LORENA FERREIRA LOPES

AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO DINÂMICO DE MALHA DE CONTROLE DE TEMPERATURA EM REATORES DE POLIMERIZAÇÃO BATELADA

Uberlândia - MG

2019

LORENA FERREIRA LOPES

AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO DINÂMICO DE MALHA DE CONTROLE DE TEMPERATURA EM REATORES DE POLIMERIZAÇÃO BATELADA

Monografia apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Rubens Gedraite

Uberlândia - MG

2019

Resumo – Este trabalho apresenta o modelo matemático aplicado ao processo de produção de resinas acrílicas utilizando-se reatores semi-batelada com serpentina meia cana. O modelo obtido foi validado contra os dados experimentais coletados durante as etapas pertinentes ao processo de produção. Tal modelo foi implementado no aplicativo Matlab™. Os objetivos principais da implementação buscaram minimizar o choque térmico na serpentina e reduzir o desperdício de energia, predizendo o comportamento dos *set-points* nas fases de transição de temperatura do meio reacional. Adicionalmente o modelo proposto permite um controle mais seguro do processo haja vista que a reação em questão é extremamente exotérmica. Atualmente o modelo matemático está em fase de avaliação prática e os resultados obtidos sugerem uma boa aproximação entre os valores teóricos e os simulados.

Abstract – This paper presents the mathematical model applied to acrylic resin production process using half-coil jacketed semi-batch reactor. The model was validated considering the use of experimental data obtained during plant operation. The model has been implemented in matlab™. The targets of the model are minimization of the thermal stress in the heating coil and energy losses by means of the set-points behavior prediction typically used in the temperature transition phases of reaction mass. Additionally, the proposed model allows a more safe process control considering the fact that the reaction is extremely exothermic. Presently the mathematical model is being practically evaluating and the result suggests a good approximation between the theoretical and simulated values.

Palavras Chave: reator químico; controle de temperatura; modelo fenomenológico.
Key words: chemical reactor; temperature control; phenomenological model

SUMÁRIO

Capítulo 1 – Introdução

1.1. Justificativa para a realização deste trabalho.....11

1.2. Objetivos deste trabalho.....12

1.3. Estrutura desta monografia.....13

Capítulo 2 – Fundamentação teórica

2.1. Considerações gerais sobre o processo de produção de resinas acrílicas.....14

2.2. Estratégias de controle aplicadas às temperaturas de fluido térmico e massa reacional.....16

Capítulo 3 – Revisão bibliográfica

3.1. Considerações sobre controle de temperatura de reatores de polimerização semi-batelada.....17

3.2. Considerações sobre o uso de modelos matemáticos para representação do comportamento térmico do reator batelada em processo de fabricação de resinas acrílicas.....24

Capítulo 4 – Modelagem matemática do reator modelamento matemático do comportamento da temperatura da massa reacional na etapa de aquecimento inicial do reator.....33

Capítulo 5 – Resultados obtidos e discussão.....33

Capítulo 6 – Conclusões.....71

Referências bibliográficas......72

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 – Fratura da serpentina..... 12

Figura 1.2 – Detalhe da serpentina..... 12

Figura 2.1 – Fluxograma simplificado do processo estudado..... 15

Figura 2.2 – Fluxograma simplificado do circuito de aquecimento e resfriamento..... 16

Figura 2.3 – Comportamento temporal das temperaturas do sistema estudado..... 17

Figura 4.1 – Representação esquematica do reator de polimerização estudado..... 35

Figura 4.2 – Diagrama de simulação do reator de polimerização..... 22

Figura 4.3 – Diagrama de simulação do modelo invertido..... 25

Figura 4.4 – Diagrama do modelo do controlador de temperatura..... 28

Figura 4.5 – Diagrama do modelo das válvulas de controle..... 28

Figura 4.6 – Volume de controle do balanço de energia..... 29

Figura 5.1 – Temperaturas da massa reacional e de entrada e saida do óleo térmico..... 32

Figura 5.2 – Comportamento temporal do valor de $U_{JR} \cdot A_{JR}$..... 33

Figura 5.3 – Temperaturas medida e simulada da massa reacional e de entrada e de saída do óleo térmico geradas pelo modelo invertido..... 34

Figura 5.4 – Temperaturas de entrada do óleo térmico estimada e controlada..... 35

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 5.1 – Parâmetros de desempenho do controlador de temperatura..... 12

ÍNDICE DE QUADROS

Quadro 5.1 – Valores ajustados dos parâmetros de sintonia do controlador de temperatura..... 37

LISTA DE SÍMBOLOS

$\frac{d\,T_{s,o}(t)}{dt}$	Variação da temperatura de saída do óleo térmico em função do tempo	–	$\frac{°C}{s}$
$\frac{d\,T_{s,o}(t)}{dt}$	Variação da temperatura de entrada do óleo térmico em função do tempo	–	$\frac{°C}{s}$
ρ_o	Densidade do óleo térmico	$797\ a\ 1.063$	$\frac{kg}{m^3}$
Cp_o	Calor específico do óleo térmico	$1.591\ a\ 2.374$	$\frac{J}{kg \cdot K}$
$T_{s,o}(t)$	Temperatura do óleo térmico na saída da jaqueta meia cana	$60\ a\ 300$	°C
$T_{e,o}(t)$	Temperatura do óleo térmico na entrada da jaqueta meia cana	$60\ a\ 300$	°C
$\overline{Cp}_o$	Calor específico médio do óleo térmico na jaqueta meia cana	$1.591\ a\ 2.374$	$\frac{J}{kg \cdot K}$
$\overline{\rho}_o$	Densidade média do óleo térmico na jaqueta meia cana	$797\ a\ 1.063$	$\frac{kg}{m^3}$
$\frac{d\,T_m(t)}{dt}$	Variação da temperatura da massa no reator em função do tempo.	–	$\frac{°C}{s}$
Cp_m	Calor específico da massa dentro do reator	1.033	$\frac{J}{kg \cdot K}$
M_m	Massa dentro do reator	1.950	kg
$T_m(t)$	Temperatura da massa dentro do reator	$25\ a\ 150$	°C
$Q_m(t)$	Fluxo de calor do óleo térmico para a massa	–	W
$Q_o(t)$	Fluxo de calor do óleo térmico para a camisa	–	W
V_j	Volume da jaqueta meia cana	$0{,}1622$	m^3
V_{vc}	Volume da região escolhida para o balanço de energia	$0{,}05$	m^3
$F_{o,j}$	Vazão de óleo térmico na jaqueta	$0{,}021$	$\frac{m^3}{s}$
$F_{o,f}(t)$	Vazão de óleo térmico de alimentação	–	$\frac{m^3}{s}$
$U \cdot A$	Coeficiente Global de Troca Térmica	1.134	$\frac{W}{K}$
ΔP	Queda de pressão nas válvulas de controle	1	psi

$S(t)$	Sinal de resposta do controlador	$-1\ a\ 1$	$-$
$S'(t)$	Sinal de resposta do controlador após tratamento inicial	$-8\ a\ 8$	$mAcc$
$S''(t)$	Sinal de resposta do controlador após tratamento final	$4\ a\ 20$	$mAcc$
$S'''(t)$	Sinal de resposta do controlador após tratamento e saturação	$4\ a\ 12$ ou $12\ a\ 20$	$mAcc$
$Cv(t)$	Coeficiente de vazão	$0\ a\ 0{,}001$	$\frac{m^3}{s \cdot \sqrt{psi}}$
$Cv'(t)$	Coeficiente de vazão após o atraso	$0\ a\ 0{,}001$	$\frac{m^3}{s \cdot \sqrt{psi}}$

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1. Justificativa para a realização deste trabalho

Mesmo aplicando controles avançados como PID com ganhos escalonados, self-tuning e auto-tuning o processo em batelada diferentemente do processo contínuo não possui um valor de referência de operação fixo ao longo do ciclo de produção. O processo é iniciado à temperatura ambiente com a elevação gradual da temperatura da massa até que a mesma atinja a temperatura de reação. Uma vez finalizada a fase de reação a massa dentro do reator é então resfriada novamente até temperaturas próximas à do ambiente. Embora distintas estratégias de controle sejam definidas para cada etapa do processo (rampa de aquecimento, controle da massa reacional e rampa de resfriamento), a transição entre uma etapa e outra causa oscilações no controle de temperatura, prejudicando a qualidade do produto, vida útil do reator, consumo desnecessário de energia e eventuais riscos à segurança do processo.

Aumentar a vida útil do reator é o principal benefício esperado do estudo, haja visto que as variações bruscas de ciclo térmico causam sérios danos às serpentinas do reator. As fotos apresentadas nas Figuras 1.1 e 1.2 a seguir são exemplos reais das ocorrências de fratura de serpentina causada por variação de ciclo térmico.

Melhorando o controle de temperatura também se obtém uma menor variação no peso molecular da resina, melhorando assim a qualidade do produto. Convém salientar também que o controle de temperatura é fundamental para diminuir a possibilidade de ocorrência de reação descontrolada, dada as características do processo de poder apresentar reação exotérmica violenta.

1.2. Objetivos deste trabalho

Desenvolver e validar modelo matemático a parâmetros concentrados para simular o comportamento temporal da temperatura da massa reacional durante a etapa de aquecimento do reator e calcular dinamicamente o valor da propriedade coeficiente global de transporte de calor visando minimizar o consumo de energia.

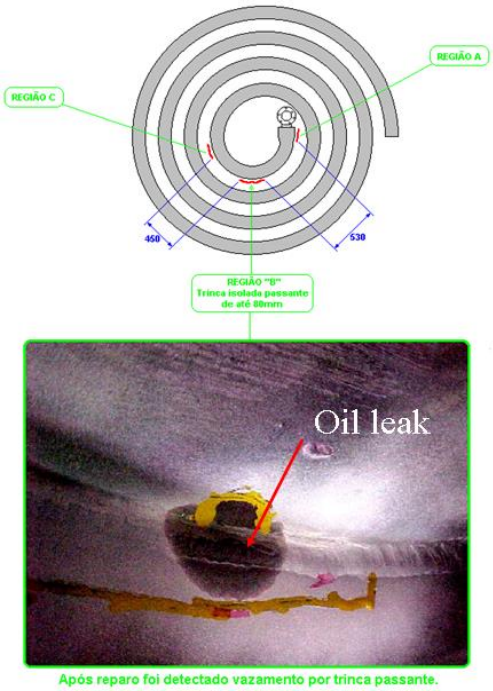


Figura 1.1 – Fratura da serpentina

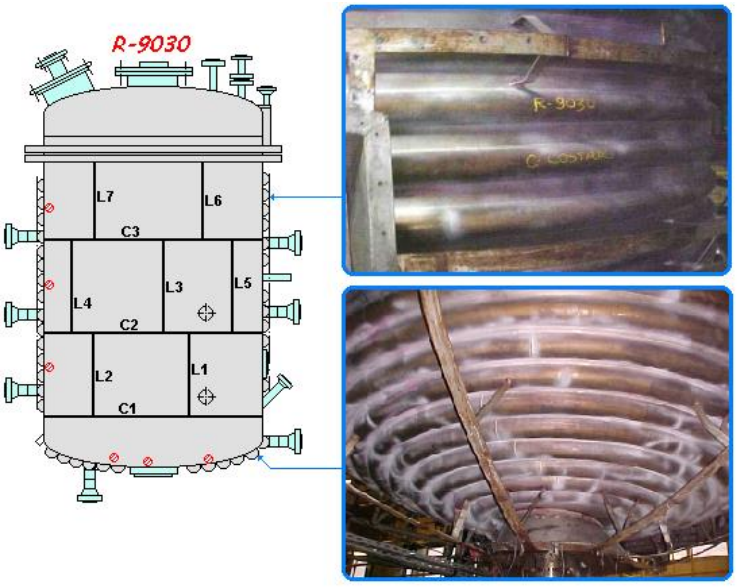


Figura 1.2 – Detalhe da serpentina

1.3. Estrutura desta monografia de conclusão de curso

Com o intuito de se alcançar o objetivo proposto neste trabalho, o texto apresenta a seguinte estrutura:

No **Capítulo 1** são apresentadas as motivações e objetivos usados no desenvolvimento deste trabalho de pesquisa bem como a organização do texto.

