comprimentos m e n das cadeias das moléculas envolvidas. Pode-se notar, entretanto, que a reação reversível envolve uma molécula grande e uma pequena, e espera-se também que a correspondente constante desta taxa de reação, k_2' , seja função apenas da cadeia de comprimento P_{m+n} (Gupta e Kumar, 1987).

Sendo k_i a constante da taxa de reação da i -ésima reação, e K_i a constante de equilíbrio para a i -ésima reação, então, a constante da taxa de reação reversa da i -ésima reação pode ser representada por:

$$k_i' = \frac{k_i}{K_i} \quad i = 1, 2, 3, 4, 5 \quad (2.10)$$

A dependência da temperatura para as constantes de equilíbrio K_i , é definida pela seguinte relação termodinâmica:

$$K_i = \exp \left[\frac{\left(\Delta S_i - \frac{\Delta H_i}{T} \right)}{R} \right] \quad i = 1, 2, 3, 4, 5 \quad (2.11)$$

2.3.2. Constantes termodinâmicas

As constantes necessárias para os cálculos das taxas e constantes de equilíbrio das reações químicas apresentadas anteriormente estão apresentadas na Tabela 2.1, e seus valores foram baseados nos resultados de uma série de experimentos realizados por Tai *et al.* (1983). A primeira linha dessa tabela apresenta os valores das constantes necessárias para o cálculo da taxa e constante de equilíbrio da reação de abertura do anel da caprolactama, a linha 2 para a reação de policondensação, a linha 3 para a reação de poliadição, a linha 4 para a reação da abertura do anel do dímero cíclico, e a linha 5 para a reação de poliadição do dímero cíclico.

Tabela 2.1. Constantes das taxas de reação e constantes de equilíbrio

i	A_i^0	E_i^0	A_i^c	E_i^c	ΔH_i	ΔS_i
	kg·mol ⁻¹ ·h ⁻¹	J·mol ⁻¹	kg ² ·mol ⁻² ·h ⁻¹	J·mol ⁻¹	J·mol ⁻¹	J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹
1	5.9874·10 ⁵	8.3198·10 ⁴	4.3075·10 ⁷	7.8703·10 ⁴	8.0268·10 ³	-3.2997·10 ¹
2	1.8942·10 ¹⁰	9.7389·10 ⁴	1.2114·10 ¹⁰	8.6504·10 ⁴	-2.4883·10 ⁴	3.9496·10 ⁰
3	2.8558·10 ⁹	9.5606·10 ⁴	1.6377·10 ¹⁰	8.4148·10 ⁴	-1.6923·10 ⁴	-2.9068·10 ¹
4	8.5778·10 ¹¹	1.7577·10 ⁵	2.3307·10 ¹²	1.5652·10 ⁵	-4.0176·10 ⁴	-6.0766·10 ¹
5	2.5701·10 ⁸	8.9141·10 ⁴	3.0110·10 ⁹	8.5374·10 ⁴	-1.3263·10 ⁴	2.4384·10 ⁰

A entalpia está representada por H_i e a entropia por S_i . O índice (i) identifica cada uma das cinco reações da cinética de reação.

2.4. Momentos estatísticos e pesos moleculares

Os polímeros são normalmente descritos por um gráfico ou função analítica da fração molar ou fração mássica do oligômero ou polímero S_n , tendo $\frac{n \cdot (S_n)}{\sum n \cdot (S_n)}$ no eixo das ordenadas, e o comprimento da cadeia n no eixo das abscissas, função esta comumente chamada de distribuição dos pesos moleculares (Figura 2.3).

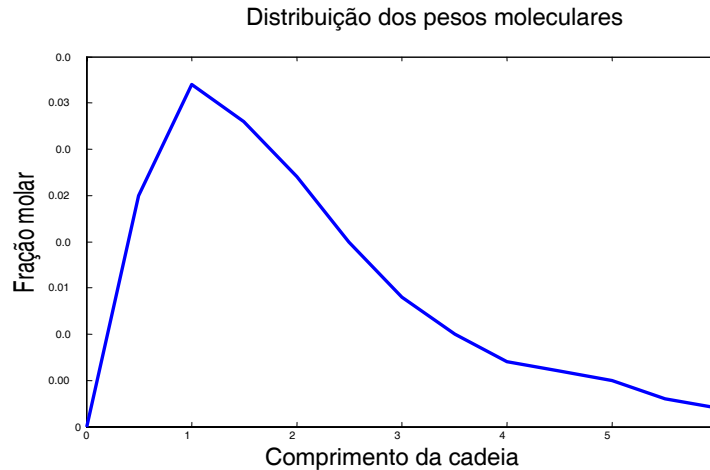


Figura 2.3. Gráfico da distribuição dos pesos moleculares.

Para a determinação da distribuição dos pesos moleculares do polímero formado, evitando-se as técnicas mais sofisticadas de integração numérica das equações para as espécies individuais do processo de polimerização, por envolverem um número infinito de equações, é utilizada muitas vezes a chamada técnica dos momentos, uma vez que qualquer função de distribuição do peso molecular pode ser equivalentemente representada por uma série infinita de momentos.

A vantagem dessa última representação é que os três primeiros momentos são comumente suficientes para caracterizar as principais propriedades do produto. Assim sendo, foram considerados os momentos de ordem 0, 1 e 2 para as cadeias de polímero, μ_0 , μ_1 e μ_2 , definidos a partir da equação geral do somatório do k -ésimo momento não normalizado μ_k da distribuição, definido por:

$$\mu_k = \sum_{n=1}^{\infty} n^k \cdot [S_n] \quad (2.12)$$

onde k é a ordem do momento e $[S_n]$ representa a concentração molar da espécie S_n . Neste caso, o momento de ordem zero da distribuição de comprimento de cadeia,

$$\mu_0 = \sum_{n=1}^{\infty} [S_n] = [S], \quad (2.13)$$

fornece em qualquer tempo, a medida do total de moles do polímero por unidade de volume na massa reacional. Por outro lado, o momento de ordem um:

$$\mu_1 = \sum_{n=1}^{\infty} n \cdot [S_n] = 1 \cdot [S_1] + 2 \cdot [S_2] + 3 \cdot [S_3] + 4 \cdot [S_4] + \dots \quad (2.14)$$

é proporcional ao total de massa por unidade de volume. O momento de ordem dois não tem interpretação física;

$$\mu_2 = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \cdot [S_n] = 1 \cdot [S_1] + 2^2 \cdot [S_2] + 3^2 \cdot [S_3] + 4^2 \cdot [S_4] + \dots \quad (2.15)$$

O comprimento molecular médio em número, M_n , e o comprimento molecular médio em massa, M_w , assim como também o índice de polidispersividade Q , que é uma medida da largura da distribuição e está relacionado com sua variância, podem ser representados pelas seguintes equações:

$$M_n = \frac{\mu_1}{\mu_0} = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n \cdot S_n}{\sum_{n=1}^{\infty} S_n} \quad (2.16)$$

$$M_w = \frac{\mu_2}{\mu_1} = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 \cdot [S_n]}{\sum_{n=1}^{\infty} n \cdot [S_n]} \quad (2.17)$$

$$Q = \frac{M_{weight}}{M_n} \quad (2.18)$$

Multiplicando-se M_n e M_w pelo peso molecular da unidade repetida (caprolactama), que neste caso é 113 g/gmol, obtém-se respectivamente o peso molecular médio em número, \bar{M}_n , e o peso molecular médio em massa, \bar{M}_w .

2.5. Equações de balanço

Com relação às análises feitas para os fenômenos de transferência de calor e de massa envolvidos, e à estruturação dos balanços de massa e de energia, as seguintes hipóteses foram consideradas para a modelagem matemática:

- Transferência de calor do óleo quente circulante no interior da jaqueta para a massa reacional na fase de aquecimento, e da massa reacional para o óleo frio circulante no interior da jaqueta na fase de resfriamento;
- Vaporização da água e da ε – caprolactama presentes na massa reacional;
- Aumento da pressão na fase vapor devido ao aquecimento da massa reacional;
- Variação na viscosidade da massa reacional durante o processo de polimerização, e o efeito dessa variação sobre as taxas de transferência de massa e energia;
- Cinética das reações envolvidas na formação do nylon 6, conforme descrita na seção 2.3.

Um balanço global na fase líquida fornece:

$$\frac{dF_T}{dt} = -R_{vT} \quad (2.19)$$

onde a taxa de evaporação é dada pela evaporação do monômero e da água:

$$R_{vT} = 0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw} \quad (2.20)$$

Para um componente C, o balanço na fase líquida fornece:

$$\frac{d[C]}{dt} = -r_C - \frac{R_{vC}}{F_T} + [C] \cdot \frac{R_{vT}}{F_T} \quad (2.21)$$

No início do processo de produção do nylon 6, a vaporização do monômero e da água ocorre apenas através da superfície livre do líquido. Após o início da fase de aquecimento, a massa reacional torna-se supersaturada, ocorrendo também a desorção pela formação de bolhas. O modelo fenomenológico também leva em consideração a presença do gás não condensável (nitrogênio), conforme equações 2.36, 2.37, 2.39, 2.40 e 2.41.

As taxas de reação do monômero ε – caprolactama, $[C_1]$, do ácido amino-capróico, $[S_1]$, do dímero cíclico, $[C_2]$, e da água, $[W]$, na fase líquida são dados por:

$$r_{c_1} = -k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] + k_1' \cdot [S_1] - k_3 \cdot [C_1] \cdot \mu_0 + k_3' \cdot (\mu_0 - [S_1]) \quad (2.22)$$

$$r_{s_1} = k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] - k_1' \cdot [S_1] - k_2 \cdot [S_1] \cdot (\mu_0 + [S_1]) + k_2' \cdot [W] \cdot (\mu_0 - [S_1] + [S_2]) - k_3 \cdot [S_1] \cdot [C_1] + k_3' \cdot [S_2] - k_5 \cdot [S_1] \cdot [C_2] + k_5' \cdot [S_3] \quad (2.23)$$

$$r_{c_2} = -k_4 \cdot [C_2] \cdot [W] + k_4' \cdot [S_2] - k_5 \cdot [C_2] \cdot \mu_0 + k_5' \cdot (\mu_0 - [S_1] - [S_2]) \quad (2.24)$$

$$r_w = -k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] + k_1' \cdot [S_1] + \frac{k_2 \cdot \mu_0^2}{2} - k_2' \cdot [W] \cdot (\mu_0 - [S_1]) - k_4 \cdot [C_2] \cdot [W] + k_4' \cdot [S_2] \quad (2.25)$$

Assim, os balanços materiais para o monômero ε – caprolactama, $[C_1]$, para o ácido amino-capróico, $[S_1]$, para o dímero cíclico, $[C_2]$, e para a água, $[W]$, são dados por:

$$\begin{aligned} \frac{d[C_1]}{dt} = & -k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] + k_1' \cdot [S_1] - k_3 \cdot [C_1] \cdot \mu_0 + k_3' (\mu_0 - [S_1]) - \\ & - \left(\frac{R_{vC_1}}{F} \right) + [C_1] \cdot \left(\frac{0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw}}{F} \right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[S_1]}{dt} = & k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] - k_1' \cdot [S_1] - k_2 \cdot [S_1] \cdot (\mu_0 + [S_1]) + k_2' \cdot [W] \cdot (\mu_0 - [S_1] + [S_2]) - \\ & - k_3 \cdot [S_1] \cdot [C_1] + k_3' \cdot [S_2] - k_5 \cdot [S_1] \cdot [C_2] + k_5' \cdot [S_3] + \\ & + [S_1] \cdot \left(\frac{0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw}}{F} \right) \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[C_2]}{dt} = & -k_4 \cdot [C_2] \cdot [W] + k_4' \cdot [S_2] - k_5 \cdot [C_2] \cdot \mu_0 + k_5' \cdot (\mu_0 - [S_1] - [S_2]) + \\ & + [C_2] \cdot \left(\frac{0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw}}{F} \right) \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[W]}{dt} = & -k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] + k_1' \cdot [S_1] + \frac{k_2 \cdot \mu_0^2}{2} - k_2' \cdot [W] \cdot (\mu_0 - [S_1]) - k_4 \cdot [C_2] \cdot [W] + \\ & + k_4' \cdot [S_2] - \left(\frac{R_{vw}}{F} \right) + [W] \cdot \left(\frac{0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw}}{F} \right) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Uma boa modelagem da concentração de água é muito importante no processo de produção do nylon 6 pela polimerização hidrolítica da ε -caprolactama, para poder prever o desempenho do reator, já que esta quantidade afeta significativamente as propriedades do produto, sendo uma das variáveis mais importantes (Gupta *et al.*, 1992).

A técnica dos momentos estatísticos é um método de redução de ordem que permite o tratamento com um número finito de equações. Os momentos de ordem 0, 1 e 2 são variáveis de estado do sistema, cujas dinâmicas são descritas pelas seguintes equações de estado:

$$\frac{d\mu_0}{dt} = \left\{ \begin{array}{l} -k_3 \cdot [C_1] \cdot \mu_0 - k_5 \cdot [C_2] \cdot \mu_0 + \mu_0 \cdot \left(\frac{0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw}}{F} \right) \\ + k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] - k_1' \cdot [S_1] + (k_4 \cdot [W] \cdot [C_2] - k_4' \cdot [S_2]) - \\ - \frac{k_2' \cdot [W]}{4} \cdot \left(\mu_1 - \frac{\mu_0}{2} \right) + k_3' \cdot (\mu_1 - [S_1]) + k_5' \cdot (\mu_0 - [S_1] - [S_2]) - \\ - k_2 \cdot \mu_0 \cdot \mu_0 + k_2' \cdot [W] \cdot \left(\mu_1 - \mu_0 + \frac{\mu_0}{2} \right) - k_3' \cdot (\mu_0 - [S_1]) - \\ - k_5' \cdot (\mu_0 - [S_1] - [S_2]) + k_3 \cdot [C_1] \cdot \mu_0 + k_5 \cdot [C_2] \cdot \mu_0 + \\ + k_2 \cdot \frac{\mu_0^2}{2} \end{array} \right\} \quad (2.30)$$

$$\frac{d\mu_1}{dt} = \left\{ \begin{array}{l} -k_3 \cdot [C_1] \cdot \mu_1 - k_5 \cdot [C_2] \cdot \mu_1 + \mu_1 \cdot \left(\frac{0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw}}{F} \right) \\ + k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] - k_1' \cdot [S_1] + 2 \cdot (k_4 \cdot [W] \cdot [C_2] - k_4' \cdot [S_2]) - \\ - \frac{k_2' \cdot [W]}{4} \cdot \left(\mu_2 - \frac{\mu_1}{2} \right) + k_3' \cdot (\mu_1 - \mu_0) + k_5' \cdot (\mu_1 - 2 \cdot \mu_0 + [S_1]) - \\ - k_2 \cdot \mu_0 \cdot \mu_1 + k_2' \cdot [W] \cdot \left(\frac{\mu_2 - \mu_1}{2} + \frac{\mu_1}{4} \right) - k_3' \cdot (\mu_1 - [S_1]) - \\ - k_5' \cdot (\mu_1 - [S_1]) - 2 \cdot [S_2] + k_3 \cdot [C_1] \cdot (\mu_1 + \mu_0) + k_5 \cdot [C_2] \cdot (\mu_1 + 2 \cdot \mu_0) + \\ + k_2 \cdot \mu_0 \cdot \mu_1 \end{array} \right\} \quad (2.31)$$

$$\frac{d\mu_2}{dt} = \left\{ \begin{array}{l} -k_3 \cdot [C_1] \cdot \mu_2 - k_5 \cdot [C_2] \cdot \mu_2 + \mu_2 \cdot \left(\frac{0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw}}{F} \right) \\ + k_1 \cdot [C_1] \cdot [W] - k_1' \cdot [S_1] + 4 \cdot (k_4 \cdot [W] \cdot [C_2] - k_4' \cdot [S_2]) - \\ - \frac{k_2' \cdot [W]}{4} \cdot \left(\mu_3 - \frac{\mu_2}{2} \right) + k_3' \cdot (\mu_2 - 2 \cdot \mu_1 + \mu_0) + k_5' \cdot (\mu_2 - 4 \cdot \mu_1 + 4 \cdot \mu_0 - [S_1]) - \\ - k_2 \cdot \mu_0 \cdot \mu_2 + k_2' \cdot [W] \cdot \left(\frac{1}{3} \cdot \left(\mu_3 - \frac{3 \cdot \mu_2}{2} + \frac{\mu_1}{2} \right) + \frac{\mu_2}{8} \right) - k_3' \cdot (\mu_2 - [S_1]) - \\ - k_5' \cdot (\mu_2 - [S_1]) - 4 \cdot [S_2] + k_3 \cdot [C_1] \cdot (\mu_2 + 2 \cdot \mu_1 + \mu_0) + \\ + k_5 \cdot [C_2] \cdot (\mu_2 + 4 \cdot \mu_0 + 4 \cdot \mu_1) + k_2 \cdot (\mu_0 \cdot \mu_2 + \mu_1^2) \end{array} \right\} \quad (2.32)$$

Observa-se nas equações acima, termos que dependem de S_2 , S_3 e μ_3 , espécies que não foram alvos de balanços e, portanto, não podem ser calculadas. A realização de balanços para estas espécies não resolveria o problema, visto que apareceriam variáveis adicionais, tais como S_4 , S_5 e μ_3 . Assim, a fim de interromper essa hierarquia de equações, Reimschuessel (1977) propôs as seguintes equações de fechamento.

$$[S_3] = [S_2] = [S_1] \quad (2.33)$$

$$\mu_3 = \frac{\mu_2 \cdot (2 \cdot \mu_2 \cdot \mu_0 - \mu_1^2)}{\mu_1 \cdot \mu_0} \quad (2.34)$$

para os oligômeros lineares no líquido e para o momento da distribuição.

Um balanço de massa global na fase gás fornece:

$$V_T = R_{vm} + R_{vw} - \frac{V_g}{R \cdot T} \cdot \frac{dP}{dt} + \frac{V_g}{T} \cdot \sum_{i=1}^{NC} [C_i] \cdot \frac{dT}{dt} \quad (2.35)$$

O volume na fase gás, V_g , pode ser calculado pela diferença entre o volume total do vaso e o volume na fase líquida, e a pressão no reator acima da superfície líquida pode ser calculada da seguinte forma:

$$P = ([M^v] + [W^v] + [N^v]) \cdot R \cdot T \quad (2.36)$$

Logo:

$$\frac{dP}{dt} = \left(([M^v] + [W^v] + [N^v]) \cdot R \cdot \frac{dT}{dt} \right) + R \cdot T \cdot \left(\frac{d([M^v])}{dt} + \frac{d([W^v])}{dt} + \frac{d([N^v])}{dt} \right) \quad (2.37)$$

Para a simulação em malha fechada, a vazão de gás que sai do reator através da válvula de controle foi calculada a partir da seguinte equação (Control valve handbook, 1997):

$$V_i = 59.64 \cdot C_v \cdot P \cdot X \cdot \sqrt{\frac{\Delta P}{P}} \cdot \sqrt{\frac{520}{G \cdot T_{(Rankine)}}}, \quad (2.38)$$

onde X representa o curso do eixo do obturador da válvula de pressão, G é a densidade do gás (ar a 60 °F), e a vazão é calculada em scfm (*standard cubic feet per minute*).

Os balanços de massa do monômero, da água e do nitrogênio na fase vapor fornecem:

$$\frac{d[M^v]}{dt} = \frac{R_{vm}}{V_g} - \frac{V_T \cdot [M^v]}{V_g \cdot ([M^v] + [W^v] + [N^v])} \quad (2.39)$$

$$\frac{d[W^v]}{dt} = \frac{R_{vw}}{V_g} - \frac{V_T \cdot [W^v]}{V_g \cdot ([M^v] + [W^v] + [N^v])} \quad (2.40)$$

$$\frac{d[N^v]}{dt} = - \frac{V_T \cdot [N^v]}{V_g \cdot ([M^v] + [W^v] + [N^v])} \quad (2.41)$$

O primeiro termo do lado direito das expressões acima (equações 2.39 e 2.40) se referem à massa do componente entrando na fase gasosa devido à vaporização, enquanto o segundo termo se refere à massa do componente saindo da fase gasosa através da válvula de controle da pressão. No caso do nitrogênio (equação 2.41), é considerada apenas sua retirada da fase gasosa.

O balanço de energia para o reator resulta em:

$$U \cdot A \cdot (T_j - T) + \frac{F}{1000} \cdot \sum_{i=1}^{NC} r_i \cdot (-\Delta H_i) - (R_{vm} \cdot \lambda_m(T_r) + R_{vw} \cdot \lambda_w(T_r)) - \\ - (0.113 \cdot R_{vm} \cdot C_{p,m}^v + 0.018 \cdot R_{vw} \cdot C_{p,w}^v) \cdot (T - T_r) + \\ \frac{dT}{dt} = \frac{+ C_{p,mix}^l \cdot (0.113 \cdot R_{vm} + 0.018 \cdot R_{vw}) \cdot (T - T_r)}{(C_{p,mix}^l + 2.0925 \cdot 10^{-3} \cdot (T - T_r)) \cdot F} \quad (2.42)$$

A equação acima leva em conta os termos de troca térmica, calor latente de vaporização do monômero e da água, calor de reação e entalpia de saída de material. O termo $\{(C_{p,mix}^l + 2.0925 \cdot 10^{-3} \cdot (T - T_r)) \cdot F\}^{-1}$ refere-se ao aquecimento da mistura líquida de uma temperatura T_r até T .

2.5.1. Equilíbrio de fases e taxas de transferência

Correlações para as taxas de vaporização, equilíbrio de fases, troca térmica e propriedades físicas podem ser encontradas em Wajge *et al.* (1994), e são também descritas neste item, e as relações constitutivas, no item 2.6.

São consideradas na modelagem do processo de produção do nylon 6, a desorção pela superfície livre do líquido no reator, e a vaporização através das bolhas formadas na fase

líquida devido à supersaturação, que pode ser resultado do aumento da temperatura, pela depressurização, ou por uma reação química.

Os valores dos coeficientes de transferência de massa volumétricos para as bolhas, e para o fator de correção em cada região de baixo e alto borbulhamento, foram correlacionados como função da supersaturação relativa da solução e do número de Reynolds na fase líquida, detalhados no item 2.6.

As taxas de vaporização da água e da ε – caprolactama foram descritas em termos de coeficientes de transferência de massa e concentrações de equilíbrio interfacial. Ocorrendo o borbulhamento, as concentrações da fase líquida da água e da ε – caprolactama na interface da bolha $[C_1]_b^*$ e $[W]_b^*$, respectivamente, são necessárias para os cálculos da transferência de massa através da bolha. Entretanto, sendo a desorção por borbulhamento do monômero ε – caprolactama desprezível, sua taxa de vaporização, levando em consideração apenas a desorção pela superfície livre do líquido, foi calculada através da seguinte expressão:

$$R_{vm} = F \cdot (k_{L,m} \cdot a)_f \cdot ([C_1] - [C_1]_f^*) \quad (2.43)$$

onde

$$[C_1]_f^* = \frac{[W] + [C_1]}{\gamma_m \cdot P_m^{sat}} \cdot [M^v] \cdot R \cdot T \quad (2.44)$$

é a desorção de C_1 pela superfície livre do líquido, e a taxa de vaporização da água foi calculada através da seguinte expressão:

$$R_{vw} = F \cdot (k_{L,w} \cdot a)_f \cdot ([W] - [W]_f^*) + F \cdot (k_{L,w} \cdot a)_b \cdot ([W] - [W]_b^*) \quad (2.45)$$

onde o primeiro termo da equação acima é devido à desorção pela superfície livre do líquido sem borbulhamento, e o segundo é devido ao borbulhamento.

A transição da desorção quiescente para a desorção pela formação de bolhas ocorre quando a soma das pressões parciais da água, da ε – caprolactama e do nitrogênio na massa reacional excede a pressão total do sistema.

Gupta e Kumar (1987), e Gupta *et al.* (1992), estudaram várias correlações de equilíbrio líquido-vapor, e chegaram à conclusão que o melhor resultado obtido com dados industriais foi aquele calculado usando correlações para os coeficientes de atividade da ε – caprolactama e da água baseados nos dados experimentais de Giori *et al.* (1970). O equilíbrio líquido-vapor para um sistema multicomponente pode ser representado na abordagem assimétrica por:

$$\varphi_i \cdot y_i \cdot P_g = \gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^{sat} \quad (2.46)$$

Tendo em vista as baixas pressões encontradas nos reatores de produção de nylon 6, a fase gás foi tratada como gás ideal, ou seja, $\varphi_i = 1$.

Snell *et al.* (1969) também estudaram o equilíbrio líquido-vapor para a ε – caprolactama, e propuseram a seguinte equação para a pressão do vapor saturado da ε – caprolactama, ajustada para a equação de Clausius-Clapeyron:

$$\ln \left(\frac{P_m^{sat} \cdot [kPa]}{101.3} \right) = 13.0063 - \frac{7024.023}{T[K]} \quad (2.47)$$

A pressão de vapor saturado da água foi calculada pela equação recomendada por Reid *et al.* (1977):

$$\ln\left(\frac{P_w^{sat} \cdot [kPa]}{101.3}\right) = 11.6703 - \frac{3816.44}{T[K] - 46.13} \quad (2.48)$$

Os coeficientes de atividade para o monômero e para a água podem ser obtidos pelas funções lineares abaixo:

$$\gamma_m = \beta_{m0} + \frac{\beta_{mf} - \beta_{m0}}{0.95} \cdot x_m \quad (2.49)$$

$$\gamma_w = \beta_{w0} + \frac{\beta_{wf} - \beta_{w0}}{0.95} \cdot x_m \quad (2.50)$$

onde β_{m0} , β_{mf} , β_{w0} e β_{wf} são constantes que foram obtidas experimentalmente através do ajustamento de dados industriais ao modelo proposto, e a conversão do monômero, x_m , pode ser calculada como (Wajge *et al.*, 1994):

$$x_m = 1.0 - \frac{F \cdot [C_1]}{F_0 \cdot [C_1]_0 - \xi_1} \quad (2.51)$$

Do equilíbrio entre as fases vapor e líquido, as seguintes expressões podem ser obtidas:

$$[W]_f^* = \frac{[W] + [C_1]}{\gamma_w \cdot P_w^{sat}} \cdot [W^v] \cdot R \cdot T \quad (2.52)$$

$$[W]_b^* = \frac{[C_1] \cdot (P - \gamma_m \cdot P_m^{sat})}{(\gamma_w \cdot P_w^{sat} - P)} \quad (2.53)$$

2.6. Relações constitutivas

Foram adotados os seguintes valores para os calores latentes de vaporização para o monômero e para a água na temperatura $T_r = 473.15 \text{ K}$, e para os calores específicos do monômero puro e da água pura na fase vapor:

- $\lambda_m = 51.0193 \cdot \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$;
- $\lambda_w = 34.2559 \cdot \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$;
- $C_{p,m}^v = 1.6426 \cdot \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$;
- $C_{p,w}^v = 1.9963 \cdot \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$.

O coeficiente de transferência de calor para o filme interno da massa reacional, que se encontra próximo à parede do reator, foi expresso por:

$$h_i \left[\text{kJ} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1} \right] = \frac{h_{ref}}{(\eta [\text{Pa} \cdot \text{s}])^{0.17}} \quad (2.54)$$

onde h_{ref} foi obtido de Wajge *et al.* (1994), que, através de um procedimento de estimação de parâmetros não linear, obteve os melhores valores para os seguintes parâmetros: h_{ref} , β_{m0} , β_{mf} , β_{w0} e β_{wf} . Analisando dados industriais, eles comentam que variáveis, tais como temperatura, pressão e comprimento médio da cadeia, são sensíveis a esses cinco parâmetros.

O coeficiente global de transferência de calor pode ser obtido pela expressão:

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h_i} + \frac{e_p}{k_{ss}}} \quad (2.55)$$

sendo k_{ss} a condutividade térmica do aço inoxidável e e_p a espessura da parede do reator. O calor específico e o peso específico da mistura reacional foram obtidos através das seguintes expressões:

$$C_{p,mix}^1 \left[\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \right] = 2.0925 + 2.0925 \cdot 10^{-3} (T[\text{K}] - 273.15) \quad (2.56)$$

$$\rho \left[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \right] = 1000 \cdot \left[1.1238 - 0.5663 \cdot 10^{-3} (T[\text{K}] - 273.15) \right] \quad (2.57)$$

Wajge *et al.* (1994) consideraram em seu estudo duas situações para a desorção dos vapores: desorção quiescente e desorção pela formação de bolhas.

2.6.1. Desorção quiescente

O estudo da desorção quiescente e da desorção pela formação de bolhas (item 2.6.2), é necessário para o cálculo das taxas de evaporação da água e da caprolactama, e a partir destes, calcular o volume dos vapores de água e da caprolactama gerado durante o processo de polimerização.

Para uma massa reacional de 1600 kg de mistura, com 8,584 moles de caprolactama/kg de mistura, e 2,8 moles de água/kg de mistura, o número médio do comprimento da cadeia polimérica do nylon 6 obtido ao final de uma corrida ficou ao redor de 11000 (Figura 2.4), com aproximadamente 91% de conversão (Figura 2.5). A viscosidade

ao final da corrida, na temperatura do reator, ficou com aproximadamente 165 poise (Figura 2.6).

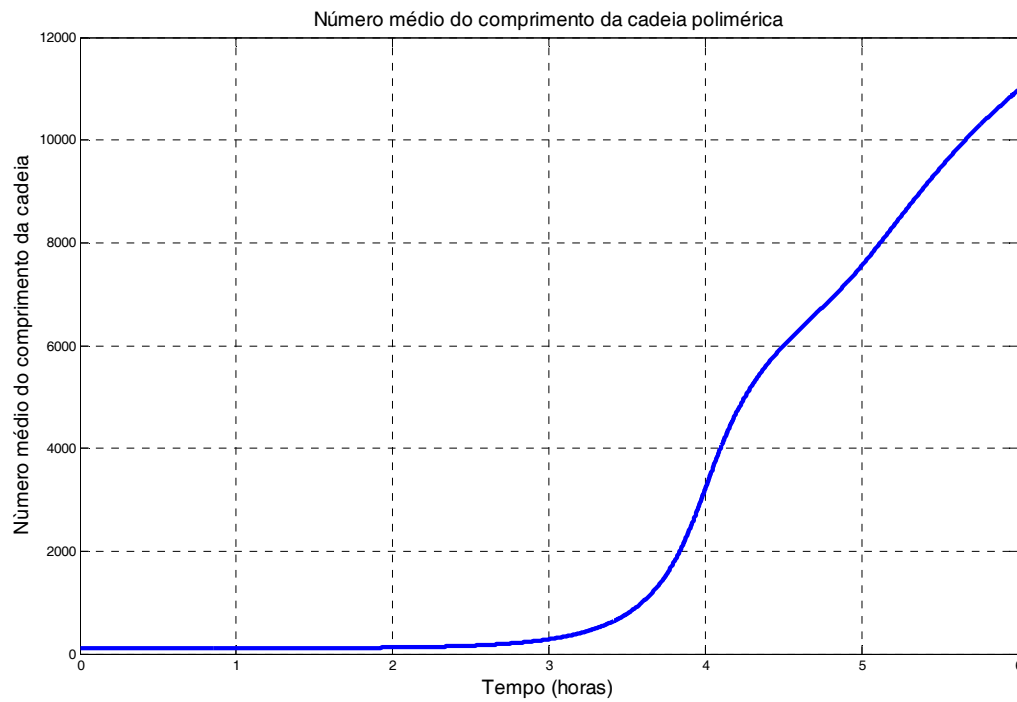


Figura 2.4. Número médio do comprimento da cadeia polimérica.

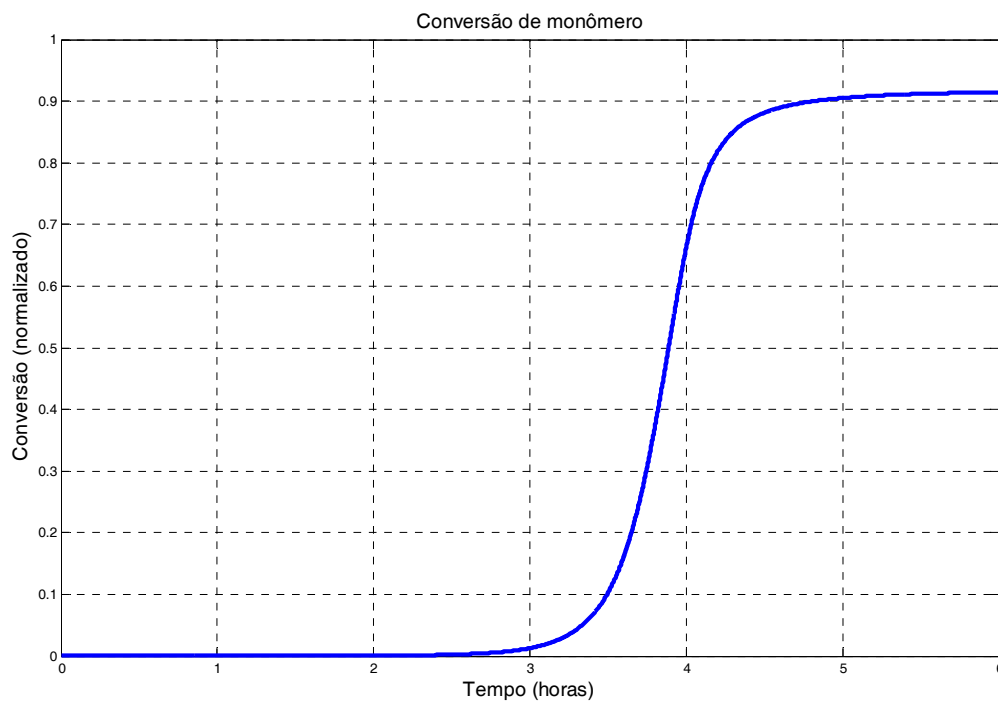


Figura 2.5. Conversão de monômero.

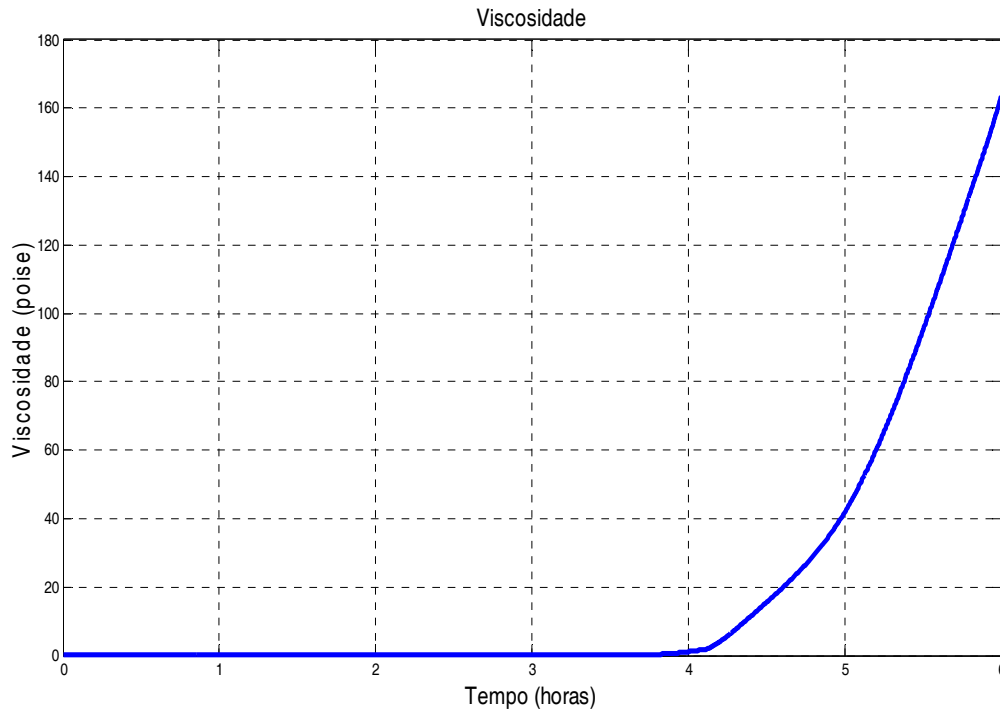


Figura 2.6. Viscosidade (poise).

Uma grande fração da quantidade total de desorção pela superfície livre do líquido, assim como através das bolhas, é retirada muito antes de chegar no estágio final da polimerização, estando o peso molecular muito abaixo dos 11000 g/mol mencionado anteriormente. Então, as correlações de transferência de massa obtidas com líquidos Newtonianos por Hikita e Konishi (1984) são usadas sem nenhuma correção. Estes autores fizeram um estudo de obtenção das correlações para os coeficientes de transferência de massa quando a desorção ocorre através das bolhas formadas devido à supersaturação do líquido, utilizando um vaso agitado provido de chicanas. Esses experimentos foram feitos em sistemas de baixa viscosidade. Entretanto, como a viscosidade não controla a nucleação das bolhas, decidiu-se assumir que a transição da desorção quiescente, que é a evaporação pela superfície livre do líquido, para a desorção pela formação de bolhas ocorre quando a soma das pressões parciais da água e da ε -caprolactama na massa reacional, Ω_b , ultrapassa a pressão total do sistema:

$$\Omega_b = \left(\frac{[C_1] \cdot \gamma_m \cdot P_m^{sat}}{[C_1] + [W]} + \frac{[W] \cdot \gamma_w \cdot P_w^{sat}}{[C_1] + [W]} \right) \quad (2.58)$$

Os valores dos coeficientes de transferência de massa da fase líquida na desorção pela superfície livre no reator, sob condições de não borbulhamento, k_{Lf} , foram preditos usando a equação empírica dada por Hikita e Konishi (1984) e apresentados a seguir.

$$\left(\frac{k_{Lf} \cdot D_r}{g_i} \right) = 0.322 \cdot \left(\frac{6 \cdot d^2 \cdot n \cdot \rho}{\eta [Pa \cdot s]} \right)^{0.7} \cdot \left(\frac{\eta}{360 \cdot \rho \cdot g_i} \right)^{0.33} \quad (2.59)$$

Os números de Reynolds e de Schmidt são representados pelas seguintes equações:

$$N_{Re} = \frac{6 \cdot d_s^2 \cdot n \cdot \rho}{\eta[\text{poise}]}, \quad (2.60)$$

$$N_{sc,i} = \frac{\eta[\text{poise}]}{360 \cdot \rho \cdot \mathcal{G}_i}, \quad (2.61)$$

e o número de Sherwood por

$$N_{sh,i,q} = 0.322 \cdot N_{Re}^{0.7} \cdot N_{sc,i}^{0.33}, \quad \begin{array}{l} i=1: \text{ monômero,} \\ i=2: \text{ água,} \end{array} \quad (2.62)$$

e também por

$$N_{sh,i,q} = \frac{(k_{L,i})_{f,q} \cdot D_r}{\mathcal{G}_i}, \quad (2.63)$$

Foram adotados os seguintes valores para os coeficientes de difusividade \mathcal{G}_i , onde o índice $i=1$ representa o monômero e $i=2$ representa a água:

- $\mathcal{G}_m = 2.88 \cdot 10^{-8} \text{ [m}^2 \cdot \text{h}^{-1}\text{]}$;
- $\mathcal{G}_w = 3.6 \cdot 10^{-6} \text{ [m}^2 \cdot \text{h}^{-1}\text{]}$.

