

UFRRJ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

DISSERTAÇÃO

**BALANÇO DE ENERGIA EM TEMPO REAL PARA UM REATOR
DE POLIMERIZAÇÃO: ESTRATÉGIAS ALTERNATIVAS PARA O
FILTRO DE KALMAN**

Paulo Fernando de Araújo Santos

2005



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**BALANÇO DE ENERGIA EM TEMPO REAL PARA UM REATOR
DE POLIMERIZAÇÃO: ESTRATÉGIAS ALTERNATIVAS PARA O
FILTRO DE KALMAN**

PAULO FERNANDO DE ARAÚJO SANTOS

*Sob a Orientação do Professor
D.Sc. André de Almeida*

Dissertação submetida como requisito
parcial para obtenção do grau de **Mestre**
em Ciências em Engenharia Química,
área de concentração Simulação e
Controle de Processo.

Seropédica, RJ.
Outubro de 2005

660.284245
S237b

T

Santos, Paulo Fernando de Araújo, 1966-

Balanço de energia em tempo real para
um reator de polimerização: estratégias
alternativas para o filtro de Kalman / Paulo
Fernando de Araújo Santos. – 2005.

82 f. : il.

Orientador: André de Almeida.

Dissertação (mestrado) – Universidade
Federal Rural do Rio de Janeiro,
Instituto de Tecnologia.

Bibliografia: f. 78-79.

1. Engenharia química - Equipamentos e
acessórios - Teses. 2. Reatores químicos
- Teses. 3. Polimerização - Teses. 4.
Polímeros - Propriedades térmicas -
Teses. 5. Kalman, Filtragem de - Teses.
I. Almeida, André, 1959-. II. Universidade
Federal Rural do Rio de Janeiro.
Instituto de Tecnologia. III. Título.

**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

PAULO FERNANDO DE ARAÚJO SANTOS

Dissertação submetida ao Curso de Pós-graduação em Engenharia Química, área de concentração em Simulação e Controle de Processo, como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Ciências**, em Engenharia Química.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM 28 / 10 / 2005

Prof. André de Almeida, D.Sc.
DEQ/UFRRJ

Prof. Álvaro de Lima Veiga Filho, Dr.

Prof. Mauricio Bezerra de Souza Jr., D.Sc.

Este trabalho é dedicado a tribo **PASOLUHE**
Amo vocês.

“O mistério da vida me causa a mais forte emoção. É o sentimento que suscita a beleza e a verdade, cria a arte e a ciência. Se alguém não conhece esta sensação ou não pode mais experimentar espanto ou surpresa, já é um morto vivo e seus olhos se cegaram”.

Albert Einstein

AGRADECIMENTOS

Neste momento quando olho para trás vejo como foi difícil e lembro como foi superado, e só me resta agradecer a Deus por ter tido vocês comigo. Espero lembrar de todos.

- A Sônia Maria Ribeiro, Luciana Helise Ribeiro Santos e Heverton Lucas Ribeiro Santos, minha vida só se completa e faz sentido se for vivida por vocês. Obrigado por todos momentos que me suportaram e suportam. “Já falei que amo vocês hoje ?”
- A meu pai José Hunaldo e minha querida mãe Dulce Maria que com certeza esta muito feliz e meu irmão Marcelo Luiz, e sua família Sônia Cristina e Matheus Artur.
- A todo Departamento de Engenharia Química da UFRRJ que deu oportunidade a um cara de outra área, afastado do meio acadêmico, porém, com muita força de vontade. Obrigado por terem confiado em mim.

Prof. Ana Lucia, Claudia Scheid e Marisa, vocês sempre tiveram um sorriso amigável e uma palavra de otimismo e incentivo.

Prof. Dilma, obrigado por ter gasto tempo para explicar sobre polímero, o carinho que teve comigo durante todo curso. Você sempre teve uma palavra de incentivo e força nos momentos em que eu fazia minhas apresentações.

Prof. Maria Alice, carrego comigo até hoje a imagem de santo Expedito (causas perdidas) que me deste. Acabei defendendo a dissertação no dia do santo (28 de outubro).

Prof. Márcia Vega, obrigado pela força tanto nas duvidas de linearização como no estudo do matlab e no apoio constante. Valeu.

Prof. Leonardo e Elio Junior, Lindoval, Luiz Calçada, valeu pelo apoio durante todo curso.

Prof. Gerson e Paulo Jansen, em momentos distintos mesmo sem saberem ambos me deram uma palavra de incentivo e forças para continuar valeu muito obrigado.

Prof. Mauricio Mancini, muito obrigado pela oportunidade e pela confiança depositada em min desde a inscrição até a conclusão.

Prof. André de Almeida, Valeu por acreditar em min e me brindar com seu conhecimento, sempre respeitando meus limites, cobrando o necessário e me guiando com sabedoria até o final. Valeu patrão a quem ouso chamar de meu amigo. Que Deus proteja você e sua família hoje e sempre.