No **Capítulo 2** é apresentada a fundamentação teórica do processo de produção de resinas acrílicas em reator semi-batelada e as estratégias de controle de temperatura empregadas, bem como é abordado o cálculo do valor do coeficiente global de troca térmica utilizando-se as propriedades de transporte de calor relevantes para o processo e detalhes construtivos do reator.

No **Capítulo 3** é apresentada a revisão bibliográfica pertinente ao assunto abordado neste trabalho.

No **Capítulo 4** é apresentado modelo matemático utilizado para representar o comportamento temporal da temperatura do reator considerado, contemplando as equações de balanços de energia que levaram a construção do modelo de simulação em ambiente SIMULINK®.

No **Capítulo 5** são mostrados os resultados obtidos com o uso do sistema estudado e também os obtidos com o modelo matemático.

No **Capítulo 6** são apresentadas as conclusões a que se chegou com o desenvolvimento das atividades contidas no escopo desta monografia de TCC e as sugestões de continuidade de trabalhos a respeito do tema.

Capítulo 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

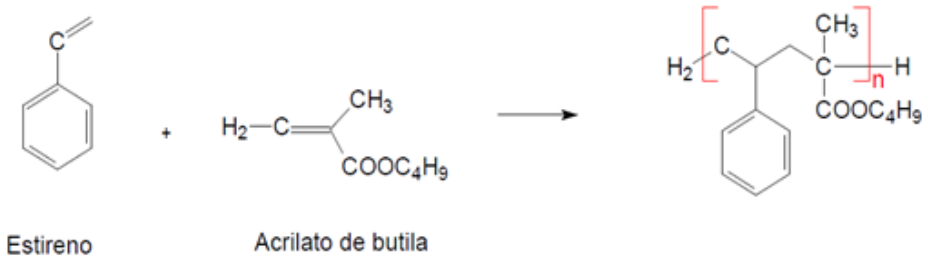
2.1. Considerações sobre reatores de polimerização semi-batelada.

O processo típico de produção de resina acrílica consiste em carregar previamente o reator com solvente orgânico, aquecer até a temperatura de reação que é por volta de 150°C e então iniciar a transferência simultânea de monômero de estireno e iniciador com vazão controlada. Normalmente alguns minutos após iniciada a transferência tem início a reação exotérmica, baseada nas experiências práticas obtidas nos processos de produção de resinas acrílicas atualmente feitos nos reatores da planta de divisão tintas automotivos.

Neste processo de fabricação de resina acrílica são tipicamente utilizadas as seguintes matérias-primas:

- Água potável.
- Acrilato de butila.
- Monômero de estireno.
- Peróxido orgânico.
- Solvente orgânico AB-9®.
- Fluido térmico Dowtherm®.

A Eq. (2.1) ilustra de maneira simplificada a reação de polimerização de resina acrílica:



(2.1)

O fluxograma simplificado apresentado na Figura 2.1 ilustra este processo, no qual se pode verificar a presença dos seguintes itens: tanque de monômero, tanque de iniciador, reator, tanque de diluição e tanque pulmão. Este último não é parte integrante do processo de reação e tem função de segurança, recebendo a massa do reator caso haja uma elevação de pressão com ruptura de discos de segurança sobre pressão. O tanque de

diluição normalmente de maior volume que o reator recebe a massa polimerizada para que seja feito ajuste de viscosidade através da adição de solvente.

O processo descrito é chamado de dual feeding porque monômero e iniciador ficam em tanques separados e são transferidos simultaneamente ao reator com vazão controlada através de medidores mássicos. Existe outro processo no qual o monômero e os iniciadores são misturados em um mesmo tanque e depois transferidos ao reator também com vazão controlada.

O aquecimento e resfriamento do reator na maioria das aplicações são feitos através da injeção controlada de fluido térmico quente (300°C) ou frio (60°C) na serpentina do reator. O controle da temperatura do reator é feito modulando a vazão de fluido térmico quente ou frio que é injetada na jaqueta meia cana do reator.

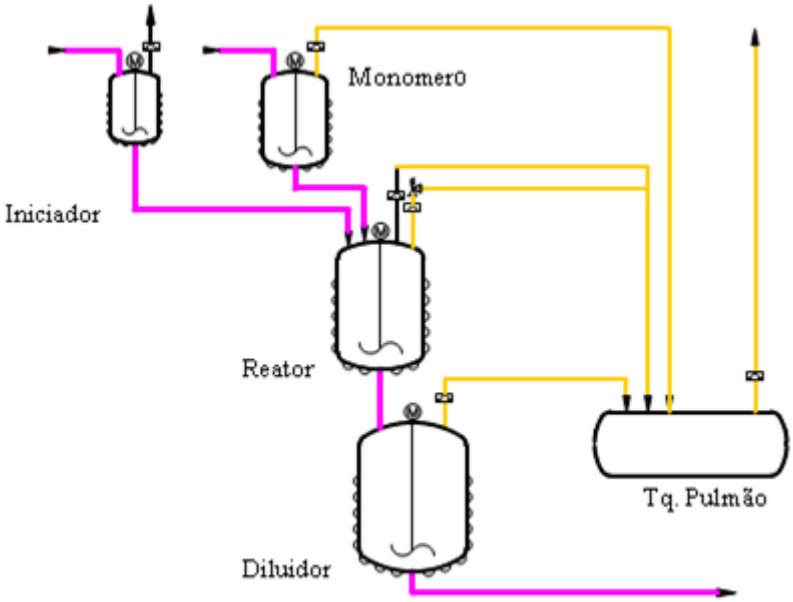


Figura 2.1 – Fluxograma simplificado do processo estudado
(fonte: Milan, 2010)

Na Figura 2.2 é apresentada uma representação esquemática do circuito de aquecimento e resfriamento do reator de polimerização considerado neste trabalho. Este circuito é composto basicamente por válvulas de controle de óleo frio e quente, válvula 3 vias de retorno de óleo frio e/ou quente, bomba centrífuga e serpentina. As válvulas possuem posição de falha definida, visando à segurança do processo. Estas válvulas têm sua posição alterada para estado seguro no caso de pane no processo que implique em perda de sinal de controle. O processo tem quatro malhas de controle (vazão de monômero, vazão de iniciador, temperatura da massa no reator e temperatura do fluido térmico).

As malhas de vazão de monômero e iniciador são independentes e não será objeto de estudo, apesar das mesmas poderem vir a atuar como distúrbio nas malhas de controle de temperatura da massa e fluido térmico durante a fase de reação. Já as malhas de controle de temperatura da massa e do fluido térmico são inter-relacionadas e serão abordadas no trabalho.

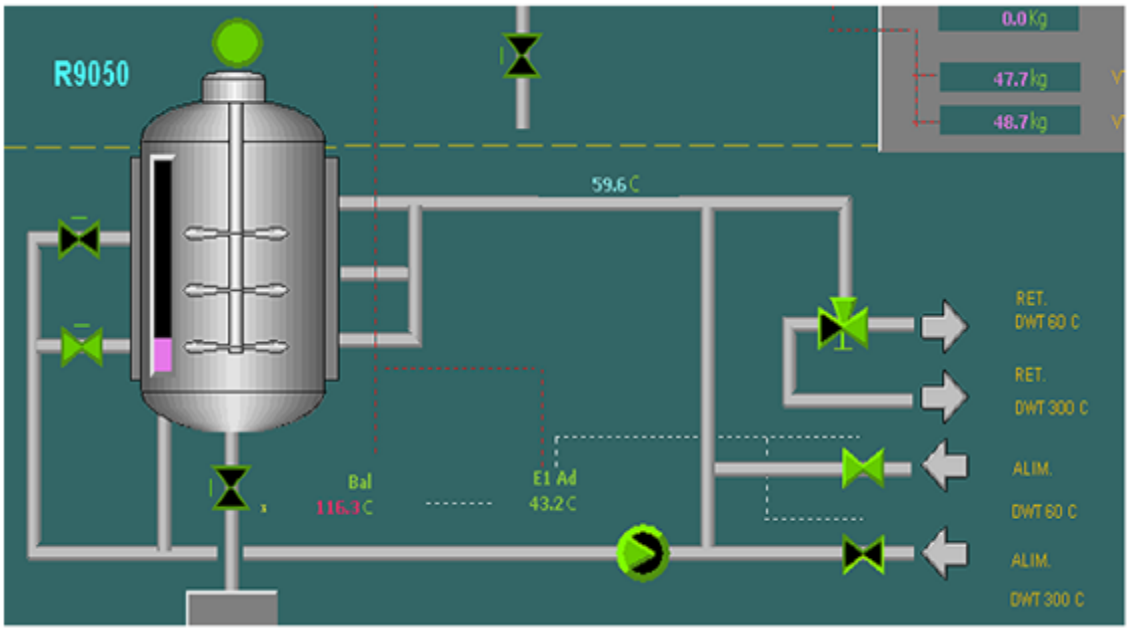


Figura 2.2 – Fluxograma simplificado do circuito de aquecimento e resfriamento
(Fonte: Milan, 2010)

2.2. Estratégias originalmente aplicadas no controle das temperaturas de fluido térmico e massa reacional para o reator estudado

São três as estratégias de controle de temperatura do reator empregadas no processo analisado (Milan, 2010), a saber: *(i)*- estratégia delta, *(ii)*- estratégia neutro e *(iii)*- estratégia de controle pela massa.

A **Estratégia Delta** é utilizada para as etapas do processo que correspondem às rampas de aquecimento e de resfriamento. Consiste basicamente em estipular uma diferença constante de temperatura entre a massa reacional e o fluido térmico, a qual é mantida constante durante esta parte do processo, até que a massa no reator atinja o valor de referência da próxima etapa.

A **Estratégia Neutro** é utilizada para a transição entre a estratégia delta e a estratégia de controle pela massa ou vice-versa. Ela tem como objetivo único estabilizar o sistema, interrompendo as entradas de fluido frio e quente e manter o fluido térmico em recirculação no circuito fechado formado pela serpentina,bomba e tubulação

A **Estratégia de Controle pela Massa** é utilizada na fase de reação na qual o valor de referência do controlador de temperatura da massa é constante. Nesta estratégia, os controladores de temperatura do fluido térmico e da massa são acoplados em cascata.

Na Figura 2.3 é apresentado o comportamento típico temporal das temperaturas consideradas no sistema de estudo e as respectivas estratégias de controle de temperatura utilizadas.

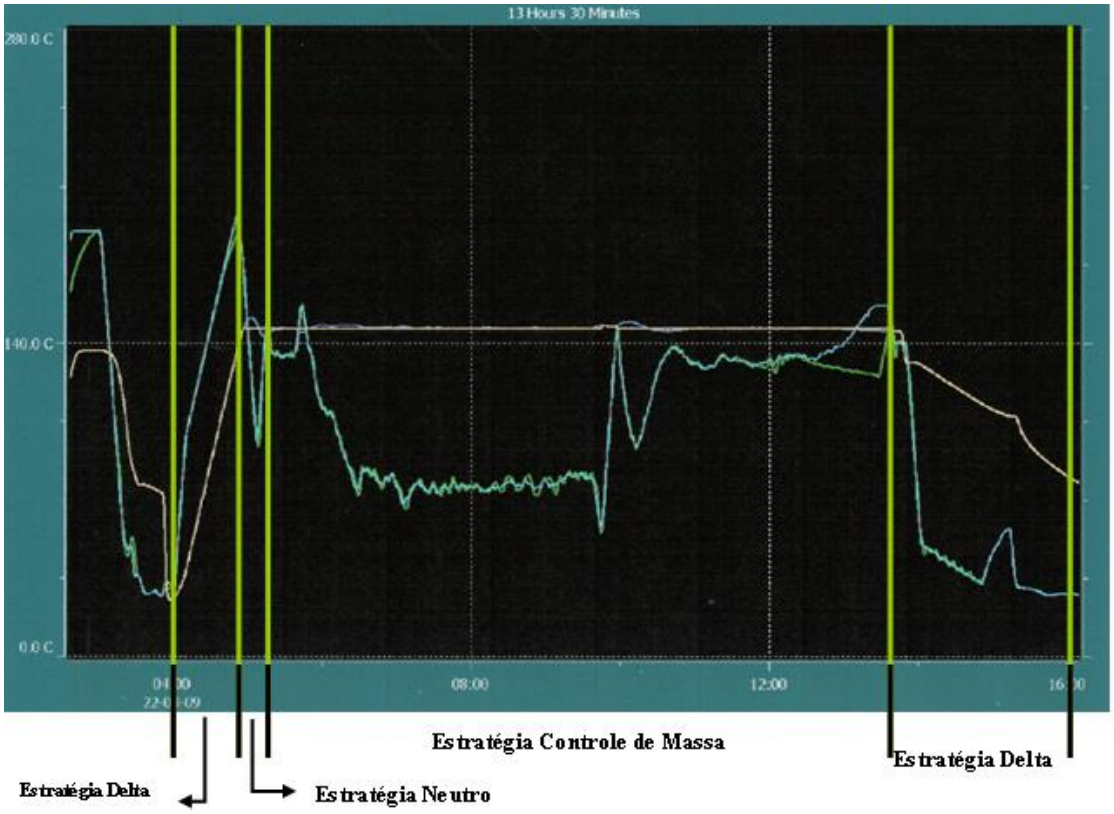


Figura 2.3 – Comportamento temporal das temperaturas do sistema estudado
(Fonte: Milan, 2010)

Capítulo 3

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Considerações sobre controle de temperatura de reatores de polimerização semi-batelada.