A área interfacial efetiva, $a_{f,q}$, sob condições de não borbulhamento, foi assumida como sendo igual à área interfacial geométrica, e igual a $8,13 \text{ m}^{-1}$, sendo dada por:

$$a_{f,q} = \frac{\left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot D_r^2}{\frac{F}{\rho}}, \quad (2.64)$$

onde o índice f se refere à superfície livre da fase líquida.

Finalmente, os coeficientes de transferência de massa volumétrico da fase líquida para a desorção pela superfície livre do líquido, $k_{L,f} \cdot a_f$, do monômero e da água, sob condições de não borbulhamento, podem ser expressos por:

$$(k_{L,m} \cdot a)_f = (k_{L,m} \cdot a)_{f,q} \quad (2.65)$$

$$(k_{L,w} \cdot a)_f = (k_{L,w} \cdot a)_{f,q} \quad (2.66)$$

$$(k_{L,w} \cdot a)_b = 0, \text{ tendo em vista a ocorrência da desorção sem a formação de bolhas} \quad (2.67)$$

Como o vapor da água representa a maior parte da fase vapor, para a temperatura do processo em torno de $260 \text{ }^\circ\text{C}$, e sendo a razão da pressão do vapor da água e da ε -caprolactama em torno de 50:1, a contribuição da transferência de massa da ε -caprolactama é insignificante.

2.6.2. Desorção pela formação de bolhas

A supersaturação da solução é a força motriz para a taxa de desorção pela formação de bolhas. Sendo $[W_b]^*$ a concentração da fase líquida na interface da bolha, a supersaturação relativa σ foi definida como:

$$\sigma \equiv \frac{[W] - [W_b]^*}{[W_b]^*} \quad (2.68)$$

Esta variável foi utilizada para correlacionar o coeficiente de transferência de massa volumétrico, $k_{Lb} \cdot a_b$, sob condições de borbulhamento. Hikita e Konishi (1984) fizeram gráficos dos valores dos coeficientes de transferência de massa da fase líquida pela formação de bolhas, $k_{Lb} \cdot a_b$, em função dos valores da supersaturação relativa σ , com os números de Reynolds da fase líquida, N_{Re} , servindo como parâmetros. As curvas, para cada valor de N_{Re} , mostraram um comportamento linear, com dois diferentes coeficientes angulares, sinalizando a existência de duas regiões separadas com respeito ao efeito da supersaturação relativa. Para baixos valores de σ , isto é, na região de baixo borbulhamento, $k_{Lb} \cdot a_b$ é proporcional a $\sigma^{0.78}$, enquanto para altos valores de σ , na região de alto borbulhamento, $k_{Lb} \cdot a_b$ varia de forma proporcional a $\sigma^{2.5}$. Estes autores fizeram também gráficos de $k_{Lb} \cdot a_b$ em função do N_{Re} , para dois diferentes valores de σ (0.15 e 0.40), observando uma proporcionalidade entre $k_{Lb} \cdot a_b$ e $N_{Re}^{0.50}$, na região de baixo borbulhamento, e uma proporcionalidade entre $k_{Lb} \cdot a_b$ e $N_{Re}^{0.93}$, na região de alto borbulhamento. As equações correlacionando estas variáveis, nas diferentes condições de borbulhamento, são descritas nas seções seguintes.

2.6.2.1. Região de baixo borbulhamento ($\sigma < \sigma_c$)

Para esta região, a seguinte correlação foi empregada:

$$(k_{L,w} \cdot a)_b [h^{-1}] = 6.77 \cdot 10^{-6} \cdot N_{Re}^{0.5} \cdot \sigma^{0.78} \cdot 3600 \quad (2.69)$$

Os coeficientes de transferência de massa quiescentes volumétricos para a fase líquida foram representados por:

$$(k_{L,m} \cdot a)_f = (k_{L,m} \cdot a)_{f,q} \quad (2.70)$$

$$(k_{L,w} \cdot a)_f = (k_{L,w} \cdot a)_{f,q} \quad (2.71)$$

No trabalho desenvolvido por Hikita e Konishi (1984), os valores do fator de melhoramento adimensional, Φ , através do qual o coeficiente de transferência de massa volumétrico para a superfície livre do líquido, $k_{Lf} \cdot a_f$, é aumentado pelo borbulhamento no líquido agitado, foram calculados e correlacionados em termos da supersaturação relativa da solução, σ , e do número de Reynolds, N_{Re} , da fase líquida. Então, quando $\sigma < \sigma_c$, isto é, na região de baixo borbulhamento, o valor de Φ é independente de σ e de N_{Re} . Portanto, o valor de Φ resulta em um valor próximo da unidade, indicando que o efeito de melhoramento no valor de $k_{L,f} \cdot a_f$, para esta condição de borbulhamento, pode ser desprezado.

O fator de melhoramento adimensional, Φ , foi representado pela seguinte equação:

$$\phi = \frac{k_{L_f} \cdot a_f}{k_{L_f}^* \cdot a_f^*} \quad (2.72)$$

onde $k_{L_f}^* \cdot a_f^*$ é o coeficiente de transferência de massa volumétrico para a superfície livre do líquido, sob condições de não borbulhamento.

2.6.2.2. Região de alto borbulhamento ($\sigma > \sigma_c$)

Os gráficos de Φ , para cada valor de N_{Re} , apresentaram um comportamento linear, indicando que $\log \phi$ é proporcional a $(\sigma - \sigma_c)$, e seu coeficiente angular aumenta com o decréscimo de N_{Re} , indicando uma proporcionalidade entre $\log_{10} \Phi$ e $N_{Re}^{-0.81}$. Então:

$$\log_{10} \Phi \equiv 522 \cdot (\sigma - \sigma_c) \cdot N_{Re}^{-0.81} \quad (2.73)$$

$$(k_{L,w} \cdot a)_b [h^{-1}] = 2.45 \cdot 10^{-6} \cdot N_{Re}^{0.93} \cdot \sigma^{2.5} \cdot 3600 \quad (2.74)$$

Neste caso, σ_c é o valor de σ na interseção das Equações 2.69 e 2.74, e foi representado por:

$$\sigma_c = 1.81 \cdot N_{Re}^{-0.25} \quad (2.75)$$

As faixas de N_{Re} e σ nas quais as Equações 2.69, 2.74 e 2.75 são válidas são (Hikita e Konishi, 1984):

- $2190 < N_{Re} < 14000$;
- $0.038 < \sigma < 0.80$.

Os coeficientes de transferência de massa volumétricos para a fase líquida sob condições de borbulhamento, e corrigidos pelo fator Φ , são:

$$(k_{L,m} \cdot a)_f = (k_{L,m} \cdot a)_{f,q} \cdot \Phi \quad (2.76)$$

$$(k_{L,w} \cdot a)_f = (k_{L,w} \cdot a)_{f,q} \cdot \Phi \quad (2.77)$$

2.6.3. Correlação da viscosidade

Todos os polímeros aumentam a viscosidade do solvente no qual estão dissolvidos. Esse aumento permite, através de métodos convenientes, determinar os pesos moleculares dos polímeros. Como os métodos de determinação da viscosidade não são baseados em leis físicas rigorosas, eles devem ser ajustados com padrões que tenham distribuições de pesos moleculares bastante estreitas.

O estudo da viscosidade no processo da polimerização é importante para os balanços de massa e de energia, porque sua variação durante o processo de polimerização interfere diretamente nos coeficientes de transferência de massa pela superfície livre do líquido e pela formação de bolhas, afetando na quantidade de vapores de água e caprolactama formados, e conseqüentemente, na pressão do reator. Afeta também, nos coeficientes de transferência de calor global, e do líquido na interface com a parede do reator, durante o processo de polimerização, afetando nos balanços de energia do sistema.

A viscosidade do monômero η_m , a viscosidade específica η_{sp} , relacionada com o aumento da viscosidade do fluido devido a todas as moléculas de polímero dissolvidas, e a viscosidade relativa η_r , adimensional, que é uma relação entre a viscosidade da solução e a viscosidade do solvente, estão relacionadas através das seguintes equações:

$$\eta_m [cp] = 2.7969 \cdot 10^{-4} \cdot \exp\left(\frac{3636.364}{T[K]}\right), \text{ para } T > 473.15K \quad (2.78)$$

$$\eta_{sp} = \frac{(\eta - \eta_0)}{\eta_0}, \quad (2.79)$$

$$\eta_r = \frac{\eta}{\eta_0} \quad (2.80)$$

A viscosidade reduzida η_{red} é representada pelo aumento da viscosidade do fluido, por unidade de concentração do polímero dissolvido, c :

$$\eta_{red} = \frac{(\eta_{sp})}{c} \quad (2.81)$$

onde c é dado por:

$$c = 11,3 \cdot \mu_1 \quad \left[\frac{\text{kg de polímero}}{100 \text{ kg de mistura}} \right] \quad (2.82)$$

A viscosidade intrínseca $[\eta]$ é o limite da viscosidade reduzida quando c tende a zero, ou ainda o limite da viscosidade inerente, $\ln\left(\frac{\eta}{\eta_0}\right)$, quando a concentração da solução do polímero, c , tende a zero:

$$[\eta] = \lim_{c \rightarrow 0} \eta_{red} = \lim_{c \rightarrow 0} \frac{\eta_{sp}}{c} = \lim_{c \rightarrow 0} \frac{\ln\left(\frac{\eta}{\eta_0}\right)}{c} \quad (2.83)$$

A idéia de fazer a concentração (c) do polímero tender a zero é eliminar a interação intermolecular do polímero.

A viscosidade intrínseca da mistura reacional pode ser ainda representada pelas seguintes equações:

$$[\eta] \equiv \lim_{c \rightarrow 0} \frac{\eta_{sp}}{c} \equiv \lim_{c \rightarrow 0} \frac{\eta - \eta_m}{\eta_m} \cdot \frac{1}{c} = \left[\frac{100 \text{ kg de mistura}}{\text{kg de polímero}} \right] \quad (2.84)$$

$$[\eta] = \left(-\frac{1875}{T(K)} + 4.678 \right) \cdot \left(\frac{M_m}{5424} \right)^{0.75}$$

Para $c < \frac{21.0}{[\eta]}$, a viscosidade específica pode ser representada por:

$$\frac{\eta_{sp}}{c \cdot [\eta]} = \left(1.0 - 0.3102 \cdot c \cdot [\eta] + 0.0575 \cdot (c \cdot [\eta])^2 - 0.525 \cdot 10^{-2} \cdot (c \cdot [\eta])^3 + \right. \\ \left. + 0.2305 \cdot 10^{-3} \cdot (c \cdot [\eta])^4 - 0.3663 \cdot 10^{-5} \cdot (c \cdot [\eta])^5 \right) \quad (2.85)$$

Para $c > \frac{21.0}{[\eta]}$, tem-se:

$$\log_{10} \eta [poise] = 5 \cdot \log_{10} (C'_s \cdot M_w^{0.68}) - 12.3097 \quad (2.86)$$

Para $C'_s \cdot M_w^{0.68} > 315$ e $M_w > 5000$, e sendo C'_s a concentração do polímero na solução, têm-se:

$$\log_{10} \eta [poise] = \log_{10} (C'_s \cdot M_w) - 3.503 \quad (2.87)$$

onde:

$$C'_s = 11.3 \cdot 10^{-5} \cdot \rho \cdot \mu_1 \left[\frac{g \text{ de polímero}}{cm^3 \text{ de mistura}} \right] \quad (2.88)$$

No próximo capítulo, será apresentada uma revisão bibliográfica sobre os assuntos relacionados aos sistemas de controle aplicados aos processos de polimerização em batelada, e apresentando o problema de controle. Descreve ainda, a estratégia de controle baseada em lógica *fuzzy*.

CAPÍTULO 3

SISTEMAS DE CONTROLE

3.1. Preliminares

Os processos de polimerização em batelada e semi-batelada são largamente utilizados nas indústrias devido à sua flexibilidade operacional. O grande desafio reside em desenvolver o projeto de um sistema de controle eficiente para esse tipo de processo, uma vez que existe uma série de dificuldades envolvidas, como o comportamento não linear do processo de produção e a ausência de estado estacionário, o que impõe naturalmente trajetórias dinâmicas para as variáveis de processo, no sentido de viabilizar a obtenção de um produto com as propriedades desejadas. Devido a essas dificuldades, alguns reatores, ainda hoje, operam em malha aberta (Yabuki *et al.*, 2002).

Uma grande quantidade de nylon 6 é produzida em batelada e uma dificuldade para o controle de qualidade do produto final deste tipo de reação é que as variáveis envolvidas no processo de polimerização que deveriam ser controladas, tais como MI (*Melting Index*, índice de fluidez), resistência ao impacto, transparência e outras características físicas do produto, não podem ser medidas diretamente durante o processo de produção, uma vez que esses testes são feitos em laboratório (Vieira *et al.*, 2003).

Como o controle da temperatura durante a reação de polimerização tem uma importância muito grande devido aos efeitos que causa nas propriedades do polímero, como o peso molecular médio e a distribuição de peso molecular, diretamente relacionados com as propriedades citadas anteriormente, esta será uma das variáveis a serem controladas no processo. O problema de controle da temperatura em um reator de nylon se caracteriza por ter *setpoint* variável, fazendo com que esta variável de processo tenha que seguir uma trajetória pré-definida ao longo de toda a batelada.

Outra dificuldade relacionada a reatores de nylon é a definição de um modelo fenomenológico representativo do comportamento do processo. Estudos realizados por Joly e Pinto (2003), relatam que até a metade dos anos 80, não apenas pelas restrições computacionais, mas decisivamente pelas poucas publicações disponíveis, não era fácil construir um bom modelo fenomenológico. Até então, as informações sobre a cinética de reação do nylon 6 estavam restritas a poucos trabalhos pioneiros, como os de Ogata (1960, 1961).

Chylla e Haase. (1993) apresentam um estudo focado no controle da temperatura de um reator batelada para produzir vários produtos em escala industrial. A estratégia de controle adotada foi uma configuração cascata com algoritmo PI (Proporcional Integral) para o controlador escravo. Aplicou-se uma perturbação degrau no sistema para a determinação da curva de reação, estando o reator cheio com água. Mesmo a jaqueta tendo um comportamento integrador, uma sintonia satisfatória pode ser obtida considerando-o como um modelo de primeira ordem. A saída do controlador mestre com algoritmo PID (Proporcional Integral Derivativo) fornece o *setpoint* para o controlador escravo, e os parâmetros de sintonia para esse controlador foram escolhidos empiricamente. Os autores chegaram à conclusão de que o sistema cascata com algoritmo PID tinha deficiências no desempenho, e seria desejável que um, ou mesmo os dois controladores, fossem substituídos por controladores com um melhor algoritmo de controle. Como o objetivo daquele estudo era verificar a dinâmica da temperatura do sistema, foi usado um modelo do processo simplificado e os autores recomendam que os modelos da cinética de reação, da viscosidade e da transferência de calor, apresentados naquele trabalho, não sejam utilizados no projeto de controle avançado, por serem representações rudimentares do comportamento do sistema. Os autores comentam que os algoritmos podem ter parâmetros de sintonia para produtos específicos, mas algum guia deve ser fornecido, como a seleção dos parâmetros, quando do projeto do controlador. São permitidos ajustes automáticos em quaisquer dos parâmetros, desde que não sejam baseados em informações não disponíveis para o sistema de controle, como coeficientes de transferência de calor, ou o número de bateladas.

Clarke-Pringle e MacGregor, (1997) também pesquisaram o desempenho de um controlador de temperatura para um reator batelada para vários produtos distintos, utilizando o mesmo modelo apresentado por Chylla e Haase, (1993) para as simulações, procurando avaliar todas as dificuldades inerentes a esse tipo de processo. Eles chegaram à conclusão de que é possível obter um bom desempenho com controladores PID para sistemas onde existe apenas uma condição de operação, e que seja consistentemente repetida. Nessas circunstâncias, existe pouco incentivo para investir em estratégias de controle mais elaboradas. Para condições de produção de vários produtos em um mesmo reator batelada, os controladores PID terão um desempenho ruim, exigindo serem sintonizados freqüentemente. Nessas circunstâncias, os controladores adaptativos não lineares se mostram mais promissores.

Ozkan *et al.* (2001) pesquisaram teórica e experimentalmente a aplicação de um sistema de controle preditivo não linear baseado no algoritmo de matriz dinâmica estendido, no processo de polimerização de estireno em um reator batelada de vidro com volume de 1.1 litros, provido de jaqueta. Foi determinado o perfil ótimo para a trajetória da temperatura, com o objetivo de obter o produto com uma qualidade desejada para o polímero. Foram avaliados dois tipos de modelos para o controle da temperatura, sendo um paramétrico e outro não paramétrico. Para o modelo não paramétrico, foi obtida a curva de reação do processo para a determinação da matriz dinâmica do sistema, e para a obtenção do modelo paramétrico, foi utilizada a estrutura NARMAX (*Nonlinear Auto-Regressive Moving Average with eXogenous variable*, auto-regressiva não linear com média móvel e variável externa) para relacionar a energia térmica de entrada para a jaqueta, escolhida como variável manipulada, com a temperatura no reator. A experiência laboratorial mostrou que a temperatura pode acompanhar a trajetória definida, e o modelo não linear implementado no controlador é aceitável para as variações dos parâmetros do sistema. Os resultados das simulações também foram bons, concordando com os resultados experimentais. Pelo fato de muitos processos químicos na indústria terem naturezas não lineares, a implementação de controladores não lineares baseados em modelos nas indústrias é muito promissora, quando comparada aos controladores lineares.

Embiruçu (1996) ressalta que os resultados obtidos com controle ótimo e com procedimentos de otimização do estado estacionário são fortemente dependentes da qualidade do modelo do processo e freqüentemente têm um custo computacional muito alto, sendo estas duas importantes razões para o fraco impacto da teoria do controle ótimo sobre algumas aplicações práticas industriais. O problema é contornado pela introdução das técnicas do controle preditivo, onde o problema da otimização é continuamente reformulado pelo novo critério de desempenho (objetivos ou restrições) e do novo modelo (baseado na variável medida). O autor comenta ainda que, os controladores preditivos lineares apresentam melhores desempenho e robustez do que os controladores PID convencionais. Fez também, pesquisas sobre o controle ótimo e a otimização do estado estacionário para reatores de polimerização e constatou que essa questão está centrada em três linhas de investigação. A primeira é a seleção do ajuste do melhor estado estacionário (otimização do estado estacionário). A segunda é a seleção da melhor estratégia de controle que levará o sistema de certa condição inicial, para outra condição final especificada (controle servo ótimo), e a terceira é a seleção da melhor estratégia de controle que reduzirá os impactos negativos dos distúrbios no processo (controle regulatório ótimo). A existência de poucas pesquisas sobre a otimização do estado estacionário para reatores de polimerização, quando comparado com aquelas devotadas ao controle ótimo de tais reatores, talvez pelo fato da maioria dos processos de polimerização ainda operarem em bateladas.

Antunes *et al.* (2005) realizaram um teste experimental em um reator de vidro com volume de um litro, para operar em bateladas, e implementaram um controlador de temperatura PID-*fuzzy* para produção do metacrilato de metila (MMA, *Methyl*

MethAcrylate), com o objetivo principal de demonstrar experimentalmente a qualidade desse controlador. Foi utilizado um controlador PID-*fuzzy* híbrido, sendo o valor da saída do controlador composto por dois componentes, que são avaliados independentemente. Um deles é a parcela correspondente à saída de um controlador PI-*fuzzy* na forma de velocidade, e o outro correspondente à saída de um controlador PD-*fuzzy* na forma de posição. Além da vantagem de usar conjuntos de regras bidimensionais, ao invés de tridimensionais, a abordagem híbrida simplifica a sintonia do controlador, sendo usados quatro ganhos como fatores de escala. Foi utilizada a curva de reação do processo para se obter apropriadamente as funções de pertinência. A sintonia do controlador foi feita alterando o fator de escala da saída do controlador. Um filtro digital foi usado com sucesso para evitar o comportamento oscilatório da temperatura de reação. A manipulação da vazão de água de resfriamento, através do controlador *fuzzy*, foi suficiente para dar um comportamento suave à temperatura, principalmente, no período final do processo de batelada. Os resultados foram comparados com outros obtidos com um controlador PID convencional, e a conclusão foi que o controlador *fuzzy* se mostrou mais efetivo e confiável para esse tipo de processo, apresentando um desempenho melhor do que o controlador PID.

Altinten *et al.* (2003) estudaram o desempenho de um controlador de temperatura *fuzzy* com algoritmo genético em um processo de polimerização do estireno, utilizando um reator de 1,1 litros em vidro e com jaqueta também de vidro. A maior dificuldade encontrada no projeto desse sistema de controle *fuzzy* foi a obtenção completa e correta do conjunto de regras de controle. Por essa razão, o algoritmo genético foi utilizado *off-line* (fora de linha), por limitações na capacidade de processamento do computador, para a obtenção das funções de pertinência e da matriz de regras. Nos últimos anos, algoritmos genéticos têm se mostrado métodos eficientes e sistemáticos, e têm sido aplicados no melhor entendimento do complexo e irregular espaço das funções de pertinência, nos projetos de controladores *fuzzy* (Ng e Li, 1994). O desempenho do controlador projetado por Altinten *et al.* (2003) foi examinado experimentalmente e por meio de simulações, sendo acompanhadas variáveis, tais como conversão, peso molecular e temperatura, sendo que esta última tinha que ser controlada em um perfil ótimo ao longo do tempo (*setpoint*). Os perfis ótimos de temperatura foram determinados, para três diferentes concentrações iniciais de iniciador, de modo a produzir, com 50% de conversão, um polímero com peso molecular numérico médio de 52000 g/moles, no menor tempo possível. Estas trajetórias ótimas foram utilizadas como *setpoints* para o controlador *fuzzy*. O controlador apresentou bom desempenho e os resultados experimentais mostraram um bom acompanhamento da temperatura em relação à trajetória definida pelos *setpoints*. Foram observados um pequeno *overshoot* (sobre-sinal) e uma pequena oscilação na temperatura, sem apresentar, porém, *offset* (erro estacionário).

Nagarajan *et al.* (1998) também implementaram um controlador preditivo *fuzzy* para o controle de temperatura na produção de resinas em sistemas a batelada. Existem ainda diversas referências abordando outras estratégias de controle para reatores batelada e semi-batelada em processos de polimerização, com a utilização, por exemplo, algoritmos adaptativos lineares (Defaye *et al.*, 1993), controladores não lineares (Soroush e Kravaris, 1992; Cott e Macchietto, 1989) e controladores preditivos baseados em modelo (Inglis *et al.*, 1991). Diversas pesquisas também têm sido realizadas abordando a estimação de estados para o controle da qualidade do produto final em reatores batelada e semi-batelada, como os trabalhos de Joly e Pinto (2003), Yabuki e MacGregor (2002; 1997), Russell *et al.* (2000; 1998) e Kozub e MacGregor (1992).

3.2. O problema de controle

Conforme descrição do processo apresentado no Capítulo 2, considerando a natureza intrinsecamente transiente do processo analisado, o problema de controle consiste em conduzir o sistema reacional ao longo de cada batelada, fazendo com que variáveis auxiliares sejam monitoradas e controladas para garantir a qualidade do produto final, de modo que as trajetórias de *setpoints* da temperatura na massa reacional e da pressão na fase gasosa, apresentadas na Figura 3.1, sejam devidamente obedecidas por essas variáveis de processo. Dessa forma, tem-se um problema de controle tipicamente servo, com *setpoints* variáveis, e o atendimento a esses perfis dos *setpoints* tem importância fundamental na garantia da qualidade final do polímero produzido.

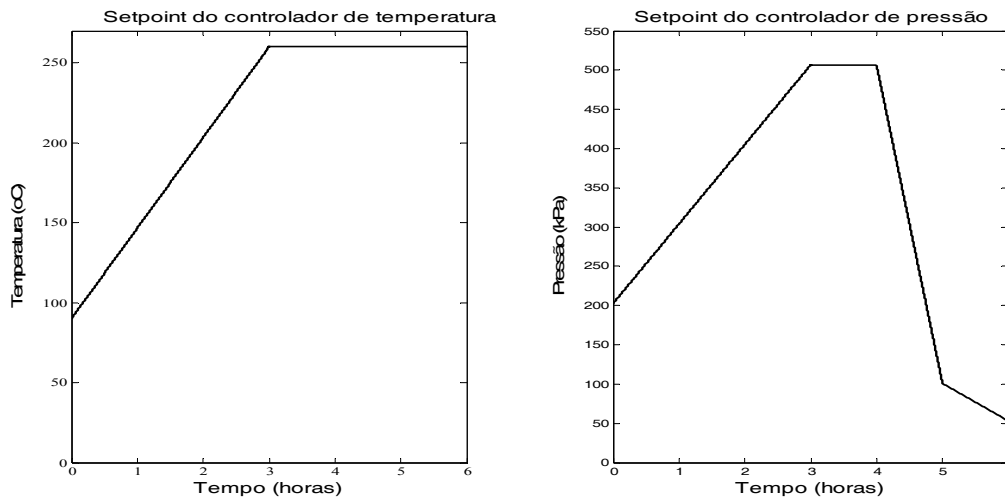


Figura 3.1. *Setpoints* dos controladores de temperatura e de pressão.

A estratégia de controle utilizando sistema de aquecimento e resfriamento oferece maior controlabilidade em relação ao atendimento da trajetória de temperatura, sobretudo no que diz respeito à rampa de aquecimento e à ocorrência de *overshoot* (sobre-sinal) no início da etapa de temperatura constante, do que o sistema utilizando apenas o aquecimento. Para cada uma dessas configurações, o sistema de controle compreendeu duas malhas de controle, sendo uma para o controle da temperatura na massa reacional, e outra, para o controle da pressão na fase vapor do reator.

No caso específico da utilização de óleo quente e óleo frio, a malha de controle da temperatura contemplou uma estratégia *split-range* (faixa dividida), com uma faixa de escala da temperatura de 40 °C a 460 °C, para uma faixa correspondente do sinal na saída do controlador de 4 a 20 mA, operando duas válvulas de controle para manipular as vazões de óleo quente e óleo frio. Este sinal é dividido em duas faixas de trabalho. Uma faixa de 4 a 12 mA, destinada para o posicionador da válvula de controle de resfriamento, que está calibrado para enviar um sinal de saída proporcional de pressão de 0.2 a 1.0 kgf/cm² para o atuador da válvula de controle, proporcionando uma abertura da válvula de 0 a 100%. A outra faixa de saída do controlador é de 12 a 20 mA, e é destinada ao posicionador da válvula de aquecimento, que envia uma saída proporcional de pressão de 0.2 a 1.0 kgf/cm² para o atuador dessa válvula, proporcionando uma abertura de válvula de 0 a 100%.

A malha de controle da pressão no reator, através da respectiva válvula de controle, manipula a vazão de retirada de vapor, reduzindo a pressão sempre que esta estiver acima do valor desejado. Para uma faixa (*range*) de escala de pressão de 0 a 10 kgf/cm², a saída do sinal do controlador correspondente será de 4 a 20 mA, e este sinal será enviado para o posicionador da válvula de controle. Para essa faixa do sinal de entrada, o posicionador foi calibrado para enviar um sinal de saída correspondente entre 0.2 a 1.0 kgf/cm² para o

atuador da válvula de controle, proporcionando uma abertura de válvula de 0 a 100% (figura 3.2).

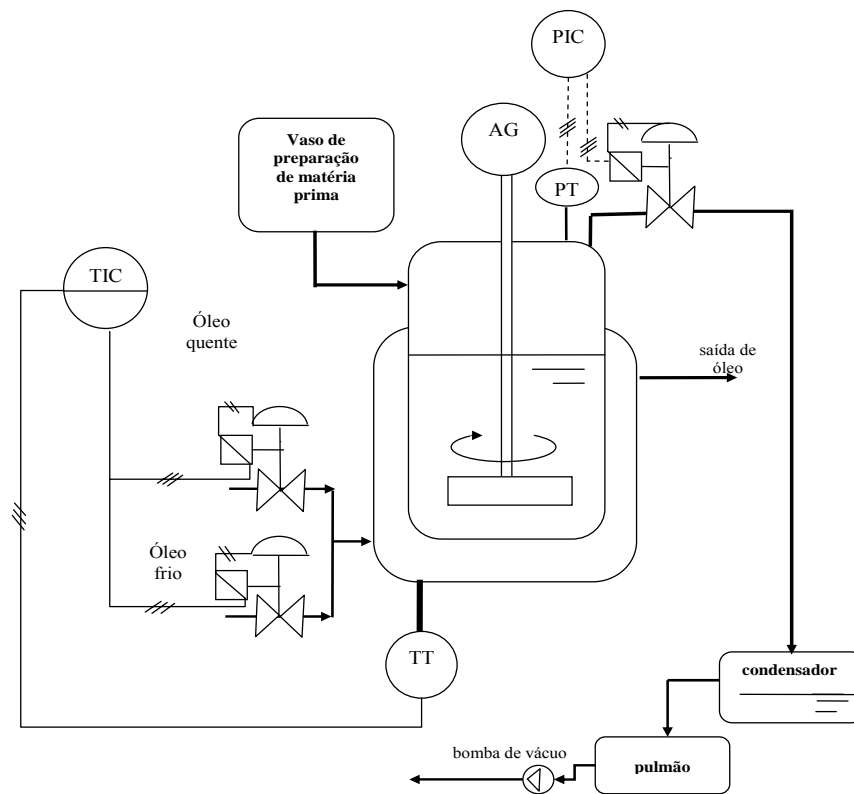


Figura 3.2. Controladores de temperatura (*split-range*), e de pressão, operando com sistema de aquecimento e resfriamento

A Figura 3.3 apresenta o sistema de polimerização para o caso particular do reator operando somente com aquecimento, tipo de configuração utilizado por algumas indústrias para o controle da temperatura no reator, como mencionado anteriormente.

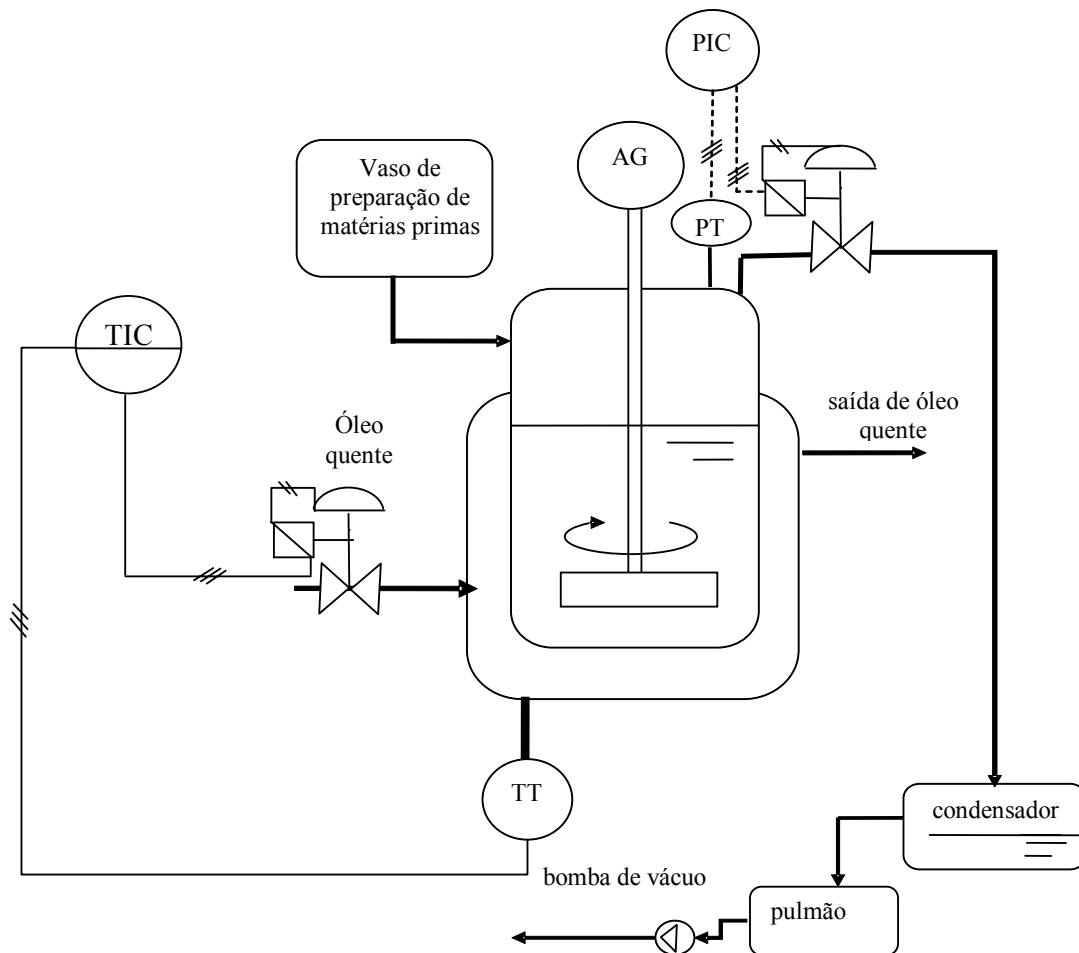


Figura 3.3. Controladores de temperatura e pressão, operando apenas com o sistema de aquecimento.

Foram analisadas e comparadas duas estratégias de controle para cada uma das configurações, quais sejam: controle PID e controle PI baseado em lógica *fuzzy* (PI-*fuzzy*). Em ambos os casos, os parâmetros de sintonia dos controladores foram obtidos através de procedimentos de sintonia ótima, que consistem na resolução de um problema de otimização para minimizar os desvios entre as variáveis controladas e as respectivas trajetórias dos *setpoints*.

3.3. Controladores convencionais com algoritmo PID

Mais de 90% das malhas de controle existentes nas indústrias são do tipo PID. Nesses controladores, o sinal de saída do controlador $u(t)$ é composto por três parcelas: a ação proporcional, a ação derivativa e a ação integral, sendo representado matematicamente por:

$$u(t) = bias + K_c \cdot \left[e(t) + \frac{1}{T_i} \cdot \int e(t) \cdot dt + T_d \cdot \frac{de(t)}{dt} \right] \quad (3.1)$$

onde a ação proporcional contribui com um sinal na saída do controlador proporcional ao erro $e(t)$ entre o *setpoint* e a variável controlada. Quanto maior o ganho proporcional K_c , maior o sinal de correção na saída do controlador para um mesmo valor do erro, mas essa ação nem sempre elimina o *offset*.

A ação integral é representada pelo segundo termo da expressão entre colchetes da Equação 3.1, e tem a capacidade de eliminar o *offset*, pois, enquanto existir o erro, o sinal na saída do controlador continuará aumentando devido a essa ação, até que o erro $e(t)$ seja eliminado.

A ação derivativa, representada na Equação 3.1 pelo terceiro termo da expressão entre colchetes, tem a função de antecipar a ação de controle.

O algoritmo PID também pode ser colocado na forma discretizada, e, para isso, é necessário fazer algumas aproximações. Assim, para a ação derivativa:

$$\frac{de(t)}{dt} \approx \frac{e_{(t)} - e_{(t-T)}}{T} \quad (3.2)$$

onde T é o período de amostragem. Para a ação integral a seguinte aproximação pode ser feita:

$$\int_0^t e(\tau) \cdot d\tau \approx T \cdot \sum_{n=0}^k e_{(nT)} \quad (3.3)$$

Desta forma, a equação do sinal na saída do controlador na forma discretizada pode ser representada por:

$$c_{(kT)} = K_c \cdot E_{(kT)} + \frac{K_c \cdot T}{T_i} \cdot \sum_{n=0}^k E_{(nT)} + \frac{K_c \cdot T_d}{T} \cdot [E_{(kT)} - E_{((k-1)T)}] \quad (3.4)$$

Simplificando, a equação final para o PID na forma discreta fica:

$$c_{(k)} = K_c \cdot E_{(k)} + \frac{K_c \cdot T}{T_i} \cdot \sum_{n=0}^k E_{(n)} + \frac{K_c \cdot T_d}{T} \cdot [E_{(k)} - E_{(k-1)}] \quad (3.5)$$

3.4. Controladores baseados em lógica *fuzzy*

As redes neurais artificiais e lógica *fuzzy* são dois dos principais desenvolvimentos metodológicos relacionados ao que se convencionou chamar de controle inteligente. As redes neurais artificiais representam a abordagem conexionista da inteligência artificial enquanto a lógica *fuzzy* faz parte da abordagem cognitiva.

A lógica *fuzzy* foi introduzida primeiramente por Zadeh (1965) como forma de controlar e processar informações vagas e lingüísticas. Ele raciocinou que técnicas quantitativas convencionais de análise de sistemas são intrinsecamente inadequadas para lidar com sistemas humanísticos, e as formulou no princípio da incompatibilidade: “Quando a complexidade do sistema aumenta, nossa habilidade para fazer afirmações precisas sobre seu comportamento diminui, até que um limite é alcançado, além do qual a precisão e a significância (ou relevância) têm características quase mutuamente exclusivas” (Brown e Harris, 1994).

A propriedade dos controladores inteligentes, especialmente os controladores *fuzzy*, é de serem baseados em experiências práticas e nos padrões de raciocínio, e não em modelos matemáticos. Enquanto o controle convencional se apóia no conhecimento das equações diferenciais representativas do comportamento dinâmico do sistema, o controle *fuzzy* utiliza regras lógicas no algoritmo de controle, com a intenção de descrever numa rotina a experiência humana, intuitiva e heurística, para controlar um processo. Controle *fuzzy* tem sido utilizado em aplicações que vão do controle de eletrodomésticos ao controle de satélites, do mercado financeiro à medicina, e tende a crescer cada vez mais, sobretudo em sistemas híbridos, que incorporam abordagens conexionistas e evolutivas, no que é chamado hoje em dia de *soft computing* (computação avançada). A lógica *fuzzy* é uma das tecnologias atuais bem sucedidas para o desenvolvimento de sistemas para controlar processos sofisticados. O poder do método heurístico está na sua habilidade de possibilitar a construção de funções relacionando entradas e saídas, e representá-las por um conjunto de regras lingüísticas, de acordo com uma experiência prévia, e estratégias já frequentemente utilizadas.

Um controlador *fuzzy* a base de regras, faz um mapeamento das entradas para as saídas do sistema *fuzzy*, e é caracterizado por um conjunto de regras do tipo (condição --> consequência), ou na forma *modus ponens* (se – então).

SE <condição> ENTÃO <consequência>

Normalmente, as entradas do sistema *fuzzy* são associadas com as premissas, e as saídas com os consequentes.

Para uma forma MISO de regra lingüística, tem-se:

$$\text{Se } \tilde{u}_1 \text{ é } \tilde{A}_1 \text{ e } \tilde{u}_2 \text{ é } \tilde{A}_2 \text{ e } \tilde{u}_n \text{ é } \tilde{A}_n, \text{ então } \tilde{y}_q \text{ é } \tilde{B}_q$$

As variáveis lingüísticas, representadas por \tilde{u}_i , são usadas para descrever as entradas u_i , $i=1,2,\dots$, e \tilde{y}_q para descrever as saídas y_q , variáveis *crisp* (números reais), para $q=1,2,\dots$ e $p=1,2,\dots,M_i$ (Passino e Yurkovich, 1998). \tilde{A}_i^j e \tilde{B}_q^p serão definidos no item 3.4.1.