- A todos funcionários do DEQ “Claudinha, Eliana, Carlinhos e Gilson, obrigado por segurar os meus vacilos na administração”
- A galera “OS KINGONS” com certeza se tivesse entrado em outra turma não teria conseguido concluir as matérias obrigatórias. Luilson (Loverboy) um atleta, Francisco (Brankkis) o conselheiro, Serenott (Big) um irmão. Onde vocês estiverem, quando vocês precisarem, é só me chamar que eu chego junto. Valeu por tudo.
- Paulista, Adelson, Tunala, Jonatas, Bruninho, Juliano, Carla. Todos vocês de alguma forma positiva me ajudaram, e com certeza vocês são excelentes alunos e seres maravilhosos. valeu moçada.
- Mage, Jamele, Breno, Tepei, Emilio, Danilo, Luciano, Gabriela, Rodrigão, Bárbara, Meus queridos, conhecer cada um de vocês foi um prazer. Não sei para onde vocês vão mas saibam que estarei por aqui e que em qualquer momento que precisarem estarei pronto para ajudar.
- Clarice (meu abajur vermelho) obrigado por ter dividido o humor, a tristeza, a alegria e até o computador. Beijo gatinha.
- Fernando Serenott e Emily Rita (os mais velhos), foi muito bom encontrar vocês (“Negrão de Lima”). Muito obrigado pela ajuda em todos os sentidos. Vocês sabem que são irmãos, filhos e grandes amigos e que fazem parte da tribo PaSoLuHe. Amamos você.
- Felício, Fred e Cecília. Obrigado pelo apoio e a força durante o curso.
- Não podia terminar este agradecimento sem falar na Dona Vanda do decanato de pós-graduação. Como havia prometido, terminei o curso e agora agradeço por ter segurado o cheque do pagamento da inscrição no mestrado. um beijão para senhora e todas as meninas que trabalham aí, e um obrigado do tamanho do mundo.

Por fim, a todos aqueles que contribuíram ao longo desta jornada, acreditando em min e torceram para que tudo desse certo.

Um beijo a todos

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	01
2. REVISÃO DE LITERATURA.....	03
2.1 – Introdução.....	03
2.2 – Técnicas de Estimação.....	04
2.3 – Determinação Simultânea do Calor de Reação (Qr) e o Coeficiente de Transferência de Calor Global (UA).....	06
3. UM MODELO EMPÍRICO PARA UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO	10
3.1 – Introdução.....	10
3.2 – Configuração do Reator.....	10
3.3 – Cinética de Reação.....	11
3.4 – Relação de Transferência de Calor.....	13
3.5 – Modelo para o Balanço de Energia do Reator.....	14
3.6 – Modelo para o Balanço de Energia da Jaqueta.....	14
3.7 – Sistema de Controle.....	15
3.8 – Os Controladores.....	16
3.8.1 – Controle corrigido por Almeida.....	16
3.8.2 – Controle corrigido por Chylla & Hasse.....	17
3.9 – Cálculo de Conversão.....	18
4. ESTRATÉGIAS DE ESTIMAÇÃO.....	20
4.1 – Filtro de Kalman.....	20
4.2 – Considerações para o modelo do balanço de energia para o reator e jaqueta.....	23
4.2.1 – Balanço de energia para o reator.....	23
4.2.2 – Balanço de energia para jaqueta.....	24
4.3 – Alternativas para Estruturas de Estimação.....	25
4.3.1 – Modelo passo aleatório (random walk).....	26
4.3.2 – Modelo de rampa aleatória (random ramp).....	28
4.3.3 – Modelo exponencial.....	30

4.4 – Modelos Híbridos.....	33
4.4.1 – Modelos de passo aleatório (Qr) e rampa aleatória (UA).....	33
4.4.2 – Modelos de passo aleatório (UA) e rampa aleatória (Qr).....	34
4.4.3 – Modelo exponencial (Qr) e passo aleatório (UA).....	34
4.4.4 – Modelo exponencial (Qr) e rampa aleatória (UA).....	36
4.5 – Modelo de Passo Aleatório com Tji variando no tempo.....	37
5. ANÁLISE DOS RESULTADOS.....	39
5.1 – Dados Gerados: Simulação do Reator.....	39
5.2 – Metodologia de Análise.....	42
5.3 – Avaliação das Estratégias.....	43
5.3.1 – Modelo de passo aleatório (random walk).....	44
5.3.2 – Modelo de passo aleatório sob ação de ruídos.....	47
5.3.3 – Modelo de passo aleatório com controlador mais ativo.....	49
5.3.4 – Modelo de passo aleatório com controlador ativo sob ação de ruídos.....	52
5.3.5 – Modelo de rampa aleatória (random ramp).....	54
5.3.6 – Modelo exponencial.....	58
5.3.7 – Análise comparativa dos modelos de passo, rampa exponencial.....	61
5.3.8 – Modelos híbridos.....	63
5.4 – Modelo de Passo Aleatório Tendo Tji como Estado Estocástico.....	71
6. CONCLUSOES E SUGESTOES.....	76
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	78
ANEXO.....	80