Clarke-Pringle; MacGregor (1997) estudaram o controle de temperatura de reatores de polimerização semi-batelada, do tipo multi-propósito. No estudo desenvolvido por aqueles autores, foi levada em consideração a característica de mudança na taxa de troca térmica ao longo do tempo devido a taxa da geração de calor terem comportamento não linear. Adicionalmente, os autores citam a dificuldade em se obter modelos cinéticos detalhados das reações de polimerização na literatura. Eles trabalham com um controlador adaptativo não linear baseado em conceitos de geometria diferencial acoplado a um filtro de Kalman estendido para executar o controle.

Régnier, Defaye, Caralp & Vidal (1996) estudaram essencialmente o controle preditivo adaptativo baseado em modelo da temperatura de reatores batelada e semi-batelada. Os autores utilizaram um 'software sensor' para estimar a taxa de produção de calor liberado na reação química em reator tipo CSTR empregando filtro de Kalman estendido. As temperaturas foram medidas para determinar o valor dos parâmetros desconhecidos considerando o emprego de balanços de energia e equações cinéticas em tempo real. Desta maneira foi possível prever a taxa de liberação instantânea de calor ao longo do horizonte de predição. A robustez e a flexibilidade do ‘software sensor’ foram avaliadas em diversas condições, considerando o emprego de um controlador inferencial e de um controlador tradicional para as mesmas condições de trabalho.

Crowley; Choi (1996) desenvolveram um estudo teórico e experimental para estimação e controle ‘on-line’ de um reator batelada usado na polimerização em solução de metacrilato de metila. O principal objetivo dos autores foi controlar a temperatura do reator tão rapidamente quanto possível considerando o menor sobre sinal possível na mesma. Um algoritmo que emprega o filtro de Kalman estendido foi usado para estimar o coeficiente efetivo de transporte de calor do reator, o qual foi usado para calcular automaticamente o ‘valor de referência’ da temperatura do fluido que circula pela camisa do reator, considerando uma malha de controle em cascata. A performance da malha de controle para o método proposto foi comparada com aquela apresentada por um controlador PID

convencional. Foi observado que o sobre sinal na temperatura pode ser minimizado pelo método proposto, considerando o uso de balanços de energia tanto no reator quanto na camisa de troca térmica do mesmo para o efetivo controle de sua temperatura. Nas situações nas quais a medição direta da conversão de monômero não estava disponível, foi empregado um filtro de Kalman estendido para estimar a taxa de calor produzido na reação de polimerização, a qual foi integrada para se obter uma estimativa do grau de conversão da reação. Foi constatado que os valores da covariância do erro entre o modelo e a medição afetam de maneira significativa a precisão do resultado.

Galván; Zaldıvar (1998), empregaram sistemas de controle neural inversos e preditivo para controlar em tempo real a temperatura do fluido empregado como agente de transporte de calor em um protótipo de reator químico. O treinamento do sistema de controle inverso foi executado usando tanto o conhecimento genérico como o específico acerca do sistema em estudo. Este procedimento permitiu a obtenção de pesos para o controlador atuando em tempo real e desempenho apropriado do controlador neural inverso. O sistema de controle preditivo fez uso de uma rede neural para calcular a ação do controle. Desta maneira, os problemas relacionados com o esforço computacional envolvido em sistemas não lineares preditivos baseados em modelo foram reduzidos. O desempenho dos controladores neurais foi comparado com controlador PID 'self-tuning' tipicamente instalado na planta. Os resultados mostraram que os controladores baseados em rede neural melhoraram a performance da planta real.

Louleh, Cabassud & Le Lann (1999) apresentaram uma nova estratégia para o controle da temperatura de reatores batelada multi-propósito usando estratégia de controle em cascata baseada em modelo. A estratégia está baseada no emprego do fluxo térmico como variável manipulada. Em cada instante amostrado, o controlador mestre calcula o fluxo térmico a ser trocado entre a massa reacional e o fluido térmico que escoa internamente à camisa do reator. Esta informação é então usada para avaliar o grau de abertura da válvula de controle. Para este propósito, um modelo físico de sistema termal foi desenvolvido. Os testes foram realizados em reator experimental.

Xaumier, Le Lann, Cabassud & Casamatta (2002) estudaram o emprego de controle preditivo não-linear baseado em modelo (NMPC) no controle da temperatura de um reator químico semi-batelada equipado com um sistema de aquecimento/resfriamento com múltiplos fluidos. A estratégia do sistema de controle não linear está baseada em um problema de otimização de restrição, o qual é resolvido 'on-line' repetidamente por integração 'step-wise' de um modelo dinâmico não linear e de estratégia de otimização. Uma rotina de controle supervisório foi desenvolvida, com base em modelo não linear dinâmico,

para lidar automaticamente com as alterações dos fluidos. O NMPC e o controle supervisório foram implementados em um PC e aplicados a um protótipo de reator batelada de 16 L. Os experimentos demonstraram a aplicabilidade de tal procedimento envolvendo tanto o controle preditivo como o controle supervisório.

Aziz, Hussain & Mujtaba (2000) testaram três diferentes tipos de controladores no rastreamento dos perfis ótimos de temperatura de reator batelada. Os autores utilizaram para este propósito uma reação exotérmica complexa executada em batelada para este propósito. Os perfis ótimos de temperatura do reator foram obtidos por meio da resolução 'off-line' de problemas de controle ótimo. Foram empregados os algoritmos 'dual mode' (DM) com proporcional e integral (PI) e proporcional-integral-derivativo (PID) associados com algoritmos genéricos usados para controle baseado em modelo (GMC) para o projeto dos controladores a serem usados para rastrear os perfis ótimos de temperatura (valores de referência dinâmicos). A técnica de rede neural foi usada juntamente com o algoritmo GMC como algoritmo estimador 'on-line' para a quantidade de calor liberada pela reação química. Os autores verificaram que o estimador teve comportamento mais efetivo e robusto do que aquele apresentado pelos controladores PI e PID no rastreamento dos perfis ótimos de temperatura de maneira a permitir a obtenção dos produtos desejados.

Delaplace *et al.* (2005) estudaram a determinação do valor do coeficiente de transporte de calor do lado do processo por meio do emprego de um sensor de fluxo de calor. Os autores compararam os resultados obtidos com aqueles obtidos com o emprego de técnicas que usam termopares convencionais associados com balanços de energia. Um medidor de fluxo de calor de emprego local foi montado no lado interno da parede de um vaso de fundo arredondado equipado com um impulsor do tipo helicoidal de geometria atípica suportado por dois braços verticais. Uma análise detalhada das variações de fluxo de calor instantâneo com as posições do impulsor foi também estudada. Foi ainda demonstrado pelos autores que o sensor de fluxo de calor foi capaz de monitorar a espessura da camada limite térmica, bem como a respectiva renovação com a rotação do impulsor.

Haugwitz, Hagander, & Nóren (2007) estudaram um novo tipo de reator químico denominado de 'Open Plate Reactor' em desenvolvimento pela Alfa Laval AB. Ele combina boa mistura com alta capacidade de transporte de calor. Com o novo conceito, as reações altamente exotérmicas podem ser conduzidas usando reagentes mais concentrados. Os autores elaboraram um modelo não linear do reator, o qual foi usado em conjunto com um sistema de controle. Para o controle da temperatura, um sistema de controle da etapa de resfriamento foi projetado e testado, o qual usou uma estrutura de controle adequada para aumentar a faixa de operação do equipamento hidráulico. Um Controlador Preditivo

Baseado em Modelo foi proposto para maximizar o grau de conversão sob condições de restrição pesada da entrada e do estado do reator. Os autores projetaram um filtro de Kalman estendido para estimar as concentrações não medidas e/ou os parâmetros de processo. Simulações mostraram que o sistema de controle proposto fornece um elevado grau de conversão da reação química e assegura que a temperatura interna do reator não exceda um limite de segurança pré-estabelecido.

Rani; Patwardhan (2007), utilizaram um Modelo Genérico de Controle (GMC) para obter um controle fino de processos batelada e/ou semi-batelada. Os autores usaram uma abordagem baseada em modelo de rede neural artificial associada com GMC (ANNGMC) estendido a processos semi-batelada de segunda ordem ou superiores. O comportamento não linear variável no tempo típico de processos batelada/semi-batelada é aproximado usando um modelo ANN desenvolvido em torno da região de operação desejada. Este modelo foi posteriormente usado para sintetizar um controlador não linear usando uma estrutura tipo GMC para resolver problemas de rastreamento de trajetória associados com reatores semi-batelada.

Kawase, Hoshino & Takahashi (2002) estudaram o transporte de calor na camada limite em um tanque agitado equipado com camisa para trabalho com fluidos não newtonianos. As taxas de transporte de calor da jaqueta para o fluido de processo através da parede do tanque foram medidas para diferentes tipos de impulsores de larga escala, bem como de propriedades reológicas. Os autores desenvolveram uma correlação para a película laminar de fluido não newtoniano associada ao transporte de calor em tanques agitados. A correlação foi obtida a partir da técnica integral de Von Karman. Os autores verificaram uma boa aproximação entre os valores preditos pela correlação e aqueles obtidos experimentalmente para transporte de calor laminar em fluidos viscosos newtonianos e não-newtonianos em tanques agitados.

Zeybek, Çetinkaya, Hapoglu, Alpbaz (2006) implementaram um algoritmo generalizado do tipo regra delta (GDR) com controle preditivo generalizado (GPC) para rastrear um 'valor de referência' de temperatura em um reator batelada encamisado de polimerização. Uma equação para temperatura ótima foi obtida por meio do emprego de equações de coestado Hamiltoniano e de um modelo. Para rastrear os perfis ótimos de temperatura calculados, o controlador usado deve atuar de maneira suave e precisa. No projeto deste sistema de controle, o reator carregado com uma mistura de estireno–tolueno foi assumido apresentar o comportamento típico de um trocador de calor. Quando o reator foi aquecido por meio de um aquecedor imerso na massa reacional, água de resfriamento é feita escoar através da camisa de resfriamento. Desta maneira, a água de resfriamento absorve o calor liberado

pelo aquecedor. Neste cenário, o reator foi considerado como de operação contínua no que tange à energia posta em jogo. O calor libertado durante a reação foi considerado como um distúrbio para o trocador de calor. O calor fornecido pelo aquecedor por imersão foi considerado como a variável manipulada do sistema. O modelo neural utilizado foi baseado na relação entre a temperatura do reator e o calor alimentado. Os resultados do desempenho do GDR associado ao GPC foram comparados com os resultados obtidos com o emprego de um GPC não linear com modelo NARMAX. A temperatura do reator seguiu muito próxima a trajetória ótima.