Assim, as ações de controle são definidas em função das diversas faixas de valores que as variáveis de estado do problema podem assumir. Estas faixas (usualmente mal definidas) de valores são modeladas por conjuntos *fuzzy*, denominados de variáveis

lingüísticas (Sandri e Correa, 1999). Isso pode ser feito sempre, mesmo diante da complexidade de obtenção de um modelo matemático.

Na abordagem *fuzzy*, uma função real de relação entre a entrada e a saída é aproximada por seções que cobrem regiões da função. Em vez de especificar um valor exato de um ponto na função de entrada *versus* saída, a seção indica um conjunto de valores plausíveis, e quanto maior for a cobertura da região, mais incerta, ou seja, mais *fuzzy* se torna um valor nesse conjunto para representar um ponto real. Cada uma dessas regiões é expressa por uma regra. Da mesma forma, quanto menos incertas (*fuzzy*) forem as regras, menores serão as regiões. Se as regras contivessem números reais em vez de conjuntos *fuzzy*, elas se tornariam pontos (Shaw e Simões, 1999).

Os principais elementos que compõem um controlador baseado na lógica *fuzzy* são: *fuzzificação*, base de conhecimentos, conjunto de regras, e *defuzzificação*.

3.4.1. Fuzzificação

Para a descrição do processo de *fuzzificação* é necessário definir inicialmente, o universo de discurso, a variável lingüística e a função de pertinência.

Os universos de discurso das variáveis de estado u_i de entrada, e y_q de saída, assumem valores sobre os universos de discurso U_i e Y_q , respectivamente, contendo todos os valores possíveis que elas podem assumir.

As variáveis lingüísticas, representadas por \tilde{u}_i e \tilde{y}_q , são as descrições simbólicas que descrevem as entradas u_i e as saídas y_q do sistema *fuzzy*, sendo representadas pelas respectivas funções de pertinência, então, logo que u_i e y_q assumem valores sobre o universo de discurso U_i e Y_q , respectivamente, as variáveis lingüísticas assumem valores lingüísticos, que são usados para descrever características dessas variáveis.

\tilde{A}_i^j representa então, o valor lingüístico “ j ”, da variável lingüística de entrada \tilde{u}_i , definido sobre o universo de discurso U_i . Se existirem vários valores lingüísticos definidos sobre U_i , então, a variável lingüística \tilde{u}_i assume elementos do conjunto de valores lingüísticos representados por $\tilde{A}_i = \left\{ \tilde{A}_i^j : j = 1, 2, \dots, N_i \right\}$, e \tilde{B}_q^p representa o valor lingüístico “ p ”, da variável lingüística de saída \tilde{y}_q , definido no universo de discurso Y_q .

A variável lingüística de saída \tilde{y}_q se baseia no conjunto de valores lingüísticos representados por:

$$\tilde{B}_q = \left\{ \tilde{B}_q^p : p = 1, 2, \dots, M_i \right\}$$

Valores lingüísticos são geralmente descritos por termos como “positivo grande”, “zero”, e “negativo grande”. Por exemplo, se assumimos que \tilde{u}_1 representa a variável lingüística velocidade, então, o índice subscrito 1 de \tilde{A}_1^j representando, p.ex., o erro, o índice sobrescrito “ j ” representará o valor lingüístico da variável lingüística erro, p.ex.:

- $j = 1$ \tilde{A}_1^1 erro pequeno

- $j = 2$ \tilde{A}_1^2 erro médio
- $j = 3$ \tilde{A}_1^3 erro grande

Então, \tilde{u}_1 tem valores provenientes de $\tilde{A}_1 = \left\{ \tilde{A}_1^1, \tilde{A}_1^2, \tilde{A}_1^3 \right\}$ (Passino e Yurkovich, 1998).

Dada a variável lingüística \tilde{u}_i , com o valor lingüístico \tilde{A}_i^j , definido no universo de discurso U_i , e a função de pertinência $\mu_{A_i^j}(u_i)$ (função de pertinência associada com o conjunto *fuzzy* A_i^j) que mapeia U_i entre $[0,1]$, o conjunto *fuzzy* denominado A_i^j é definido como $A_i^j = \{(u_i, \mu_{A_i^j}(u_i)) : u_i \in U_i\}$. Esse conjunto *fuzzy* é simplesmente um conjunto *crisp* de pares de elementos do universo de discurso acoplados com seus valores de pertinência associados, então, seja A para caracterizar o conjunto *fuzzy* (Passino e Yurkovich, 1998).

Esse conjunto *fuzzy* A é definido por uma função de pertinência $\mu_{A_i^j}(u_i) : U \rightarrow [0,1]$. Essa função associa a cada elemento de u_i pertencente a U , o grau $\mu_{A_i^j}(u_i)$, com o qual u_i pertence a A . A função de pertinência $\mu_{A_i^j}(u_i)$ indica o grau de compatibilidade entre u_i e o conceito expresso por A :

- $\mu_{A_i^j}(u_i) = 1$ indica que u_i é completamente compatível com A ;
- $\mu_{A_i^j}(u_i) = 0$ indica que u_i é completamente incompatível com A ;
- $0 < \mu_{A_i^j}(u_i) < 1$ indica que u_i é parcialmente compatível com A , com grau $\mu_{A_i^j}(u_i)$ (Sandri e Correa, 1999).

Fuzzificação, então, é um processo que converte as entradas, frequentemente grandezas contínuas no domínio dos números reais e representadas pelo valor u_i , provenientes de sensores, em valores discretos $\mu_{A_i^j}(u_i)$, para cada valor de u_i .

Um número muito grande de valores lingüísticos (funções de pertinência) sobrecarrega o sistema, pelo fato de necessitar de um número maior de regras a serem definidas e executadas. Por outro lado, este excesso de valores lingüísticos possibilita um ajuste mais fino nas ações de controle. Normalmente, a escolha do número de valores lingüísticos é feita de forma heurística. A grande maioria dos controladores *fuzzy*, na prática, utiliza entre 3 e 12 valores lingüísticos (Campos e Saito, 2004).

3.4.2. Base de conhecimento

A base de conhecimento possui as informações a respeito dos universos de discurso, dos valores lingüísticos e das funções de pertinência de todas as variáveis do sistema. Ela contém também as regras de produção que associam as variáveis lingüísticas de entrada com as de saída. Pode-se dizer que a base de conhecimento de um controlador *fuzzy* é o “cérebro” do sistema, onde está localizada a inteligência do mesmo (Campos e Saito, 2004).

3.4.3. Procedimento de inferência ou raciocínio *fuzzy*

A etapa de raciocínio *fuzzy* consiste em utilizar as regras de controle e a base de dados, na presença das variáveis de entrada medidas no processo, satisfazendo parcialmente as condições de utilização das regras (ou os antecedentes das regras), inferindo as ações de controle de acordo com o estado do sistema, aplicando o operador de implicação, conforme o procedimento de inferência adotado.

Sandri e Correa (1999) comentam que, em um dado controlador *fuzzy*, é importante que existam tantas regras quantas forem necessárias para mapear totalmente as combinações dos termos das variáveis. As premissas são relacionadas pelos conectivos lógicos, dados pelo operador de conjunção (*e*) e pelo operador de disjunção (*ou*). Em geral, as regras têm a forma de um sistema de múltiplas entradas e múltiplas saídas (MIMO, *Multi Input-Multi Output*), mas podem se converter em vários sistemas com múltiplas entradas e uma saída (MISO, *Multi Input-Single Output*). Por exemplo, a regra MIMO abaixo, e representadas por duas saídas:

$$\text{Se } \tilde{u}_1 \text{ é } \tilde{A}_1 \text{ e } \tilde{u}_2 \text{ é } \tilde{A}_2 \text{ e } \tilde{u}_n \text{ é } \tilde{A}_n$$

então

$$\tilde{y}_1 \text{ é } \tilde{B}_1 \text{ e } \tilde{y}_2 \text{ é } \tilde{B}_2$$

é equivalente a duas regras MISO do tipo:

$$\text{Se } \tilde{u}_1 \text{ é } \tilde{A}_1 \text{ e } \tilde{u}_2 \text{ é } \tilde{A}_2 \text{ e } \tilde{u}_n \text{ é } \tilde{A}_n \text{ então } \tilde{y}_1 \text{ é } \tilde{B}_1$$

$$\text{Se } \tilde{u}_1 \text{ é } \tilde{A}_1 \text{ e } \tilde{u}_2 \text{ é } \tilde{A}_2 \text{ e } \tilde{u}_n \text{ é } \tilde{A}_n \text{ então } \tilde{y}_2 \text{ é } \tilde{B}_2$$

3.4.4. Defuzzificação

Existem várias estratégias de *defuzzificação*, e neste trabalho, foi aplicado o método COA (center of area), centro da área, ou centróide.

Após a avaliação em paralelo de todas as regras, o resultado final é representado por um único valor real y_q^{crisp} , um número real, que é o centro da área das contribuições de todos os conseqüentes do conjunto de regras, denominado de centróide. Então, seu valor pode ser representado por:

$$y_q^{crisp} = \frac{\int_{y_q} y_q \cdot \mu_{B_q}^{\wedge}(y_q) \cdot dy_q}{\int_{y_q} \mu_{B_q}^{\wedge}(y_q) \cdot dy_q} \quad (3.6)$$

sendo $\int_{y_q} \mu_{B_q}^{\wedge}(y_q) \cdot dy_q$ a área sob $\mu_{B_q}^{\wedge}(y_q)$ (função de pertinência associada com o conjunto *fuzzy* B_q), tal que $\int_{y_q} \mu_{B_q}^{\wedge}(y_q) \cdot dy_q \neq 0$ para todas as entradas $u_i \in U_i$, onde $i = 1, 2, \dots, m$ (Passino e Yurkovich, 1998).

Dentre as alternativas de implementação de uma estratégia de controle *fuzzy*, podem-se destacar as seguintes abordagens:

- **Controle *fuzzy* baseado em regras**

Compreende a efetiva implementação de um sistema de inferência *fuzzy* com o objetivo específico de controle. Ou seja, regras lingüísticas são disparadas de modo paralelo e o conseqüente de cada regra contribuirá para a ação de controle. Dentre os mecanismos de inferência, destacam-se os modelos de Mamdani e os de interpolação de Takagi-Sugeno e Tsukamoto. A principal característica desta abordagem de controle *fuzzy* compreende a necessidade de um bom conhecimento da heurística do processo ou das relações entre as variáveis manipuladas e controladas, no sentido de se estabelecer um conjunto de regras que atendam aos objetivos do controle. Este

conhecimento, muitas vezes, pode ser obtido através de entrevistas com os próprios operadores que detêm estas informações de forma subjetiva, muitas vezes não efetivamente quantificadas;

- **Controle PID-*fuzzy***

As regras que definem o modelo deste controlador estão diretamente associadas ao controle PID, mais especificamente ao PID na forma discreta. Ou seja, esta abordagem de controle *fuzzy* compreende a tentativa de expressar linguisticamente as relações intrínsecas estabelecidas pela lógica do PID entre o erro, a variação do erro e a correspondente ação de controle que deve ser aplicada sobre o processo. A vantagem desta estratégia de controle *fuzzy* reside no fato de existir um padrão pré-definido para a construção das regras, na medida em que os antecedentes compreendem o erro, a variação do erro, ou mesmo, a variação da variação do erro, e o conseqüente compreende a variação da ação de controle. Este padrão facilita a construção das regras do modelo de inferência *fuzzy*, sendo fundamental o conhecimento do efeito de cada variável manipulada sobre a respectiva variável controlada.

Com relação à segunda alternativa de controle *fuzzy*, pode-se destacar ainda as seguintes opções de construção das regras de inferência baseadas e derivadas exclusivamente das equações do algoritmo PID digital:

- **Controlador proporcional *fuzzy*;**
- **Controlador PI *fuzzy*;**
- **Controlador PID *fuzzy*.**

O controlador proporcional *fuzzy* tem esse nome devido à correspondência direta com o controlador proporcional convencional, representado matematicamente na forma discreta por $C_{(k)} = K_c \cdot E_{(k)}$. Desta forma, o controlador *fuzzy* correspondente é representado por uma regra na forma *modus ponens*:

$$\textit{Se erro} = E_i, \textit{então, ação de controle} = C_i$$

sendo E_i e C_i representados por funções de pertinência (variáveis linguísticas). A Figura 3.4 ilustra a representação esquemática.

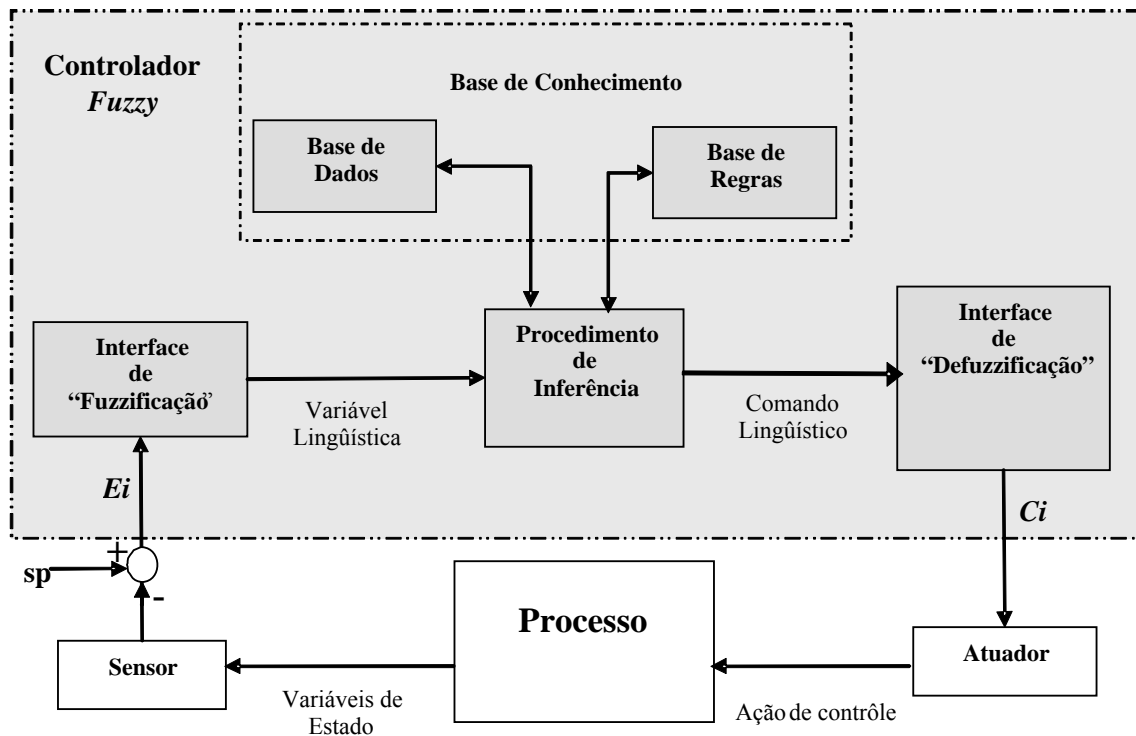


Figura 3.4. Estrutura de um controlador *fuzzy* proporcional.

Existem outras formas de controladores PID *fuzzy* com mais de uma variável lingüística de entrada e que oferecem um desempenho superior, devido à possibilidade de inserção de ações de outra natureza. Como mostram as equações em seguida, o controlador PI *fuzzy* é derivado diretamente do controlador PI digital, na forma do algoritmo de velocidade, e possui como antecedentes de cada regra o erro (E_i) e a variação do erro (ΔE_i), e como saída a variação na ação de controle (ΔC_i). Para o instante k , tem-se:

$$C_{(k)} = K_c \cdot E_{(k)} + \frac{T \cdot K_c}{\tau_I} \cdot \sum_{n=0}^k E_{(n)} \quad (3.7)$$

Para o instante $k-1$, tem-se:

$$C_{(k-1)} = K_c \cdot E_{(k-1)} + \frac{T \cdot K_c}{\tau_I} \cdot \sum_{n=0}^{k-1} E_{(n)} \quad (3.8)$$

Então, a variação da ação de controle na saída do controlador é representada por:

$$C_{(k)} - C_{(k-1)} = K_c \cdot [E_{(k)} - E_{(k-1)}] + \frac{T \cdot K_c}{\tau_I} \cdot E_{(k)} \quad (3.9)$$

ou

$$\Delta C_{(k)} = K_c \cdot \Delta E_{(k)} + \frac{T \cdot K_c}{\tau_I} \cdot E_{(k)} \quad (3.10)$$

O controlador *fuzzy* correspondente compreende a seguinte regra genérica:

Se erro = E_i e variação do erro = ΔE_i ; então, variação na ação de controle = ΔC_i

A representação esquemática do controle PI-fuzzy está ilustrada na Figura 3.5.

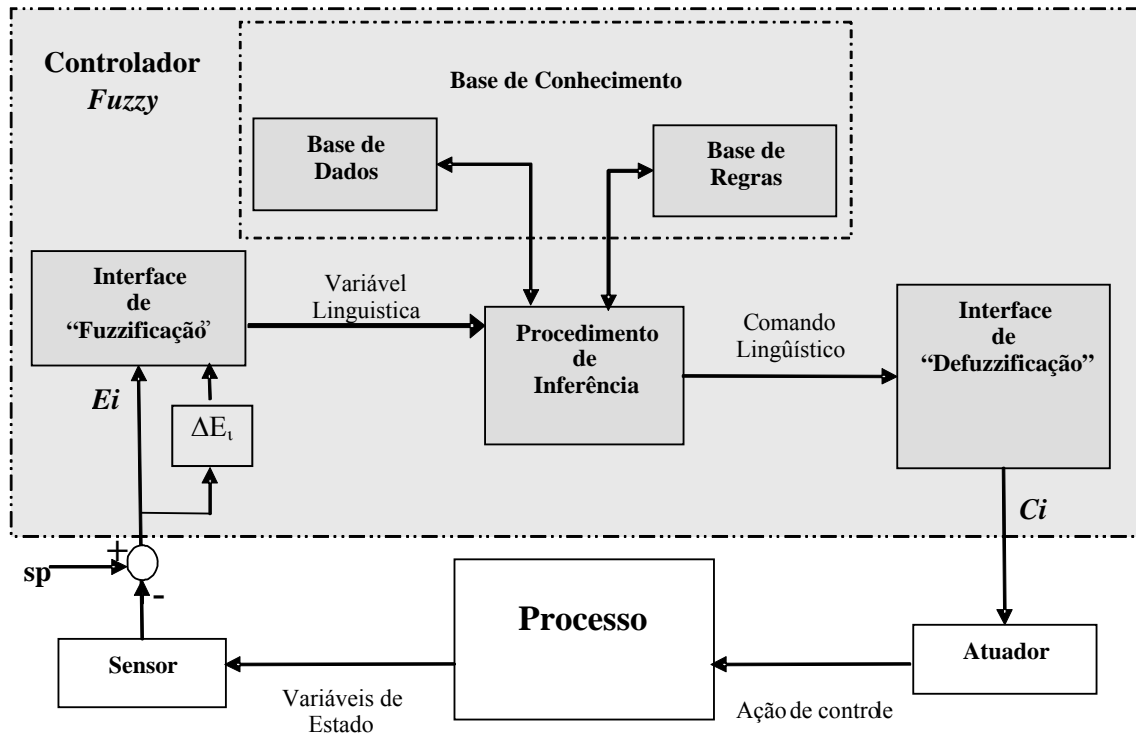


Figura 3.5. Estrutura de um controlador *fuzzy* PI.

Analogamente, uma terceira alternativa compreenderia a definição de regras com base no controlador PID digital cuja representação para o instante k é:

$$c_{(k)} = K_c \cdot E_{(k)} + \frac{T \cdot K_c}{\tau_I} \cdot \sum_{n=0}^k E_{(n)} + \frac{K_c \cdot \tau_D}{T} \cdot [E_{(k)} - E_{(k-1)}] \quad (3.11)$$

e para o instante anterior $k-1$ é:

$$c_{(k-1)} = K_c \cdot E_{(k-1)} + \frac{T \cdot K_c}{\tau_I} \cdot \sum_{n=0}^{k-1} E_{(n)} + \frac{K_c \cdot \tau_D}{T} \cdot [E_{(k-1)} - E_{(k-2)}] \quad (3.12)$$

Então, a variação na ação de controle é dada por:

$$c_{(k)} - c_{(k-1)} = K_c \cdot \Delta E_{(k)} + \frac{T \cdot K_c}{\tau_I} \cdot E_{(k)} + \frac{K_c \cdot \tau_D}{T} \cdot [\Delta E_{(k)} - \Delta E_{(k-1)}] \quad (3.13)$$

ou

$$\Delta c_{(k)} = K_c \cdot \Delta E_{(k)} + \frac{T \cdot K_c}{\tau_I} \cdot E_{(k)} + \frac{K_c \cdot \tau_D}{T} \cdot [\Delta^2 E_{(k)}] \quad (3.14)$$

O controlador *fuzzy* (PID-fuzzy) correspondente compreende a seguinte regra genérica:

Se erro = E_i e variação do erro = ΔE_i , e variação da variação do erro = $\Delta^2 E_i$, então, variação da ação de controle = ΔC_i

sendo E_i , ΔE_i , $\Delta^2 E_i$ e ΔC_i representadas pelas funções de pertinência (variáveis lingüísticas).

3.4.5. Configuração das malhas de controle e sintonia

Para o sistema de controle da temperatura na massa reacional do reator utilizando o sistema de aquecimento e resfriamento, foram escolhidas como variáveis manipuladas as vazões de óleo quente e óleo frio. Para o sistema de controle da temperatura utilizando apenas o sistema de aquecimento, a variável manipulada selecionada foi a vazão de óleo quente. Para o sistema de controle da pressão na fase gasosa do reator, a variável manipulada foi a vazão de retirada de vapor (caprolactama e água) do reator.

Adotou-se um procedimento de sintonia ótima para a determinação dos melhores parâmetros de ajuste dos controladores PID e também para os controladores PI-*fuzzy*. Este procedimento consiste na minimização dos quadrados dos erros ao longo da trajetória de *setpoint* de cada uma das variáveis controladas.

As técnicas de sintonia disponíveis na literatura, em geral, não são desenvolvidas para processos não lineares, ou não levam em conta os erros de identificação, e as diversas formas de perturbações existentes em um processo. Desta forma, os parâmetros de sintonia obtidos por estas técnicas não são flexíveis, aplicando-se a um número limitado de situações. A maioria dos métodos de sintonia reduz a caracterização do processo a alguns poucos tipos simples de modelos. Esse procedimento, normalmente feito para facilitar a etapa de identificação e viabilizar a obtenção de expressões analíticas, impossibilita a utilização de modelos mais sofisticados, o que resulta, dentre outros, em uma sintonia deficiente para muitos processos, ou não leva à melhor sintonia possível para uma determinada malha, tornando a aplicação dessas técnicas limitada.

De modo genérico, o método da sintonia ótima tem por finalidade determinar os valores dos parâmetros do controlador (*fuzzy* ou PID convencional) que otimizem um determinado critério (Alfano e Embiruçu, 2002), de tal forma que este critério seja uma função destes parâmetros de sintonia.

Como este trabalho contempla dois estudos de caso, o primeiro em que o reator dispõe de um sistema para aquecimento e resfriamento, e o segundo em que apenas o sistema de aquecimento está disponível, os parâmetros de sintonia escolhidos para o controlador convencional de temperatura, para os dois casos, foram o ganho proporcional, o tempo integral e o tempo derivativo, e, para o controlador convencional de pressão, apenas o ganho proporcional.

Para os controladores PI-*fuzzy* de temperatura, os parâmetros das funções de pertinência que foram otimizados para o estudo de caso com aquecimento e resfriamento estão descritos no item 4.3.3, e para o caso em que apenas o sistema de aquecimento está disponível, foram otimizados os fatores de escala da variação do erro e da variação na ação de controle, além dos parâmetros das funções de pertinência, conforme apresentados na tabela 4.12, e descritos no item 4.3.4.

Como os desempenhos dos controladores de pressão PI-*fuzzy* sintonizados com parâmetros das funções de pertinência e fatores de escala determinados heurísticamente foram bons, conseguindo fazer com que a pressão acompanhasse a trajetória do *setpoint* com pequenos *overshoot* e *offset*, conforme mostrado na figura 4.34 (com sistema de aquecimento e resfriamento) e na figura 4.46 (apenas aquecimento), não houve necessidade de se proceder com a otimização para esse controlador de pressão PI-*fuzzy*.

Os fatores de escala para as variáveis lingüísticas de entrada e saída dos controladores de temperatura e pressão PI-*fuzzy*, foram determinados por simulação. Inicialmente, foi feita uma simulação do modelo fenomenológico implementado com controladores convencionais PID de temperatura e pressão, criando-se vetores dos erros para

as duas malhas de controle, caracterizados pelas diferenças entre os valores das trajetórias dos *setpoints* e os valores das variáveis controladas ao longo do processo de produção, verificando os valores máximos e mínimos desses vetores. Os maiores valores em módulo de cada um dos vetores foram arredondados para cima, e serviram como fatores de escala dos universos de discurso das variáveis lingüísticas “erro”, para os controladores de temperatura e pressão *PI-fuzzy*.

Para a determinação dos fatores de escala das variações dos erros, foram criados vetores dos erros no instante atual, menos os erros no instante imediatamente anterior, verificando-se os maiores valores em módulo dos componentes desses vetores, e arredondando para cima. Esses valores foram adotados como fatores de escala dos universos de discurso das variáveis lingüísticas “variação do erro” dos respectivos controladores *PI-fuzzy* de temperatura e pressão.

Finalmente, para os fatores de escala das variações nas ações de controle, foram criados vetores dos valores das ações de controle dos controladores no instante atual, menos os valores dessas ações no instante imediatamente anterior, e adotando-se os valores máximos em módulo dos valores desses vetores, como fatores de escala para os universos de discurso das variações nas ações de controle dos controladores *PI-fuzzy* de temperatura e pressão.

As funções objetivo do procedimento de otimização dos parâmetros de sintonia para essas duas estratégias de controle considerou a minimização das somas dos quadrados dos erros ao longo das trajetórias dos *setpoints* dos controladores de temperatura e de pressão (expressões 3.15 e 3.16), e são representadas matematicamente por:

$$\min_{Pi} \sum (T_{set} - T)^2 \quad (3.15)$$

$$\min_{Pi} \sum (P_{set} - P)^2 \quad (3.16)$$

Serão apresentados no próximo capítulo, os resultados comparativos das simulações em malha fechada, usando as estratégias de controle convencional PID, e *PI-fuzzy*, discutindo os métodos de sintonia aplicados em cada caso, ou seja, com sistema de aquecimento e resfriamento, e apenas com sistema de aquecimento.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1. Introdução

Neste capítulo são analisados e comparados os desempenhos de duas estratégias de controle, quais sejam, controle convencional utilizando o algoritmo PID (Proporcional Integral Derivativo) e o controle PI (Proporcional Integral) baseado em lógica *fuzzy*, ambas aplicadas ao mesmo objeto de estudo, compreendendo o reator semi-batelada para produção do nylon 6, apresentado e discutido nos capítulos anteriores.

Os resultados obtidos foram avaliados com base nos desvios em relação às trajetórias de *setpoint* (valor de referência) de temperatura e pressão, ocorrência de sobrelevação (*overshoot*) e eliminação de *offset* (desvio estacionário), principalmente no patamar final de temperatura (Figura 3.1, Capítulo 3). As simulações em malha fechada foram realizadas com a utilização do modelo fenomenológico apresentado no Capítulo 2.

4.2. Projeto dos controladores convencionais com algoritmo PID

Para poder avaliar o desempenho dos controladores PI-*fuzzy* de temperatura e pressão, também foi aplicado o método de sintonia ótima para os controladores convencionais PID, que serviram de parâmetro de comparação.

Para a determinação da estimativa inicial de cada um dos parâmetros desses controladores, necessários para a aplicação do método de sintonia ótima, foram utilizados métodos clássicos de sintonia. Este procedimento foi necessário para acelerar o processo de convergência, contribuindo significativamente para a redução do tempo computacional e para a eficácia do método de otimização.

Adotando parâmetros fixados heurísticamente para as estimativas iniciais, o método de sintonia ótima não convergiu após mais de dez dias de processamento. Ainda assim, com os parâmetros de sintonia determinados através de métodos clássicos sendo adotados como estimativas iniciais, o método necessitou mais de cinco dias para convergir.

Essa redução foi motivada pelo fato do programa necessitar de aproximadamente 15 minutos para proceder a uma simulação completa do modelo fenomenológico, considerando a corrida de produção de 6 horas. Então, para cada simulação, iniciando o processo com os parâmetros definidos para a estimativa inicial, o procedimento de sintonia ótima processa uma simulação completa do modelo, observando se as metas das funções objetivos de minimização foram atingidas, caso contrário, o método assume novos valores para os parâmetros de sintonia dos controladores, e simula o modelo iterativamente, até que os objetivos de minimização sejam alcançados. Na maioria das vezes, o número de iterações foi superior a 460, para o programa encontrar a solução. Então, a depender das estimativas iniciais adotadas, o procedimento poderá necessitar bem mais de 460 iterações mencionadas anteriormente.

Considerando que a transferência de energia entre óleo quente, camisa e massa reacional contribui para uma dinâmica lenta da temperatura, foi adotado, neste caso, o algoritmo PID. O controle da pressão, através da manipulação da retirada da vazão de monômero e de água presentes na fase vapor do reator, caracteriza-se por ter uma dinâmica muito mais rápida. Nesse caso, tanto o algoritmo P como o algoritmo PI são bastante satisfatórios (Stephanopoulos, 1984). Neste trabalho, dada a natureza integradora desta variável, foi adotada apenas a ação proporcional.

Para a aplicação dos métodos clássicos de sintonia, um modelo linear do processo tem que estar disponível. Então, tendo o modelo fenomenológico do processo, e com o propósito de obter um modelo linear, foi utilizado o método de identificação através da determinação da curva de reação do processo em malha aberta, conforme será discutido no item 4.2.1.

4.2.1. Métodos clássicos de sintonia aplicados ao controlador PID de temperatura

4.2.1.1. Identificação do modelo reduzido do processo para o sistema de controle da temperatura

Conforme descrito anteriormente, o objetivo principal deste trabalho foi o de analisar e comparar os desempenhos dos controladores convencionais PID e PI-*fuzzy*, com os parâmetros de sintonia obtidos por um procedimento de sintonia ótima. Para os controladores PID convencional, foram aplicados métodos clássicos de sintonia de Cohen-Coon e ITAE (*Integral of Time-weighted Absolute Error*) integral absoluta do erro ponderado pelo tempo) (Almeida e Embiruçu, 2000), para encontrar os melhores valores para a estimativa inicial de cada um dos parâmetros.

A metodologia escolhida para o processo de identificação dos modelos foi a de aplicar uma perturbação do tipo degrau em malha aberta no sistema, representado pelo modelo fenomenológico do processo, obtendo-se as correspondentes curvas de reação do processo. O apêndice 4A ilustra este procedimento.

Como o sistema de controle para o reator semi-batelada de polimerização do nylon 6 compreende duas malhas de controle, uma para o controle da temperatura na massa reacional e outra para o controle da pressão na fase vapor do reator, inicialmente foi identificado o modelo do processo considerando a malha de controle da temperatura. Neste caso, foi feita a simulação com a malha de controle fechada e com o *setpoint* ajustado em 187 °C (460 K). No tempo de simulação igual a 5 horas, abriu-se a malha de controle, impondo-se uma perturbação do tipo degrau na variável manipulada, vazão de óleo quente (280 °C), que foi alterada de zero para 2 m³/h, resultando no aquecimento da massa reacional até o tempo final da simulação (35 horas), período este suficiente para a massa reacional atingir o segundo estado estacionário. Como o controlador de temperatura foi configurado para trabalhar em *split-range* (faixa dividida), a válvula de resfriamento foi bloqueada para o tempo de simulação maior do que 5 horas.

A concentração inicial da ϵ -caprolactama foi reduzida de 8.584 mol/kg para 2.0 mol/kg, permitindo que o sistema atingisse uma situação estável após a aplicação da perturbação, e a curva de reação obtida com essa simulação está ilustrada na Figura 4.1. Um procedimento semelhante foi utilizado por Chylla e Haase (1993), sendo que estes autores consideraram apenas a existência de água no reator.

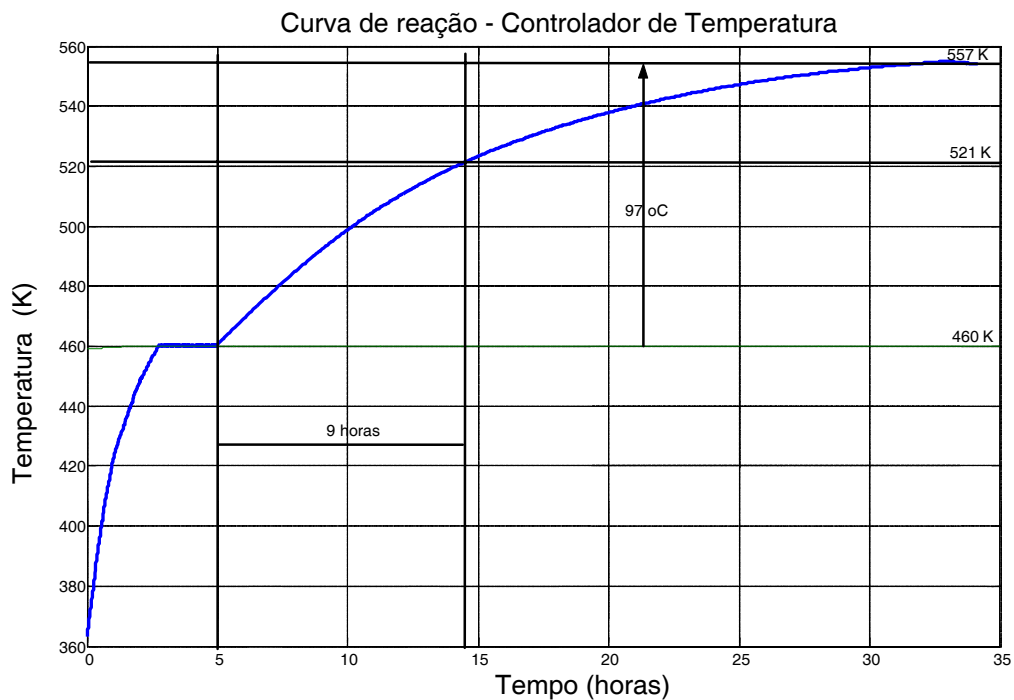


Figura 4.1. Curva de resposta do processo para uma perturbação do tipo degrau na variável manipulada, de zero a 2 m³/h, em malha aberta.

Pela análise da curva de reação da Figura 4.1, foram obtidos os valores mostrados a seguir.

Ganho do processo:

$$K_p = \frac{\Delta T}{\Delta F_{\text{oleo}}} = \frac{(557 - 460)}{2} = \frac{97}{2} = 48.5 \left[\frac{K}{m^3/h} \right] \quad (4.1)$$

Ganho do transmissor:

$$K_{transmissor} = \frac{16}{400} \left[\frac{mA}{K} \right] \quad (4.2)$$

Como o controlador de temperatura está configurado para atuar em *split-range*, o sistema de controle foi projetado para que cada válvula atue com apenas metade da faixa, ou seja, 8 mA. Desta forma, o ganho da válvula de controle é:

$$K_v = \frac{30}{8} \left[\frac{m^3/h}{mA} \right], \quad (4.3)$$

e o ganho da malha aberta é dado por:

$$K = K_p \cdot K_{transmissor} \cdot K_v = 7.27 \text{ [Adimensional]} \quad (4.4)$$

O tempo morto encontrado foi de:

$$t_d = 0.024 \text{ horas} \quad (4.5)$$

A constante de tempo, τ , foi obtida da curva de reação ilustrada na Figura 4.1, e seu valor é de 9 horas (tempo para que a temperatura atinja 63.2 % do estado estacionário final).

A função de transferência do sistema englobando o processo, a válvula, e o transmissor, considerando os valores obtidos através da Figura 4.1 é:

$$G = \frac{K \cdot e^{-t_d \cdot s}}{\tau \cdot s + 1} = \frac{7.27 \cdot e^{-0.024 \cdot s}}{9 \cdot s + 1} \quad (4.6)$$

A Figura 4.2 ilustra o procedimento adotado.

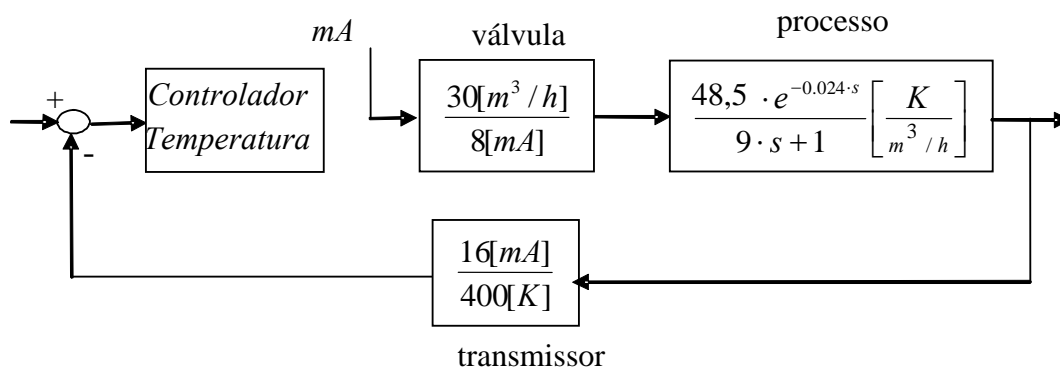


Figura 4.2. Diagrama esquemático para aplicação do método de identificação em malha aberta.

4.2.1.2. Aplicação do método Cohen-Coon para obtenção dos parâmetros do controlador de temperatura (óleo quente a 280 °C)

Aplicando-se o método Cohen-Coon com os valores dos parâmetros do processo obtidos no item 4.2.1.1, ou seja, com $K = 7.27$, $t_d = 0.024$ e $\tau = 9$, foram obtidos para os parâmetros do controlador de temperatura os valores mostrados a seguir.

Ganho proporcional:

$$K_{c1} = \frac{1}{K} \cdot \frac{\tau}{t_d} \cdot \left(\frac{4}{3} + \frac{t_d}{4 \cdot \tau} \right) = 68.81 \quad (4.7)$$

Tempo derivativo:

$$\tau_{d1} = t_d \cdot \frac{4}{11 + 2 \cdot \frac{t_d}{\tau}} = 0.0087 \text{ horas} \quad (4.8)$$

Tempo integral:

$$\tau_{i1} = t_d \cdot \frac{32 + 6 \cdot \left(\frac{t_d}{\tau} \right)}{13 + 8 \cdot \frac{t_d}{\tau}} = 0.059 \text{ horas} \quad (4.9)$$

A Figura 4.3 mostra o resultado da simulação do sistema com os parâmetros calculados pelo método Cohen-Coon.