ÍNDICE DE TABELAS

Tab. 5.1 – Unidades adotadas para toda dissertação.....	42
Tab. 5.2 – Parâmetros de ajuste do filtro. Modelo passo aleatório.....	44
Tab. 5.3 – Erro geral e parcial médio. Modelo passo aleatório.....	44
Tab. 5.4 – Erros em intervalos para produto A. Modelo passo aleatório.....	44
Tab. 5.5 – Erros em intervalos para produto B. Modelo passo aleatório.....	45
Tab. 5.6 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. passo aleatório com ruídos.....	47
Tab. 5.7 – Erro geral e parcial médio. Mod. passo aleatório com ruídos.....	47
Tab. 5.8 – Erros em intervalos produto A. Mod. passo aleatório com ruídos.....	48
Tab. 5.9 – Erros em intervalos produto B. Mod. passo aleatório com ruídos.....	48
Tab. 5.10 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. de passo com cont. ativo.....	49
Tab. 5.11 – Erro geral e parcial médio. Mod. de passo com cont. ativo.....	50
Tab. 5.12 – Erros em intervalos produto A. Mod. de passo com cont. ativo.....	50
Tab. 5.13 – Erros em intervalos produto B. Mod. de passo com cont. ativo.....	51
Tab. 5.14 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. passo; cont. ativo; ruído.....	52
Tab. 5.15 – Erro geral e parcial médio. Mod. passo; cont. ativo; ruído.....	52
Tab. 5.16 – Erros em intervalos produto A. Mod. passo; cont. ativo; ruído.....	52
Tab. 5.17 – Erros em intervalos produto B. Mod. passo; cont. ativo; ruído.....	53
Tab. 5.18 – Parâmetros de ajuste do filtro. Modelo rampa aleatória.....	54
Tab. 5.19 – Erro geral e parcial médio. Modelo rampa aleatória.....	55
Tab. 5.20 – Erros em intervalos para produto A. Modelo rampa aleatória.....	55
Tab. 5.21 – Erros em intervalos para produto B. Modelo rampa aleatória.....	56
Tab. 5.22 – Parâmetros de ajuste do filtro. Modelo exponencial.....	58
Tab. 5.23 – Erro geral e parcial médio. Modelo exponencial.....	58

Tab. 5.24 – Erros em intervalos para produto A. Modelo exponencial.....	58
Tab. 5.25 – Erros em intervalos para produto B. Modelo exponencial.....	59
Tab. 5.26 – Erros absolutos do produto A para os modelos estruturados.....	61
Tab. 5.27 – Erros relativos do produto A para os modelos estruturados.....	61
Tab. 5.28 – Erros absolutos do produto B para os modelos estruturados.....	62
Tab. 5.29 – Erros relativos do produto B para os modelos estruturados.....	62
Tab. 5.30 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. passo (Qr); rampa (UA).....	63
Tab. 5.31 – Erro geral e parcial médio. Mod. passo (Qr); rampa (UA).....	63
Tab. 5.32 – Erros em intervalos para produto A. Mod. passo (Qr); rampa (UA)....	63
Tab. 5.33 – Erros em intervalos para produto B. Mod. passo (Qr); rampa (UA)....	64
Tab. 5.34 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. passo (UA); rampa (Qr).....	65
Tab. 5.35 – Erro geral e parcial médio. Mod. passo (UA); rampa (Qr).....	65
Tab. 5.36 – Erros em intervalos produto A. Mod. passo (UA); rampa (Qr).....	65
Tab. 5.37 – Erros em intervalos produto B. Mod. passo (UA); rampa (Qr).....	66
Tab. 5.38 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. exponencial (Qr); passo (UA)....	67
Tab. 5.39 – Erro geral e parcial médio. Mod. exponencial (Qr); passo (UA).....	67
Tab. 5.40 – Erros em intervalos produto A. Mod. exponencial (Qr); passo (UA)...	67
Tab. 5.41 – Erros em intervalos produto B. Mod. exponencial (Qr); passo (UA)...	68
Tab. 5.42 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. exponencial (Qr); rampa (UA)...	69
Tab. 5.43 – Erro geral e parcial médio. Mod. exponencial (Qr); rampa (UA).....	69
Tab. 5.44 – Erros em intervalos produto A. Mod. exponencial (Qr); rampa (UA)..	69
Tab. 5.45 – Erros em intervalos produto B. Mod. exponencial (Qr); rampa (UA)..	70
Tab. 5.46 – Parâmetros de ajuste dos filtros. Mod. passo Tji estocástico.....	71
Tab. 5.47 – Erro geral e parcial médio. Controladores Ativo e Suave.....	72
Tab. 5.48 – Erros em intervalos produto A. controlador Suave.....	72
Tab. 5.49 – Erros em intervalos produto A. controlador Ativo.....	73
Anexo – Tab. 1A – Dados para o reator e o meio de refrigeração.....	80
Anexo – Tab. 2A – Valores utilizados como dados iniciais para o produto A.....	80
Anexo – Tab. 3A – Valores utilizados como dados iniciais para o produto B.....	81
Anexo – Tab. 4A – Valores utilizados como dados iniciais para programação do produto A.....	81
Anexo – Tab. 5A – Valores utilizados como dados iniciais para programação do produto B.....	82