Nagy; Agachi (1997) discutiram um método de melhorar a qualidade do controle de temperatura de uma suspensão de cloreto de polivinila (PVC) em reator batelada por meio da implementação de dois controladores não lineares preditivos baseados em modelo (NMPCs) para este processo exponencialmente instável com comportamento significativo não linear. O primeiro método foi baseado em novo cálculo da matriz de resposta ao degrau para cada intervalo de amostragem com uma predição baseada em modelo dual e resolvendo tanto o problema de otimização quanto o do modelo linear do processo descrito pela matriz de resposta ao degrau. O segundo método usou um modelo rigoroso tanto para a predição quanto para a otimização. Estes métodos foram testados para diferentes distúrbios, sendo as respectivas performances comparadas com aquelas obtidas com o emprego de controlador PID. Significativa melhoria no controle da temperatura foi alcançado usando o NMPC.

Dhotre, Murthy & Subramanian (2006) estudaram o resfriamento de líquidos usando camisa meia-cana. Os experimentos realizados foram conduzidos para escoamento de agente de resfriamento através de camisa meia-cana considerando o escoamento laminar e turbulento. Correlações foram desenvolvidas para o coeficiente de transporte de calor para jaqueta meia-cana. Os autores propuseram um modelo matemático para a jaqueta meia-cana, desenvolvendo equações para balanço diferencial de energia tanto para o lado do casco como para o lado da serpentina. No modelo, o lado da serpentina foi dividida em um número definido de seções de mistura (n). O valor de n foi encontrado através de variância adimensional obtida a partir dos dados do transiente da temperatura da água de resfriamento e é igual a três para escoamento laminar e um para escoamento turbulento. As equações foram resolvidas pelo método de Euler semi-implícito para predizer tanto a temperatura do lado do casco como a temperatura do lado da serpentina. Os resultados obtidos com base nas predições do modelo mostraram-se adequados com os dados experimentais.

3.2. Considerações sobre o uso de Modelos Matemáticos para representação do comportamento térmico do reator batelada em processo de fabricação de resinas acrílicas

Conceitua-se modelo como sendo qualquer artifício que nos permita reproduzir a realidade física de um determinado sistema. A dimensão e a complexidade do sistema dependem do grau de detalhe com o qual se deseja realizar o estudo, podendo ir desde um trocador de calor até todas as inter-relações existentes numa unidade de processo completa.

O comportamento real dos componentes e/ou de um sistema físico completo é normalmente tão complexo que seu equacionamento tende a ser intratável pelos métodos matemáticos usuais. O recurso que se dispõe é o de idealizar aquele comportamento, admitindo certas hipóteses simplificadoras que ajudam a tornar o modelo mais adequado para utilização em análise e acompanhamento do processo (LOTUFO; GARCIA, 2008).

No contexto deste trabalho optou-se por utilizar modelos a parâmetros concentrados, pois os mesmos representam de maneira satisfatória o comportamento dos valores médios globais das temperaturas da massa reacional e da camisa de óleo térmico que serão utilizados nos modelos matemáticos considerados.

Capítulo 4

MODELAMENTO MATEMÁTICO DO COMPORTAMENTO DA TEMPERATURA DA MASSA REACIONAL NA ETAPA DE AQUECIMENTO INICIAL DO REATOR

Na Figura 4.1 é apresentada a representação esquemática simplificada do sistema utilizado para obtenção dos dados necessários ao modelamento matemático da temperatura do reator considerado.

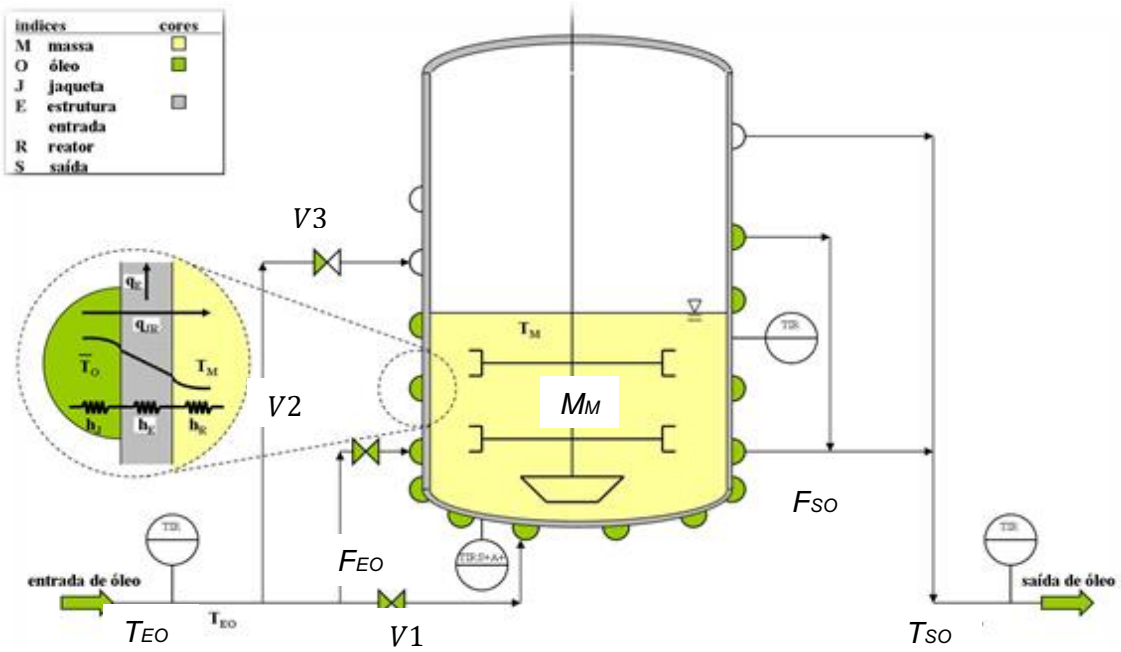


Figura 4.1 – Representação esquematica do reator de polimerização estudado (Fonte: Milan, 2010)

.

Este sistema é composto pelos seguintes elementos (MILAN, 2010):

- Reator cilíndrico vertical construído em aço inoxidável com 6 m^3 de capacidade;
- Sistema digital de controle distribuído ABB modelo AC450;
- Driver OPC de comunicação digital;
- Válvulas de controle Masoneilan modelo UNIPACT300;
- Elementos sensores de temperatura tipo Pt 100;
- Medidor de vazão volumétrica por ultra som Flexim Gmbh modelo: Fluxus ADM 6725;
- Termômetro de radiação infravermelha Raytek modelo RAYST30XXUS.

O modelo matemático simplificado do reator estudado neste trabalho foi obtido a partir das equações de balanço global de energia, aplicadas ao volume de controle composto pelo reator propriamente dito e pela jaqueta de aquecimento e/ou resfriamento do tipo meia cana. Adicionalmente, foram usadas correlações específicas para o cálculo do coeficiente global de transporte de calor.

Para a obtenção do modelo matemático foram assumidas algumas simplificações, apresentadas na sequência: *(i)*- as propriedades de transporte de calor dos fluidos contidos no interior do reator e no interior da jaqueta não variam com a temperatura; *(ii)*- não há mudança de fases nos fluidos considerados e *(iii)*- as variações de energia cinética e de energia potencial são assumidas desprezíveis (GARCIA, 2005).

Os processos de troca térmica considerados na representação matemática do sistema estudado são os seguintes: *(i)*- transferência de calor por convecção entre o fluido que escoa na jaqueta de aquecimento e/ou de resfriamento; *(ii)*- transferência de calor por condução nas paredes do reator e *(iii)*- transferência de calor por convecção entre o fluido contido no interior do reator e a parede do mesmo.

Foi assumido que o reator químico apresenta funcionamento adiabático e que seja aplicável a representação do sistema usando o valor médio global das propriedades térmicas consideradas no modelo.

A configuração do reator pode ser vista na Figura 4.1, apresentada anteriormente. Como pode ser observado naquela figura, o reator foi preenchido com aproximadamente 1/3 de seu volume total nesta fase do processo. Também é importante ressaltar que o reator possui três segmentos independentes de jaqueta meia-cana. Estes segmentos são utilizados de acordo com o volume de matéria prima contido no interior do reator. A escolha dos segmentos a serem empregados é feita por meio das válvulas de bloqueio $V1$, $V2$ e $V3$, as quais permitem ou não a circulação de fluido térmico nos segmentos 1, 2 e 3 respectivamente.

Os balanços de massa aplicados aos volumes de controle definidos pelo interior do reator químico propriamente dito e pela jaqueta meia-cana não são relevantes para o modelamento matemático da temperatura do reator, haja vista o fato da massa reacional dentro do reator (M_M) permanecer constante na etapa de aquecimento estudada, e da vazão de entrada de óleo térmico na serpentina (F_{EO}) ser igual à vazão de saída de mesmo fluido (F_{SO}).

Na etapa de aquecimento estudada, a energia é transportada da jaqueta meia-cana para

a massa reacional no interior do reator. O balanço global de energia aplicado ao volume de controle definido pela jaqueta meia-cana pode ser escrito como apresentado pela Eq. (4.1).

$$\frac{d(Tso)}{dt} = \frac{(\rho_{Eo}.F_{EO}.Cp_{EO}.T_{EO}) - (\rho_{So}.F_{SO}.Cp_{SO}.T_{SO}) - U_{JR}.A_{JR}.(\overline{T}_O - T_M)}{\overline{\rho}_O.V_{OS}.\overline{C}p_O} \tag{4.1}$$

Foi assumida a hipótese simplificadora de que o sistema pode ser modelado como um sistema a parâmetros concentrados devido ao fato de que as diferenças de temperaturas entre entrada e saída do fluido térmico usado como agente de aquecimento da massa reacional são pequenas.

Complementarmente foi considerado que as incertezas que afetam o modelo proposto na Eq. 4.1 estão contidas no valor do coeficiente global de troca térmica.

A temperatura média é calculada fazendo a média aritmética entre as temperaturas de entrada (T_{EO}) e temperatura de saída do fluido térmico (T_{SO}) de acordo com a Eq. (4.2).

$$\overline{T}_O = \frac{(T_{EO} + T_{SO})}{2} \tag{4.2}$$

A temperatura da massa reacional (T_M) será calculada com base no balanço global de energia aplicado ao volume de controle definido pelo reator químico propriamente dito.

O balanço global de energia aplicado ao volume de controle definido pelo reator químico propriamente dito pode ser escrito como apresentado pela Eq. (4.3).

$$\frac{d(T_M)}{dt} = \frac{U_{JR}.A_{JR}.(\overline{T}_O - T_M)}{\rho_M.V_M.Cp_M} \tag{4.3}$$

O modelo matemático desenvolvido foi implementado no ambiente SIMULINK® do aplicativo Matlab™, como mostrado no diagrama de simulação apresentado na Figura 4.2.