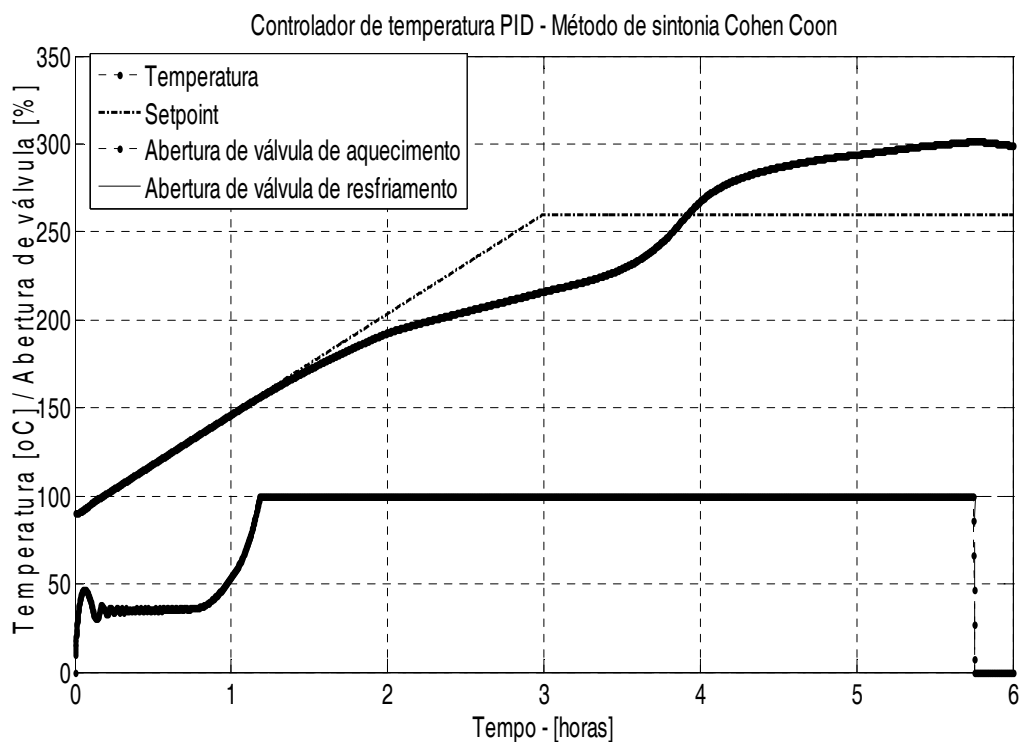


Figura 4.3. Gráfico do perfil da temperatura, do sinal na saída do controlador, e abertura das válvulas de aquecimento e resfriamento, obtidos pelo método Cohen-Coon.

Observa-se que o sinal na saída do controlador já estava em seu máximo em $t=1.2$ horas, mantendo válvula totalmente aberta, e sem o alcance efetivo do *setpoint*. Em $t=3.9$ horas, quando a temperatura atinge o *setpoint*, a saída do controlador, que já deveria começar a fechar a válvula de aquecimento, ainda permanece enviando o sinal máximo de 20 mA para a válvula até $t=5.5$ horas. Isso ocorreu devido à saturação do modo integral, já que foi usado um algoritmo sem prevenção de saturação (*anti-reset windup*), a fim de reproduzir de forma mais próxima a realidade da planta tomada como referência. Quanto aos desvios entre o *setpoint* e a variável controlada, constatados na rampa de subida, eles poderiam ser eliminados aumentando a temperatura do óleo quente, mas isso acarretaria em um aumento no custo de produção. Além disso, conforme já comentado anteriormente, procurou-se reproduzir as condições operacionais de uma unidade industrial instalada no Brasil, que opera com essa faixa de temperatura para o óleo quente.

Nota-se que, com os valores dos parâmetros calculados pelo método Cohen-Coon, houve um *overshoot* muito elevado ($41.6\text{ }^{\circ}\text{C}$), seguido de um *offset* também significativo de $39\text{ }^{\circ}\text{C}$. Como o resultado dessa simulação não foi satisfatório, escolheu-se outro método de sintonia alternativo, que foi o método ITAE.

4.2.1.3. Aplicação do método ITAE (Integral of Time-weighted Absolute Error) para obtenção dos parâmetros do controlador de temperatura (óleo quente a $280\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Uma das críticas apresentadas por Churro (1986) ao método Cohen-Coon é que este método utiliza a relação de decaimento de 1:4 como um dos critérios de sintonia. Ainda que o decaimento do primeiro pico para o segundo tenha a relação de 1:4, nada garante que o mesmo ocorrerá nos demais, dado o fato que, em geral, os processos são não lineares. O critério de desempenho fica assim representado por dois pontos da curva de controle (resposta do sistema em malha fechada), se tornando pouco representativo. Existem métodos utilizando critérios integrais de desempenho a partir da caracterização do processo através de modelos de primeira ordem com tempo morto (Almeida e Embiruçu, 2000), como o IAE (integral do valor absoluto do erro), o ISE (integral do quadrado do erro), e o ITAE (integral do valor absoluto do erro ponderado pelo tempo).

O problema destas definições é que elas se tornam indeterminadas (as integrais tendem a infinito) quando o erro não é forçado para zero, ou seja, quando existe desvio permanente causado pela ausência da ação integral. A diferença entre os critérios IAE e ISE é que o ISE pondera mais os erros grandes, o que ocorre usualmente no início da resposta, e menos os erros pequenos, o que ocorre no final da resposta. Na tentativa de reduzir o erro inicial, o critério ISE resulta em altos ganhos do controlador e respostas muito oscilatórias, isto é, alta razão de decaimento, com o erro oscilando em torno de zero por um tempo relativamente longo. Esse fato sugere que o critério de desempenho deve conter um peso do erro com o tempo. (Almeida e Embiruçu, 2000). Assim sendo, escolheu-se o método ITAE, como segunda alternativa para determinação dos parâmetros para as estimativas iniciais.

Considerando a mesma curva de reação apresentada na Figura 4.1 e os respectivos valores para o ganho do sistema ($7.27 \frac{K}{m^3/h}$), tempo morto (0.024 horas) e constante de tempo (9 horas), e aplicando o método ITAE, foram obtidos para os parâmetros do controlador de temperatura os valores mostrados a seguir.

Ganho proporcional:

$$K_{cl} = \frac{0.965}{K} \cdot \left(\frac{t_d}{\tau} \right)^{-0.855} = 21.07 \quad [\text{Adimensional}] \quad (4.10)$$

Tempo integral:

$$\tau_{i1} = \frac{\tau}{0.796 - 0.147 \cdot \frac{t_d}{\tau}} = 11.31 \text{ horas} \quad (4.11)$$

Tempo derivativo:

$$\tau_{d1} = 0.308 \cdot \tau \cdot \left(\frac{t_d}{\tau} \right)^{0.9292} = 0.0112 \text{ horas} \quad (4.12)$$

Os gráficos do perfil da temperatura e do sinal na saída do controlador (aberturas das válvulas de aquecimento e resfriamento), obtidos pelo método ITAE (óleo quente), através da simulação com os parâmetros calculados acima, estão apresentados na Figura 4.4.

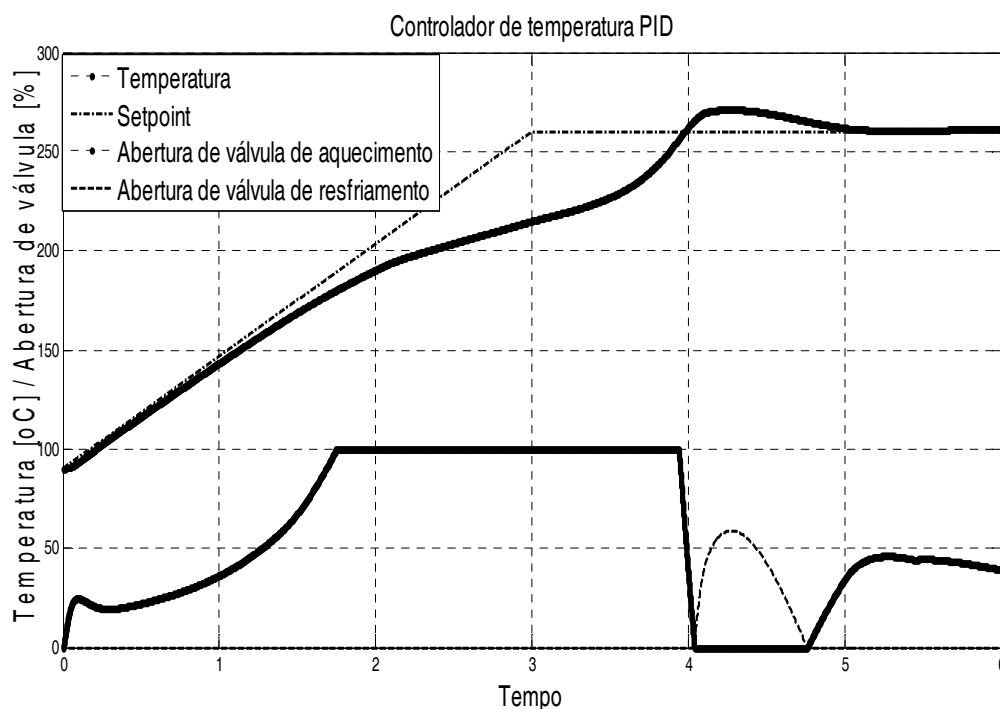


Figura 4.4. Malha de temperatura. Método ITAE (óleo quente).

A simulação obtida com os parâmetros calculados pelo método ITAE mostrou que o controlador de temperatura obteve um desempenho melhor do que no caso anterior, diminuindo bastante o *overshoot*. Além disso, não se verificou a saturação do modo integral, tendo em vista que, neste caso, o tempo integral foi de 11.31 horas, e, no caso anterior, foi de 0.059 horas.

4.2.1.4. Aplicação do método ITAE para obtenção dos parâmetros do controlador de temperatura (óleo frio a 60 °C)

Adotando o mesmo procedimento anterior, ou seja, aplicando uma perturbação degrau na variável manipulada, óleo frio a 60 °C, de zero para 2 m³/h no instante t=5 horas, verifica-se a curva de reação conforme mostra a Figura 4.5.

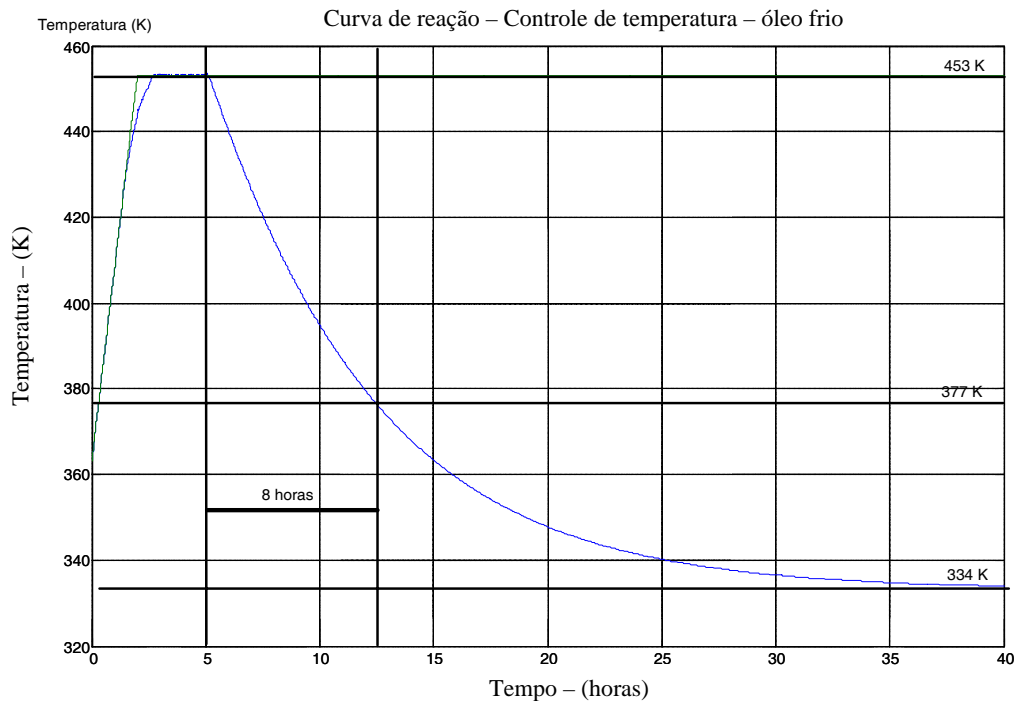


Figura 4.5. Curva de resposta do sistema para uma perturbação degrau na variável manipulada (óleo a 60 °C), em malha aberta.

Pela análise da curva de reação da Figura 4.5, foram obtidos os valores mostrados a seguir.

Ganho do processo:

$$K_p = \frac{\Delta T}{\Delta F_{oleo}} = \frac{(453 - 334)}{2} = \frac{119}{2} = 59,5 \left[\frac{K}{m^3/h} \right] \quad (4.13)$$

Ganho do transmissor:

$$K_{transmissor} = \frac{16}{400} \left[\frac{mA}{K} \right] \quad (4.14)$$

Ganho da válvula:

$$K_v = \frac{30}{8} \left[\frac{m^3/h}{mA} \right] \quad (4.15)$$

Então, o ganho da malha aberta é:

$$K = K_p \cdot K_{transmissor} \cdot K_v = 8,9 \quad [\text{Adimensional}] \quad (4.16)$$

O tempo morto foi de 0,012 horas, representando o atraso entre a aplicação da perturbação e o início da reação do processo. A constante de tempo do processo foi de 8 horas. Desta forma, a função de transferência do modelo reduzido (linear) pode ser representada por:

$$G_p = \frac{K \cdot e^{-t_d \cdot s}}{\tau \cdot s + 1} = \frac{8,9 \cdot e^{-0,012 \cdot s}}{8 \cdot s + 1} \quad (4.17)$$

O ganho do sistema, K, teve um pequeno aumento de 7.27 para 8.9, o tempo morto permaneceu em 0.012, e a constante de tempo diminuiu de 9 para 8 horas.

Utilizando o mesmo procedimento adotado no item 4.2.1.3, e para mudanças no *setpoint*, tendo agora o óleo frio a 60 °C como variável manipulada e utilizando os valores dos parâmetros do processo (tempo morto, ganho e constante de tempo), obteve-se os seguintes parâmetros de sintonia para o controlador de temperatura, obtidos pelo método ITAE.

Ganho proporcional:

$$K_{cl} = \frac{0,965}{K} \cdot \left(\frac{t_d}{\tau} \right)^{-0,855} = 43,96 \quad (4.18)$$

Tempo integral:

$$\tau_{il} = \frac{\tau}{0,796 - 0,147 \cdot \frac{t_d}{\tau}} = 10 \text{ horas} \quad (4.19)$$

Tempo derivativo:

$$\tau_{d1} = 0,308 \cdot \tau \cdot \left(\frac{t_d}{\tau} \right)^{0,9292} = 0,0059 \text{ horas} \quad (4.20)$$

A Figura 4.6 ilustra o gráfico da simulação utilizando os parâmetros calculados pelo método ITAE, com óleo frio. Nota-se que durante a rampa de subida, a temperatura não acompanhou a trajetória do *setpoint* devido à capacitância térmica do sistema, e o processo de polimerização passar da fase de reação endotérmica, para a fase de reação exotérmica.

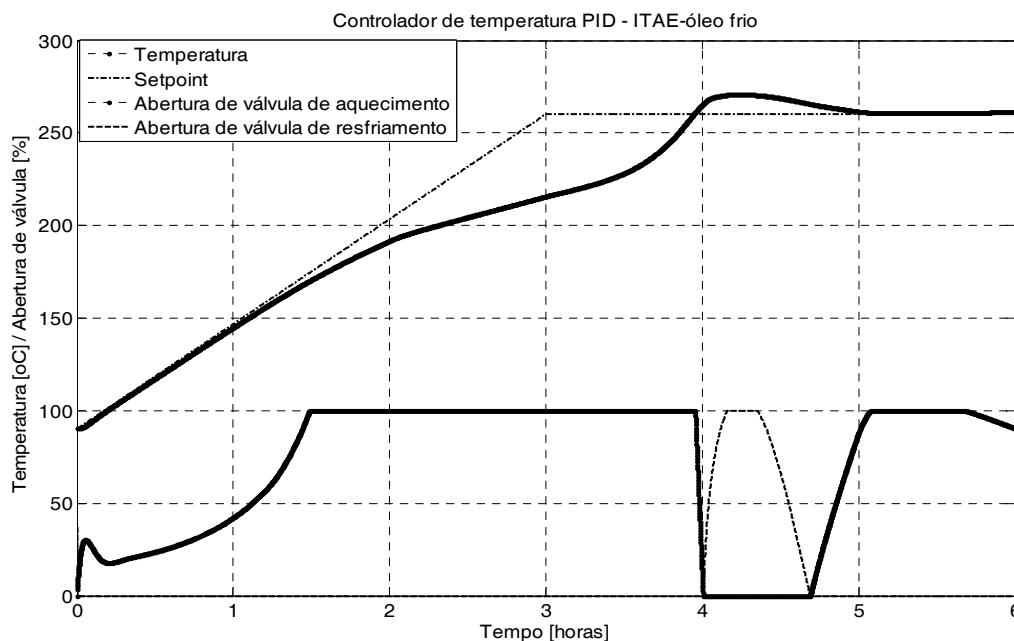


Figura 4.6. Temperatura do reator (°C) e abertura das válvulas de aquecimento e resfriamento (%), com óleo frio.

Conforme ressalta a Tabela 4.1, os resultados das simulações com os parâmetros calculados pelo método ITAE foram satisfatórios, tanto para o óleo quente como para o óleo frio, e, desta forma, os parâmetros obtidos através deste método foram os escolhidos como estimativas iniciais para o procedimento de sintonia ótima.

Tabela 4.1. Desempenhos dos controladores PID de temperatura, sintonizados conforme o método ITAE

Controlador de temperatura PID					
Modelo – óleo quente			Modelo – óleo frio		
ISE	Overshoot (°C)	Offset (°C)	ISE	Overshoot (°C)	Offset (°C)
$4.95 \cdot 10^9$	10.87	2.47	$4.25 \cdot 10^9$	10.89	1.96

ISE: *Integral of the Squared Error* (integral do erro quadrático).

4.2.2. Métodos clássicos de sintonia aplicados ao controlador de pressão

4.2.2.1. Determinação do modelo linear do processo

Analogamente ao procedimento adotado para o controle de temperatura, foi necessário também neste caso obter um modelo linear. Foi aplicada uma perturbação tipo degrau em malha aberta no instante $t=4$ horas na variável manipulada (vazão de retirada de vapor) com amplitude igual a 1000 moles/h, estando a pressão inicial do reator em 300 kPa. O tempo total da simulação foi fixado em 6 horas. Simultaneamente à aplicação da perturbação, as válvulas de aquecimento e resfriamento foram fechadas, para não interferirem no processo de identificação do modelo para a malha de pressão.

Analisando a Figura 4.7, constatou-se que o sistema apresentou um comportamento puramente integral. Ou seja, para uma perturbação tipo degrau, a saída é representada por uma reta com um coeficiente angular negativo.

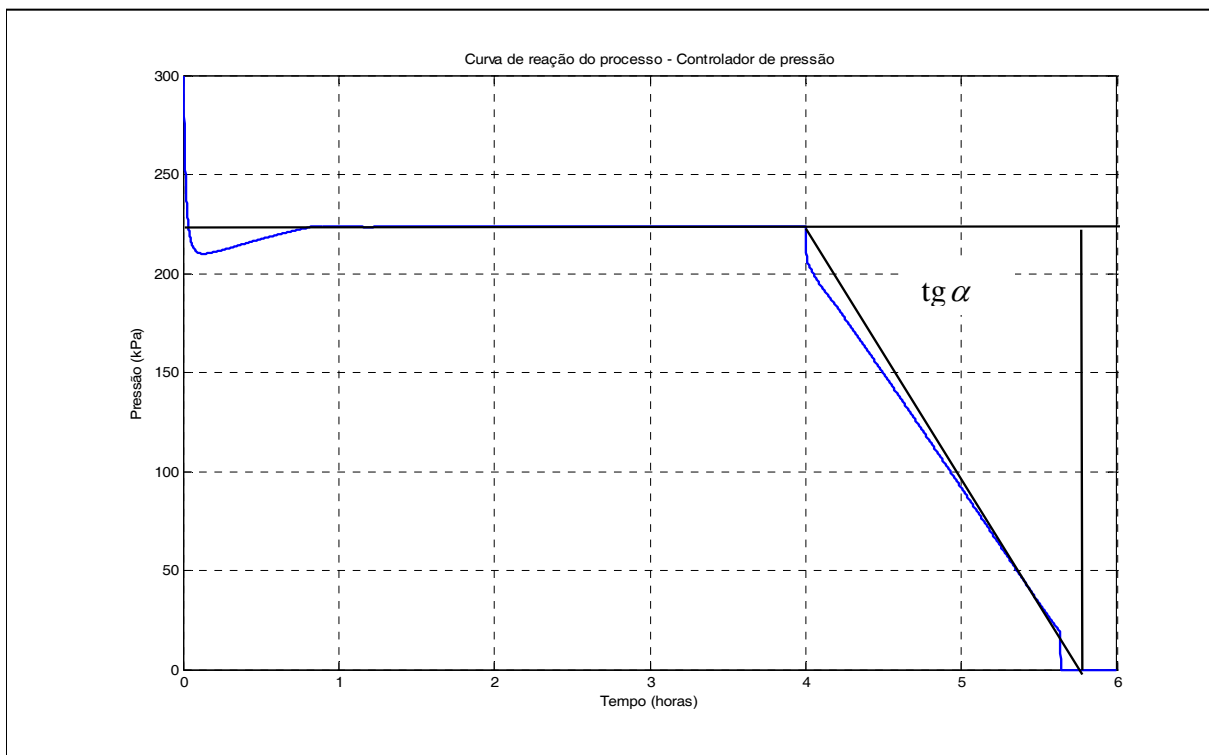


Figura 4.7. Curva de reação para a pressão na fase gasosa.

Nessas condições, tendo o processo comportamento puramente integral, o seu modelo pode ser representado por:

$$G_p(s) = \frac{K_p}{s} = \frac{P(s)}{V_t(s)} \quad (4.21)$$

Por outro lado, a função de transferência para uma perturbação degrau com amplitude 1000 é representada por:

$$V_t(s) = \frac{1000}{s} \quad (4.22)$$

Então, a partir da Equação 4.21 e da Equação 4.22, tem-se que:

$$P(s) = \frac{K_p}{s} \cdot \frac{1000}{s} = \frac{1000 \cdot K_p}{s^2} \quad (4.23)$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace na Equação 4.23, tem-se a equação da pressão no domínio do tempo:

$$p(t) = 1000 \cdot K_p \cdot t \quad (4.24)$$

Através da curva de reação, o coeficiente angular fica:

$$tg(\alpha) = \frac{\Delta P}{\Delta t} \quad (4.25)$$

$$\Delta P = 0 - 222 = -222 \cdot kPa \quad (4.26)$$

$$\Delta t = 5.8 - 4.00 = 1.8 \cdot hora \quad (4.27)$$

$$tg(\alpha) = -\frac{222}{1.8} = -123 \cdot \frac{kPa}{hora} \quad (4.28)$$

Portanto:

$$p(t) = tg(\alpha) \cdot t \quad (4.29)$$

Igualando as Equações 4.29 e 4.24, e substituindo o valor de $tg(\alpha)$ (Equação 4.28), tem-se que:

$$1000 \cdot K_p = tg(\alpha) = -123 \quad (4.30)$$

Da Equação 4.30 pode-se obter o ganho do processo:

$$K_p = -\frac{123}{1000} = -0.123 \cdot \frac{kPa}{gmol/h} \quad (4.31)$$

Então, a função de transferência do processo para a malha de pressão é:

$$G_p(s) = \frac{K_p}{s} = -\frac{0.123}{s} \quad (4.32)$$

Para se obter o ganho da válvula, primeiramente procedeu-se ao cálculo da vazão máxima da variável manipulada, impondo-se que a válvula ficasse totalmente aberta e sob diferencial de pressão máxima. Assim:

$$K_v = G_v = \frac{1526600}{16} \left[\frac{\text{gmol} / \text{h}}{\text{mA}} \right] \quad (4.33)$$

O ganho do transmissor foi obtido da relação entre a faixa de operação do transmissor (4 mA a 20 mA) e a faixa de pressão do processo que é de 10 kgf/cm². Então:

$$K_{\text{transmissor}} = \frac{16}{10 \cdot 101.325} \left[\frac{\text{mA}}{\text{kPa}} \right] \quad (4.34)$$

Então, o ganho da malha aberta fica:

$$K = K_p \cdot K_v \cdot K_{\text{transmissor}} \quad (4.35)$$

ou, substituindo os valores:

$$K = -0.123 \left[\frac{\text{kPa}}{\text{gmol} / \text{h}} \right] \cdot \frac{1526600}{16} \left[\frac{\text{gmol} / \text{h}}{\text{mA}} \right] \cdot \frac{16}{10 \cdot 101.325} \left[\frac{\text{mA}}{\text{kPa}} \right] = -185 [\text{adimensional}] \quad (4.36)$$

A partir da curva de reação, o tempo morto obtido foi de 0,0008 horas. Logo, a função de transferência do sistema, englobando o processo, a válvula, e o transmissor é:

$$G = \frac{K}{s} \cdot e^{-t_d \cdot s} = -\frac{185}{s} \cdot e^{-t_d \cdot s} \quad (4.37)$$

A Figura 4.8. ilustra o procedimento adotado.

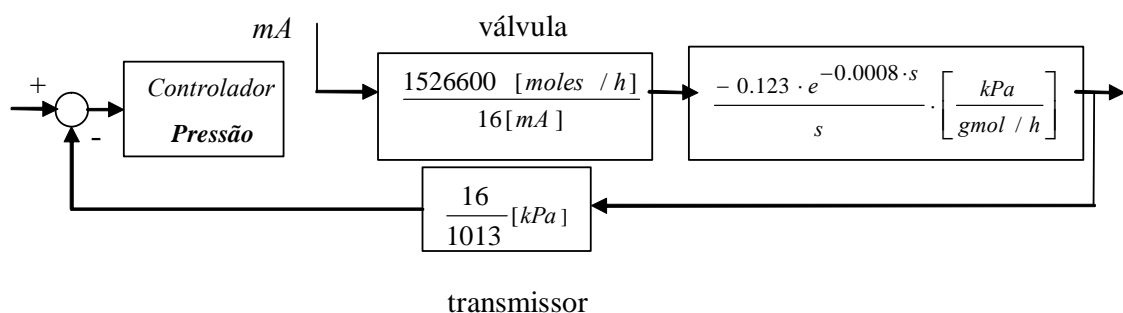


Figura 4.8. Diagrama para identificação de modelo e sintonia para a malha de controle de pressão.

4.2.2.2. Método IMC – Controle com modelo interno para determinação dos parâmetros de sintonia do controlador de pressão

Para a determinação dos parâmetros de sintonia do controlador de pressão foi utilizado o método IMC (*Internal Model Control*, controle com modelo interno) (Smith e Corripio, 1997). Esta metodologia (Figura 4.9) foi introduzida por Garcia e Morari (1982), embora um conceito similar tenha sido utilizado prévia e independentemente por outros

pesquisadores. A metodologia IMC foi escolhida neste caso porque os métodos utilizados anteriormente são inadequados para sistemas integradores.

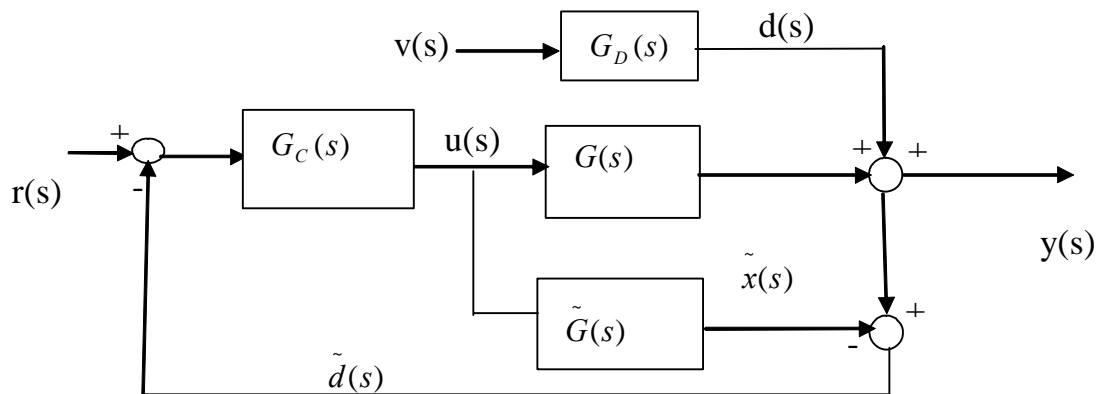


Figura 4.9. Diagrama de blocos para o método IMC – “Internal Model Control”.

Conforme o diagrama apresentado na Figura 4.9, a variável controlada y pode ser expressa da seguinte forma:

$$y = \frac{G \cdot G_C}{1 + (G - \tilde{G}) \cdot G_C} \cdot r + \frac{1 - \tilde{G} \cdot G_C}{1 + (G - \tilde{G}) \cdot G_C} \cdot G_D \cdot v \quad (4.38)$$

Rivera e Morari (1986) converteram o controlador IMC para uma forma do tipo PID. Para isso, é necessário fazer a equivalência da malha fechada da estrutura apresentada na Figura 4.9, com a malha fechada da estrutura apresentada na Figura 4.10.

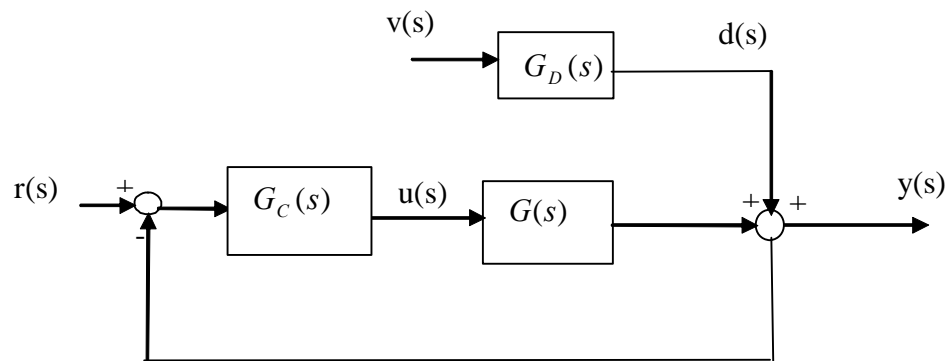


Figura 4.10. Diagrama de blocos de controlador PID.

De acordo com a Figura 4.10:

$$y = \frac{G \cdot G_C}{1 + G \cdot G_C} \cdot r + \frac{G_D}{1 + G \cdot G_C} \cdot v \quad (4.39)$$

Considerando o problema servo, podemos igualar os termos correspondentes das duas equações acima (onde os subscritos FB e IMC são acrescentados para diferenciar os controladores *FeedBack* (realimentação pura) e IMC, respectivamente):

$$\frac{G \cdot G_{C,FB}}{1 + G \cdot G_{C,FB}} = \frac{G \cdot G_{C,IMC}}{1 + \left(G - \tilde{G} \right) \cdot G_{C,IMC}} \quad (4.40)$$

resultando em:

$$G_{C,FB} = \frac{G_{C,IMC}}{1 - \tilde{G} \cdot G_{C,IMC}} \quad (4.41)$$

Foram selecionados os valores correspondentes dos parâmetros para um processo puramente integral (Almeida e Embiruçu, 2000), para o problema servo, ou seja, o tempo morto foi desprezado:

$$\text{Processo} \left(\tilde{G} \right) : \frac{K}{s} \quad (4.42)$$

$$\text{Controlador} (G_{C,FB}) : \frac{1}{K \cdot \varepsilon} \quad (4.43)$$

$$K_c \cdot K : \frac{1}{\varepsilon} \quad (4.44)$$

O sistema pode ser representado conforme apresentado na Figura 4.11.

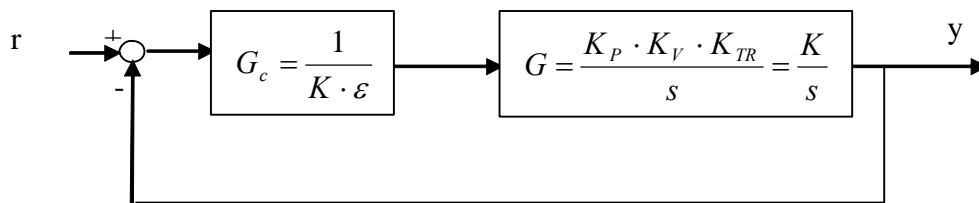


Figura 4.11. Diagrama de blocos de controlador IMC em uma forma do tipo PID.

De acordo com a Figura 4.11:

$$y = G \cdot G_c \cdot (r - y) \quad (4.45)$$

Logo:

$$y = \frac{K}{s} \cdot \frac{1}{K \cdot \varepsilon} \cdot (r - y) = \frac{1}{\varepsilon \cdot s} \cdot (r - y) \quad (4.46)$$

Explicitando y:

$$y = \frac{1}{\varepsilon \cdot s + 1} \cdot r \quad (4.47)$$

Analisando a função de transferência acima, ε representa a constante de tempo do sistema em malha fechada. De acordo com resultados anteriores:

$$K_c \cdot K = \frac{1}{\varepsilon} \quad (4.48)$$

$$K_c = \frac{1}{\varepsilon \cdot K} = \frac{1}{\varepsilon \cdot 185} \quad (4.49)$$

Considerando que esse parâmetro será utilizado apenas como estimativa inicial para o procedimento de sintonia ótima, a próxima etapa se consistiu na determinação aproximada da constante de tempo ε . Foi assumido empiricamente que a constante de tempo da malha fechada seria igual ao tempo necessário para se alcançar a pressão atmosférica em malha aberta. Assim, alterou-se o valor da perturbação na variável manipulada de 1000 [moles/h] para 100000 [moles/h] e verificou-se que o tempo transcorrido para que a pressão reduzisse de 222 kPa para 101.325 kPa (pressão atmosférica) foi de 0.0067 horas. Desta forma, tem-se que:

$$\varepsilon = 0.0067 \text{ horas} \quad (4.50)$$

Logo:

$$K_{c2} = \frac{1}{\varepsilon \cdot 185} = \frac{1}{0.0067 \cdot 185} = 0.92 \quad [\text{Adimensional}] \quad (4.51)$$

O gráfico da simulação do sistema com o parâmetro de sintonia do controlador de pressão, calculado pelo método IMC, está representado na Figura 4.12, e, devido ao fato do seu desempenho ter sido satisfatório, fazendo com que a variável controlada seguisse o *setpoint* em quase toda a sua trajetória, esta sintonia foi tomada como estimativa inicial para a aplicação do procedimento de sintonia ótima para a determinação do parâmetro proporcional do controlador de pressão.

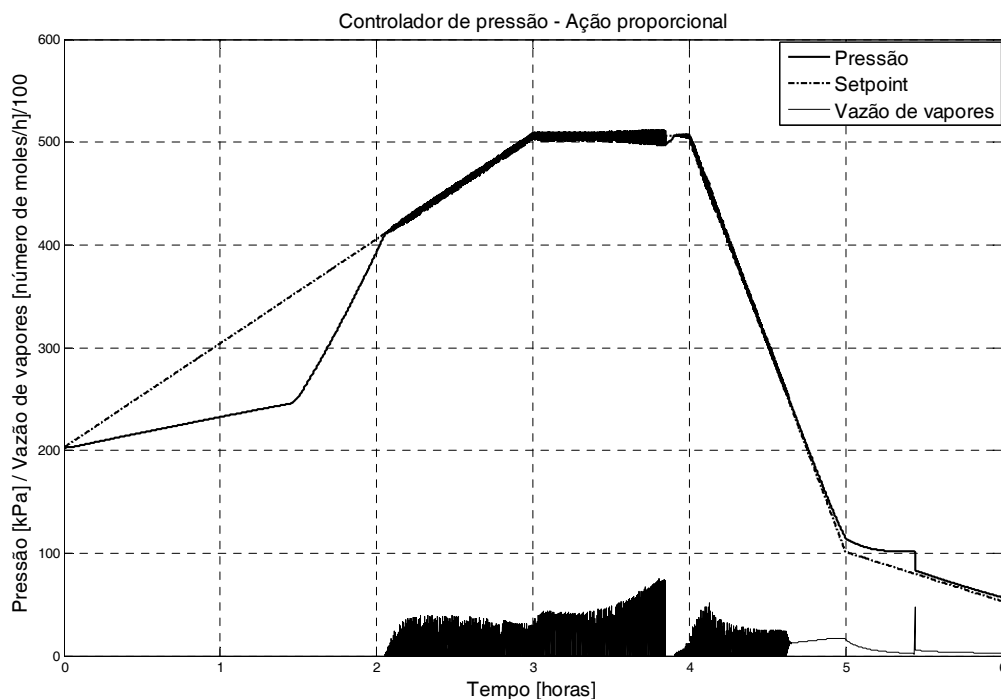


Figura 4.12. Controlador de pressão com ação proporcional, sintonizado pelo método IMC.

4.2.3. Sintonia ótima para controle de temperatura

A metodologia adotada para a obtenção dos parâmetros de sintonia dos controladores PID convencionais de temperatura e pressão compreendeu a minimização da soma dos quadrados dos erros entre os valores das variáveis controladas e os valores dos *setpoints*, ao longo das trajetórias definidas na Figura 3.1 (Capítulo 3).

As Figuras 4.4 e 4.6 (itens 4.2.1.3 e 4.2.1.4) mostram que os desempenhos dos controladores ajustados com os parâmetros obtidos pelo método ITAE com óleo quente e com óleo frio foram muito semelhantes. Assim sendo, foram adotados os parâmetros obtidos com o óleo quente como estimativas iniciais para a aplicação do procedimento de sintonia ótima para o controlador PID de temperatura, e os resultados obtidos foram:

- Ganho proporcional igual a 40;
- Tempo derivativo igual a 9.8 horas;
- Tempo integral igual a 25 horas.

A Figura 4.13 ilustra o resultado da simulação com os parâmetros do controlador de temperatura obtidos pelo método de sintonia ótima.

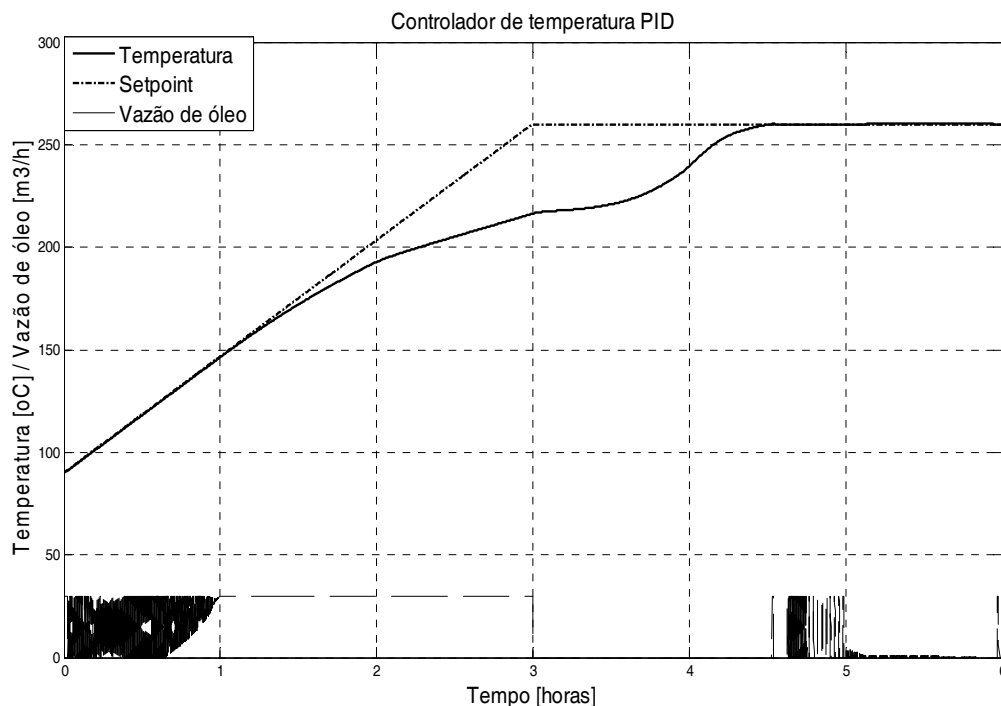


Figura 4.13. Controlador PID de temperatura, com parâmetros otimizados.