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 3.1 Reator modelado por Chylla & Hasse.....	11
Fig. 5.1 – Controlador mais suave. produto A; Temperaturas	39
Fig. 5.2 – Controlador mais ativo. produto A; Temperaturas	40
Fig. 5.3 – Controlador mais suave. produto B; Temperaturas	40
Fig. 5.4 – Controlador mais ativo. produto B; Temperaturas	41
Fig. 5.5 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto A. Modelo de passo aleatório; (real (o); simulado(-)).....	45
Fig 5.6 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA produto A. Modelo de passo aleatório.....	45
Fig. 5.7 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto B. Modelo de passo aleatório; (real (o); simulado(-)).....	46
Fig 5.8 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA produto B. Modelo de passo aleatório.....	46
Fig. 5.9 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
	48

Produto A. Modelo passo aleatório com ruídos; (real (o); simulado(-)).....	
Fig. 5.10 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto B. Modelo passo aleatório com ruídos; (real (o); simulado(-)).....	49
Fig. 5.11 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo de passo com controlador ativo; (real (o); simulado(-))...	50
Fig. 5.12 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão	
Produto B. Modelo de passo com controlador ativo; (real (o); simulado(-))...	51
Fig. 5.13 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo de passo; controlador ativo e ruído; (real (o); simulado(-)).....	53
Fig. 5.14 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto B. Modelo de passo; controlador ativo e ruído; (real (o); simulado(-)).....	53
Fig. 5.15 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo de rampa aleatória; (real (o); simulado(-)).....	55
Fig 5.16 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA produto A. Modelo de rampa aleatória.....	56
Fig. 5.17 – Calor da reação (Qr); Coef. Transferência de calor (UA); Conversão; Produto B. Modelo de rampa aleatória; (real (o); simulado(-)).	56
Fig 5.18 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA produto B. Modelo de rampa aleatória.....	57
Fig. 5.19 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo exponencial; (real (o); simulado(-)).....	59
Fig 5.20 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA produto A. Modelo Exponencial.....	59
Fig. 5.21 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto B. Modelo exponencial; (real (o); simulado(-)).....	60
Fig 5.22 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA produto B. Modelo Exponencial.....	60
Fig. 5.23 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo passo(Qr); rampa(UA); (real (o); simulado(-)).....	64
Fig. 5.24 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto B. Modelo passo(Qr); rampa(UA); (real (o); simulado(-)).....	64
Fig. 5.25 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo de passo (UA); rampa (Qr); (real (o); simulado(-)).....	66
Fig. 5.26 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
	66

Produto B. Modelo de passo (UA); rampa (Qr) ; (real (o); simulado(-)).....	
Fig. 5.27 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo exponencial (Qr); passo (UA) ; (real (o); simulado(-))... 68	68
Fig. 5.28 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto B. Modelo exponencial (Qr); passo (UA); (real (o); simulado(-)).... 68	68
Fig. 5.29 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo exponencial (Qr); rampa (UA); (real (o); simulado(-))... 70	70
Fig. 5.30 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto B. Modelo exponencial (Qr); rampa(UA); (real (o); simulado(-)).... 70	70
Fig. 5.31 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo de passo e Tji estimado, controlador suave (real (o); simulado(-))..... 72	72
Fig. 5.32 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;	
Produto A. Modelo de passo; Tji estimado, controlador Ativo (real (o); simulado(-))..... 73	73
Fig. 5.33 – Calor de reação, controlador suave 1º Tji determinístico; 2º Tji estimado;	
(real (o); simulado(-))..... 74	74
Fig. 5.34 – Coeficiente de transf. de calor, controlador suave 1º Tji determinístico;	
2º Tji estimado; (real (o); simulado(-))..... 74	74
Fig. 5.35 – Calor de reação, controlador Ativo 1º Tji determinístico; 2º Tji estimado;	
(real (o); simulado(-))..... 75	75
Fig. 5.36 – Coeficiente de transf. de calor, controlador ativo 1º Tji determinístico; 2º Tji estimado; (real (o); simulado(-))..... 75	75

NOMENCLATURA

A	área de transferência de calor na jaqueta.
Cpm	calor específico do componente.
Cr	calor específico da mistura.
C(t)	sinal de saída do controlador (0 - 100).
Cp _c	capacidade de calor de resfriamento da jaqueta.
Cp(t)	capacidade calorífica.
Cpw	capacidade calorífica do fluido refrigerante.
f(t)	fração de sólidos
F _M	vazão molar de monômeros no reator.
Fw	vazão mássica do fluido refrigerante.
i	fator de impureza.
k _o	fator pré - exponencial.
k	constante cinética de primeira ordem.
K _p	ganho para o aquecimento / resfriamento do processo.
Mw _M	peso molecular da mistura de monômero.