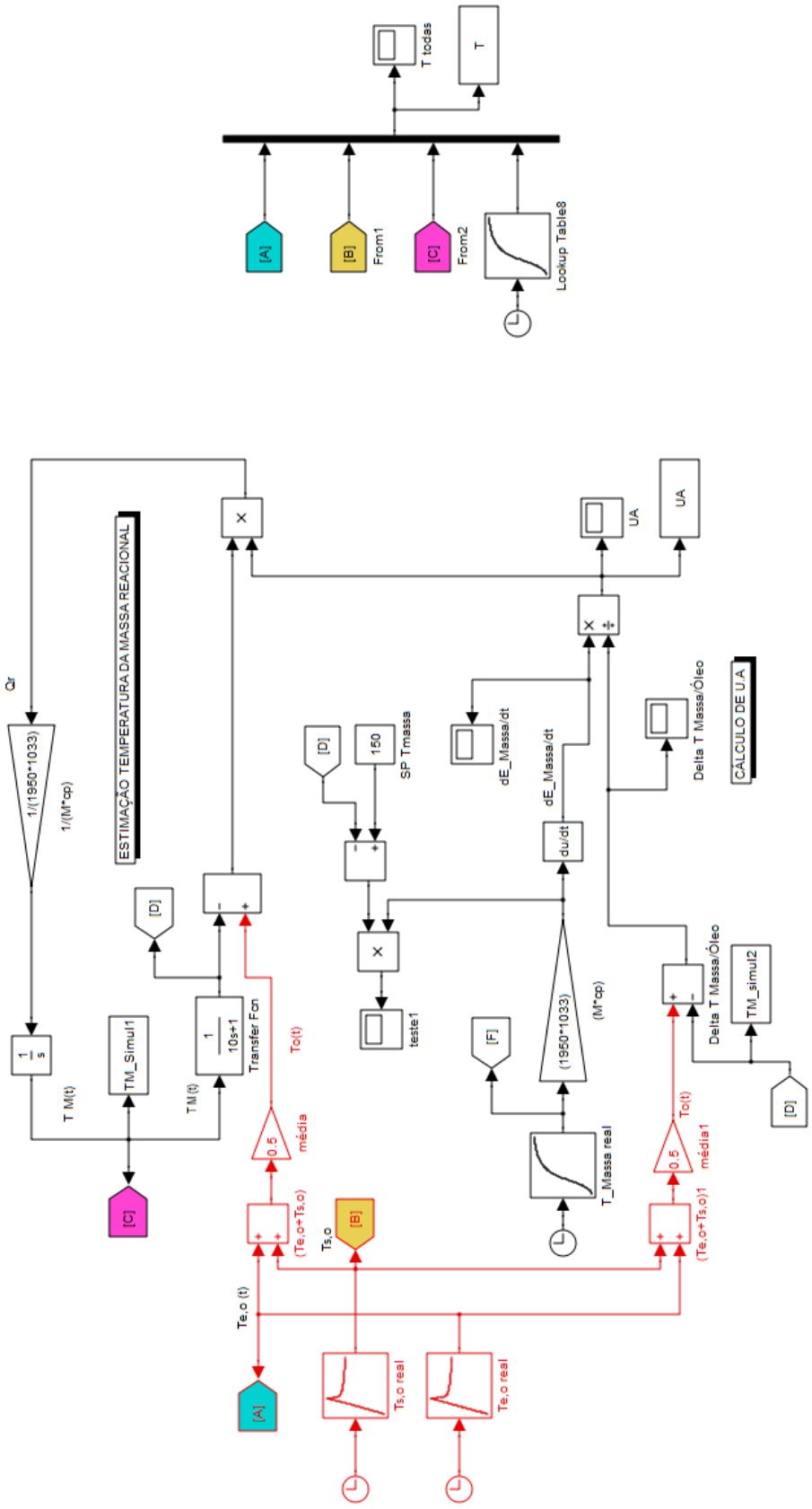


Figura 4.2 – Diagrama de simulação do reator de polimerização em estudo
(Fonte: Mendonça, 2016)

O diagrama de simulação do **modelo invertido simplificado do reator de polimerização correspondente à etapa de aquecimento da massa de solvente no reator desde o instante inicial até o instante do início da reação** é apresentado na Figura 4.3. Este diagrama também foi desenvolvido com o emprego do aplicativo Matlab™.

No diagrama em estudo o comportamento desejado para a temperatura da massa ao longo do tempo é alimentado ao modelo por meio dos blocos de função "**Look-up Table**" denominado $\mathrm{Tm(t)\ TARGET}$ e "**Derivative**" denominado dTm/dt. Com base no comportamento desejado para a temperatura da massa é calculada a quantidade de calor absorvida por unidade de tempo pela massa reacional $Qm(t)$, multiplicando-se dTm/dt por $Mm \cdot Cpm$.

Com base no valor calculado para $Qm(t)$ é feito o cálculo da diferença de temperatura entre o óleo térmico e a massa $(\Delta To, m)$, multiplicando $(\mathrm{Qm(t)})$ pelo inverso do produto $(U \cdot A)$ inserido no bloco de função "**Gain**", denominado $(\frac{1}{U} \cdot A)$. Com base no valor de $\Delta To, m$ foi calculado o valor desejado para a temperatura de saída do óleo térmico $Ts, o(t)$, pela soma do valor da $Tm(t)$ ao valor da $\Delta To, m$. Foi utilizado o bloco de função "**Sum**" identificado como $\mathrm{CÁCULO\ DE\ Ts, o(t)\ TARGET}$.

O calculo do valor desejado para a temperatura de entrada do óleo térmico $\mathrm{Te, o(t)\ TARGET}$, foi feito com base na equação de balanço de energia aplicada à camisa do reator. Esta equação foi rearranjada como apresentado na Eq. (4.4). A implementação da Eq. (4.4) no diagrama de simulação obdeceu ao procedimento descrito no próximo parágrafo.

$$T_{e,o}(t) = T_{s,o}(t) + \frac{1}{\rho_o \cdot F_o \cdot Cp_o} \cdot \left\{ Q_m(t) + \left[\rho_o \cdot V_j \cdot Cp_o \cdot \frac{dT_{s,o}(t)}{dt} \right] \right\} \tag{4.4}$$

Com base no valor desejado para a temperatura de saída do óleo térmico $Ts, o(t)$ anteriiormente calculado, foi aplicada a operação de derivação por meio do bloco de função "**Derivative**" denominado $\mathrm{dTs, o/dt\ TARGET}$. Na sequência, o valor obtido foi multiplicado por $\rho_o \cdot V_j \cdot Cp_o$ usando o bloco de função "**Gain**". O resultado da operação anteriormente citada foi acrescido ao valor já calculado quantidade de calor absorvida por unidade de tempo pela massa reacional $Qm(t)$, usando o bloco de função "**Sum**" denominado $\mathrm{CÁLCULO\ DE\ dQo(t)/dt\ TARGET}$.

O valor resultante do cálculo apresentado no parágrafo anterior foi multiplicado por

$\frac{1}{\rho_o \cdot F_{o,j} \cdot Cp_o}$ e somado ao valor desejado para a temperatura de saída do óleo térmico $T_{s,o}(t)$ já calculada em etapa preliminar, resultado no valor desejado para a temperatura de entrada do óleo térmico $\mathrm{T_{e,o}(t)}$ TARGET.

O valor de $T_{s,o}(t)\ TARGET$ é enviado para o modelo desenvolvido posteriormente que representa o balanço de energia na jaqueta do reator. Já o valor calculado em cada instante para $T_{e,o}(t)\ TARGET$ é enviado para o modelo matemático que representa o comportamento do controlador de temperatura do óleo térmico, visando manter o valor desta variável o mais próximo possível do seu *set-point*.

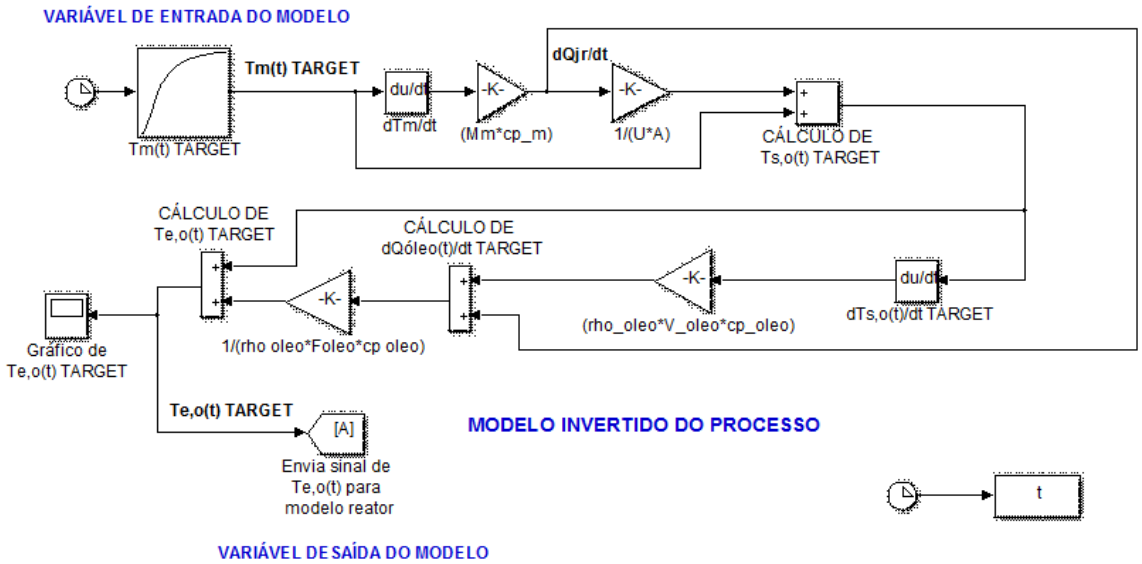


Figura 4.3 – Diagrama de simulação do modelo invertido em estudo
(Fonte: Mendonça, 2016)

O diagrama de simulação do **comportamento do controlador de temperatura de entrada do óleo térmico** corresponde à etapa de controle na qual um controlador PID visa a manutenção da variável controlada (temperatura de entrada do óleo térmico na jaqueta) o mais próximo possível do *set point*, obtido como resultado do modelo proposto anteriormente na Figura 4.2. Este diagrama também foi desenvolvido com o emprego do aplicativo Matlab™ e está representado pela Figura 4.3.

Como primeiro passo para o desenvolvimento do diagrama, é alimentada a informação do *set-point* da temperatura de entrada do óleo térmico $T_{e,o}(t)\ TARGET$ obtido anteriormente como já descrito. No bloco de função "**Sum**" denominado $CÁLCULO\ DE\ Erro(t)\ Absoluto$ é calculado o desvio entre o valor de $T_{e,o}(t)\ TARGET$ e o valor realimentado da temperatura de entrada do óleo térmico real $T_{e,o}(t)\ REAL$ após a atuação do controlador de temperatura, em cada instante.

O $\mathrm{Erro(t)\ Absoluto}$ obtido é normalizado a partir da divisão do seu valor pelo erro máximo $ErroMAX$, operação feita utilizando o bloco de função "**Gain**". O resultado desta operação é o erro normalizado $Erro(t)$ cuja faixa de variação está compreendida entre -1 a +1. O valor de $Erro(t)$ em cada instante alimenta o bloco de função "**PID Controller**", que produz como saída o sinal de resposta do controlador $S(t)$. Os valores de $S(t)$ também estão normalizados entre -1 a +1.

A partir do valor de $S(t)$ em cada instante, obtido como resposta de controle, é feita a transdução deste sinal de tal modo que possa ser processado pelas válvulas de controle. Essa transformação se dá primeiramente multiplicando $S(t)$ por 8, operação feita utilizando o bloco de função "**Gain**" denominado $\mathrm{Fator\ Conversão}$, gerando o sinal tratado $S'(t)$. Os valores de $S'(t)$ possuem range de -8 a +8. Posteriormente, a faixa de variação dos valores de $S'(t)$ são transformados para a faixa de sinal padronizado tipicamente utilizada em instrumentação industrial, compreendida entre $4\ a\ 20\ mAcc$. Essa operação é feita somando $12\ mAcc$ ao valor do sinal $S'(t)$, considerando o emprego do bloco de função "**Sum**" denominado $Fator\ Conversão\ 2$.

O diagrama de simulação do **comportamento das válvulas de controle de entrada de óleo térmico na camisa** corresponde a etapa de controle na qual os elementos finais de controle, as válvulas em questão, recebem o sinal de resposta do controlador, obtido como descrito anteriormente. Este diagrama também foi desenvolvido com o emprego do aplicativo matlab/simulink™ e está representado pela Figura 4.5.

Como primeiro passo, é necessário definir a estratégia para que apenas uma válvula de óleo térmico atue em cada momento, chamada de controle em faixa dividida. Para tal, a informação do sinal final $S''(t)$ foi inserido em dois ramos diferentes do diagrama, um para cada válvula de controle. Nestes ramos os valores $S''(t)$ em cada instante passam por blocos de função "**Saturation**", nos quais há a sua saturação em diferentes faixas, de $4\ a\ 12\ mAcc$ para a válvula de óleo térmico à 60ºC e de $12\ a\ 20\ mAcc$ para a válvula de óleo térmico à 300ºC. O sinal final saturado $S'''(t)$ de cada ramo é então transformado em coeficiente de vazão $\mathrm{Cv(t)}$ utilizando a interpolação linear feita bloco de função "**Lookup Table**".