Percebe-se que, apesar do procedimento de sintonia ótima ter levado a uma solução de minimização do erro da temperatura na massa reacional ao longo da trajetória, eliminando completamente o *overshoot* e o *offset*, a ação da variável manipulada (vazão de óleo) ficou muito agressiva, revelando que o processo de otimização convergiu para uma solução que inviabilizaria a implementação prática do resultado acima, em um sistema real. Assim sendo, foi aplicado o método de sintonia ótima novamente, na expectativa de suavizar as ações de controle através da retirada da ação derivativa, e adotando como estimativas iniciais os parâmetros encontrados pelo método ITAE com óleo quente (item 4.2.1.3), que foram os mesmos utilizados no processo de otimização anterior. Os resultados obtidos para o ganho proporcional e tempo integral foram de 24.7884 e 30 horas, respectivamente, e o resultado da simulação com esses parâmetros de sintonia (controle PI) está apresentado na Figura 4.14.

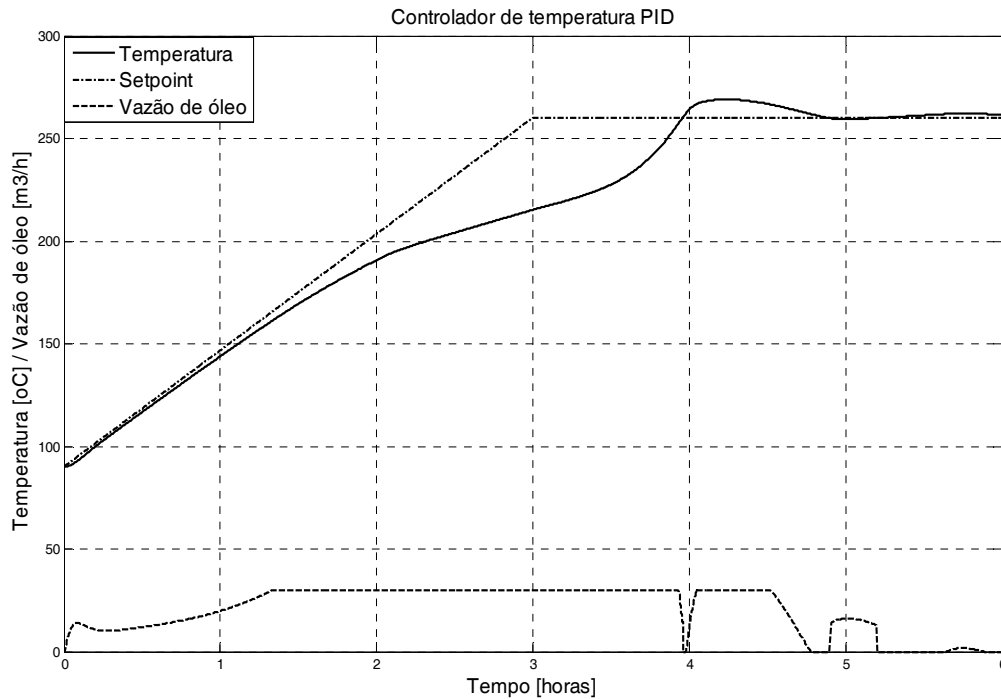


Figura 4.14. Controlador PI de temperatura, com parâmetros otimizados.

Verifica-se um resultado melhor para o comportamento da variável manipulada, se comparado com a da Figura 4.13, estando o *offset* em um valor tolerável, igual a 1.34 °C. Porém, o *overshoot* atingiu o valor de 9.07 °C, superior aos 3 °C recomendáveis para não haver degradação nas propriedades químicas e físicas do nylon.

Para o controlador de pressão, o parâmetro proporcional encontrado pelo procedimento de sintonia ótima foi igual a 1, e os resultados obtidos por simulação estão apresentados na Figura 4.15. Nota-se que não houve um controle efetivo da pressão na etapa final do processo, ou seja, onde a pressão deve ficar negativa.

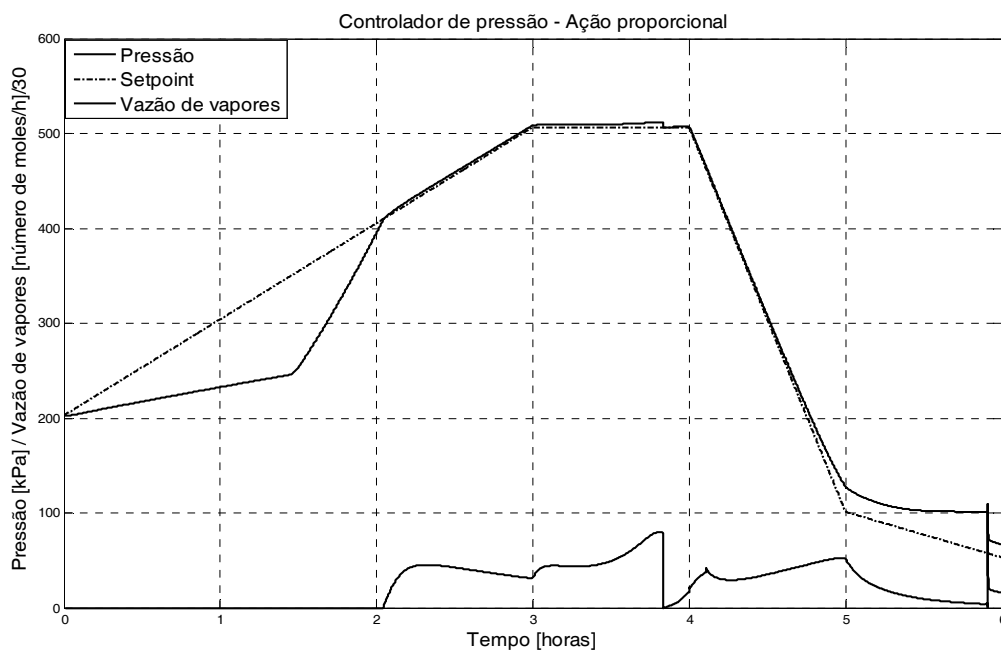


Figura 4.15. Controlador de pressão com o parâmetro proporcional, otimizado.

4.2.4. Sintonia ótima para o controle de temperatura (apenas sistema de aquecimento)

Este estudo foi elaborado com o objetivo de reproduzir uma aplicação industrial, e como o sistema de controle de temperatura da unidade industrial visitada, assim como da planta piloto instalada na Escola Politécnica da Universidade Federal da Bahia, trabalham apenas com sistema de aquecimento, foram feitas também simulações considerando um reator semi-batelada para produção de nylon 6 apenas com o sistema de aquecimento em sua malha de controle da temperatura.

O procedimento de sintonia ótima para determinação dos parâmetros foi adotado tanto para o controlador de temperatura como para o controlador de pressão.

Tendo os valores obtidos através do método ITAE (item 4.2.1.3) como estimativa inicial para cada um dos parâmetros do controlador PID de temperatura, obteve-se para o ganho proporcional um valor igual a 48, para o tempo derivativo um valor igual a 25.48 horas e para o tempo integral um valor igual a 20 horas. Para o controlador de pressão, o ganho proporcional foi igual a 1.815.

Os resultados das simulações para as malhas de temperatura e pressão estão ilustrados nas Figuras 4.16 e 4.17, respectivamente. O controlador de temperatura, na parte plana da trajetória do *setpoint* (Figura 4.16), conseguiu manter a temperatura bem próxima ao valor do *setpoint*. Nota-se na Figura 4.17 que na fase final do processo, em que a pressão torna-se negativa, o controlador conseguiu fazer com que a pressão acompanhasse o *setpoint* em quase toda sua trajetória.

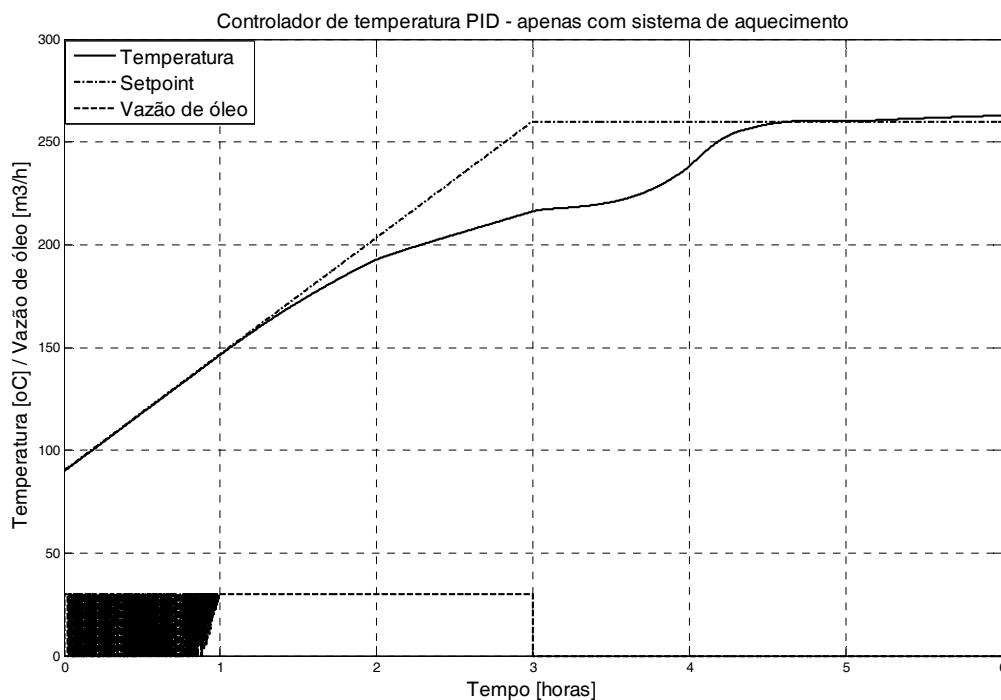


Figura 4.16. Controlador PID de temperatura com os parâmetros otimizados, apenas com sistema de aquecimento.

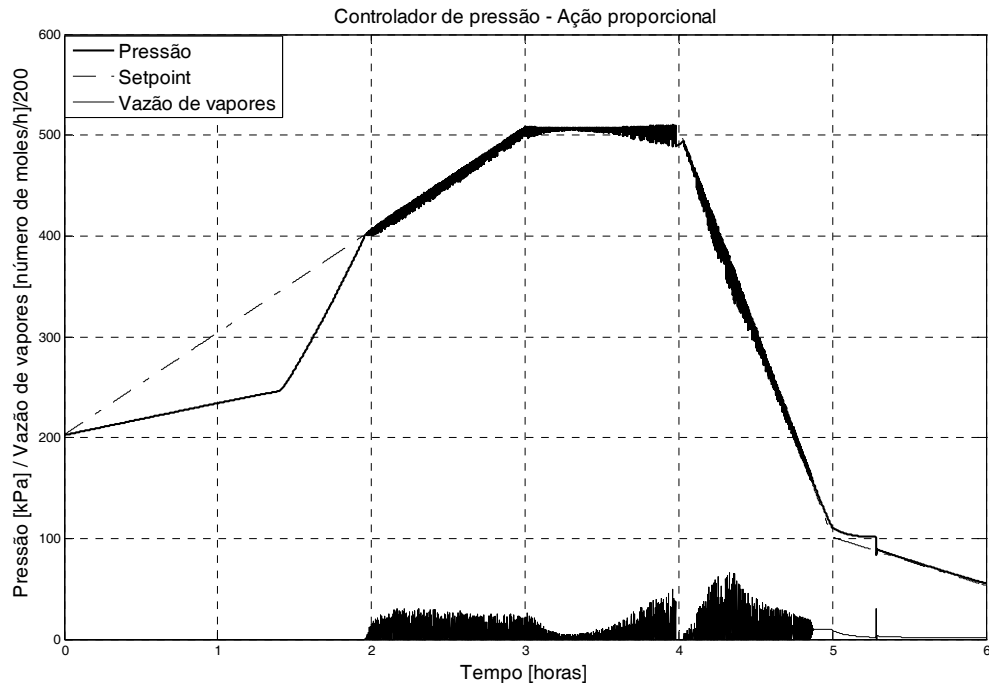


Figura 4.17. Controlador de pressão convencional com ação proporcional. Sintonia ótima, apenas com sistema de aquecimento.

4.3. Projeto de controladores baseados em lógica *fuzzy*

Conforme discutido no Capítulo 3, a outra estratégia de controle analisada e avaliada para o sistema em estudo compreendeu a utilização de um controlador PI baseado em lógica *fuzzy*, ou simplesmente, um controlador PI-*fuzzy*. De acordo com as características desta abordagem, o sistema de inferência *fuzzy* realiza um mapeamento da variação da ação de controle ou variação da variável manipulada (conseqüente), em função do erro e da variação do erro da variável controlada (antecedentes). A metodologia compreendeu uma abordagem monovariável com a definição de sistemas de inferência, ou controladores independentes para cada uma das malhas (temperatura e pressão). As seguintes etapas foram seguidas:

- Definição dos universos de discurso para o erro, variação do erro e variação da ação de controle;
- Definição das variáveis lingüísticas e das regras;
- Caracterização das funções de pertinência associadas a cada variável lingüística ou conjunto *fuzzy*;
- Definição de parâmetros para a sintonia dos controladores;
- Sintonia com determinação dos parâmetros do controlador de forma heurística, e sintonia ótima.

O modelo de inferência adotado foi o de Mamdani, que utiliza o operador mínimo (*t*-norma). A interseção dos conjuntos *fuzzy* \tilde{A}_i^1 e \tilde{A}_i^2 , definidos nos universos de discurso U_i , é um conjunto *fuzzy* representado por $\tilde{A}_i^1 \cap \tilde{A}_i^2$, que é uma função de pertinência definida pelo método dos mínimos. Então, $\tilde{A}_i^1 \cap \tilde{A}_i^2 = \min \{ \mu_{A_i^1}(u_i), \mu_{A_i^2}(u_i) : u_i \in U_i \}$.

4.3.1. Controlador PI-*fuzzy* de temperatura (aquecimento e resfriamento)

A Figura 4.18 ilustra os diferentes cenários possíveis que os sinais do erro e da variação do erro da temperatura podem apresentar em uma situação normal de operação do reator, em malha fechada.

A região do erro positivo representa as situações em que os valores da variável controlada são menores do que os valores da trajetória do *setpoint*, enquanto que a região do erro negativo é quando os valores da variável controlada são maiores do que os valores da trajetória do *setpoint*.

A variação do erro positivo representa as situações em que a variável controlada está se afastando da trajetória do *setpoint*, caracterizando uma situação desfavorável, e a variação do erro negativo representa as situações em que a variável controlada está se aproximando da trajetória do *setpoint*, caracterizando uma situação favorável.

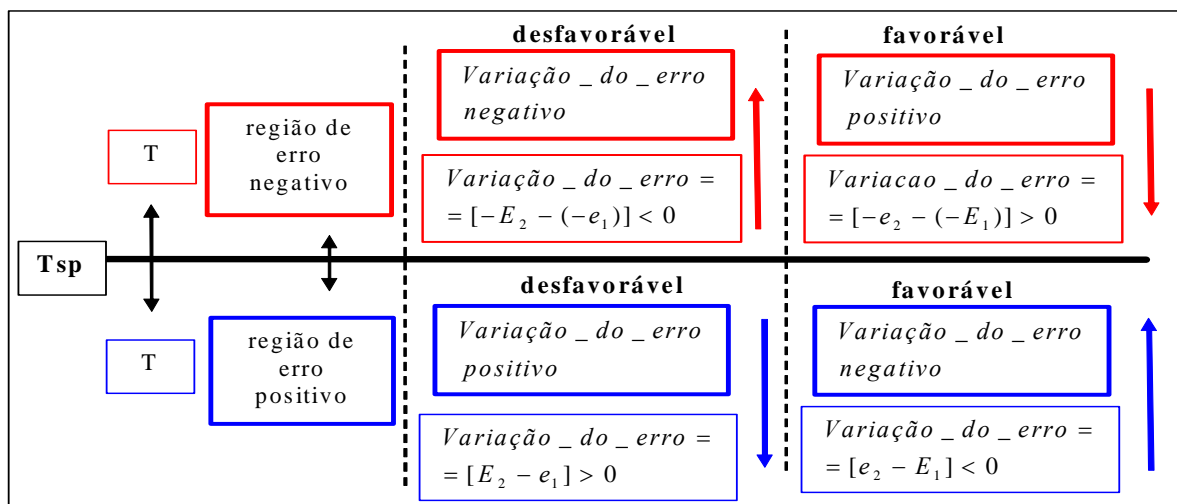


Figura 4.18. Configurações para sinais do erro e da variação do erro (temperatura).

As regras lingüísticas dos controladores *fuzzy* compõem a sua base de conhecimento e associam os antecedentes à saída. Para defini-las, é necessário ter um conhecimento prévio de como o controlador *fuzzy* deverá se comportar para as diversas situações operacionais do reator de polimerização. Como o controlador *fuzzy* representa uma tentativa de textualização do algoritmo PID convencional, é válido que as ações de controle deste último controlador possam ser interpretadas.

Considerando o PID ideal, tem-se:

$$u(t) = u_{(0)} + K_c \cdot e(t) + K_i \cdot \int e(t) \cdot dt + K_d \cdot \frac{de(t)}{dt} \quad (4.52)$$

onde $u(t)$ é o sinal na saída do controlador com algoritmo PID.

O erro é determinado por:

$$e(t) = r(t) - y(t) \quad (4.53)$$

onde $r(t)$ é o *setpoint* para a variável controlada, e $y(t)$ é a variável controlada.

Conforme já visto, no presente estudo $r(t)$ é uma função do tempo. Genericamente, uma variável controlada pode ser representada por:

$$y(t) = f[u(t), t, p(t)] \quad (4.54)$$

onde $u(t)$ é a entrada para o sistema e $p(t)$ representa as perturbações, que também estão entrando no sistema.

Para o controlador com algoritmo PID operando com ação proporcional pura, e o processo estando na condição de estado estacionário (*steady-state*), observa-se que:

$$u(t)_{ss} = u_{(0)} + K_c \cdot e(t)_{ss} \quad (4.55)$$

$$e(t)_{ss} = r(t)_{ss} - y(t)_{ss} \quad (4.56)$$

$$y(t)_{ss} = g[u(t)_{ss}, p(t)_{ss}] \quad (4.57)$$

Portanto, pode existir um erro não nulo que satisfaça as Equações 4.55, 4.56, e 4.57, na condição de estado estacionário.

Pela própria definição de estado estacionário, todos os termos da Equação 4.52 devem ser constantes quando o processo atingir essa condição. Considerando que a variável controlada não esteja apresentando pequenas oscilações, será feita uma análise em separado de cada um desses termos, nessas condições.

Como o controlador PID é linear, os termos K_c , K_d e K_i são constantes, então:

1. O termo $K_c \cdot e(t)$ será constante quando $e(t)$ for constante (não necessariamente zero);
2. O termo $K_d \cdot \frac{de(t)}{dt}$ será constante quando a derivada do erro for constante, ou seja, quando a taxa de variação do erro for constante (derivada do erro igual a zero como caso particular);
3. O termo $K_i \cdot \int e(t) \cdot dt$ só será constante quando a integral for constante, o que implica, necessariamente, que o erro deve ser zero.

Com base nessas considerações, as ações do controlador com algoritmo PID, em termos lingüísticos, traduzem-se em:

- Ação proporcional sobre a válvula de controle: -Mexa-se enquanto o erro não for constante;
- Ação derivativa sobre a válvula de controle: -Mexa-se enquanto a taxa de variação do erro não for constante;
- Ação integral sobre a válvula de controle: -Mexa-se enquanto o erro não for zero.

Escrevendo de outra forma:

- Ação proporcional sobre a válvula de controle: -Pare somente quando o erro for constante (o que inclui o zero como um caso particular);
- Ação derivativa sobre a válvula de controle: -Pare somente quando a taxa de variação do erro for constante (o que inclui o zero como um caso particular);
- Ação integral sobre a válvula de controle: -Pare somente quando o erro for zero (só admitindo o zero como solução).

Nota-se que a ação proporcional depende apenas do valor atual do erro, a ação integral depende da integral do erro desde o tempo zero até o tempo atual, portanto contém várias informações dos erros passados, e, finalmente, a ação derivativa depende da derivada do erro, o que dá uma idéia para onde o erro está se dirigindo, ou seja, para onde o valor da variável controlada está se dirigindo. Assim, pode-se dizer que a ação proporcional atua sobre o estado presente do processo, a ação integral leva em conta o passado, e a ação derivativa leva em conta o futuro.

A fase da definição do conjunto de regras para o controlador *fuzzy* é a mais crítica, e o conhecimento prévio de como o algoritmo PID funciona na sua forma lingüística facilita a montagem das regras. A Tabela 4.2 ilustra o conjunto de regras inicialmente consideradas para o funcionamento do controlador PI-*fuzzy* de temperatura.

Tabela 4.2. Conjunto de regras do controlador PI-*fuzzy* de temperatura

regras	Erro	Condição	Variação do erro	Conseqüente	Variação na ação de controle
1	Se erro é zero	NA	NA	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é zero
2	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é zero	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é abertura pequena
3	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é positivo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é abertura grande
4	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é negativo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é abertura pequena
5	Se erro é zero	NA	NA	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é zero
6	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é zero	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é abertura pequena
7	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é positivo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é abertura pequena
8	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é negativo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é abertura grande

NA: Não se Aplica.

Antes mesmo de se proceder com a simulação, pode ser feita uma previsão de qual será o comportamento do controlador *fuzzy* de temperatura, considerando o conjunto de regras da Tabela 4.2.

As regras 1 e 5 estabelecem que, se não existir o erro, não deve existir variação na ação de controle.

- Nessa condição, o controlador *fuzzy* se comportará como se fosse um controlador proporcional puro, uma vez que ele estará atuando sobre a válvula de controle na seguinte condição: -Pare somente quando o erro for constante (o que inclui o zero como um caso particular);
- Não existe a ação integral nessa situação, sendo o erro igual a zero;
- Não existe a ação derivativa porque a taxa de variação do erro é zero.

A regra 2 estabelece que, existindo o erro e não existindo a variação do erro, a variação na ação de controle deve ser pequena.

- Nessa condição, o controlador *fuzzy* se comportará como se fosse um controlador com ação proporcional e ação integral, uma vez que a ação integral estará atuando sobre a válvula de controle na seguinte condição: -Mexa-se enquanto o erro não for zero. A regra 2 garante o comportamento da ação integral porque, existindo o erro, deve existir também a variação na ação de controle;
- Não há variação do erro, logo não existe a ação derivativa.

A regra 3 estabelece que, existindo o erro e existindo a variação do erro, deve existir uma variação grande na ação de controle.

- Essa regra faz com que o controlador *fuzzy* funcione como um controlador com ação proporcional, pois, existindo o erro, deve existir também a variação na ação de controle;
- Essa regra faz com que o controlador *fuzzy* se comporte como se incorporasse também uma ação integral, pelo mesmo motivo explicado na regra 2;
- Essa regra faz com que o controlador *fuzzy* se comporte como se incorporasse também uma ação derivativa, uma vez que ela atua sobre a válvula de controle na seguinte condição: -Mexa-se enquanto a taxa de variação do erro não for constante;
- Então, a regra 3 faz com que o controlador *fuzzy* funcione com um comportamento semelhante ao de um controlador PID.

A regra 4 estabelece que, existindo o erro e existindo a variação do erro, deve existir uma taxa de variação pequena na ação de controle.

- Situação semelhante à da regra 3, porém com uma variação na ação de controle mais suave, fazendo com que o controlador *fuzzy* atue como um controlador PID, porém com um ganho menor do que o da regra 3. Como a regra 3 impõe uma variação na ação de controle grande e a regra 4 impõe uma variação na ação de controle pequena, isto sugere que o controlador *fuzzy* tem um ganho variável, fazendo com que o mesmo opere como um controlador PID com ganho adaptativo.

As funções de pertinência para as variáveis linguísticas “erro”, “variação do erro”, “variação da ação de controle”, e os respectivos universos de discurso, foram definidos

heurísticamente, conforme as Figuras 4.19 a 4.24. As mesmas funções de pertinência foram adotadas para a fase do aquecimento e resfriamento. Os universos de discurso das variáveis de entrada (“erro” e “variação do erro”) e da saída (“variação da ação de controle”) estão normalizados no intervalo -1 a +1. Nesse sentido, são empregados fatores de escala para efetuar a correspondência direta para o domínio real (unidades de engenharia) de cada variável.

Como foram definidas três funções de pertinência para a variável lingüística “erro” e três para a variável lingüística “variação do erro”, então existem, no máximo, nove combinações possíveis de regras para formar o conjunto de regras.

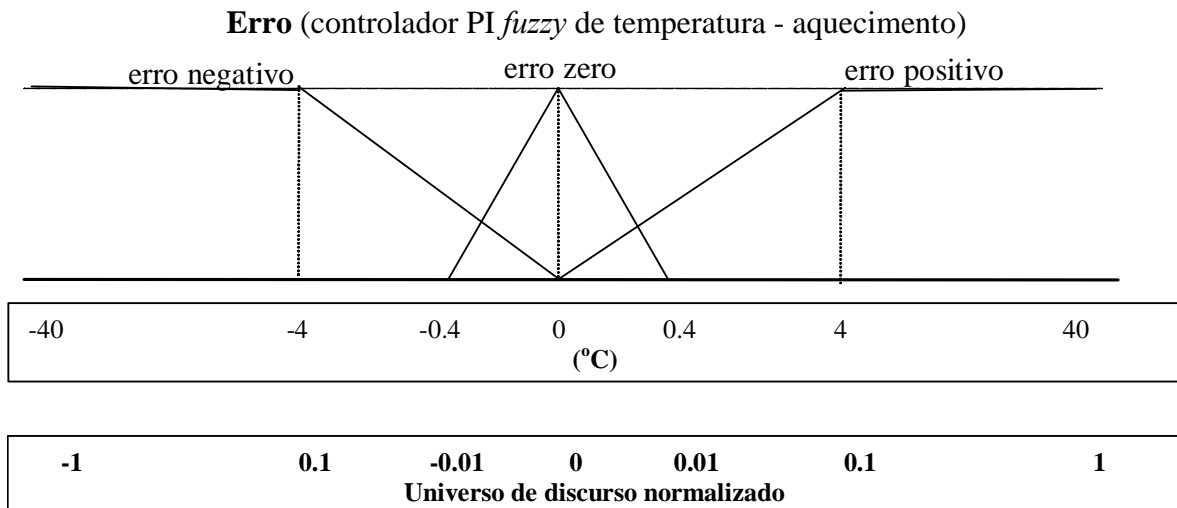


Figura 4.19. Funções de pertinência da variável lingüística erro, para o controlador PI-*fuzzy* de temperatura (aquecimento).

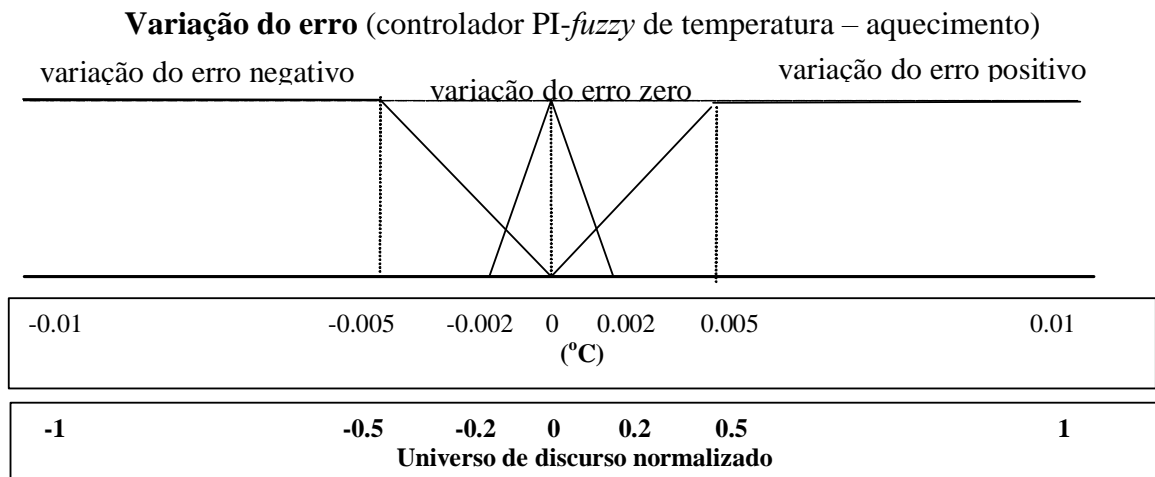


Figura 4.20. Funções de pertinência da variável lingüística “variação do erro” para o controlador PI-*fuzzy* de temperatura (aquecimento).

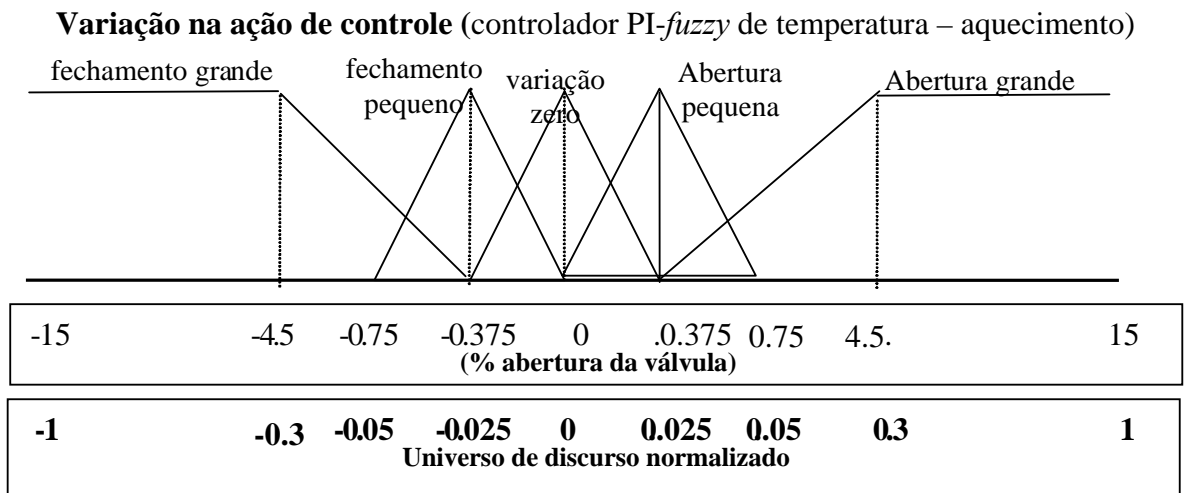


Figura 4.21. Funções de pertinência da variável lingüística “variação na ação de controle” para o controlador PI-*fuzzy* de temperatura (aquecimento).

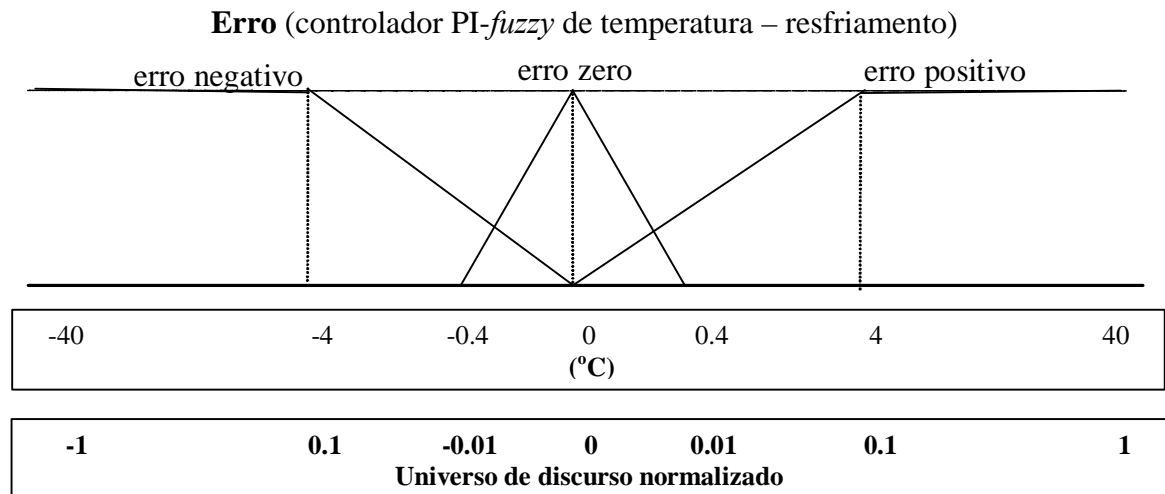


Figura 4.22. Funções de pertinência da variável lingüística “erro”, para o controlador PI-*fuzzy* de temperatura (resfriamento).

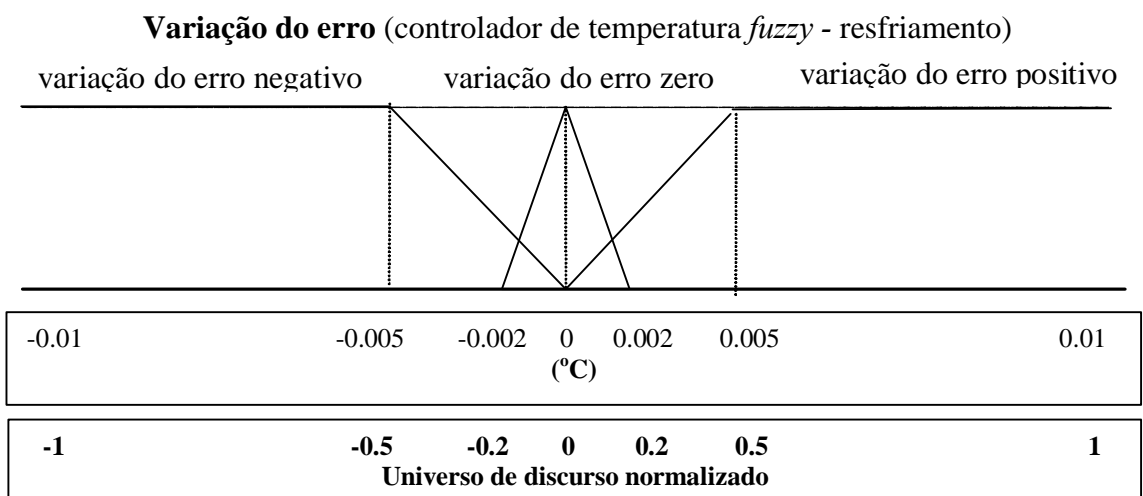


Figura 4.23. Funções de pertinência da variável lingüística “variação do erro” para o controlador PI-*fuzzy* de temperatura (resfriamento).

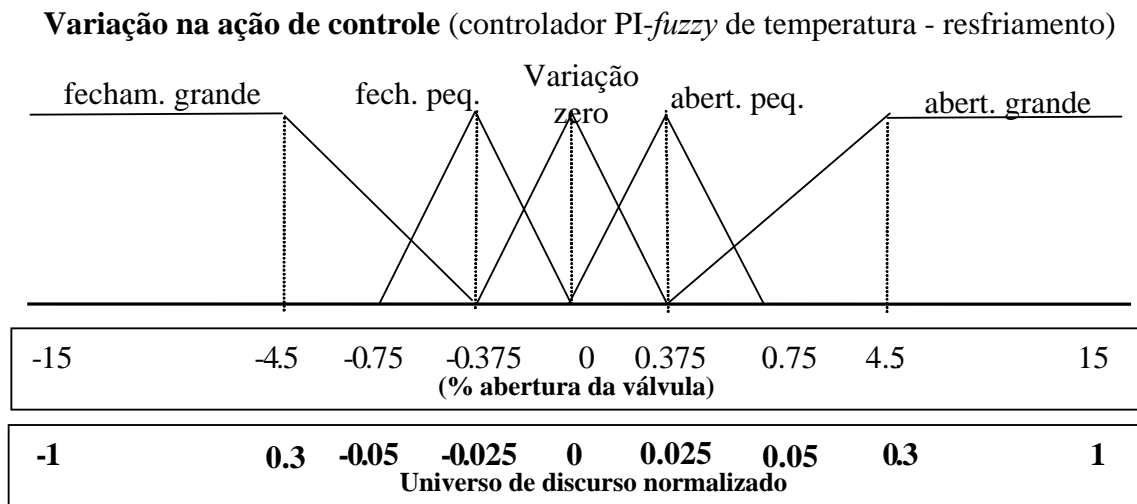


Figura 4.24. Funções de pertinência da variável lingüística “variação na ação de controle” para o controlador PI-*fuzzy* de temperatura (resfriamento).

A primeira simulação foi realizada com os valores dos parâmetros das funções de pertinência estabelecidos conforme as Figuras 4.19 a 4.24. A Figura 4.25 apresenta o resultado de simulação em malha fechada com o controle PI-*fuzzy*. A temperatura acompanhou a trajetória de *setpoint*, tendo ocorrido um pequeno *overshoot* e ausência de *offset*. Entretanto, o comportamento verificado na variável manipulada foi muito agressivo, o que inviabilizaria a efetiva concretização prática deste controlador.

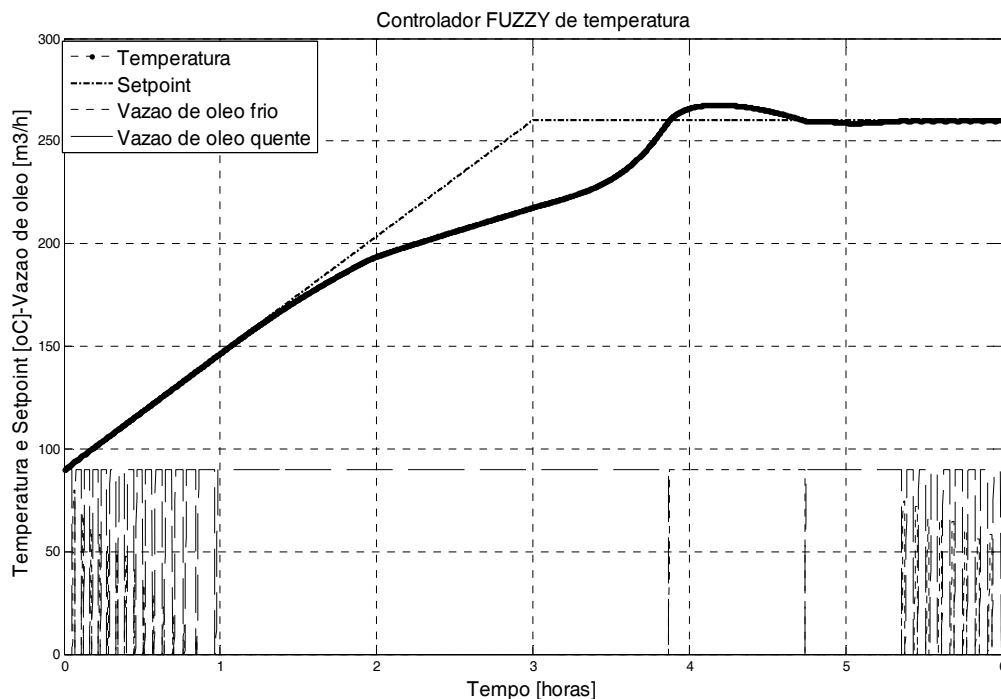


Figura 4.25. Temperatura. Simulação em malha fechada (controle PI-*fuzzy*, configuração com aquecimento e resfriamento).