M_{MT}	massa total de monômero adicionada.
m_r	massa de componente no reator.
\dot{m}_M	vazão mássica de alimentação de monômero.
N_m	número de moles de monômeros no reator.
Q_r	calor da reação
R_p	taxa de polimerização.
S	massa de sólidos.
T_R	temperatura do reator.
T_j	temperatura da jaqueta.
T_{ji}	temperatura de entrada na jaqueta.
T_{amb}	temperatura ambiente.
\bar{T}_j	temperatura média da jaqueta.
U	coeficiente de transferência de calor.
UA	produto do coeficiente de transferência de calor pela área.
UA_{per}	perda de calor para ambiente.
W	massa de água constante durante a reação.
W_{cj}	capacidade calorífica (jaqueta + parede).
x	conversão em qualquer instante.
- H_p	calor de polimerização.
₁	atraso por transporte dentro da jaqueta.
₂	atraso por transporte na volta de recirculação.
	viscosidade da batelada.
P	constante de tempo para aquecimento / resfriamento.

RESUMO

SANTOS, Paulo Fernando de Araújo. **Balanço de Energia em Tempo Real para um Reator de Polimerização: Estratégias Alternativas para o Filtro de Kalman.** Seropédica: UFRRJ, 2005. (Dissertação, Mestrado em Engenharia Química).

Neste trabalho procurou-se explorar, através da utilização do filtro de Kalman, a possibilidade de estimação simultânea dos valores do calor de reação (Q_r) e do coeficiente de transferência de calor e a área (UA), a partir das equações de balanço de energia do reator e da jaqueta e medidas das temperaturas. Foram comparadas estratégias com base nos seguintes modelos para os estados estocásticos: passo aleatório, rampa aleatória, exponencial e, também, modelos híbridos a partir de diferentes combinações

destes. O critério utilizado para comparação foi baseado nos erros absolutos e relativos calculados para cada estratégia. Como base para a avaliação das diferentes estratégias utilizou-se a simulação de um reator industrial descrito na literatura (CHYLLA & HASSE, 1993). Para este reator, foram exploradas duas diferentes versões do sistema de controle, permitindo, assim, avaliar a influência da ação de controle nos procedimentos de estimação. Ressalta-se, ainda, uma outra abordagem na qual a temperatura na entrada da jaqueta – a variável manipulada T_{ji} – é tratada como estado estocástico e não como variável independente. Ao final pôde-se concluir que embora não se justifique a tentativa de agregar maior estrutura aos modelos estocásticos, resultados positivos podem ser alcançados pela incorporação de novos estados estocásticos. Em outra perspectiva pôde também ser evidenciado o papel relevante desempenhado pela ação de controle para a qualidade do método de estimação.

Palavras Chave: Filtro de Kalman, métodos calorimétricos, reatores de polimerização

ABSTRACT

SANTOS, Paulo Fernando de Araújo. **On-Line energy balance for a polymerization reactor: alternative strategies for the Kalman Filter.** Seropédica: UFRRJ, 2005. (Dissertation, Master in Chemical Engineering).

This work was an attempt to explore, by means of the Kalman filter, the possibilities of simultaneously estimating the heat of reaction (Q_r) and the heat transfer coefficient and the area (UA). The estimation was based on the energy balance around the reactor and temperature measurements. The strategies were based on the following models for the stochastic states: random walk, random ramp, exponential and hybrid models, by combining them. It was used the simulation of an industrial reactor, presented

in the literature (CHYLLA & HASSE, 1993), as a case study. Two different control systems were implemented allowing the assessment of the control action influence. Another approach was also tried by treating the inlet jacket temperature as a stochastic state. At the end, it was possible to conclude that there is no improvement in adding more structure to the stochastic states. However, the inclusion of new ones may lead to better results. It was also verified the important role played by the control action pattern on the quality of the estimation strategies.

Key Words: Kalman filter, calorimetric methods, polymerization reactors

1. INTRODUÇÃO

Os setores produtivos cada vez mais investem em tecnologia para otimização dos processos de produção. O objetivo final é a diminuição de custos sem alterar a qualidade final de seus produtos e sem comprometer regras básicas de segurança. Na indústria química este comportamento não é diferente. Os reatores de polimerização não contínuos (batelada ou semibatelada), normalmente utilizados para operações em pequenas escalas, como por exemplo, testes de novos processos ainda não completamente desenvolvidos, fabricação de produtos de alto valor agregado e processos difíceis de operar em modo contínuo, surgem como equipamentos indispensáveis que devem ser operados de forma rígida, quando relacionados às questões de qualidade do produto, às condições operacionais, às regras de segurança e exigências ambientais.