Garcia (2005) afirma que as válvulas apresentam um atraso na sua atuação. A maneira para representação deste atraso foi inserir os valores de $Cv(t)$ em cada instante em um bloco de função "**Transfer Function**" de ganho unitário e tempo de resposta equivalente. O sinal de saída dessa operação foi denominado coeficiente de vazão final $Cv'(t)$.

A partir desse ponto, os valores de $Cv'(t)$ são transformados em valores de vazão de entrada de óleo $Fo,f(t)$. Esta operação é feita utilizando o bloco de funçao "**Gain**" que apresenta a equação de válvula, representada na Eq. (4.5).

$$Fo,f(t) = Cv'(t).\sqrt{\frac{\Delta P}{\rho}} \tag{4.5}$$

Os valores de $Fo,f(t)$ em cada instante têm dois destinos. O primeiro destes é a soma das vazões das duas válvulas, feita pelo bloco de função "**Sum**" denominado *CÁLCULO DE* $Fo,f(t)\ TOTAL$. Esta informação é destinada para o posterior desenvolvimento do modelo do balanço de energia na jaqueta do reator. Já o segundo destino é a transformação de $Fo,f(t)$ em energia, através de blocos sucessivos de função "**Gain**" com a finalidade de multiplicar o valor da temperatura T, densidade do óleo ρ_o e calor específico Cp_O de cada válvula de controle. Então, os valores de $Fo,f(t) \cdot T \cdot \rho_o \cdot Cp_O$ em cada instante e de cada ramo do diagrama são somados no bloco de função "**Sum**" denominado $Fo,f(t) \cdot T \cdot \rho_o \cdot Cp_O\ TOTAL$. Finalmente, esta informação é também destinada para o desenvolvimento do modelo do balanço de energia na jaqueta do reator.

O diagrama de simulação do **modelo do balanço de energia da jaqueta do reator** apresenta a quantificação das energias postas em jogo pelo óleo já presente na jaqueta e pelo óleo proveniente da alimentação. O diagrama foi desenvolvido com o emprego do aplicativo matlab™ e está representado pela Figura 4.6.

O balanço de energia feito na jaqueta do reator foi realizado no volume de controle apresentado na Figura 4.7. Nessa região há primeiramente a mistura das vazões de óleo térmico vindo da saída da jaqueta térmica com a alimentação nova vinda das válvulas de controle térmico e, posteriormente, há a separação dessa mistura em duas correntes, uma que será a vazão de entrada da jaqueta do reator e outra que será a vazão de purga para não haver acúmulo de fluido térmico dentro do sistema.

O balanço de energia resultou na Eq. (4.7), que apresenta todas as energias resultantes das vazões de entrada e de saída da região do volume de controle escolhido. Essa equação já leva em conta o fato de que a densidade e a capacidade calorífica do óleo não apresentam variação e por isso foram substituídos pelos seus valores médios e a vazão de purga do óleo térmico é igual a vazão de óleo térmico de alimentação $F_{o,f}(t)$.

$$\overline{\rho}_o \cdot F_{o,j} \cdot \overline{Cp}_o \cdot T_{s,o}(t) + \overline{\rho}_o \cdot F_{o,f}(t) \cdot \overline{Cp}_o \cdot T(t) - \overline{\rho}_o \cdot F_{o,f}(t) \cdot \overline{Cp}_o \cdot T_{e,o}(t) - \overline{\rho}_o \cdot F_{o,j} \cdot \overline{Cp}_o \cdot T_{e,o}(t) = \overline{\rho}_o \cdot V_{VC} \cdot \overline{Cp}_o \cdot \frac{dT_{e,o}(t)}{dt} \quad (4.6)$$

Para uma melhor visualização, a Eq. (4.6) pode ser simplificada através da retirada de $\overline{\rho}_0$ e $\overline{Cp}_o$ do equacionamento, obtendo-se a Eq. (4.7).

$$F_{o,j} \cdot T_{s,o}(t) + F_{o,f}(t) \cdot T(t) - F_{o,f}(t) \cdot T_{e,o}(t) - F_{o,j} \cdot T_{e,o}(t) = V_{VC} \cdot \frac{dT_{e,o}(t)}{dt} \quad (4.7)$$

A partir da Eq. (4.6) foi desenvolvido o diagrama do modelo. Primeiramente foram definidos três blocos de recebimento de informação: $T_{s,o}(t)$, $F_{o,f}(t)\ TOTAL$ e $F_{o,f}(t) \cdot T \cdot \overline{\rho}_o \cdot \overline{Cp}_o\ TOTAL$. Esses sinais são recebidos dos modelos anteriormente desenvolvidos ao longo deste capítulo.

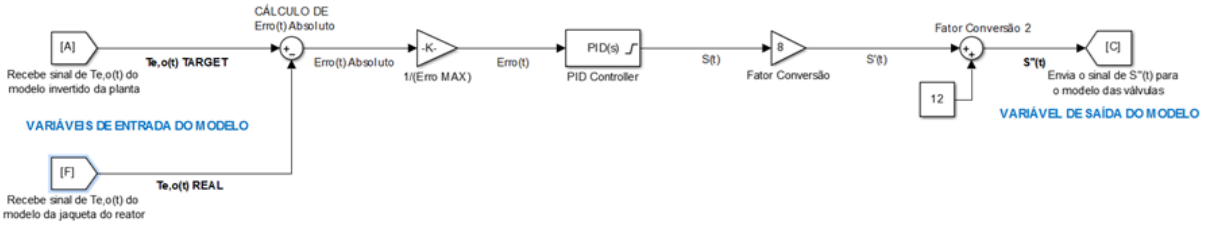


Figura 4.4 – Diagrama do modelo do controlador de temperatura em estudo
(Fonte: Elaborado pela autora, 2019)

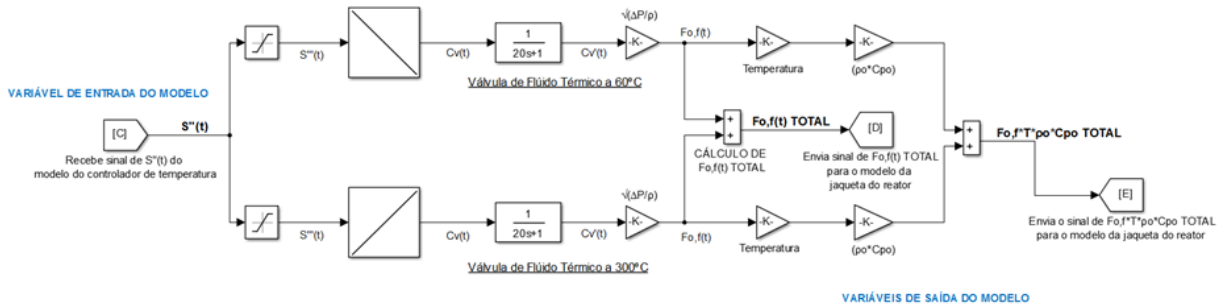


Figura 4.5 – Diagrama do modelo das válvulas de controle
(Fonte: Elaborado pela autora, 2019)

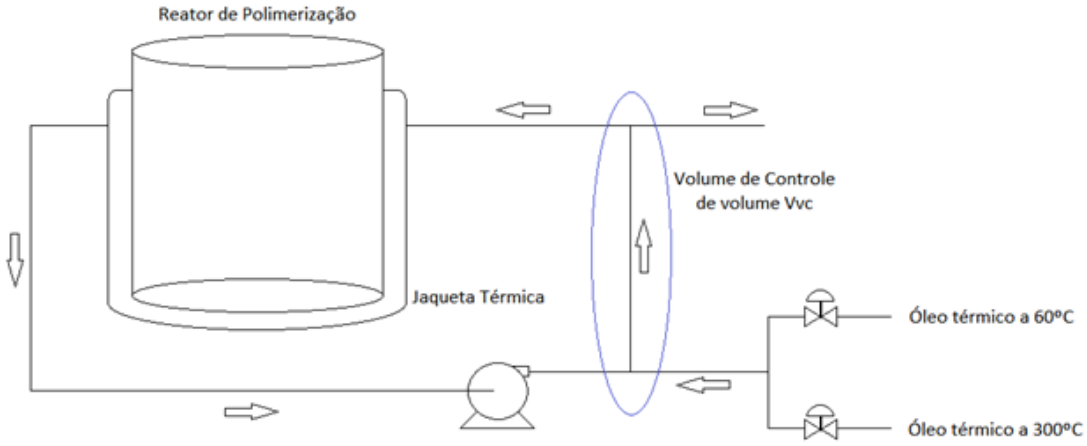


Figura 4.6 – Volume de controle do balanço de energia
(Fonte: Elaborado pela autora, 2019)

Os valores de $T_{s,o}(t)$ em cada instante, para se tornarem valores de energia, foram multiplicados por $\overline{\rho}_o \cdot \overline{Cp}_o \cdot F_{o,j}$ utilizando o bloco de função "**Gain**". Já os valores de "$F_{o,f}(t) \cdot T \cdot \overline{\rho}_o \cdot \overline{Cp}_o\ TOTAL$" em cada instante já apresentavam unidade de energia e portanto não precisaram de nenhum tratamento.

Para os termos negativos, foi necessário a realimentação dos valores finais de $T_{e,o}(t)\ REAL$. Foram utilizados então dois blocos de função "**Product**" para realizar a multiplicação desta realimentação com os valores de $F_{o,f}(t)\ TOTAL$ e de $F_{o,j}$, que foi gerado através do uso do bloco de função "**Constant Value**". Posteriormente, os dois valores resultantes de tais multiplicações foram ambos multiplicados por "$\overline{\rho}_o \cdot \overline{Cp}_o$", gerando unidades de energia.

Os quatro valores já em unidades de energia foram então levados ao bloco de função "**Sum**", representando o lado esquerdo da igualdade da Eq. (4.6). O resultado desta operação, que apresenta o valor do lado direito da igualdade da Eq. (4.6), foi multiplicado por $1/\overline{\rho}_o \cdot \overline{Cp}_o \cdot V_{VC}$ utilizando o bloco de função "**Gain**". Finalmente, o resultado da última operação, $dT_{e,o}(t)/dt$, foi integrado utilizando o bloco de função "**Integrator**", gerando o valor da temperatura do óleo térmico na entrada da jaqueta do reator após a atuação do controlador $T_{e,o}(t)\ REAL$.

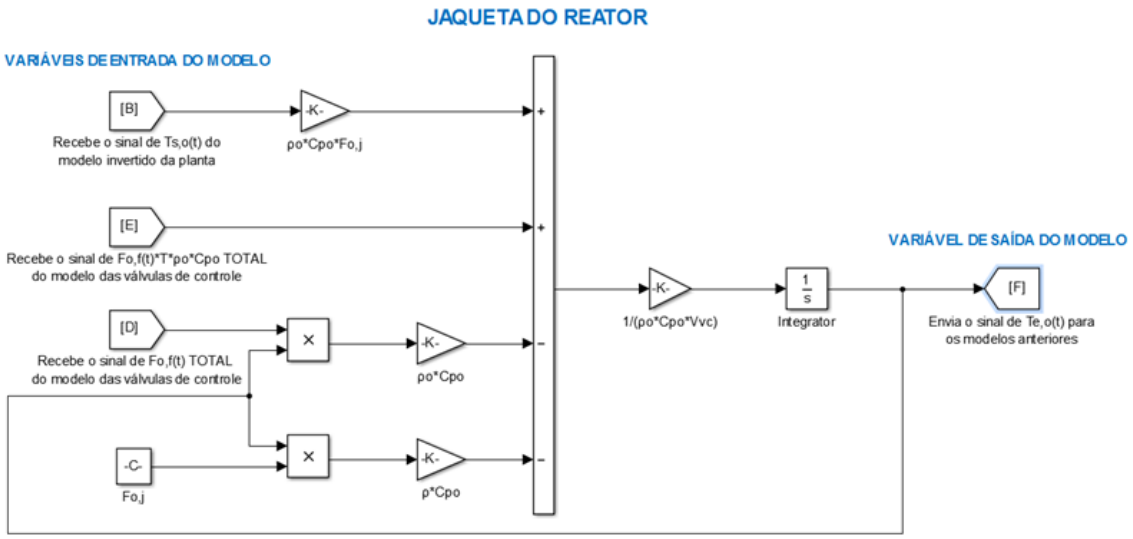


Figura 4.7 – Modelo do balanço de energia na jaqueta do reator
(Fonte: Elaborado pela autora, 2019)

Capítulo 5

RESULTADOS OBTIDOS E DISCUSSÃO

Na Figura 5.1 são apresentados os comportamentos temporais das temperaturas da massa reacional, de entrada do óleo térmico e de saída do óleo térmico utilizado na etapa inicial de aquecimento do reator.