Foram realizados ajustes adicionais de forma heurística sobre as regras propostas (Tabela 4.2), na tentativa de suavizar o comportamento da variável manipulada. Inicialmente as regras 2, 4, 6 e 7 foram alteradas de “abertura pequena” para “fechamento pequeno”, conforme ilustrado na Tabela 4.3, incorporando, neste caso, uma ação antecipatória ao

controlador. Houve uma melhora no comportamento da variável manipulada, sem prejuízo significativo de desempenho para o controle de temperatura, conseguindo inclusive, eliminar o *overshoot*, conforme ilustra a Figura 4.26.

Tabela 4.3. Conjunto de regras do controlador PI-fuzzy de temperatura (1ª. alteração)

regras	Erro	Condição	Variação do erro	Conseqüente	Variação na ação de controle
1	Se erro é zero	NA	NA	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é zero
2	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é zero	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é FECHAMENTO PEQUENO
3	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é positivo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é abertura grande
4	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é negativo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é FECHAMENTO PEQUENO
5	Se erro é zero	NA	NA	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é zero
6	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é zero	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é FECHAMENTO PEQUENO
7	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é positivo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é FECHAMENTO PEQUENO
8	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é negativo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é abertura grande

NA: Não se Aplica.

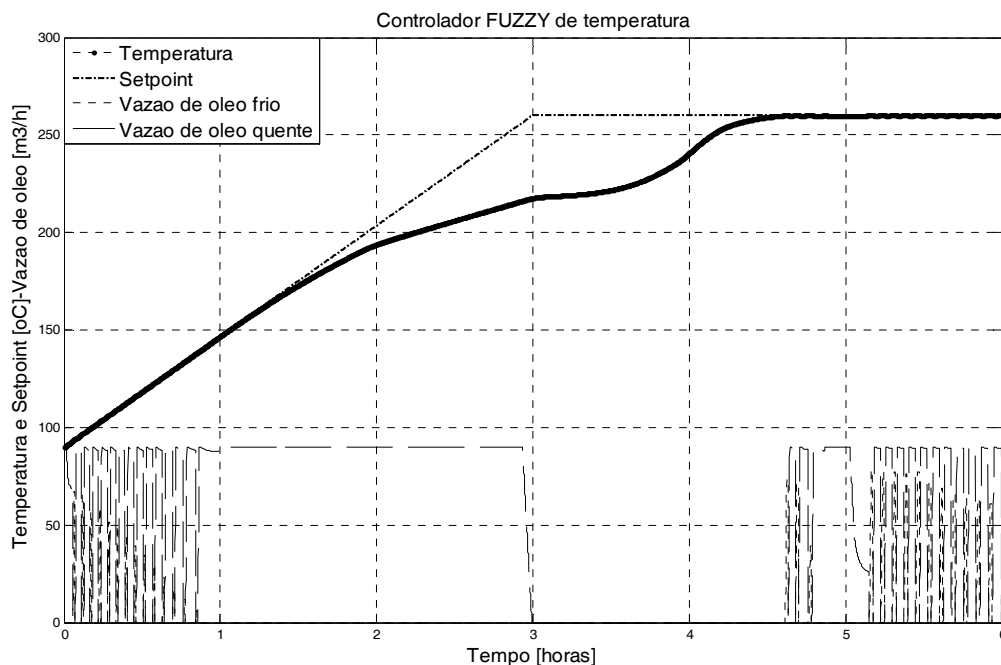


Figura 4.26. Temperatura (controle PI-fuzzy com regras conforme a Tabela 4.3).

Dando continuidade às alterações sobre os conseqüentes das regras para melhorar o comportamento da variável manipulada, as regras 2 e 6 foram alteradas de “fechamento pequeno” para “ação de controle zero”. Foram alteradas ainda as regras 3 e 8, de “abertura grande”

grande” para “abertura pequena”, na tentativa de suavizar a ação de controle. O novo conjunto de regras do controlador está representado na Tabela 4.4.

Tabela 4.4. Conjunto de regras do controlador PI-*fuzzy* de temperatura (2ª. alteração)

regras	Erro	Condição	Variação do erro	Conseqüente	Variação na ação de controle
1	Se erro é zero	NA	NA	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é zero
2	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é zero	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é ZERO
3	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é positivo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é ABERTURA PEQUENA
4	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é negativo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo quente é FECHAMENTO PEQUENO
5	Se erro é zero	NA	NA	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é zero
6	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é zero	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é ZERO
7	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é positivo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é FECHAMENTO PEQUENO
8	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é negativo	então	Variação na ação de controle para válvula de óleo frio é ABERTURA PEQUENA

NA: Não se Aplica.

O resultado de simulação com as regras da Tabela 4.4 está apresentado na Figura 4.27. Portanto, o novo conjunto de regras compreendeu a inclusão de ação antecipatória (regras 2, 4, 6 e 7) e suavização da ação de controle (regras 3 e 8). O comportamento agressivo inicial da variável manipulada pode ser explicado por um possível sobre-dimensionamento adotado para o coeficiente de válvula (C_v), em ambas as correntes de óleo frio e quente, existentes na unidade industrial. Vale ressaltar que os parâmetros de projeto considerados em todas as simulações estão em conformidade com as características de um reator de escala comercial existente no Brasil, que foi tomado como campo de testes. O dimensionamento incorreto das válvulas de controle é um problema algumas vezes freqüente em unidades industriais (Oliveira, 2007), gerando, no caso do super-dimensionamento, um ganho elevado para a malha aberta e amplificando efeitos de outros problemas existentes na própria válvula de controle.

O resultado obtido na Figura 4.27 mostra um comportamento da variável manipulada mais próximo da viabilidade de sua implementação, além de se verificar a eliminação do *offset* e do *overshoot* para a variável controlada.

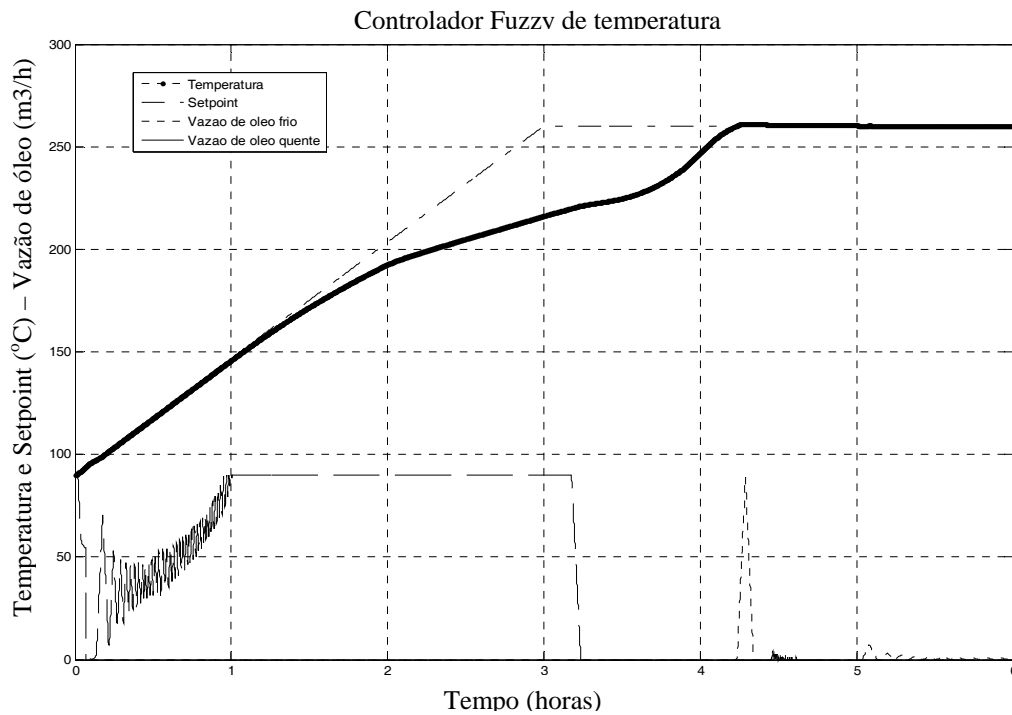


Figura 4.27. Temperatura (controle PI-*fuzzy* com regras conforme a Tabela 4.4).

A Tabela 4.5 ilustra a seqüência do procedimento adotado para as alterações nos conjuntos de regras do controlador PI-*fuzzy* de temperatura.

Tabela 4.5. Alterações nas regras do controle de temperatura

CONTROLADOR DE TEMPERATURA			VARIÇÃO NA AÇÃO DE CONTROLE		
	Erro	Varição do erro	Tabela 4.2	Tabela 4.3	Tabela 4.4
Regra 1	zero	NA	zero	zero	zero
Regra 2	positivo	zero	abertura pequena	FECHAMENTO PEQUENO	ZERO
Regra 3	positivo	positivo	abertura grande	abertura grande	ABERTURA PEQUENA
Regra 4	positivo	negativo	abertura pequena	FECHAMENTO PEQUENO	FECHAMENTO PEQUENO
Regra 5	zero	NA	zero	zero	zero
Regra 6	negativo	zero	abertura pequena	FECHAMENTO PEQUENO	ZERO
Regra 7	negativo	positivo	abertura pequena	FECHAMENTO PEQUENO	FECHAMENTO PEQUENO
Regra 8	negativo	negativo	abertura grande	abertura grande	ABERTURA PEQUENA

NA: Não se Aplica.

4.3.2. Controlador PI-fuzzy de pressão (aquecimento e resfriamento)

A Figura 4.28 ilustra diferentes configurações para o erro e para a variação do erro na malha de controle da pressão.

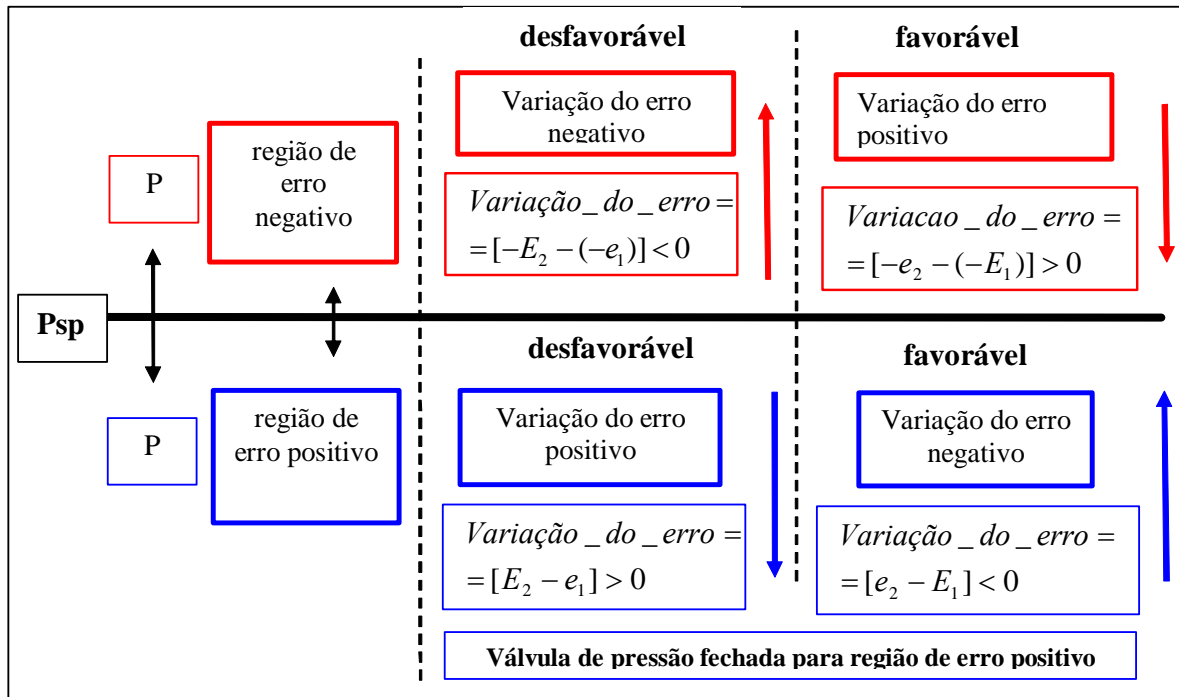


Figura 4.28. Configurações para sinais do erro e da variação do erro (controle da pressão).

A Tabela 4.6 apresenta as regras estabelecidas para o controlador de pressão. Nota-se que para a situação de erro positivo, ou seja, quando a pressão na fase vapor do reator está abaixo do valor determinado pelo *setpoint*, a válvula de controle deve permanecer fechada.

Tabela 4.6. Conjunto de regras do controlador PI-fuzzy de pressão

regras	Erro	condição	Variação do erro	conseqüente	Variação na ação de controle
1	Se erro é zero	NA	NA	então	Variação na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é zero
2	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é zero	então	Variação na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é fechamento grande
3	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é positivo	então	Variação na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é fechamento grande
4	Se erro é positivo	<i>e</i>	Variação do erro é negativo	então	Variação na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é fechamento grande
5	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é zero	então	Variação na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é abertura pequena
6	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é positivo	então	Variação na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é fechamento pequeno
7	Se erro é negativo	<i>e</i>	Variação do erro é negativo	então	Variação na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é abertura grande

NA: Não se Aplica.

As funções de pertinência para cada um dos antecedentes e para o conseqüente das regras estão apresentadas nas Figuras 4.29 a 4.31.

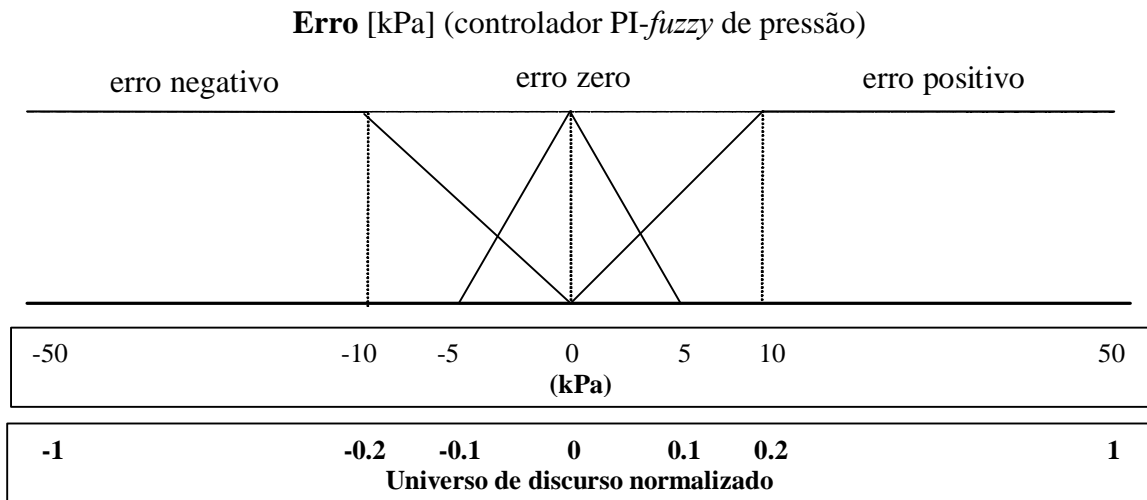


Figura 4.29. Funções de pertinência da variável lingüística erro, para o controlador PI-fuzzy de pressão.

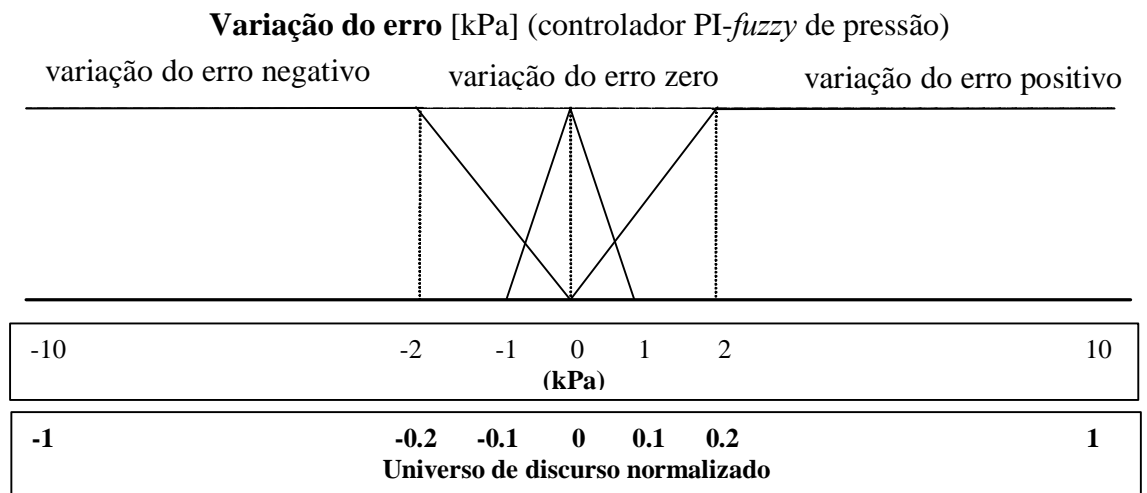


Figura 4.30. Funções de pertinência da variável lingüística variação do erro, para o controlador PI-fuzzy de pressão.

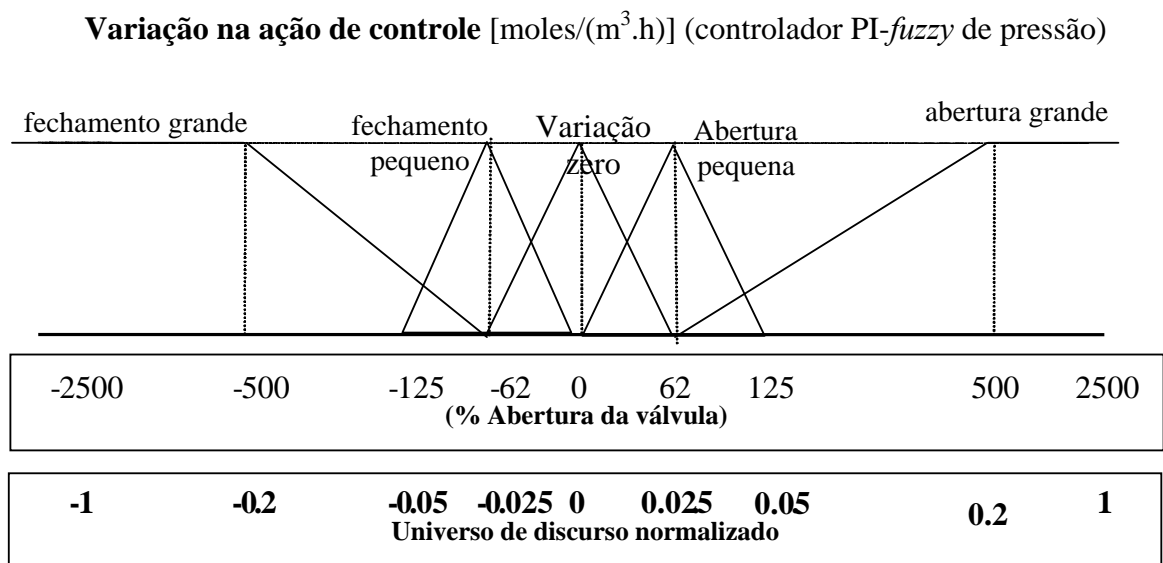


Figura 4.31. Funções de pertinência da variável lingüística “variação na ação de controle”, para o controlador PI-fuzzy de pressão.

A Figura 4.32 ilustra o resultado da simulação feita com o controlador PI-*fuzzy* de pressão, com os parâmetros de ajuste das funções de pertinência determinados heurísticamente, indicados nas Figuras 4.29 a 4.31, e utilizando o conjunto de regras definido na Tabela 4.6.

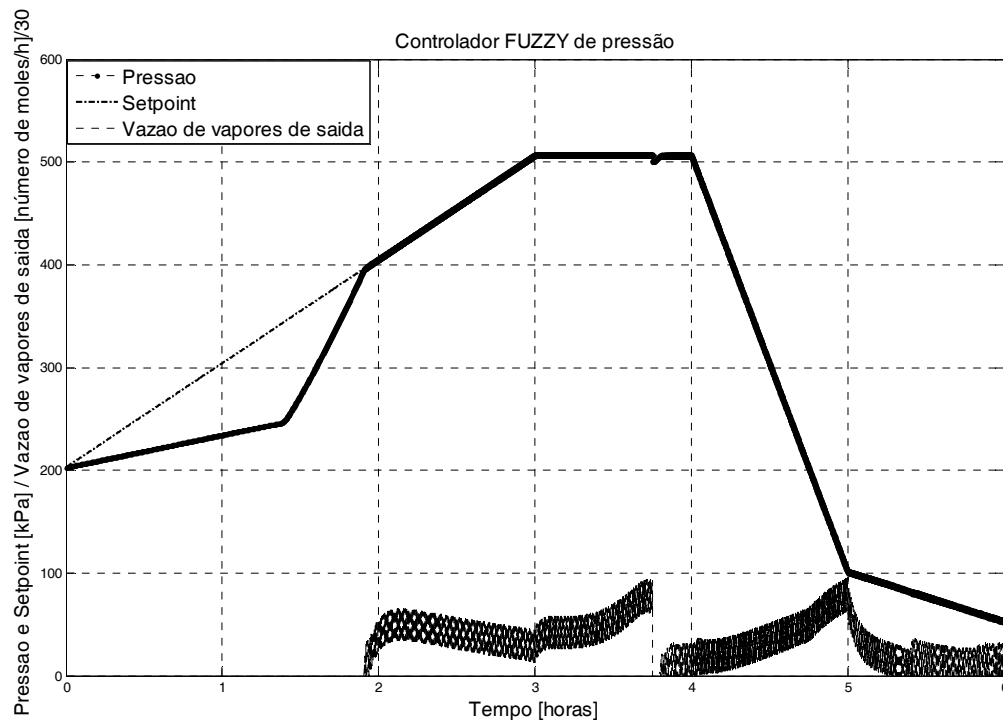


Figura 4.32. Pressão. Controle PI-*fuzzy* (configuração com aquecimento e resfriamento).

O comportamento da variável manipulada apresentou elevada frequência de oscilação, então, seguindo procedimento análogo em relação ao controle de temperatura, a regra 5 foi alterada de “abertura pequena” para “ação de controle zero”.

A ação de controle da regra 7 também foi alterada de “abertura grande” para “abertura pequena”, na tentativa de suavizar a ação da variável manipulada. Essa alteração fez com que fosse necessário aumentar a largura da função de pertinência “abertura pequena” da ação de controle. Então, na primeira tentativa, os parâmetros dessa função de pertinência foram aumentados de [0; 0.025; 0.05] para [0; 0.05; 0.1], e a Figura 4.33 apresenta o resultado da simulação com essas alterações. As alterações realizadas estão representadas na Tabela 4.7.

Nota-se, na Figura 4.33, que a variável manipulada do controlador PI-*fuzzy* já não apresenta a frequência de oscilação verificada anteriormente, mas ela não conseguiu dar vazão suficiente para a saída dos vapores do reator, fazendo com que a pressão no reator ficasse ligeiramente maior do que o *setpoint*. Assim sendo, foram elevados os parâmetros da função de pertinência da “abertura pequena” de [0; 0.05; 0.1] para [0; 0.1; 0.2], e a Figura 4.34 apresenta os resultados da simulação após essa modificação, conseguindo eliminar o *offset*, e mantendo um comportamento satisfatório para a variável manipulada.

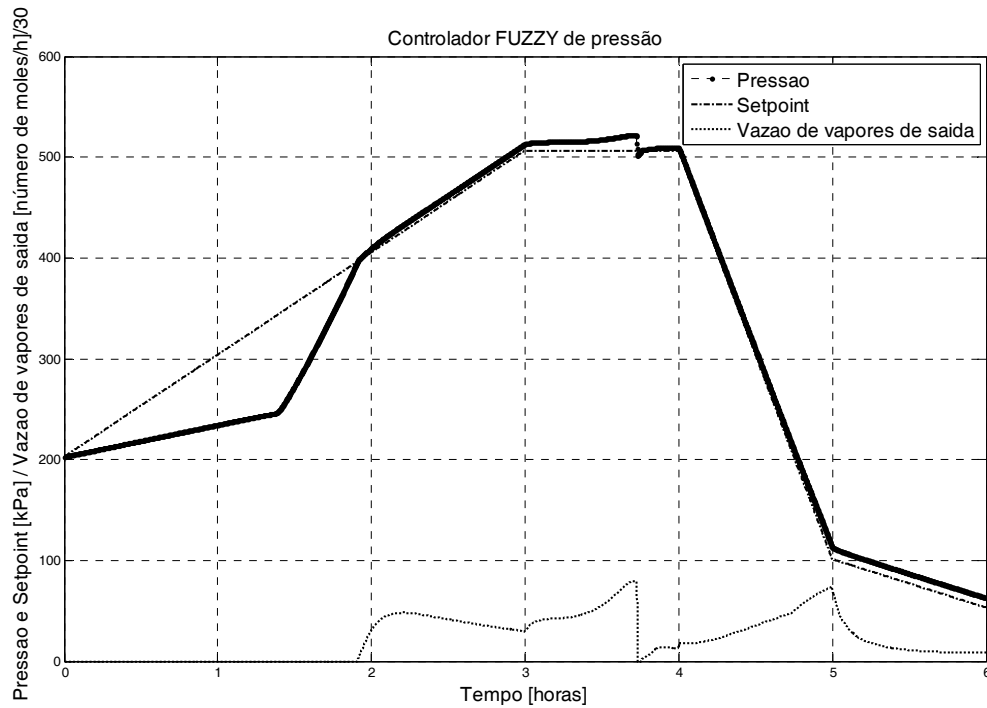


Figura 4.33. Controle pressão. Regras conforme a Tabela 4.6.

Tabela 4.7. Conjunto de regras do controlador PI-*fuzzy* de pressão (primeira alteração)

regras	Erro	condição	Varição do erro	consequente	Varição na ação de controle
1	Se erro é zero	NA	NA	então	Varição na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é zero
2	Se erro é positivo	<i>e</i>	Varição do erro é zero	então	Varição na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é fechamento grande
3	Se erro é positivo	<i>e</i>	Varição do erro é positivo	então	Varição na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é fechamento grande
4	Se erro é positivo	<i>e</i>	Varição do erro é negativo	então	Varição na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é fechamento grande
5	Se erro é negativo	<i>e</i>	Varição do erro é zero	então	Varição na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é ZERO
6	Se erro é negativo	<i>e</i>	Varição do erro é positivo	então	Varição na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é fechamento pequeno
7	Se erro é negativo	<i>e</i>	Varição do erro é negativo	então	Varição na ação de controle para a válvula da saída dos vapores é ABERTURA PEQUENA

NA: Não se Aplica.

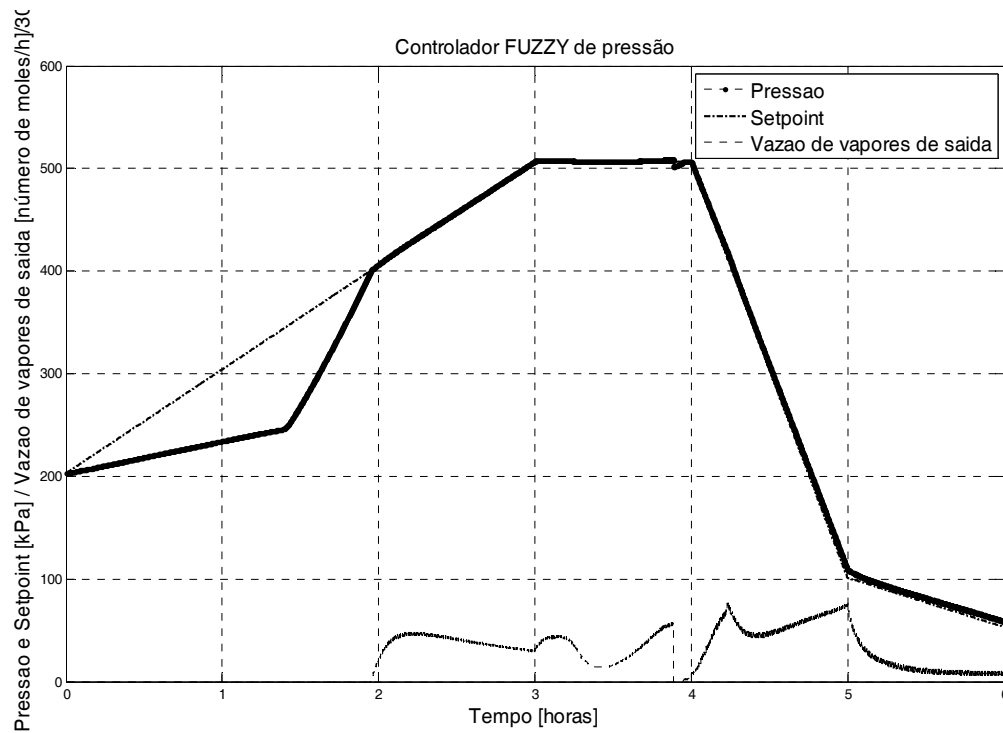


Figura 4.34. Controle pressão. Parâmetros de Abertura pequena alterados de [0; 0.05; 0.1] para [0; 0.1; 0.2].

A Tabela 4.8 ilustra todas as alterações efetuadas no conjunto de regras para o controlador de pressão.

Tabela 4.8. Alterações nas regras do controlador de pressão

MALHA DE PRESSÃO		VARIÇÃO NA AÇÃO DE CONTROLE		
	Erro	Varição do erro	Tabela 4.6	Tabela 4.7
Regra 1	Erro positivo	NA	zero	zero
Regra 2	Erro positivo	zero	fechamento grande	fechamento grande
Regra 3	Erro positivo	positivo	fechamento grande	fechamento grande
Regra 4	Erro positivo	negativo	fechamento grande	fechamento grande
Regra 5	Erro negativo	zero	abertura pequena	ZERO
Regra 6	Erro negativo	positivo	fechamento pequeno	fechamento pequeno
Regra 7	Erro negativo	negativo	abertura grande	ABERTURA PEQUENA

NA: Não se Aplica.

4.3.3. Controle PI-*fuzzy* de temperatura. Sintonia ótima

Adotando-se a mesma metodologia aplicada para o controle PID, procedeu-se, nesta etapa, a sintonia ótima de potenciais parâmetros de ajuste do controlador PI-*fuzzy* de temperatura. A estimativa inicial de cada um dos fatores de escala (definidos nos itens 3.4.5, 4.3.1 e 4.3.2) foi determinada através de dados obtidos de simulações prévias com o modelo fenomenológico do sistema.

De acordo com suas características intrínsecas (funções de pertinência $\mu_{A_i}(u_i)$ e $\mu_{B_q}(y_q)$, e universos de discurso U_i e Y_i), a estratégia de controle *fuzzy* oferece um potencial elevado de parâmetros que podem ser ajustados, no sentido de alcançar um determinado critério de desempenho.

As funções de pertinência das variáveis “erro”, “variação do erro” e “variação da ação de controle” adotadas neste trabalho são simétricas entre si. Por exemplo, a função de pertinência “erro negativo” é simétrica em relação à função de pertinência “erro positivo”. Desta forma, a aplicação do método de sintonia ótima foi programada para que os parâmetros calculados mantivessem essa mesma estrutura simétrica. Assim sendo, os parâmetros das funções de pertinência têm os mesmos valores com sinais opostos.

Os parâmetros das estimativas iniciais das funções de pertinência, definidas nos itens 4.3.1 e 4.3.2, foram estabelecidas de forma heurística, e como o número dos parâmetros escolhidos para serem ajustados foi grande, o procedimento de obtenção do valor ótimo destes parâmetros foi dividido em duas etapas, a fim de minimizar o esforço computacional e aumentar a possibilidade de sucesso do procedimento numérico.

Inicialmente, foram considerados apenas quatro parâmetros de sintonia do controlador de temperatura, cujos valores (normalizados) calculados pelo método de sintonia ótima foram (esses resultados estão apresentados na Tabela 4.9). Esses parâmetros foram escolhidos porque influenciam na forma de atuação da válvula de óleo quente, na fase de aquecimento.

- ✓ 0.0211 (parâmetro 2) para o segundo parâmetro da função de pertinência do “erro positivo”, e -0.0211 para o “erro negativo”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.35;
- ✓ 0.7294 (parâmetro 4) para o segundo parâmetro da função de pertinência da “variação do erro positivo”, e -0.7294 para a “variação do erro negativo”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.36;
- ✓ 0,299 (parâmetro 13) para o terceiro parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura pequena” e -0.299 para o “fechamento pequeno”, na fase do resfriamento, valores estes que estão indicados na Figura 4.40;
- ✓ 0.9 (parâmetro 14) para o segundo parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura grande” e -0.9 para o “fechamento grande”, na fase do resfriamento, valores estes que estão indicados na Figura 4.40.

Tabela 4.9. Resultados iniciais dos parâmetros do controlador de temperatura – Sintonia ótima

Parâmetro	Parâmetros das funções de pertinência	Valores otimizados (normalizado)
2	Erro positivo aquecimento	0.0211
4	Variação do erro positivo aquecimento	0.7294
13	Abertura e fechamento pequeno	0.299
14	Abertura grande resfriamento	0.9

Substituindo os parâmetros iniciais obtidos de maneira heurística e apresentados nas Figuras 4.19 a 4.24 pelos obtidos na primeira etapa da aplicação do método de sintonia

ótima (Tabela 4.9), procedeu-se a segunda aplicação do método de sintonia ótima com mais oito novos parâmetros, convergindo para os seguintes resultados, que estão também apresentados na Tabela 4.10:

- 0.2935 e -0.2935 (parâmetro 3) para os parâmetros da função de pertinência “variação do erro zero” na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.36;
- 0.2 (parâmetro 5) para o primeiro parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura grande” e -0.2 para “fechamento grande”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.37;
- 0.05 (parâmetro 6) para o terceiro parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura pequena” e -0.05 para “fechamento pequeno”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.37;
- 0.5755 (parâmetro 7) para o segundo parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura grande” e -0.5755 para “fechamento grande”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.37;
- 0.1 (parâmetro 9) para o segundo parâmetro da função de pertinência do “erro positivo”, e -0.1 para o “erro negativo”, na fase do resfriamento, valores estes que estão indicados na Figura 4.38;
- 0.01 e -0.01 (parâmetro 10) para os parâmetros da função de pertinência da “variação do erro zero” na fase do resfriamento, valores estes que estão indicados na Figura 4.39;
- 0.1747 (parâmetro 11) para o segundo parâmetro da função de pertinência da “variação do erro positivo”, e -0.1747 para a “variação do erro negativo”, na fase de resfriamento, valores estes que estão indicados na Figura 4.39;
- 0.1127 (parâmetro 12) para o primeiro parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura grande” e -0.1127 para “fechamento grande”, na fase de resfriamento, valores estes que estão indicados na Figura 4.40.

Tabela 4.10. Resultados da segunda etapa de otimização dos parâmetros do controlador de temperatura – Sintonia ótima

Parâmetro	Parâmetros das funções de pertinência	Valores otimizados (normalizado)
3	“Variação do erro zero” aquecimento	0.2935
5	“Abertura grande” (1º. parâmetro) aquecimento	0.2
6	“Abertura pequena” (3º. parâmetro) aquecimento	0.05
7	“Abertura grande” (2º. parâmetro) aquecimento	0.5755
9	“Erro positivo” (2º. parâmetro) resfriamento	0.1
10	“Variação erro zero” resfriamento	0.01
11	“Variação erro positivo” (2º. parâmetro) resfriamento	0.1747
12	“Abertura grande” (1º. parâmetro) resfriamento	0.1127

Os valores obtidos pelo procedimento de sintonia ótima (Tabela 4.10), com as novas regras (Tabela 4.7), foram inseridos nas respectivas funções de pertinência das variáveis lingüísticas, conforme ilustrado nas Figuras 4.35 a 4.40.

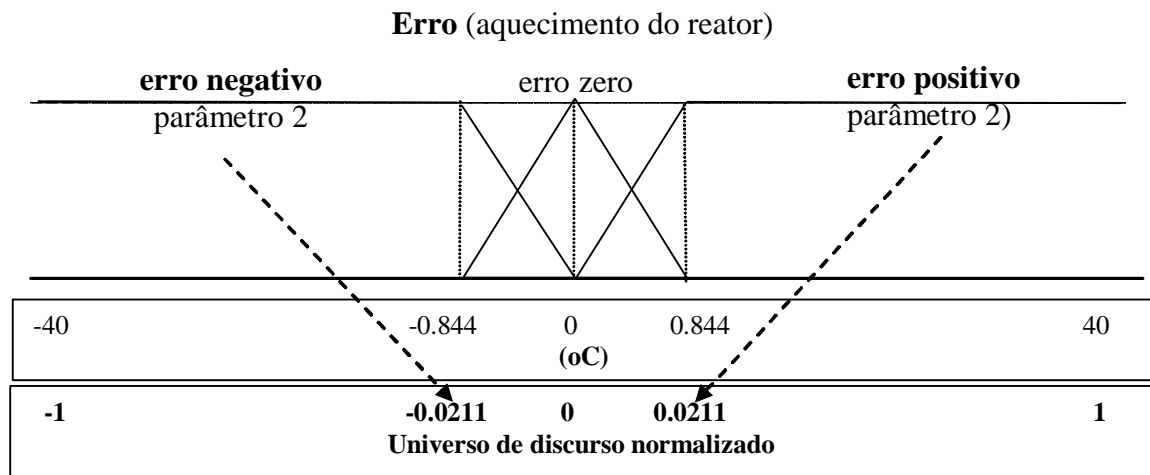


Figura 4.35. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para o erro.

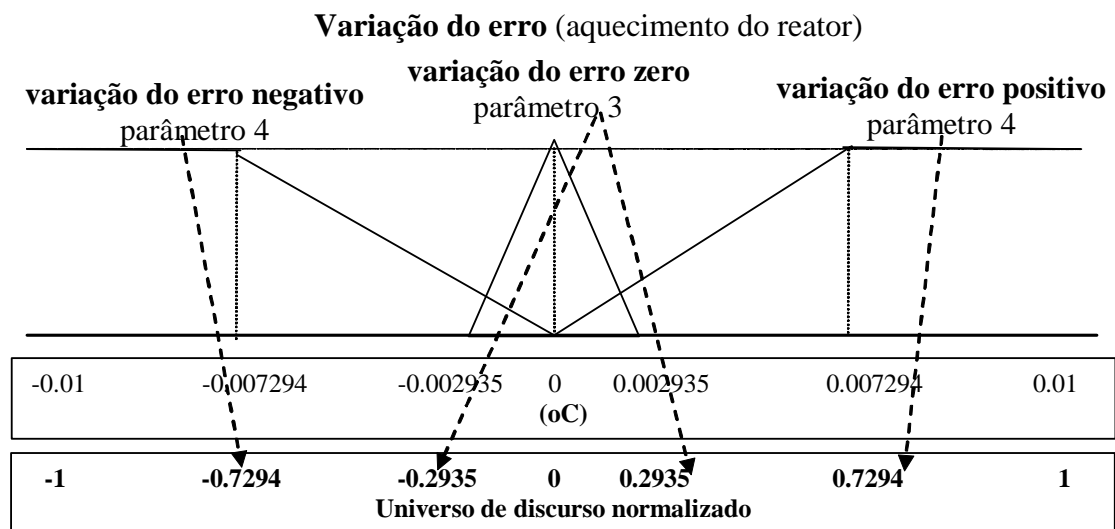


Figura 4.36. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação do erro.