As características inerentes de cada produto (viscosidade, cinética de reação, temperatura do reator, taxa de adição de monômero, etc.) propiciam uma relação única em cada batelada, dificultando a manutenção do funcionamento de um controle único para inúmeros produtos e onerando o processo produtivo.

Acrescenta-se a esta adversidade as inúmeras condições encontradas de produção individualizada, desencadeada pelos diferentes mecanismos cinéticos possíveis, pelo meio reacional utilizado ou pelo tipo de reator empregado no processo.

Outra dificuldade encontrada consiste na construção de modelos e na determinação dos parâmetros envolvidos. Ambos guardam entre si uma relação toda especial com cada produto ou processo em particular. Entretanto, todo reator é ou pode ser bem instrumentado para medidas de temperatura e vazão; quando combinadas com uma série de equações dinâmicas de balanço de energia, possibilitam o monitoramento em tempo real do calor liberado pelo meio reacional. A partir de então a taxa de reação instantânea pode ser determinada e sobre integração ser obtida a estimativa da conversão no reator a qualquer instante de tempo.

Devido à impossibilidade de algumas medidas diretas relevantes e fundamentais para obtenção do produto final, surgem o balanço de energia em tempo real (BETR) que associado às técnicas de estimativa, como por exemplo, o filtro de Kalman, que é largamente utilizado em reatores de polimerização tanto em estratégias de monitoramento como em estratégias de controle, traz vantagens significativas para a determinação dos termos entalpicos.

Na maioria dos casos o coeficiente de transferência de calor (U) é considerado constante, e seu valor determinado por calibração antes da reação, contudo, no caso de mudanças significantes no valor de (U) durante a reação, o fluxo de calor não pode ser calculado. Um procedimento comum é executar uma segunda calibração depois da reação e estimar a mudança do valor da transferência de calor por interpolação linear entre estes dois valores. Este procedimento pode conduzir a falsos resultados. Somado a esta dificuldade temos ainda o fato de que múltiplas variáveis em modelos não lineares são comuns e freqüentemente algumas variáveis que mudam ao longo do tempo não são medidas. A partir daí surge à necessidade de investigar possibilidade de utilização do filtro de Kalman como estimador simultâneo do calor da reação (Q_r) e do produto do coeficiente de transferência de calor pela área de troca (UA). Neste momento é sugerido o modelo de passo aleatório, rampa aleatória e exponencial, como possíveis formas de estruturas para determinação simultânea de Q_r e UA .

Para todas as estratégias, concebidas a partir do filtro de Kalman as variáveis T_r , T_j (temperatura do reator e temperatura da jaqueta, respectivamente) foram consideradas como estados determinísticos e disponíveis a cada tempo de amostragem; Q_r e UA como estados estocásticos. As variáveis como vazão mássica do fluido refrigerante (F_w), temperatura ambiente (T_{amb}), coeficiente de transferência de calor perdido (UA_{per}) bem como, o calor específico da mistura (C_r), capacidade calorífica do fluido refrigerante (C_{pw}), capacidade calorífica jaqueta/parede (W_{cj}), foram tomadas como constantes e as variáveis relacionadas com a alimentação do reator seguiram exatamente os respectivos procedimentos operacionais, expostos em (CHYLLA & HASSE, 1993). Em relação a C_r , embora o seu valor seja função do andamento da reação, logo variando no tempo, para efeito de estimativa e análise foi considerado como constante, tomada em seu valor médio. Também é analisada a possibilidade da temperatura de entrada na jaqueta (T_{ji}) ser vista como estado estocástico e não como variável.

Com interesse de investigar a influência da ação de controle as estratégias alternativas para o filtro de Kalman foram utilizadas para dois controladores:

- O primeiro, corrigido por ALMEIDA, (1997) que apresenta uma ação mais suave.
- O segundo, corrigido pelos autores CHYLLA & HASSE, (1993b) que se mostrou mais ativo.

O ponto de partida para construção deste trabalho é o artigo de (CHYLLA & HAASE, 1992) onde é apresentado um estudo de caso para um reator industrial totalmente modelado e desenvolvido

empiricamente, para testar diversos produtos em uma mesma planta piloto e na mesma instalação. Este artigo é discutido em destaque no (capítulo 3) onde o reator industrial de polimerização semibatelada, é apresentado bem como à cinética do meio reacional, o balanço de energia do reator e da jaqueta, e o comportamento do controle.

Em revisão de literatura, (capítulo 2), são apresentados estudos de diversos autores sobre a importância do cálculo simultâneo do calor da reação e do produto do coeficiente de transferência de calor pela área.

Aborda-se em estratégias de estimativa, (capítulo 4), a formulação do filtro de Kalman e os modelos testados: passo aleatório, rampa aleatória e exponencial. Tais modelos são também combinados entre si formando assim os modelos híbridos. Por fim apresenta-se a estratégia onde T_{ji} é vista com um estado estocástico.