Com base na Figura 5.1 e no modelo matemático apresentado no diagrama de simulação mostrado na Figura 4.3, pode-se observar que a elevação da temperatura da massa reacional é feita gradualmente, de maneira a atingir a temperatura de operação depois de decorridos 6.000 segundos. O óleo térmico quente é introduzido na jaqueta meia cana durante aproximadamente 1.600 segundos, sendo a sua temperatura aumentada à taxa de 0,11 °C/s até que o sistema de controle envie um sinal para interromper o aquecimento. Este sinal de controle é gerado quando ocorre a condição de igualdade entre a quantidade de energia térmica disponível na jaqueta meia-cana com a quantidade de energia térmica requerida pela massa reacional para atingir o set-point de trabalho (MILAN, 2010).

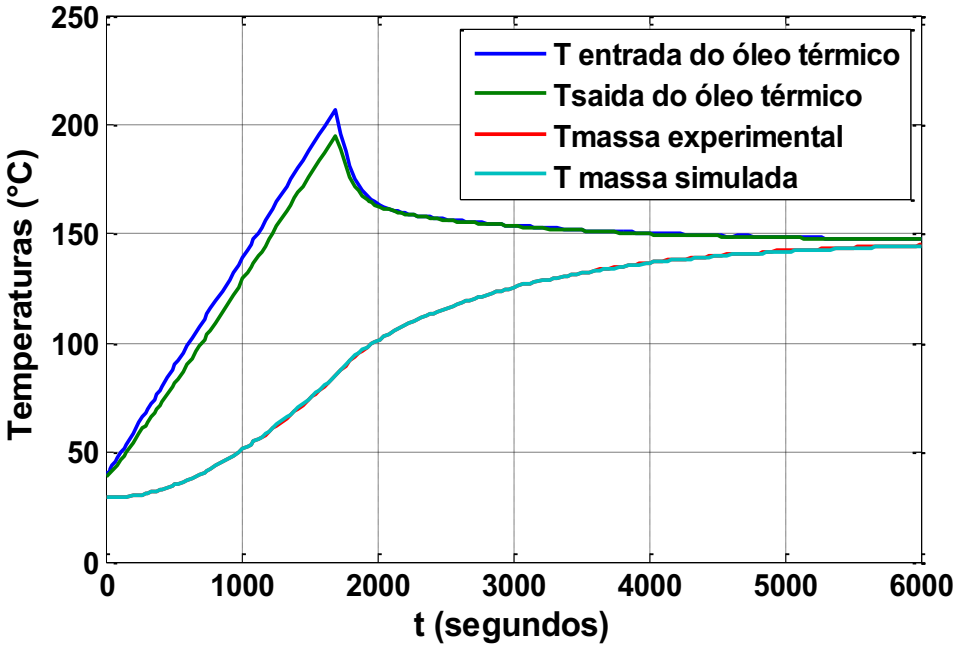


Figura 5.1 – Temperaturas da massa reacional e de entrada e saída do óleo térmico (Fonte: Milan, 2010)

Pode-se ainda verificar, com base no modelo apresentado na Figura 4.2, que a propriedade de transporte de calor denominada coeficiente global de troca térmica ($\mathrm{U_{JR}} \cdot \mathrm{A_{JR}}$) não apresenta valor constante ao longo da etapa de aquecimento inical do reator. O comportamento temporal do valor de $\mathrm{U_{JR}} \cdot \mathrm{A_{JR}}$ é apresentado na Figura 5.2.

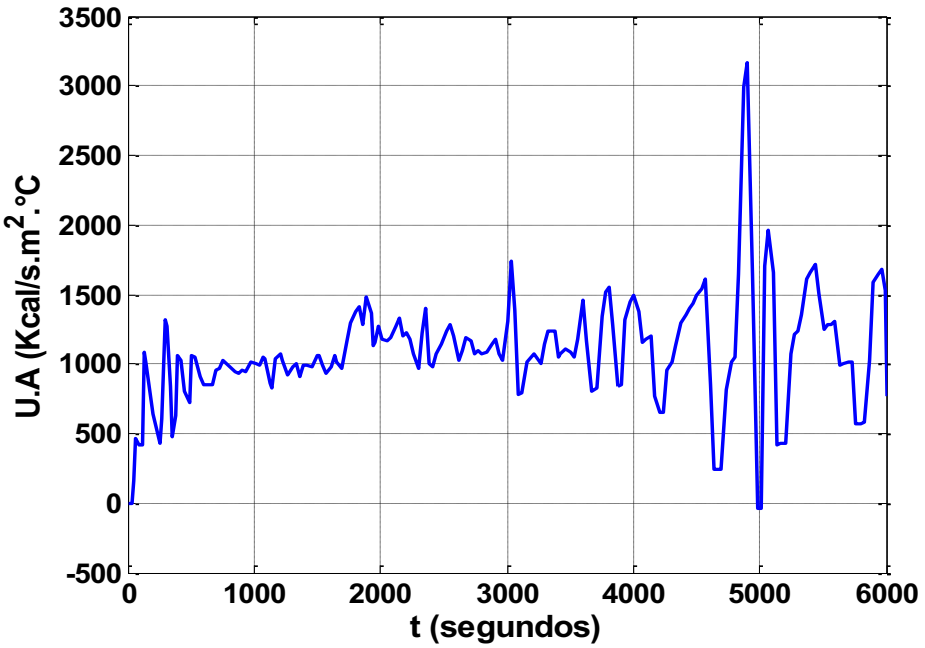


Figura 5.2 – Comportamento temporal do valor de $\mathrm{U_{JR}} \cdot \mathrm{A_{JR}}$.
(Fonte: Milan, 2010)

O resultado obtido com o emprego do modelo para o cálculo do valor do coeficiente global de troca térmica utilizado neste trabalho foi considerado coerente e adequado. O valor de $U_{JR} \cdot A_{JR}$ calculado por Queiroz e Gedraite (2013) utilizando a metodogia experimental proposta por Milan (2010) revelou um afastamento médio global inferior a 9% entre o valor calculado e o valor simulado usando o modelo.

Foi verificado que o valor do coeficiente global de troca térmica não se manteve constante ao longo do período de aquecimento inicial, o que era esperado, pois a velocidade de transporte de calor varia ao longo do tempo, diminuindo à medida que a temperatura da massa reacional se aproxima do valor estabelecido como valor desejado (150ºC).

Foi também constatado que a partir do instante t = 3500 segundos, o valor calculado para o coeficiente global de troca térmica apresentou maior variabilidade. Tal comportamento pode estar associado à propagação de incertezas presentes no cálculo do valor de $U_{JR} \cdot A_{JR}$ pelo modelo, haja vista o fato de que o cálculo da variação da temperatura da massa reacional com o tempo é feito com base na derivada do valor da mesma no instante e não na diferença entre os valores da mesma em instantes subsequentes.

É oportuno ressaltar que as variáveis de processo consideradas neste trabalho tiveram os respectivos valores registrados pelo sistema digital de controle existente na unidade industrial estudada com frequência de amostragem de 30 segundos (Milan, 2010).

Uma possível explicação para o aumento do valor de $\mathrm{U}_{\cdot\mathrm{JR}} \cdot \mathrm{A}_{\mathrm{JR}}$ pode estar baseada no fato de que o valor da resistência térmica oferecida pelo mecanismo da convecção tende a diminuir com o aumento da temperatura, acarretando por consequência a diminuição no valor da resistência térmica total e assim no aumento de $U_{\cdot JR} \cdot A_{JR}$.

Considerando o intervalo de tempo compreendido entre $1080\ \mathrm{s}$ e $6000\ \mathrm{s}$, foi verificado que o desvio global em $U_{\cdot JR} \cdot A_{JR}$ foi de aproximadamente 2 %. Este desvio pode ser considerado como de pequena amplitude face às variações verificadas no valor de $U_{\cdot JR} \cdot A_{JR}$ no trecho final da curva.

Na Figura 5.3 são apresentados os comportamentos temporais da temperatura real desejada da massa reacional, da temperatura simulada da massa reacional, da temperatura estimada de entrada do óleo térmico na etapa inicial de aquecimento do reator e da temperatura calculada de saida do óleo térmico usando o modelo invertido do processo.

A validação do modelo matemático invertido do processo foi realizada por meio da comparação dos resultados obtidos com o emprego deste com os resultados obtidos por Milan (2010) e apresentados na Figura 5.1.

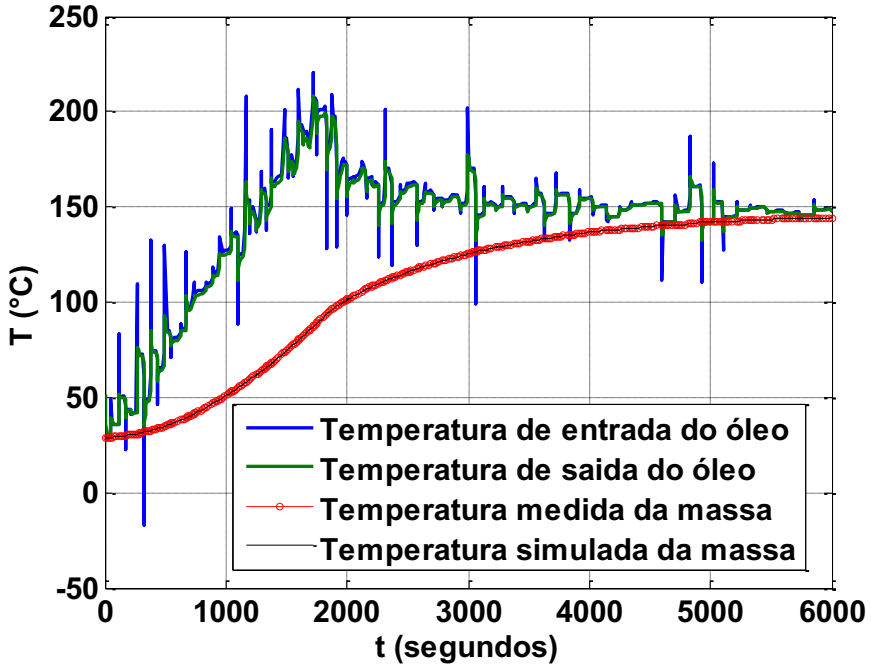


Figura 5.3 – Temperaturas medida e simulada da massa reacional e de entrada e de saída do óleo térmico geradas pelo modelo invertido
(Fonte: Mendonça, 2016)

Na Figura 5.4 é apresentado o comportamento temporal da temperatura de entrada do óleo térmico estimada pelo modelo invertido e aquela controlada com base no estudo desenvolvido neste trabalho.