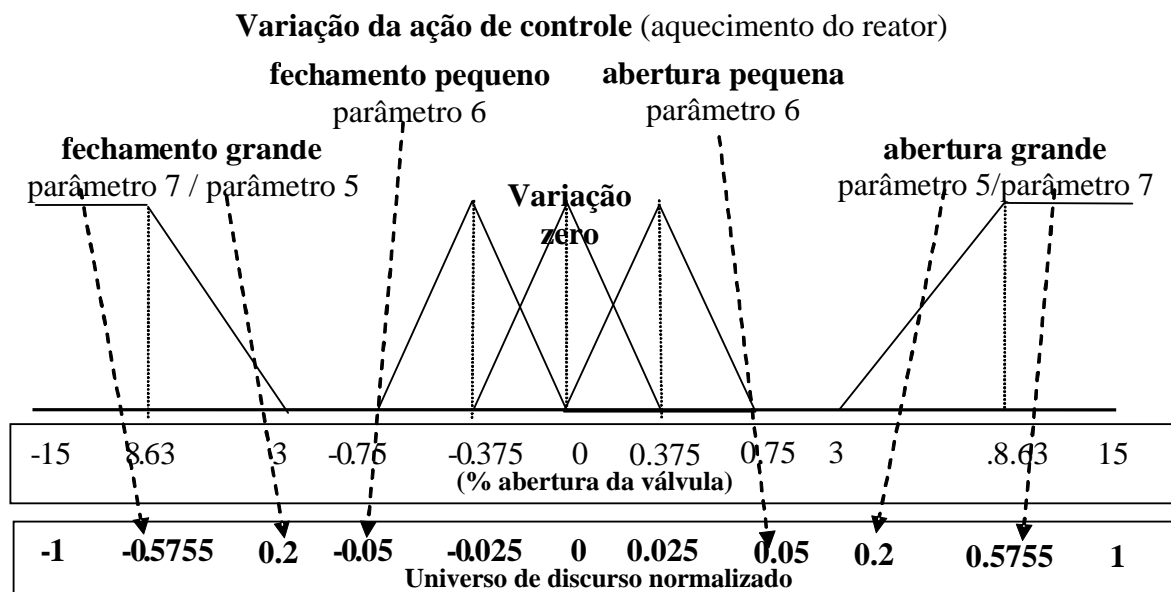


Figura 4.37. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação da ação de controle.

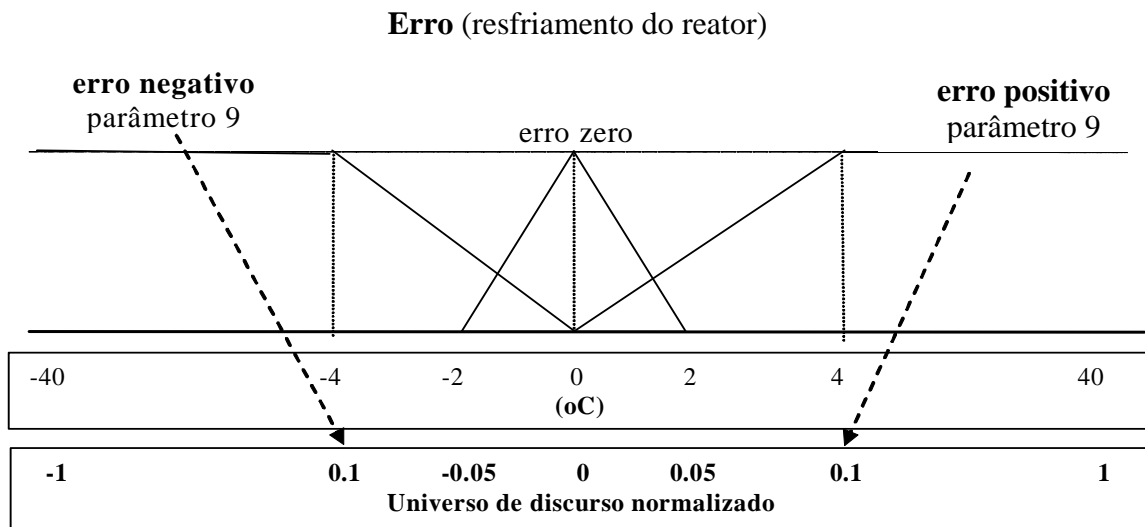


Figura 4.38. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para o erro.

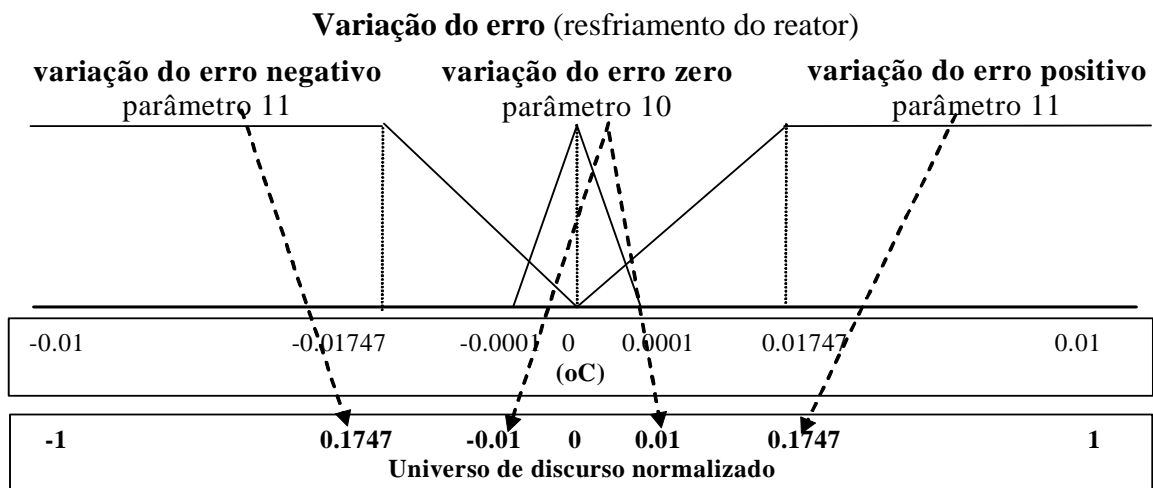


Figura 4.39. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação do erro.

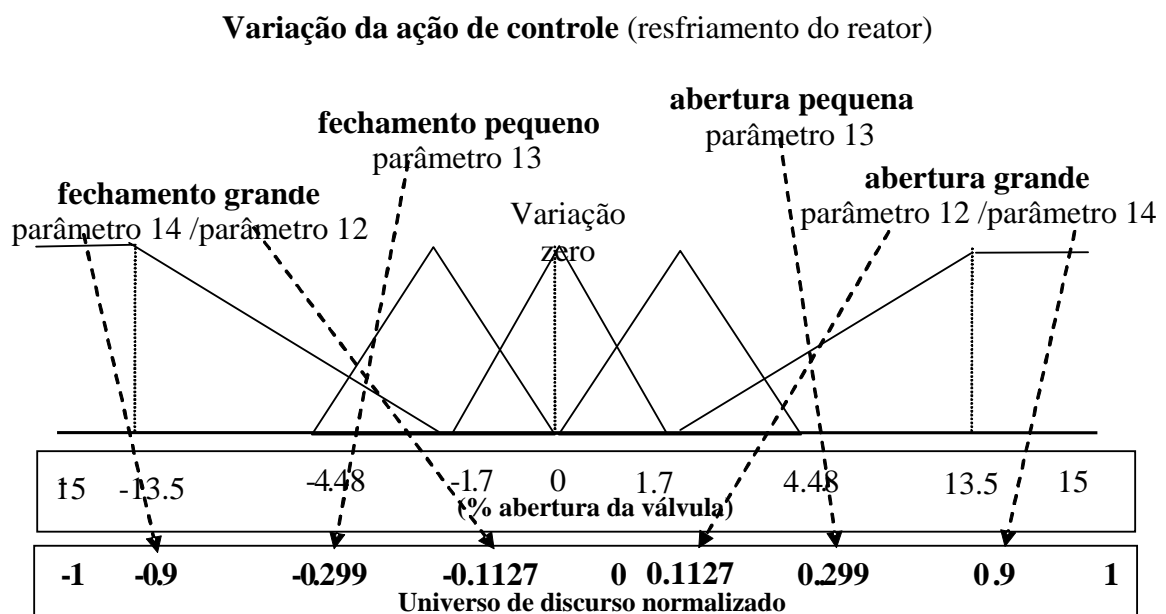


Figura 4.40. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação da ação de controle.

A simulação do controlador PI *fuzzy* de temperatura com os 12 parâmetros otimizados apresentou resultados muito bons (Figura 4.41), conseguindo eliminar quase que completamente o *overshoot* e o *offset*. Seu desempenho será comparado no item 4.4.1 com o desempenho do controlador PID, também sintonizado com parâmetros obtidos pelo procedimento de sintonia ótima.

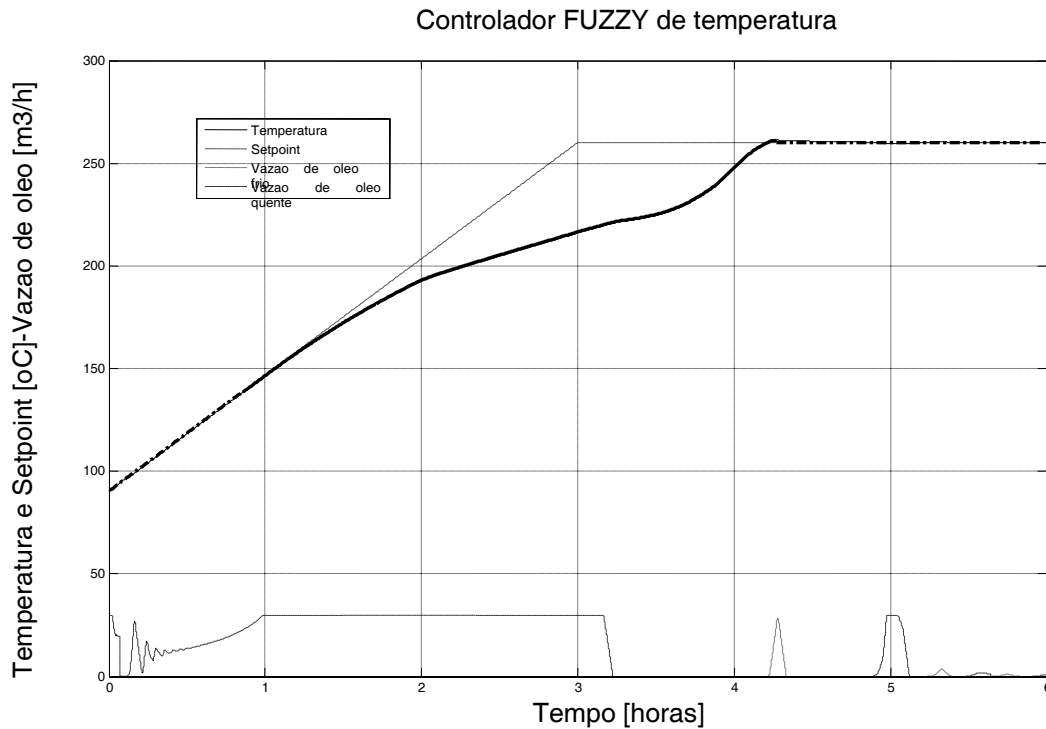


Figura 4.41. Temperatura - Controlador PI-*fuzzy* - Sintonia ótima (aquecimento e resfriamento).

4.3.4. Controle PI-*fuzzy* de temperatura. Sintonia ótima e apenas sistema de aquecimento

Considerando que a unidade industrial, tomada como caso base para este trabalho e cujos parâmetros de projeto foram adotados como referência, opera, durante toda a batelada, apenas com aquecimento da camisa, esta situação foi contemplada também nos testes de simulação com o controlador PI-*fuzzy*. Neste caso, as regras estão apresentadas na Tabela 4.11.

Tabela 4.11. Regras para o controlador de temperatura (apenas aquecimento)

regras	Erro	condição	Variação do erro	conseqüente	Variação da ação de controle
1	Se erro é zero	NA	NA	então	variação da ação de controle é zero
2	Se erro é positivo	e	variação do erro é zero	então	variação da ação de controle é zero
3	Se erro é positivo	e	variação do erro é positivo	então	variação da ação de controle é abertura pequena
4	Se erro é positivo	e	variação do erro é negativo	então	variação da ação de controle é fechamento pequeno

NA: Não se Aplica.

Após a aplicação do método de sintonia ótima para a determinação dos seis parâmetros das funções de pertinência e de dois fatores de escala, foram encontrados os valores relacionados a seguir, e também, apresentados na Tabela 4.12.

- 0.01 e -0.01 (parâmetro 2) para os parâmetros das funções de pertinência “erro positivo” e “erro negativo” na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.42;
- 0.3 e -0.3 (parâmetro 3) para os parâmetros da função de pertinência “variação do erro zero” na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.43;
- 0.8 (parâmetro 4) para o segundo parâmetro da função de pertinência “variação do erro positivo” e -0.8 para “variação do erro negativo”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.43;
- 0.025 (parâmetro 5) para o primeiro parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura grande” e -0.025 para “fechamento grande”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.44;
- 0.149 (parâmetro 6) para o terceiro parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura pequena” e -0.149 para “fechamento pequeno”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.44;
- 0.3 (parâmetro 7) para o segundo parâmetro da função de pertinência da ação de controle “abertura grande” e -0.3 para “fechamento grande”, na fase do aquecimento, valores estes que estão indicados na Figura 4.44;
- 0.05 para o fator de escala da variável lingüística “variação do erro”, na fase de aquecimento (Figura 4.42);
- 20 para o fator de escala da variável lingüística “variação na ação de controle” na fase de aquecimento (Figura 4.44).

Tabela 4.12. Parâmetros otimizados para o controlador de temperatura (apenas aquecimento)

Parâmetro	Parâmetros das funções de pertinência	Valores otimizados
2	“Erro positivo” aquecimento	0.01
3	“Variação do erro zero” aquecimento	0.3
4	“Variação erro positivo” aquecimento	0.8
5	“Abertura grande” (1°. parâmetro) aquecimento	0.025
6	“Abertura pequena” (3°. parâmetro) aquecimento	0.149
7	“Abertura grande” (2°. parâmetro) aquecimento	0.3
15	Fator de escala da variação do erro	0.05
16	Fator de escala da ação de controle	20

As Figuras 4.42 a 4.44 mostram os parâmetros otimizados, nas suas respectivas funções de pertinência e nas escalas do universo de discurso das variáveis lingüísticas, para a situação onde o reator opera apenas com sistema de aquecimento.

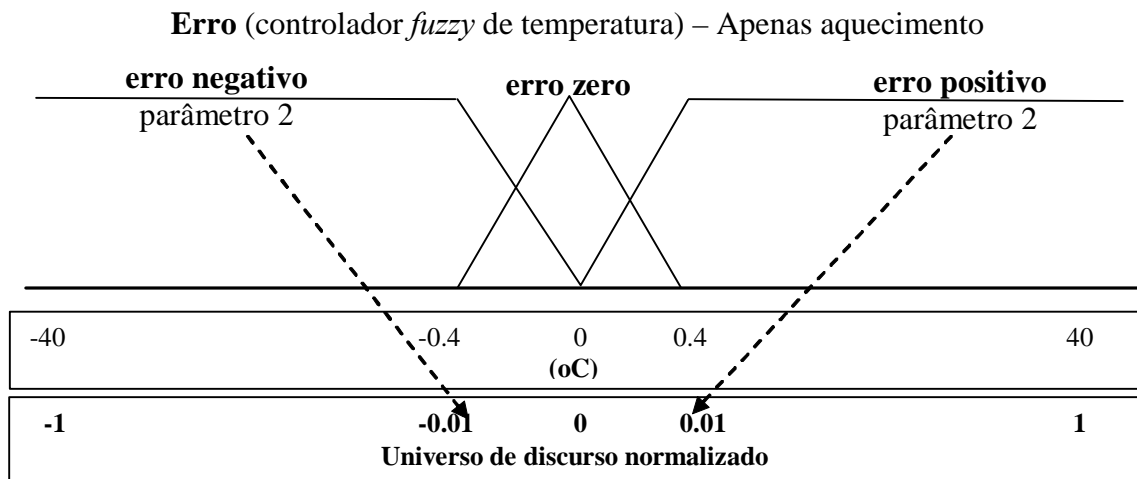


Figura 4.42. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para o erro.

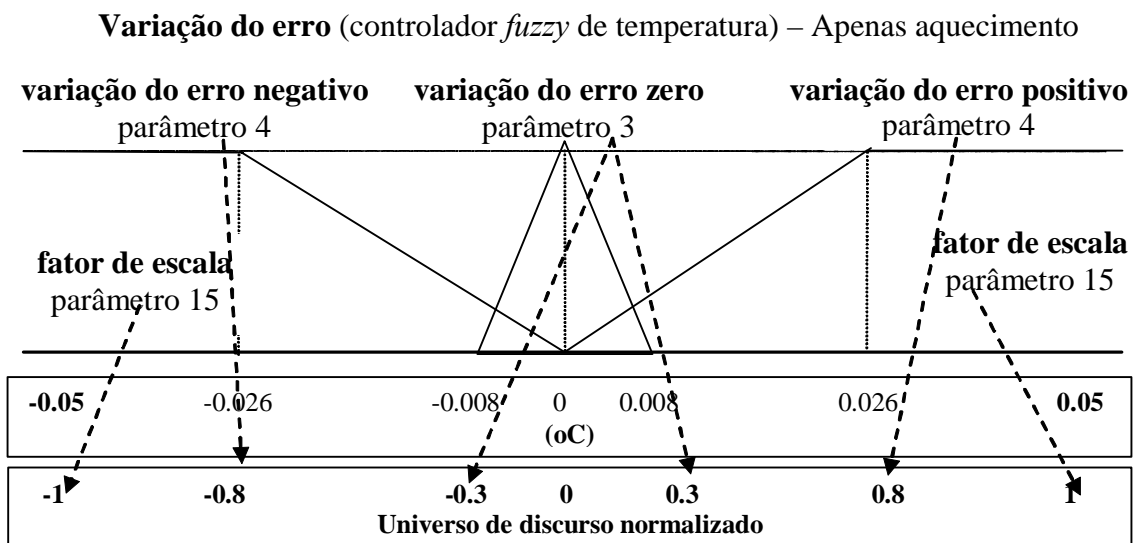


Figura 4.43. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação do erro.

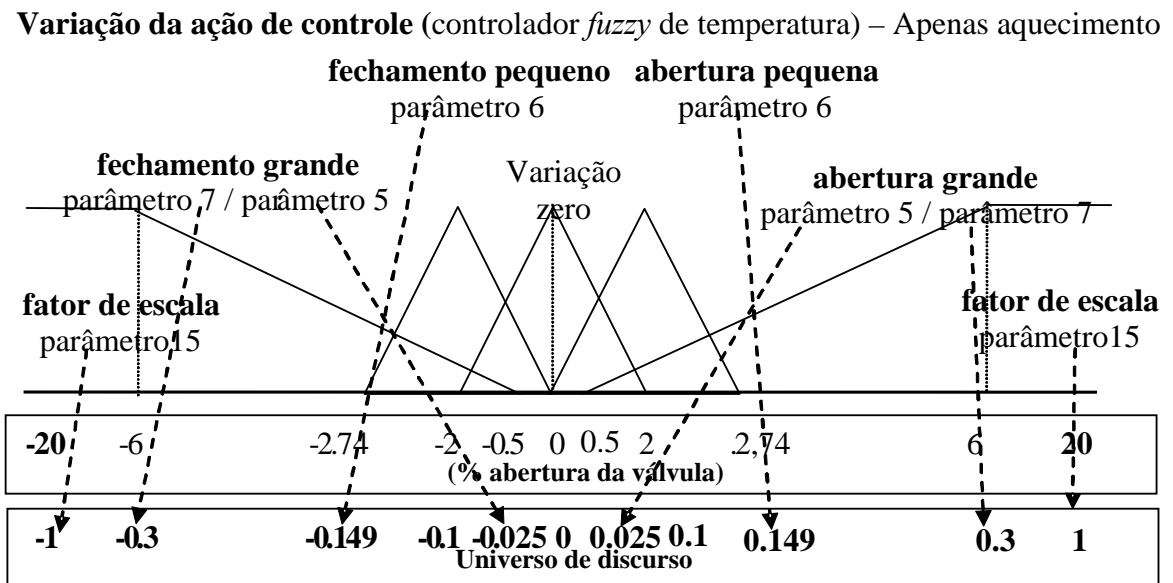


Figura 4.44. Parâmetros ajustados. Funções de pertinência para a variação da ação de controle.

Os resultados das simulações com os controladores PI-*fuzzy* de temperatura e pressão, para a situação onde o reator opera apenas o sistema de aquecimento, com os parâmetros ajustados pelo procedimento de sintonia ótima, estão apresentados nas Figuras 4.45 e 4.46. Estes resultados mostram um bom desempenho dos controladores, podendo ser observado que as variáveis controladas acompanham os *setpoints* ao longo das suas trajetórias, com valores pequenos para o *overshoot* e para o *offset*.

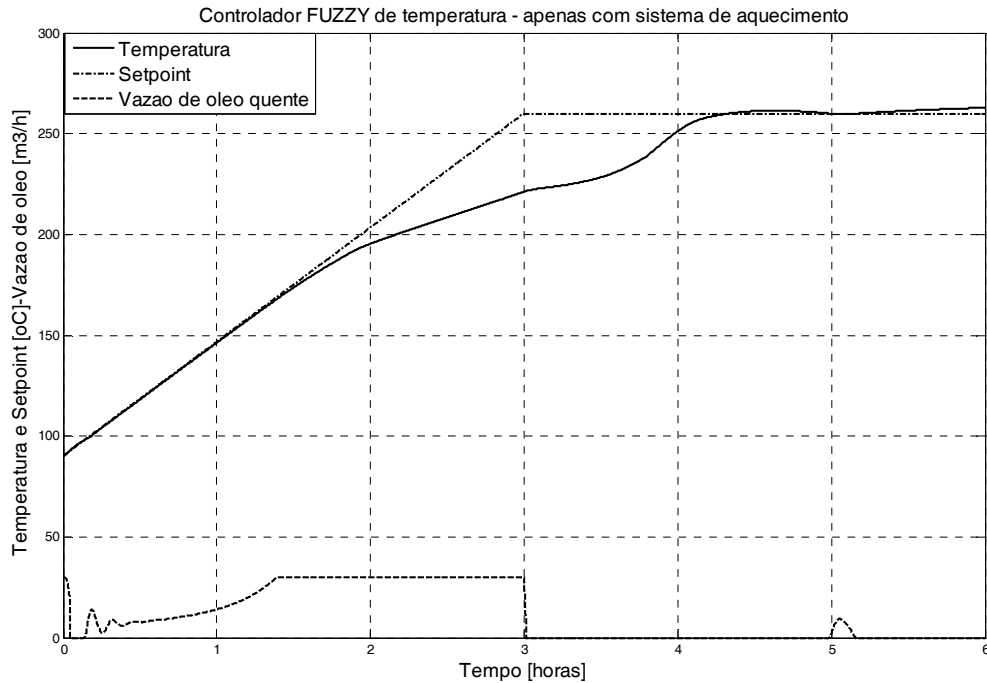


Figura 4.45. Temperatura. Parâmetros ajustados pelo procedimento de sintonia ótima.

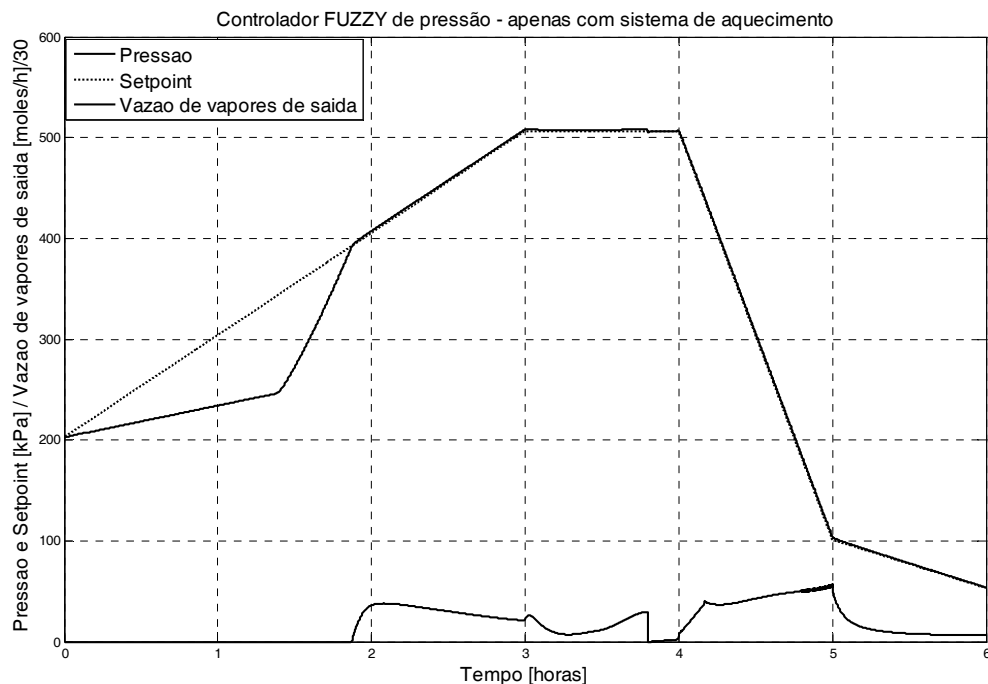


Figura 4.46. Pressão. Parâmetros ajustados heurísticamente

4.4. Análise comparativa dos desempenhos dos controladores

Ao projetar sistemas de controle, é fundamental definir todos os fatores que influenciam nos custos de produção, na qualidade dos produtos, na segurança e em outros aspectos relevantes, e a partir daí, definir os critérios de desempenho do sistema de controle a serem adotados, que podem estar associados a características pontuais da resposta dinâmica, tais como *overshoot*, tempo de subida e razão de decaimento. Para alguns processos, o comportamento no estado estacionário é mais importante do que o comportamento dinâmico provocado por distúrbios, e, para outros, o comportamento dinâmico é mais importante do que o comportamento no estado estacionário.

É necessário estabelecer, então, uma base de comparação entre alternativas de estratégias de controle, escolhendo e estudando criteriosamente os fatores de desempenho das mesmas, objetivando a melhoria na qualidade do produto final, os aspectos de segurança, a minimização dos custos de produção, dentre outros.

No sistema em estudo, tem-se basicamente um problema servo onde os controladores de temperatura e de pressão operam sem que haja a manutenção do sistema em um determinado estado estacionário. Conforme os resultados verificados nas diferentes estratégias e configurações, as seguintes observações preliminares podem ser feitas:

- Dificuldade de efetivo alcance dos *setpoints* ao longo da rampa de subida, pelas variáveis controladas. Este fato está associado à capacitância térmica do sistema;
- Ocorrência de *overshoot* da temperatura no final da rampa de subida e início do patamar de temperatura constante. O mesmo não se verificou de forma significativa em relação à pressão, cuja dinâmica é notadamente mais rápida.

O controle da temperatura para o sistema da unidade industrial tomada como objeto de estudo é feito controlando a temperatura do óleo quente, tendo um indicador de temperatura para acompanhar a temperatura da massa reacional. Com a alimentação de matérias primas no início do processo, a temperatura da massa reacional cai até um valor mínimo (vale inferior), e então, por troca térmica, vai aumentando a sua temperatura. Assim sendo, o controle da temperatura na massa reacional é feito de maneira indireta, conforme mostram os registros da Figura 4.47.

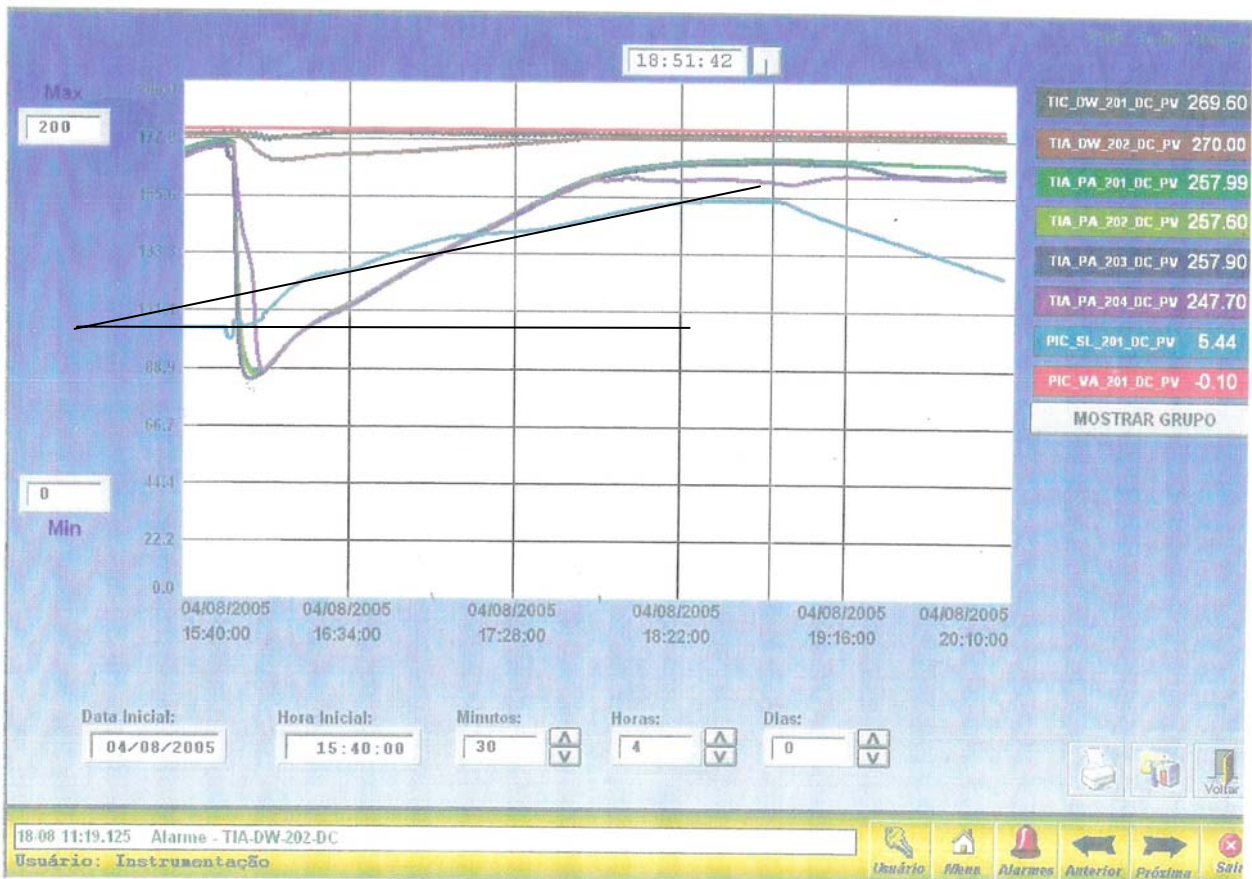


Figura 4.47. Variáveis controladas do sistema de produção de nylon de uma planta industrial real.

À direita da Figura 4.47 existe uma legenda que, de cima para baixo, representam:

1. Controlador da temperatura do trocador de aquecimento do óleo térmico;
2. Indicador da temperatura da jaqueta;
3. Indicador da temperatura na massa reacional (cor verde escuro);
4. Indicador de temperatura auxiliar;
5. Indicador de temperatura auxiliar;
6. Indicador de temperatura auxiliar;
7. Controlador da pressão no interior do reator semi-batelada;
8. Controlador da pressão negativa no interior do reator.

Dentre os requisitos ou critérios de desempenho estabelecidos para o sistema em estudo, pode-se destacar que a minimização do *overshoot* e a redução de *offset*, associada diretamente ao ISE (*Integral of Squared Error*, integral do erro quadrático), são parâmetros quantitativos importantes para a verificação da qualidade dos resultados obtidos, e foram adotados como indicadores principais na comparação entre as estratégias aplicadas. Visando organizar os resultados já apresentados e discutidos, nesta seção são apresentados e comparados os desempenhos das estratégias PID e PI-*fuzzy* para ambas as configurações de aquecimento e resfriamento, assim como para a situação onde apenas o sistema de aquecimento está operacional.

4.4.1. Malha de temperatura com sistema de aquecimento e resfriamento – Análise comparativa entre o controlador convencional PI e o controlador PI-fuzzy, ambos ajustados pelo procedimento de sintonia ótima

Para não haver degradação nas propriedades químicas e físicas do nylon 6 é importante controlar a temperatura de maneira a manter o *overshoot* menor do que 3 °C. Nesse sentido, o controle PI-fuzzy se mostrou mais efetivo, limitando o *overshoot* a 1.22 °C, e eliminando o *offset*, enquanto o controlador convencional apresentou um *overshoot* de 9.07 °C. Esse *overshoot* alto ocorreu devido à necessidade de suavizar a variável manipulada, conforme mostrado na Tabela 4.13 e na Figura 4.48.

Tabela 4.13. Desempenhos dos controladores de temperatura

Controlador	Overshoot	Offset	ISE
PID (4 parâmetros)	9.07 °C	1.34 °C	5.28 10 ⁹
PI-fuzzy (12 parâmetros)	1.22 °C	0.0 °C	6.37 10 ⁹

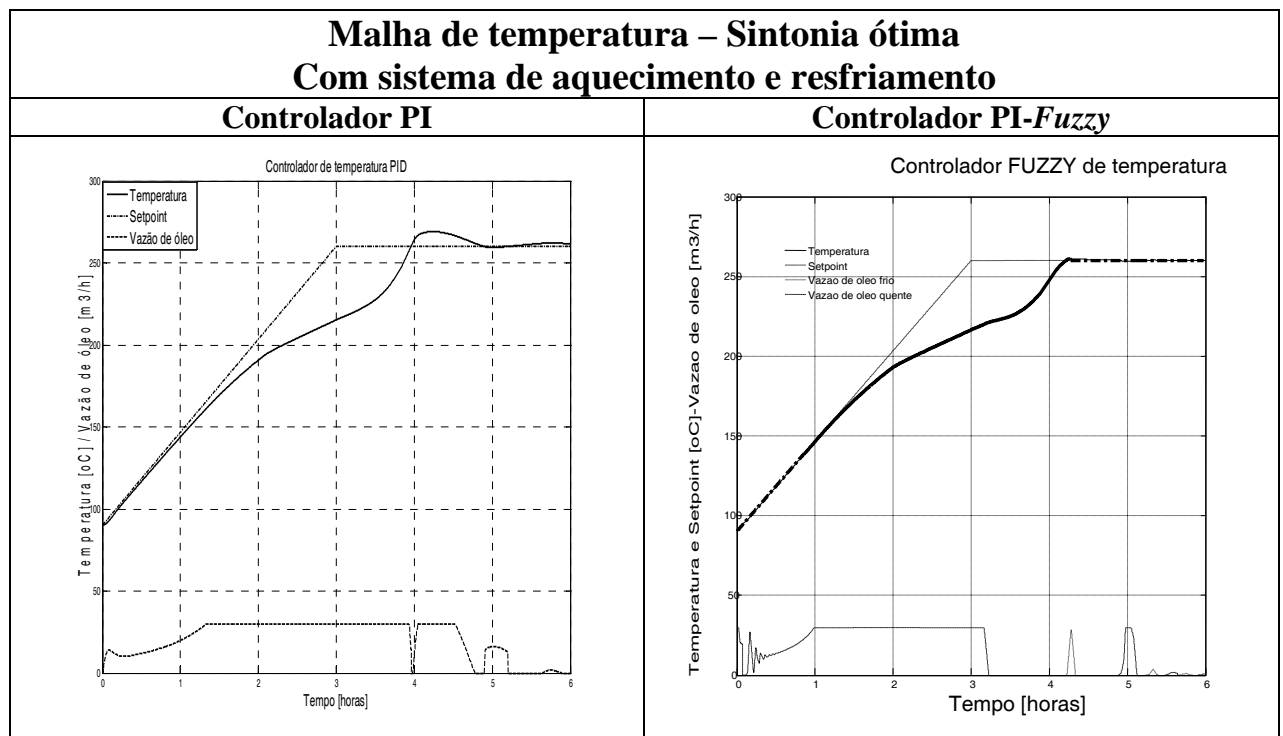


Figura 4.48. Temperatura. Controle PI convencional e PI-fuzzy (aquecimento e resfriamento). Vazões de óleo quente e frio (m³/h).

O desvio entre a temperatura do reator e o *setpoint* durante a rampa de subida inicial poderia ser reduzido, aumentando a temperatura do óleo quente. Entretanto, como já ressaltado anteriormente, esta alternativa implicará em elevar os custos de produção do polímero devido ao aumento no consumo de combustível necessário para aquecer o óleo de recirculação. Por sua vez, essa modificação de processo acarretaria, nas condições reais, na efetiva necessidade de um sistema de resfriamento, uma vez que nessas condições, ao final da rampa de subida, a temperatura da massa reacional necessitaria de um rápido resfriamento, para manter o *overshoot* abaixo de 3 °C.

Como a unidade industrial adotada como campo de testes deste trabalho não possui sistema de resfriamento, não seria trivial simplesmente elevar a temperatura do óleo de aquecimento. Em outras palavras, o problema de controle de temperatura, do sistema nas condições reais, contempla um conflito intrínseco de atender à rampa de subida e reduzir o *overshoot* ao final desta rampa.

4.4.2. Malha de pressão com sistema de aquecimento e resfriamento – Análise comparativa entre o controlador convencional com ação proporcional, ajustado pelo método IMC, e com controlador PI-fuzzy sintonizado com parâmetros determinados heurísticamente

Como não houve necessidade de aplicar o procedimento de sintonia ótima para o controlador de pressão PI-fuzzy, já que os resultados obtidos com a sintonia realizada com os parâmetros determinados heurísticamente foram bons (figura 4.34), a comparação de desempenho será feita entre o controlador de pressão PI-fuzzy e o controlador de pressão convencional com ação proporcional e sintonizado pelo método IMC. A Figura 4.49 apresenta os resultados gráficos das simulações, e a Tabela 4.14 apresenta os valores dos indicadores de desempenho dos controladores.