Durante as análises de resultados, (capítulo 5), são discutidos e apresentados os dados tabelados e os gráficos de cada estimativa e ainda é feita uma apreciação das relevâncias referentes a cada modelo. Vale aqui registrar que apesar da argumentação de VALLIÈRE & BONVIN, 1990c, de que é mais fácil determinar uma estratégia de estimativa para dois parâmetros que se comportem de acordo com um modelo dinâmico, do que um parâmetro para o qual o modelo dinâmico é desconhecido. Porém, essa afirmativa não é verdadeira, uma vez que o modelo de passo aleatório se mostrou o modelo de melhor confiabilidade para estimativa.

No (capítulo 6) são apresentadas às conclusões e sugestões para os trabalhos futuros, e no (capítulo 7) as referências bibliográficas utilizadas.

O objetivo deste trabalho é investigar formas alternativas e diversificadas para utilização do Filtro de Kalman Estendido (FKE) como estimador dos estados estocásticos para obtenção simultânea do calor da reação (Q_r) e o produto do coeficiente de transferência de calor global pela área (UA). Bem como, testar a influência da ação de controle nas estratégias alternativas para o filtro de Kalman e ainda investigar T_{ji} com estado estocástico em vez de variável.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Introdução

Com objetivo de direcionar um estudo onde se pretende avaliar estratégias alternativas para obter simultaneamente o calor da reação (Q_r) e o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) utilizando o filtro de Kalman estendido para estimar os estados estocásticos, faz-se aqui, uma revisão prévia da produção encontrada na literatura aberta onde são abordados meios e caminhos, bem como, suas vantagens e

desvantagens para se chegar à estimativa conjunta de Q_r e UA de forma eficiente. Contudo, vale ressaltar que as técnicas de estimativa baseiam-se fundamentalmente nas medidas de temperaturas que, associadas a um balanço de energia e a procedimentos de calibração para termos constantes, permitem acesso aos efeitos térmicos de interesse.

No caso de avaliação de parâmetros cinéticos, faz-se necessária uma incorporação de modelo para o sistema reacional e, em algum caso, medida adicional de alguma concentração. Assim, os calorímetros podem ser considerados os precursores no desenvolvimento de metodologia para utilização dos balanços de energia como fonte para acompanhamento do processo.

Não obstante, faz-se necessário atentar para o fato de que existe uma relação entre a estimativa de estado e o controle do processo. Assim, (BONVIN, 1988) aponta os objetivos almejados para um bom controle dos reatores de batelada, sendo eles:

- A segurança, cujo objetivo é manter o processo sob controle, evitando-se acidentes durante o período de batelada, como por exemplo, um disparo da temperatura.

- A qualidade do produto, que deve ser entendida como baixa variabilidade em torno de um objeto estipulado. As variabilidades provêm de perturbações externas como a variação natural das impurezas da matéria prima, solventes (que são muitas vezes reutilizados) e, sobretudo da prática operacional, que deve ser tal que permita a correção das perturbações. Em determinados casos como na produção de polímeros, é difícil corrigir as características finais do produto através de operações de mistura, portanto, a batelada torna-se o único meio de se chegar ao produto final com características desejadas.

- O aumento de escala (“scale-up”) do processo, que deve ser realizado de maneira a minimizar o número de ensaios, permitindo passar rapidamente a receita das escalas de laboratório para escala industrial, sem perder de vista a importância de minimizar a utilização de estoques intermediários uma vez que as receitas de produção devem ser tais que permitam atender demandas de escalas diferentes em equipamentos diferentes.

- A tentativa de melhorar a produtividade de uma unidade de processamento é um objetivo prioritário, no entanto, o desempenho da linha de produção como um todo é mais importante que a produtividade de uma única unidade.

Na tentativa de resolver problemas associados ao comportamento de determinados sistemas, as observações de dados experimentais surgem como meio de juntar informações úteis que proporcionam a busca de um melhor conhecimento do sistema considerado. O estudo destas informações conduz à elaboração de modelo matemático que represente as características particulares do sistema em questão. Estes modelos visam elaborar experiências que nos permitem avaliar o seu próprio desempenho, como também, determinar parâmetros, reais ou fictícios. Assim sendo, as técnicas de estimativa tornam-se ferramentas importantes para determinar parâmetros com base nas observações coletadas.

A partir de análise das diferentes metodologias, é aqui sugerida a associação do BETR às técnicas de estimativa, uma vez que algum tipo de modelo fundamental - especificamente, o balanço de energia do sistema reator/jaqueta - deve ser utilizado como base para o processo de inferência sobre as variáveis não diretamente medidas.

2.2 Técnicas de estimativa

As técnicas de estimativa de estados são utilizadas para facilitar o monitoramento e controle do processo de polimerização. O controle consiste na estimativa da taxa de reação que é realizada através de medidas diretas de temperaturas.

ALMEIDA, (1997), avalia o BETR como instrumento de acesso a diferentes variáveis relacionadas ao comportamento dos reatores de polimerização em batelada. Também, é utilizado o filtro de Kalman com a estratégia de random walk (passo aleatório) para estimativa simultânea de Q_r e U_A .