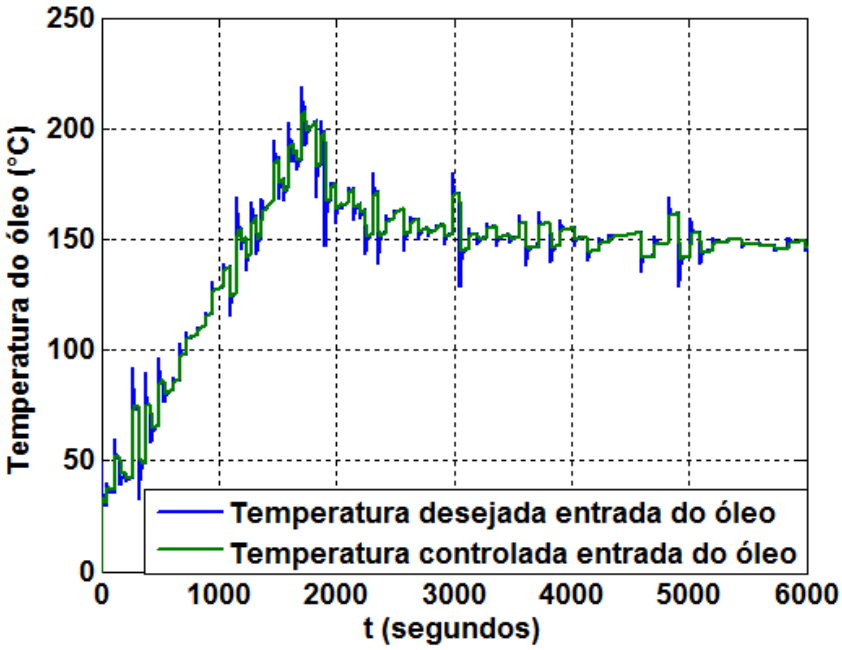


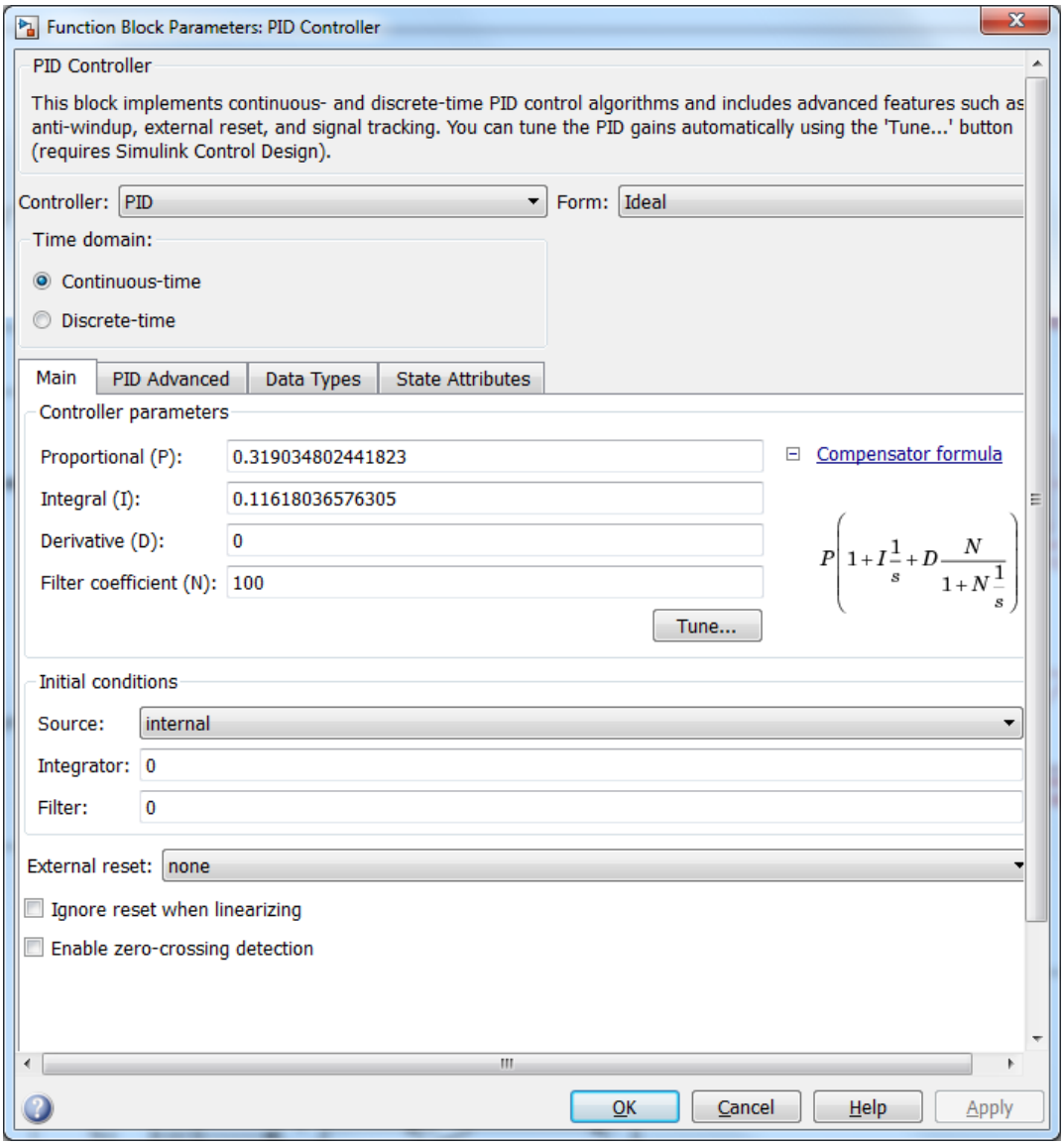
Figura 5.4 – Temperaturas de entrada do óleo térmico estimada e controlada
(Fonte: a Autora)

Os parâmetros de sintonia do controlador de temperatura foram ajustados usando o ambiente simulink™ do aplicativo matlab™ e estão apresentados no Quadro 5.1. Foi utilizada a opção "**tune**" disponível no bloco de função "**PID Controller**" para o ajuste automático do valor dos parâmetros do controlador de temperatura. O algoritmo de controle PID selecionado foi o **ideal**, tipicamente aplicado em textos da área de Controle de Processos e que representa a opção mais frequentemente utilizada na indústria. No algoritmo ideal o **ganho proporcional** (P) age na soma de todas os modos de controle, ou seja, ele multiplica todos os termos da equação do controlador. O parametro ganho proporcional utilizado neste trabalho é adimensional, uma vez que as variáveis de processo foram normalizadas. O parâmetro integral (I) contido no algoritmo do controlador representa, na verdade, o inverso do **tempo integral**, expresso em s^{-1}. Já o parametro (D) do referido algoritmo representa o tempo derivativo, expresso em s. O parametro coeficiente de filtragem do sinal (N) é um recurso complementar apresentado pelo aplicativo simulink™ para melhorar o desempenho do modo de controle derivativo, tornando sua atuação mais suave (e portanto, menos sensível a ruídos no sinal de controle).

Os valores dos parâmetros ajustados automaticamente pelo aplicativo simulink™ tornou

a atuação do controlador mais branda, o que é benéfico para o processo por tender a provocar menores oscilações na variável controlada e, via de consequência, menor desgaste nas válvulas de controle.

Quadro 5.1 – Valores ajustados dos parâmetros de sintonia do controlador de temperatura



Os principais parâmetros de desempenho do controlador de temperatura são apresentados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 – Parâmetros de desempenho do controlador de temperatura

Parâmetro	Valor ajustado
Tempo de subida	25 s
Tempo de acomodação	86,9 s
Sobressinal	10,6%
Valor de pico	1,11

Capítulo 6

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O modelo matemático invertido do processo se revelou uma ferramenta adequada para a predição da temperatura de entrada do óleo térmico, apresentando comportamento adequado e coerente com aquele obtido por Milan (2010) usando modelo matemático baseado em equações de primeiros princípios.

O modelo invertido proposto neste trabalho pode ser facilmente implementado na base de dados dos modernos sistemas de controle digitais, permitindo assim o seu emprego como gerador de *set-point* remoto para o controlador da temperatura do óleo térmico que é feito circular pela jaqueta meia-cana.

O sistema de controle estudado neste trabalho se revelou adequado e coerente para manter a temperatura de entrada do óleo térmico alimentado ao reator no valor desejado ao longo do tempo.

A temperatura estimada pelo modelo invertido pode ser filtrada para eliminar o inconveniente dos pequenos saltos na sua amplitude, melhorando desta maneira o desempenho do sistema de controle. Para tanto, seria necessário empregar uma função de transferência correspondente a um atraso de 1ª ordem aplicada ao sinal gerado pelo modelo invertido.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ÂSTRÖM, K. & HÄGGLUND, T. **PID Controllers: Theory, Design and Tuning**, North Carolina, USA: ISA, 1995. 343p.

AZIZ, N. HUSSAIN, M. A. & MUJTABA, I. M. **Performance of different types of controllers in tracking optimal temperature profiles in batch reactors**. Computers and Chemical Engineering, 24 (2000), 1069 – 1075.

CLARKE-PRINGLE, T.; MACGREGOR, J. F. **Nonlinear adaptive temperature control of multi-product, semi-batch polymerization reactors.** Computers and Chemical Engineering, 21 (1997), 1395 – 1409.

CROWLEY, T. J.; CHOI, K. **On-line monitoring and control of a batch polymerization reactor**. J. Proc. Control, 6, 2/3, 1996

DELAPLACE, G.; DEMEYRE, J.-F; GUÉRIN, R.; DEBREYNE, P. & LEULIET, J.-C. **Determination of representative and instantaneous process side heat transfer coefficients in agitated vessel using heat flux sensors.** Chemical Engineering and Processing, 44 (2005), 993 – 998.

DHOTRE M. T., MURTHY Z. V. P, J. N SUBRAMANIAN **Modeling & Dynamic Studies of Heat Transfer Cooling of Liquid in Half-Coil Jackets,** India, Chemical Engineering Journal 118 (2006) 183-188.

GALVÁN, I. M.; ZALDIVAR, J. M. Application of recurrent neural networks in batch reactors Part II: Nonlinear inverse and predictive control of the heat transfer fluid temperature. Chemical Engineering and Processing, 37 (1998), 149 – 161

GARCIA, C. **Modelagem e Simulação de Processos Industriais e de Sistemas Eletromecânicos**. São Paulo, SP: EDUSP, 2005, 678p.

HAUGWITZ, S., HAGANDER, P., & NÓREN, T. **Modeling and control of a novel heat exchange reactor,the Open Plate Reactor.** Control Engineering Practice, 15 (2007), 779 – 792.

KAWASE, Y., HOSHINO, M., & TAKAHASHI, T. **Non-Newtonian laminar**

boundary-layer heat transfer in stirred tanks. Heat and Mass Transfer, 38, (2002), 679 – 686.

LOTUFO, F. A.; GARCIA, C. **Sensores Virtuais ou Soft Sensors: Uma Introdução**. In: 7th Brazilian Conference on Dynamics, Control & Applications. Presidente Prudente, SP: DINCON, 2008.

LOULEH, Z., CABASSUD, M. & LE LANN, M. V. **A new strategy for temperature control of batch reactors: experimental application**. Chemical Engineering Journal, 75 (1999), 11 – 20.

MILAN, W. **Desenvolvimento de sensor virtual de temperatura para calcular valor de referência em controle de temperatura aplicado a processo de produção de resinas com reator de batelada**. São Caetano do Sul, SP: CEUN-IMT, Mestrado, 2010.

NAGY, Z.; AGACHI, S. **Model predictive control of a PVC batch reactor**. Computers Chemical Engineering, 21 (1997), (6), 571 – 591

QUEIROZ, C. G. e GEDRAITE, R. **Contribuição ao estudo da transferência de calor em reatores de polimerização visando à minimização da variação de temperatura da massa reacional na etapa inicial de aquecimento**. Anais da XVIII JORNEQ. Agosto, Uberlândia, 2013.

RANI, K.Y. & PATWARDHAN, S. C. **Data-driven model based control of a multi-product semi-batch polymerization reactor**. Trans IChemE, Part A, Chemical Engineering Research and Design, 2007, 85(A10): 1397–1406

RÉGNIER, N., DEFAYE, G., CARALP, L. & VIDAL, C. **Software sensor based control of exothermic batch reactors**. Chemical Engineering Science, 51, (23), 5125 - 5136, 1996

XAUMIER, F., LE LANN, M. V., CABASSUD, M. & CASAMATTA, G. (2002). **Experimental application of nonlinear model predictive control: temperature control of an industrial semi-batch pilot-plant reactor**. Journal of Process Control 12 (2002) 687–693

ZEYBEK, Z.; ÇETINKAYA, S.; HAPOGLU, H. & ALPBAZ, M. **Generalized delta rule (GDR) algorithm with generalized predictive control (GPC) for optimum temperature tracking of batch polymerization.** Chemical Engineering Science 61 (2006) 6691 – 6700

.