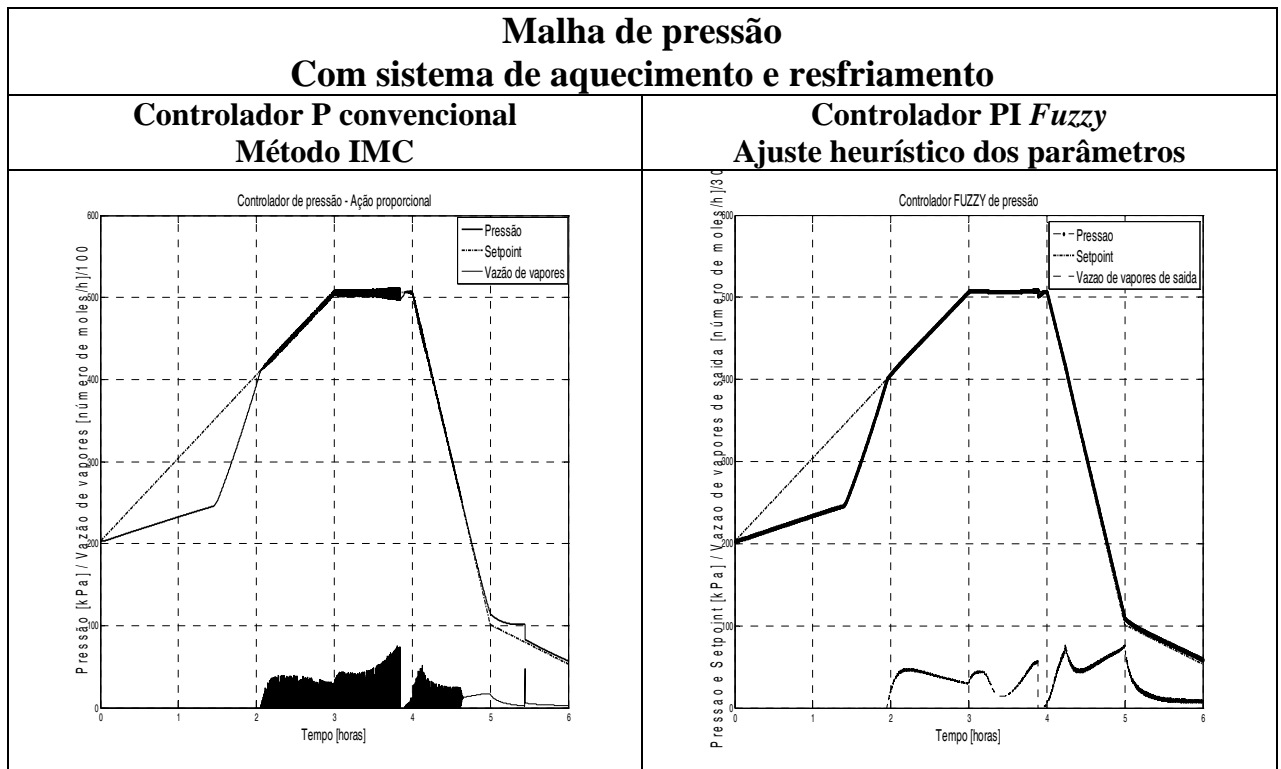


Figura 4.49. Pressão. Controlador P convencional (método IMC), e controlador PI fuzzy (parâmetros determinados heurísticamente) - (Vazões das retiradas dos vapores, em moles/h).

Tabela 4.14. Desempenhos dos controladores de pressão

Malha de pressão			
Controlador de pressão	Overshoot	Offset	$\sum (P_{set} - P)^2$
Controlador P convencional Método IMC	2.71 kPa	13.3 kPa	7.1 10⁹
Controlador PI-Fuzzy Ajuste heurístico dos parâmetros	1.1 kPa	5.6 kPa	11 10⁹

Os resultados obtidos com os controladores de pressão foram bons, mas o controlador PI-fuzzy foi superior ao controlador convencional, no sentido de conseguir manter a variável controlada mais próxima à trajetória do *setpoint* para a etapa de pressão negativa.

4.4.3. Malha de temperatura apenas com sistema de aquecimento – Análise comparativa entre o controlador convencional PI e o controlador PI-fuzzy, ambos ajustados pelo procedimento de sintonia ótima

Conforme já discutido anteriormente, a simulação em malha fechada considerando a disponibilização apenas do óleo para o aquecimento da massa reacional está em consonância com a realidade operacional da unidade adotada como campo de testes para este trabalho.

Os resultados das simulações com o controle PID convencional e com o controle PI-fuzzy, ambos ajustados pelo procedimento de sintonia ótima, estão apresentados na Figura 4.50 e na Tabela 4.15 abaixo.

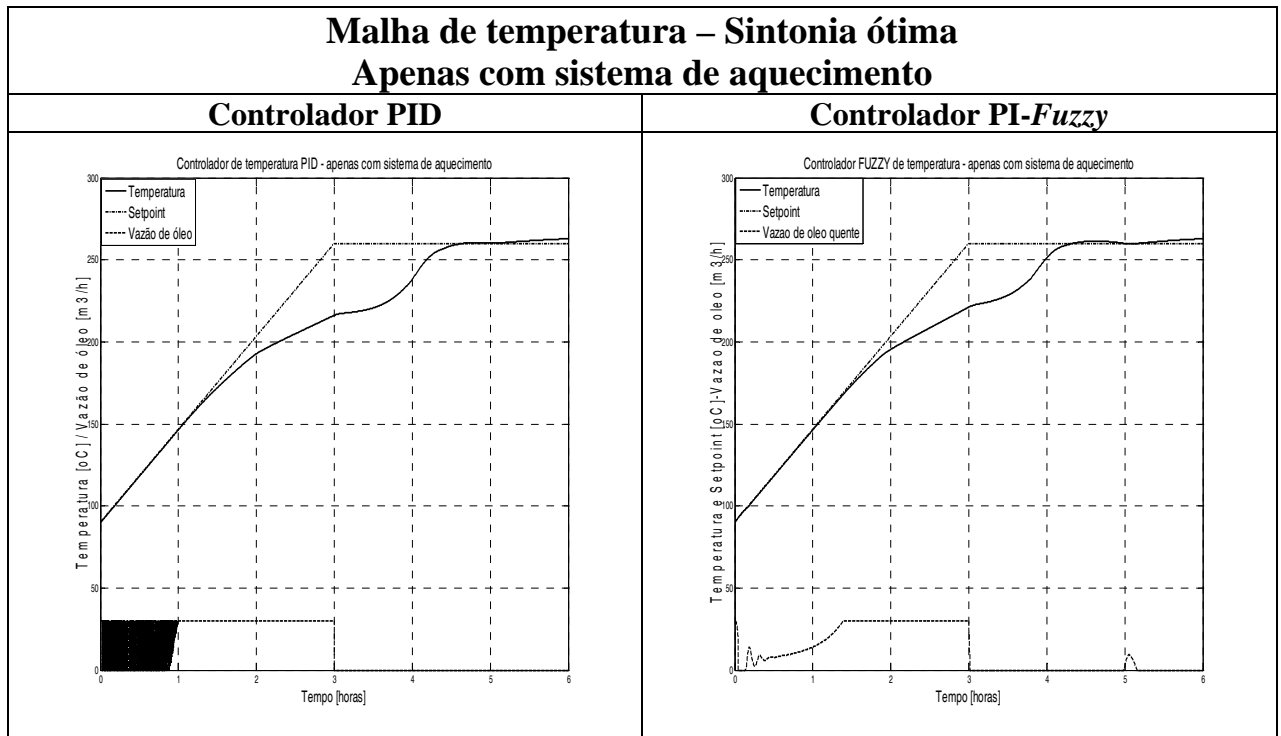


Figura 4.50. Temperatura. Controle PID convencional e PI-fuzzy (apenas com sistema de aquecimento). Vazões de óleo quente e frio (m^3/h).

Tabela 4.15. Desempenhos dos controladores de temperatura – apenas com sistema de aquecimento

Controlador	Overshoot	Offset	ISE
PID (4 parâmetros)	0.57 °C	2.9 °C	$7.87 \cdot 10^9$
PI-fuzzy (8 parâmetros)	1.43 °C	2.86 °C	$4.54 \cdot 10^9$

Ambos os controladores conseguiram manter a variável controlada próxima ao *setpoint* na etapa plana, e o controlador PI-fuzzy atuou na variável manipulada de maneira suave, enquanto que o controlador convencional PID fez com que a variável manipulada ficasse agressiva. Tentou-se utilizar o mesmo procedimento adotado no sistema com aquecimento e resfriamento, eliminando a ação derivativa, mas os resultados obtidos com o procedimento de sintonia ótima não apresentaram bons resultados.

4.4.4. Malha de pressão somente com sistema de aquecimento – Análise comparativa entre o controlador convencional PI e o controlador PI-fuzzy

Aplicando o procedimento de sintonia ótima para o controlador de pressão convencional com ação proporcional, foi determinado o valor de 1,81 para o seu ganho proporcional. Não foi aplicado o procedimento de sintonia ótima para o controlador PI-fuzzy de pressão, uma vez que os resultados alcançados com os parâmetros determinados heurísticamente foram muito bons (figura 4.46).

A Figura 4.51 apresenta os gráficos comparativos dos desempenhos entre os controladores de pressão P convencional determinado pelo procedimento de sintonia ótima, e o controlador PI-fuzzy sintonizado com parâmetros determinados heurísticamente, apenas com sistema de aquecimento, e a Tabela 4.16 apresenta os valores dos indicadores de desempenho dos controladores.

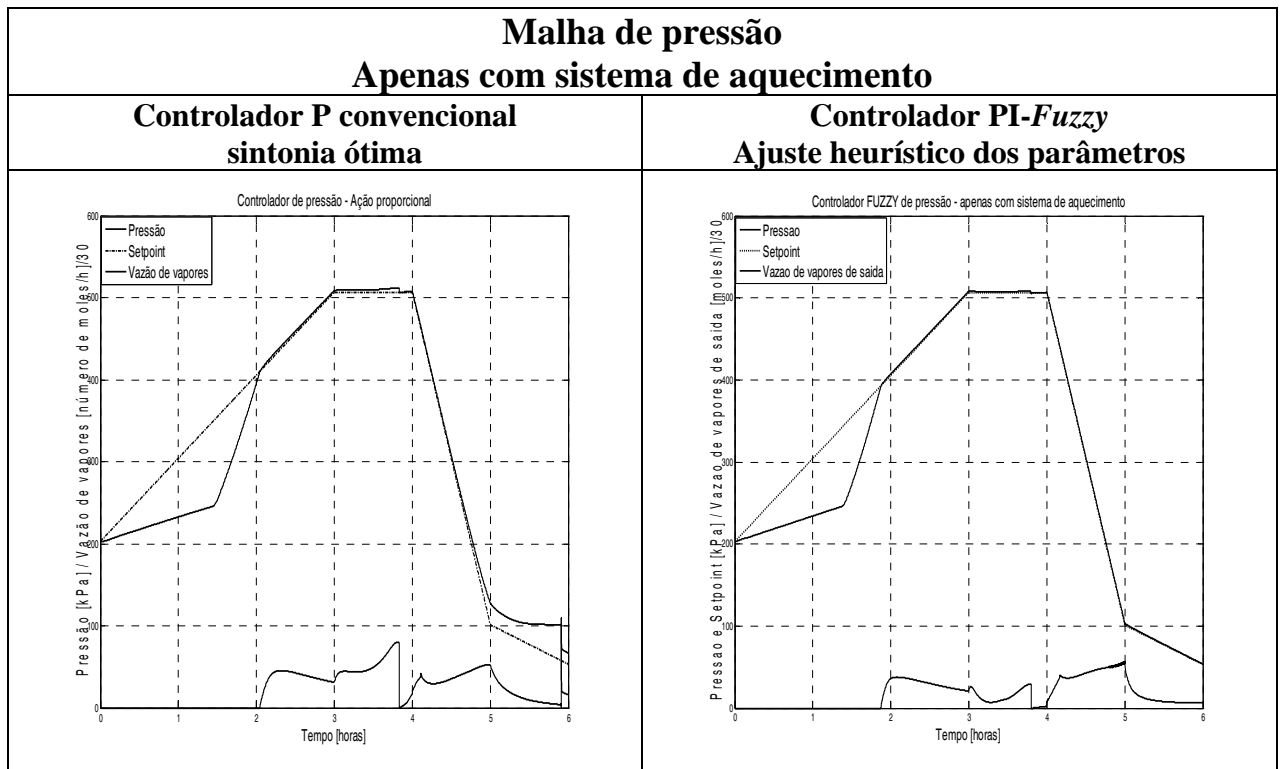


Figura 4.51. Pressão. Controlador P convencional (sintonia ótima), e controlador PI-fuzzy (parâmetros determinados heurísticamente) - (Vazões das retiradas dos vapores, em moles/h).

Tabela 4.16. Desempenhos dos controladores de pressão – apenas com sistema de aquecimento

Malha de pressão			
Controlador de pressão	Overshoot	Offset	$\sum (P_{set} - P)^2$
Controlador P convencional sintonia ótima	4.6 kPa	1.29 kPa	8.74 10⁹
Controlador PI-Fuzzy Ajuste heurístico dos parâmetros	1.47 kPa	0.54 kPa	12 10⁹

O próximo capítulo apresenta as conclusões finais e as recomendações para a continuidade deste trabalho.

Apêndice 4A: Procedimento para determinação da estimativa inicial dos parâmetros PID para o procedimento de sintonia ótima

O fluxograma abaixo descreve o procedimento adotado para a determinação dos parâmetros da estimativa inicial para a aplicação do procedimento de sintonia ótima para os controladores PID.

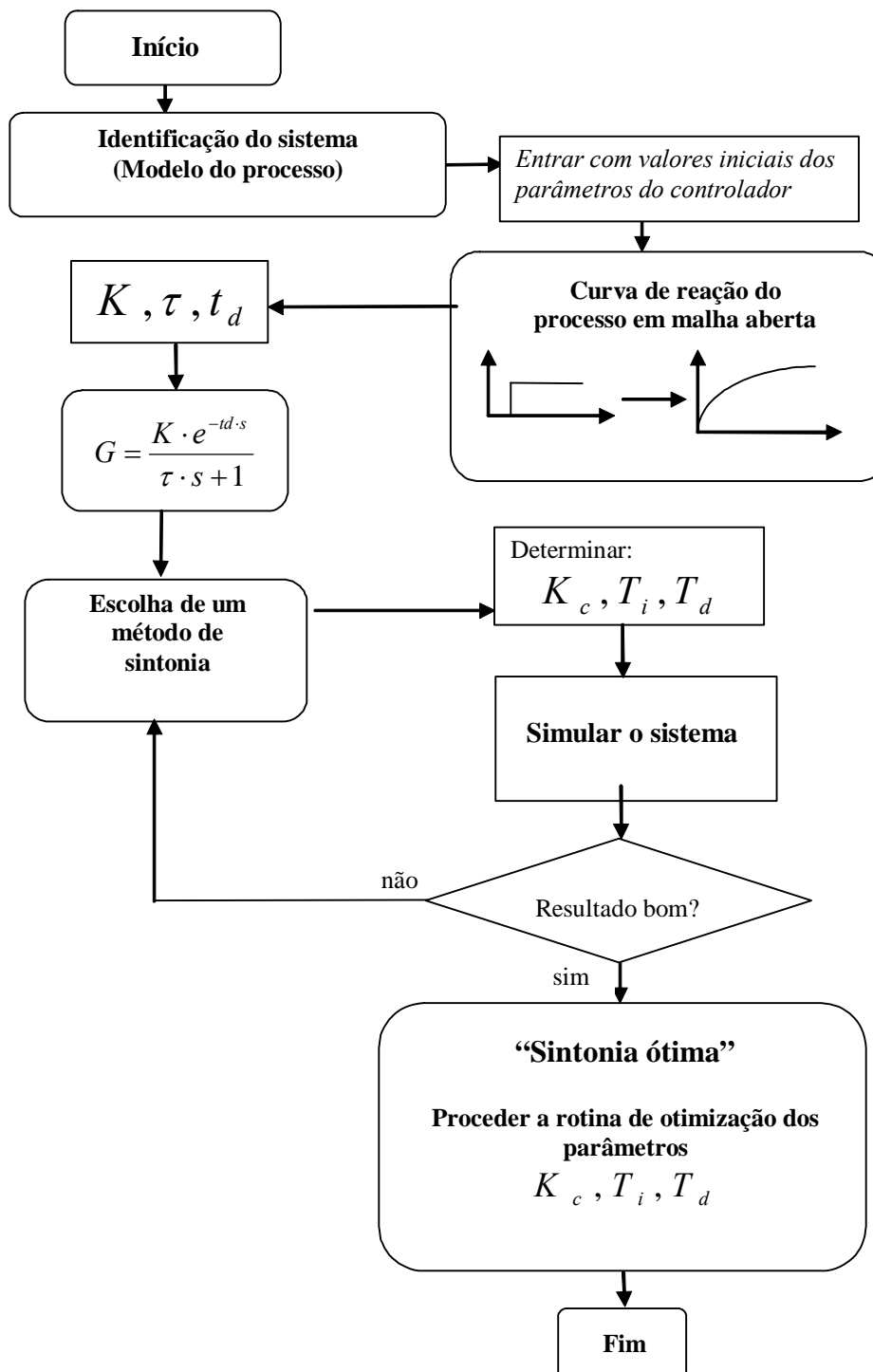


Figura 4.52. Fluxograma do procedimento adotado para a determinação dos parâmetros da estimativa inicial para a aplicação do procedimento de sintonia ótima.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

5.1. Conclusões

Foram apresentados os resultados obtidos das aplicações dos controladores PI (Proporcional Integral)-*fuzzy* e PID (Proporcional Integral Derivativo) convencional, com o uso de um modelo fenomenológico do processo, dotado de parâmetros e dimensões de equipamentos que retratam as condições de um sistema de polimerização do nylon 6, em escala industrial real.

Este trabalho apresenta não somente os resultados das simulações, mas também a metodologia adotada, incluindo definições e interpretações das regras para os controladores, baseados em sistemas reais.

Os ajustes nas regras é uma ferramenta poderosa para a sintonia dos controladores *fuzzy*, fornecendo não apenas bons desempenhos das variáveis controladas, mas, também, um comportamento mais suave das variáveis manipuladas. Os ajustes nas regras podem também detectar a existência de possíveis falhas no projeto do controlador, evitando seus efeitos no desempenho do controlador.

Os controladores PI-*fuzzy* de temperatura e pressão apresentados neste trabalho tiveram bons desempenhos, mostrando que é possível controlar as variáveis do processo, fazendo-as acompanhar os perfis dos *setpoints* (valores de referência).

As configurações das malhas controle com sistemas de aquecimento e resfriamento propiciaram melhores desempenhos do que aquelas que operam apenas com sistema de aquecimento. Estes resultados são traduzidos pelos índices de desempenho dos controladores, ou seja, menores *overshoot* (sobre-sinal), *offset* (desvio estacionário) e ISE (*Integral of the Squared Error* - integral do erro quadrático) para as estratégias com os sistemas de aquecimento e resfriamento. A flexibilidade desse sistema é traduzida pelo fato do sistema de resfriamento poder reduzir o *overshoot*, e reduzir o erro em situações em que a variável controlada ultrapassar o valor desejado.

Considerando a característica não linear e o comportamento interativo do sistema, conseguiu-se obter melhores resultados com a estratégia de controle PI-*fuzzy*, quando comparada à estratégia PID.

O fácil entendimento das regras heurísticas e a flexibilidade do sistema de inferência *fuzzy*, sugerem que a estratégia PI-*fuzzy* é uma alternativa de controle potencial para o sistema de polimerização de nylon 6 e outros sistemas não lineares. Além disso, essa estratégia conseguiu praticamente eliminar o *overshoot* e o *offset* do controle da temperatura, que devem ser limitados a 3 °C para manter as propriedades químicas e físicas do produto final.

O controle da temperatura com apenas o sistema de aquecimento também é possível, mas os parâmetros de sintonia devem ser calculados criteriosamente para que a temperatura na fase final do processo não ultrapasse o valor desejado.

Este trabalho procurou comprovar a potencialidade da aplicação de controladores PI-*fuzzy* em reatores de polimerização semi-batelada, com trajetórias de *setpoint's* pré-definidas, tendo os parâmetros das funções de pertinência e fatores de escala determinados pelo método de sintonia ótima, e possibilitar a utilização do programa de simulação em ambiente computacional, como ferramenta de trabalho para P & D de novos produtos.

5.2. Recomendações para trabalhos futuros

Como sugestão para continuação desta pesquisa e realização de trabalhos futuros, sugere-se os seguintes novos desenvolvimentos:

1. Validação do modelo fenomenológico do processo de polimerização do nylon 6, com os ajustes nos parâmetros do processo;
2. Utilização do presente trabalho para desenvolver outras estratégias de controle, objetivando melhores resultados operacionais e de controle;
3. Estudo de um controlador *fuzzy*-MIMO (múltiplas entradas, múltiplas saídas) para controlar as variáveis que determinam as qualidades físicas e químicas do produto.
4. Controle ótimo para determinação da trajetória ótima, visando à qualidade final do produto e a diminuição do tempo de batelada;
5. Estimação de estado das variáveis que determinam a qualidade final do produto.

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

Abreviaturas

IMC	: Internal Model Control – Controle Modelo Interno;
MI	: Melt Index – Índice de fluidez;
mmHg	: milímetros de mercúrio;
PID	: Algoritmo de controle Proporcional + Integral + Derivativo;
UFBA	: Universidade Federal da Bahia.

Símbolos

a	: Área interfacial específica $\left[\frac{m^2}{m^3} \right]$;
A	: Área da jaqueta $[m^2]$;
A_i	: Fator de frequência para a constante da taxa de reação $\left[\frac{kg}{mol \cdot h} \right]$;
\tilde{A}_i^j	: Valor lingüístico “j”, da variável lingüística de entrada \tilde{u}_i ;
\tilde{B}_i^p	: Valor lingüístico da variável lingüística de saída \tilde{y}_i ;
c	: Concentração do polímero na solução $\left[\frac{kg_polímero}{100kg_solução} \right]$;
C	: Símbolo do átomo de Carbono;
CV(s)	: Símbolo da variável controlada;
C_s'	: Concentração do polímero na solução $\left[\frac{g}{cm^3} \right] = \left[\frac{1000 \cdot Kg}{m^3} \right]$;
$C_{p,w}^v$: Calor específico da água pura na fase vapor $\left[\frac{kJ}{kg \cdot ^\circ K} \right]$;
$C_{p,m}^v$: Calor específico do monômero puro na fase vapor $\left[\frac{kJ}{kg \cdot ^\circ K} \right]$;
d	: Diâmetro do agitador $[m]$;
D(s)	: Símbolo do distúrbio externo ao processo;
D_r	: Diâmetro do reator $[m]$;
E_i	: Energia de ativação da reação i $\left[\frac{J}{mol} \right]$;
$E_m(s)$: Símbolo do sinal de realimentação;
F	: Massa líquida no reator no tempo “t” $[kg]$;
$G_{cp}(s)$: Símbolo da Função de transferência do controlador;
$G_d(s)$: Símbolo da Função de transferência do distúrbio externo ao processo;
$G_m(s)$: Símbolo da Função de transferência do modelo dinâmico do processo;
$G_p(0)$: Símbolo da Função de transferência do processo no estado estacionário;
$G_p(s)$: Símbolo da Função de transferência do processo, com o elemento final e o sensor;
$G_p(s)$: Símbolo da Função de transferência do processo;
H	: Símbolo do átomo de Hidrogênio;
h_i	: Coeficiente de transferência de calor do líquido $\left[\frac{kJ}{h \cdot m^2 \cdot ^\circ K} \right]$;
k	: Condutividade térmica da massa de reação $\left[\frac{kJ}{m \cdot h \cdot ^\circ K} \right]$;

k_i	: Constante da taxa de reação i , $i = 1, 2, 3, 4, 5$ $\left[\frac{kg}{mol \cdot h} \right]$;
k_i'	: Constante da taxa de reação reversa i , $i = 1, 2, 3, 4, 5$ $\left[\frac{kg}{mol \cdot h} \right]$;
K_i	: Constante de equilíbrio da reação $i = 1, 2, 3, 4, 5$;
$k_{L,w}$: Coeficiente de transferência de massa da água $\left[\frac{m}{h} \right]$;
$k_{L,m}$: Coeficiente de transferência de massa do monômero $\left[\frac{m}{h} \right]$;
M_n	: Comprimento molecular numérico médio;
M_w	: Comprimento molecular ponderal médio;
MV(s)	: Símbolo da variável manipulada;
n	: Taxa de rotação do agitador $\left[\frac{rotação}{min} \right]$;
N	: Símbolo do átomo de Nitrogênio;
N_{Re}	: Número de Reynolds;
$N_{sc,i}$: Número de Schmidt, $i =$ monômero ou água;
$N_{sh,i,q}$: Número de Sherwood, $i =$ monômero ou água;
O	: Símbolo do átomo de Oxigênio;
P_w^{sat}	: Pressão de vapor da água $[kPa]$;
P_m^{sat}	: Pressão de vapor do monômero $[kPa]$;
P	: Pressão total $[kPa]$;
R	: Constante universal dos gases = $8.31447 \left[\frac{kPa \cdot m^3}{mol \cdot K} \right] = \left[\frac{kJ}{mol \cdot K} \right]$;
r_i	: Taxa de reação direta média $\left[\frac{mol}{kg \cdot h} \right]$;
R_{vw}	: Taxa de evaporação da água $\left[\frac{mol}{h} \right]$;
R_{vm}	: Taxa de evaporação da caprolactama $\left[\frac{mol}{h} \right]$;
S_m	: Concentração dos oligômeros lineares no líquido $\left[\frac{mol}{kg} \right]$;
SP(s)	: Símbolo da Função de transferência do Valor desejado;
t	: Tempo $[h]$;
T	: Temperatura $[^\circ K]$;
t_f	: Tempo total de reação $[h]$;
T_r	: Temperatura de referência = $473.15 [^\circ K]$;
TP(s)	: Símbolo do valor objetivo;
U	: Coeficiente de transferência de calor global $\left[\frac{kJ}{h \cdot m^2 \cdot K} \right]$;
U_i	: Universo de discurso das variáveis de estado de entrada;

\tilde{u}_i	: Variável linguística de entrada;
V_T	: Taxa de vapor que sai do reator pela válvula de controle $\left[\frac{mol}{h} \right]$;
V_g	: Volume do vapor dentro do reator $[m^3]$;
\tilde{y}_i	: Variável linguística de saída;
Y_i	: Universo de discurso das variáveis de estado de saída;
y_q^{crisp}	: Centro da área das contribuições de todos os consequentes do conjunto de regras, ou centróide;
$[C_1]_{p,mix}^1$: Calor específico da mistura reacional líquida $\left[\frac{kJ}{kg \cdot ^\circ K} \right]$;
$[W]$: Concentração da água na massa líquida $\left[\frac{mol}{kg_mistura} \right]$;
$[W]_b^*$: Concentração da água no líquido devido ao borbulhamento $\left[\frac{mol}{kg} \right]$;
$[W]_f^*$: Concentração da água pela superfície livre do líquido $\left[\frac{mol}{kg} \right]$;
$[C_1]$: Concentração da caprolactama na fase líquida $\left[\frac{mol}{kg_mistura} \right]$;
$[W^v]$: Concentração de água na fase vapor $\left[\frac{mol}{m^3} \right]$;
$[C_1]_f^*$: Concentração de C_1 na superfície livre do líquido $\left[\frac{mol}{kg} \right]$;
$[M^v]$: Concentração de caprolactama na fase vapor $\left[\frac{mol}{m^3} \right]$;
$[N^v]$: Concentração de nitrogênio na fase vapor $\left[\frac{mol}{m^3} \right]$;
$[S_1]$: Concentração do ácido amino-capróico linear $\left[\frac{mol}{kg} \right]$;
$[C_2]$: Concentração do dímero cíclico na fase líquida $\left[\frac{mol}{kg_mistura} \right]$.

Símbolos gregos

β_{m0}	: Constante;
β_{mf}	: Constante;
β_{w0}	: Constante;
β_{wf}	: Constante;
Δ	: Delta – Variação definida de uma grandeza;
ΔH_i	: Variação da entalpia da reação i $\left[\frac{J}{mol} \right]$;

ΔS_i	: Variação da entropia da reação i $\left[\frac{J}{mol \cdot K} \right]$;
ε	: Monômero ε -Caprolactama = Monômero 6-Caprolactama;
γ_w	: Coeficiente de atividade da água [adimensional];
γ_m	: Coeficiente de atividade do monômero [adimensional];
\mathcal{D}_m	: Difusibilidade do monômero $\left[\frac{m^2}{h} \right]$;
\mathcal{D}_w	: Difusibilidade da água $\left[\frac{m^2}{h} \right]$;
λ_m	: Calor latente de vaporização do monômero $\left[\frac{kJ}{mol} \right]$;
λ_w	: Calor latente de vaporização da água $\left[\frac{kJ}{mol} \right]$;
μ	: Momento da distribuição S_n ($\mu_0, \mu_1, \mu_2, \mu_3$);
μ_n	: Número médio do comprimento da cadeia ($\cong \frac{\mu_1}{\mu_0}$);
$\mu_{A_i^j}(u_i)$: Função de pertinência associada com o conjunto <i>fuzzy</i> A_i^j ;
$\mu_{B_q^p}(y_q)$: Função de pertinência associada com o conjunto <i>fuzzy</i> B_q ;
η	: Viscosidade da mistura líquida [poise];
η_m	: Viscosidade do monômero;
η_{sp}	: Viscosidade específica;
ρ	: Massa específica da mistura no reator $\left[\frac{kg}{m^3} \right]$;
σ	: Supersaturação relativa;
σ_c	: Supersaturação relativa na intersecção das equações 11 e 12 (Hikita <i>et al.</i> , 1984);
Ω_b	: Soma das pressões parciais da água e de C_1 ;
ξ_1	: Total de moles de monômero vaporizados no tempo t [mol];
ξ_2	: Total de moles de água vaporizados no tempo t [mol];
ξ_3	: Total de moles de monômero e água vaporizados no tempo t [mol];
$[\eta]$: Viscosidade intrínseca da caprolactama-mistura nylon 6 $\left[\frac{100kg_mistura}{kg_polímero} \right]$.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aguirre, L. A., Introdução à identificação de sistemas, Editora UFMG, (2004);
- Alfano, C., Embiruçu, M., Apostila Sintonia ótima de controladores PID, *Apostila da Escola Politécnica – UFBA*, (2002);
- Almeida, A. F., Sintonia de Controladores PID, *Dissertação de Mestrado em Engenharia Química pela Universidade Federal da Bahia*, (1998);
- Almeida, A. F.; Neto, C. F. A.; Embiruçu, M., Métodos de sintonia de controladores PID – Metodologia IMC, *Apostila Escola Politécnica – Depto. Eng. Química, UFBA*, (2000);
- Almeida, A.F.; Neto, C. F. A.; Embiruçu, M., Métodos de sintonia de controladores PID – Domínio do tempo, *Apostila Escola Politécnica – Depto. Eng. Química, UFBA*, (2000);
- Altınten, A., Erdogan, S., Hapoglu, H., Alpbaz M., Control of a polymerization reactor by fuzzy control method with genetic algorithm, *Computers and Chemical Engineering*, 27, 1031-1040, (2003);
- Antunes, A. J. B., Pereira, J. A. F. R., Fileti, A. M. F., Fuzzy control of a PMMA batch Reactor: Development and experimental testing, *Computers & Chemical Engineering*, 30, 268-276, (2005);
- Åström, K. J., Hägglund, T., The future of PID control, *Control Engineering Practice*, 9, 1163-1175, (2001);
- Brown, M., Harris C., Neurofuzzy Adaptive modelling and control, *Prentice Hall Int.*, (1994);
- Campos, M. M., Saito, K., Sistemas Inteligentes em Controle e Automação de Processos, *Editores Ciência Moderna*, (2004);
- Churro, J. T. T., “Métodos para sintonia de controladores de processo”, *Revista C&I, março*, 31-35, (1986);
- Chylla, R. W., Haase, D. R., Temperature control of semibatch polymerization reactor, *Comp. Chem. Eng.*, 17, 257-264, (1993);
- Clarke-Pringle, T., MacGregor, J. F., Nonlinear adaptive temperature control of multi-product, semi-batch polymerization reactors, *Computers Chemical Eng.*, 21, 1395-1409, (1997);
- Cott, B. J., Macchietto, S., Temperature control of exothermic batch reactors using generic model control, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 28, 1177-1184, (1989);
- Defaye, G., Regnier, N., Chabanon, J., Caralp, L., Vidal, C., Adaptive predictive temperature control of semi-batch reactors, *Chem. Eng. Sci.*, 48, 3373-3382, (1993);
- Embiruçu, M., A survey of advanced control of polymerization reactors, *Polymer Engineering and Science*, 36, 433-447, (1996);
- Embiruçu, M., Polímeros, *Ufba*, (2001);
- Fisher Controls, Control valve handbook, *Fisher Controls* (1977)
- Friedrich, M., Perne, R., Design and control of batch reactors – an industrial viewpoint *Computers chem. Eng.*, 19, S357-5368, (1995);
- Garcia, C. E.; Morari, M., Internal model control, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 21, 308-323, (1982);
- Giori, C., Hayes, B. T., Hydrolytic polymerization of caprolactam. II. Vapor-liquid equilibria, *J. Polym. Sci., Part A1, vol. 8*, 351-358, (1970);
- Guerra, S., Gonçalves Júnior, H. J., Lages, W. F., A digital PID Controller Using RTAI, *Universidade Federal do Rio Grande do Sul*, (2002);
- Gupta, A., Gupta, S. K., Gandhi, K.S., Mehta, M.H., Padh, M.R., Soni, A.V., Ankleswaria, B.V., Modeling of hidroytic polymerization in a semibatch nylon 6 reactor, *Chem Eng. Comun.*, vol 113, pp. 63-89, (1992);

- Gupta, S. K., Kumar, A., Reaction engineering of step growth polymerization , *Plenum, New York, (1987)*;
- Hikita, H., Konishi, Y., Desorption of carbon dioxide from supersaturated water in an agitated vessel, *AIChE Journal*, 30, 945-951, (1984);
- Inglis, M. P., Cluett, W. R., Penlidis, A., Long range predictive control of a polymerization reactor, *CanadianJChE*, 69, 120-129, (1991);
- Jantzen, J., Design of fuzzy controllers, Tech. report no 98-E-864 (design), *Technical University of Denmark, Department of automation, (1998)*;
- Joly, M., Pinto, J. M., Optimal control of product quality for batch nylon-6,6 autoclaves, *Chemical Engineering Journal*, vol 97, n° 2-3, pp. 87-101, (2004);
- Kozub, D. J., MacGregor, J. F., Feedback control of polymer quality in semi-batch copolymerization reactors, *Chemical Engineering Science*, 47, 929-942, (1992);
- Nagarajan, R., Kumar, R. N., Halim, R. A., Rosli, A., A predictive fuzzy logic controller for resin manufacturing, *Computers ind. Engin.* 34, 493-500, (1998);
- Ng, K. C., Li, Y., Design of sophisticated fuzzy logic controllers using genetic algorithms, *Proceeding of third IEEE International conference on fuzzy systems, Orlando, FL, University of Glasgow -Technical Report : CSC 94001, 1708-1712, (1994)*;
- Ogata, N., Studies on polycondensation reactions of nylon salt. I. The equilibrium in the system of polyhexamethylene adipamine and water, *Macromol. Chem.*, 42, 52-67, (1960);
- Ogata, N., Studies on polycondensation reactions of nylon salt. II. The rate of polycondensation reaction of nylon 6,6 salt in the presence of water, *Macromol. Chem.*, 43, 117-131, (1961);
- Oliveira, L. C. R., “Problemas em Sensores e Atuadores e seus Efeitos no Sistema de Controle”, *V Seminário de Controle e Automação, Salvador-Ba, Br, (2007)*;
- Ozkan, G., Ozen, S., Erdogan, S., Hapoglu, H., Alpbaz, M., Nonlinear control of polymerization reactor, *Computer and Chemical Engineering*, 25, 757-763, (2001);
- Passino, K., Yurkovich, S., 1998, *Fuzzy Control*, Addison-Wesley Longman, Inc, (1998);
- Reid, R. C., Prausnitz, J. M., Sherwood, T. K., *The Properties of Gases and Liquids, McGraw Hill, New York, (1977)*;
- Reimschuessel, H. K., Nylon 6. Chemistry and mechanisms, *J. Polym. Sci., Macromol. Rev.*, 12, 65-65, (1977);
- Reimschuessel, H. K., *Ring Opening Polymerization (K.C. Frisch and S.L. Reegen, eds.), Dekker, New York, (1969)*;
- Rivera, D. E., Morari, M., Skogestad, S., Internal Model Control – PID Controller Design, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 25, 252-265, (1986);
- Russell, S. A., Robertson, D. G., Lee, J. H., Ogunnaike, B.A., Control of product quality for batch nylon 6,6 autoclaves, *Chemical Engineering Science*, 53, 3685-3702, (1998);
- Russell, S. A., Robertson, D. G., Lee, J. H., Ogunnaike, B.A., Model-based quality monitoring of batch and semi-batch processes, *Journal of Process Control*, 10 , 317-332, (2000);
- Sandri, S., Correa, C., *Lógica Nebulosa, V Escola de Redes Neurais, Promoção: Conselho Nacional de Redes Neurais, c073-c090, (1999)*;
- Shaw, I. S., Simões, M. G., *Controle e modelagem fuzzy, Editora Edgard Blücher Ltda., (1999)*;

- Schork, F. J., Deshpande, P. B. & Leffew, K. W., Control of polymerization reactors, *Marcel Dekker, Inc., N. Y.*, (1993);
- Smith, C. A., Corripio, A. B., Principles and Practice of Automatic Process Control, *John Wiley & Sons, Inc.*, (1997);
- Snell, F. D., Ettore, L. S., Encyclopaedia of Industrial Chemical Analysis, *Interscience, New York*, (1969);
- Soroush, M., Kravaris, C., Nonlinear control of a batch polymerization reactor: an experimental study, *AIChE J.*, 38, 1429-1448, (1992);
- Stephanopoulos, G., Chemical Process control – An introduction to theory and practice, *Prentice Hall International Inc.*, (1984);
- Tai, K., Tagawa, T., Simulation of hydrolytic Polymerization of ϵ -caprolactam in various reactors. A review on recent advances in reaction engineering of polymerization, *Ind.Eng. Chem. Prod. Res. Dev.*, 22, 192-206, (1983);
- Vieira, R. A. M., Embiruçu, M., Sayer, C., Pinto, J. C., Lima, E. L., Control strategies for complex chemical processes. Applications in polymerization processes, *Computers and Chemical Engineering*, 27, 1307-1327, (2003);
- Wajge, R. M., Rao, S., Gupta, S. K., Simulation of an industrial semibatch nylon 6 reactor: optimal parameter estimation, *Polymer*, 35, 3722-3734, (1994);
- Yabuki, Y., MacGregor, J. F., Product Quality Control in Semibatch Reactors Using Midcourse Correction Policies, *Industrial Engineering and Chemical Research*, 36, 1268-1275, (1997);
- Yabuki, Y., Nagasawa, T., MacGregor, J. F., Industrial experiences with product quality control in semi-batch process, *Computers and Chemical Engineering*, 26, 205-212, (2002);
- Zadeh, L. A., Fuzzy sets, *Information and Control*, 8, 338-353, (1965).