VALLIERE & BONVIN, (1990c) apresentam um estudo de modelagem para melhorar significativamente a estimativa da taxa de produção de calor em reatores de batelada utilizando o filtro de kalman, onde o principal objetivo de estimativa é a reconstrução do calor da reação (Q_r). Porém, dois problemas são levantados: O primeiro refere-se à capacidade calorífica e o coeficiente de transferência de calor que mudam ao longo da reação, o segundo a cinética da reação química envolvida na produção de calor não são conhecida. Os autores atentam para o fato de que a performance de um estimador não linear é altamente dependente das suposições feitas sobre a dinâmica das variações dos parâmetros empregados no processo. Em relação os modelos apresentados (passo aleatório e rampa aleatória), no modelo rampa aleatória, torna-se mais fácil estimar dois parâmetros que se comportam de acordo com um modelo dinâmico, do que, um para o qual o modelo é desconhecido como no caso de passo aleatório.

Segundo, (KRÄMER, S., et. al. 2004) o calorímetro de temperatura oscilante (em inglês TOC) é um método para identificação contínua do coeficiente de transferência de calor. O TOC é aplicado em controle de temperatura de reatores que usam jaqueta de resfriamento. Este método baseia-se no fato de que a especificação dinâmica rápida do coeficiente de transferência de calor (U) e a especificação dinâmica lenta de calor de reação (Q_r) podem ser analisadas separadamente. Até agora o TOC foi prosperamente aplicado em reatores de tanque agitado em escala de laboratório. Este método permite o cálculo do valor de (U) através de um algoritmo simples. Porém, para utilizá-lo algumas considerações devem ser feitas, como visto em (TIETZE, A. et. al 1996):

- Capacidade calorífica deve ser constante.
- Capacidade calorífica da parede é incorporada ao meio reacional.
- Influencia da parede é desprezível.
- Perda de calor e o efeito térmico do agitador são desprezíveis.
- Variação lenta de vários parâmetros pode ser negligenciada.
- Temperatura da jaqueta T_j é dada como variável de entrada.

É também investigada a aplicabilidade de diferentes algoritmos que utilizam o método de TOC para acompanhar a evolução do comportamento do coeficiente de transferência de calor durante o curso de uma reação em reatores de batelada com jaqueta de resfriamento externa, operando sob hipótese de mistura perfeita onde a perda de calor e a forte dissipação de calor do agitador são conhecidas ou desprezíveis. os autores discutem ainda a capacidade calorífica $C_p(t)$ que muda no decorrer da reação devido ao acréscimo de monômero durante a batelada, desta forma, aumentando a viscosidade do meio reacional, que afeta drasticamente o valor do coeficiente de transferência de calor que por sua vez varia no tempo. Daí a necessidade de estudar diferentes técnicas de operação para diferentes tipos de oscilações que requerem algoritmos diferentes para a avaliação dos coeficientes de transferência de calor. Três casos relevantes foram estudados sendo observado que todos os algoritmos são teoricamente equivalentes e seus resultados são coincidentes no caso nominal (nenhum erro em dados). Porém, nas aplicações em

dados experimentais, para o caso, de variações senoidais no *setpoint* da temperatura do reator, são mostrados resultados diferentes.

GESTHUISEN, et al., (2004) apresentam um estudo comparativo entre o TOC e o filtro de Kalman estendido (em inglês EKF) onde é descrito o TOC como um método de estimação de estado que tem boa performance para taxa do fluxo da jaqueta alta e reatores pequenos ($<5l$), enquanto que, a performance do (EKF) é melhor para taxa do fluxo da jaqueta pequena e reatores maiores ($>2l$). Entretanto, algumas limitações dos métodos encontram-se na observabilidade, quando $T_j = Tr$. O TOC quando utilizado para reatores em escala de laboratório, estima os valores de UA e Qr melhor para reatores de pequena escala e maior fluxo de massa através da jaqueta. A razão é que o período da oscilação é escolhido proporcional ao tamanho do reator e inversamente proporcional ao fluxo de massa examinado. O período da oscilação corresponde ao tempo morto dos valores estimados. O EKF rende uma estimativa mais exata para volumes maiores do reator e menor massa de fluxo líquido através da jaqueta. Porém, a maioria das reações exotérmicas requer uma remoção máxima de calor por tempo ótimo. Conseqüentemente, uma taxa de fluxo baixa, que seja vantajosa para o EKF não pode ser usada. Por sua vez, o EKF pode ser estendido para reatores da escala piloto para escala industrial e os resultados esperados podem ser melhores.

Segundo (TIETZE, et al., 1996) na maioria dos casos ao considerarmos o coeficiente de transferência de calor constante, seu valor pode ser determinado por calibração antes da reação, contudo, no caso de mudanças significantes no valor de (U) durante a reação, o fluxo de calor não pode ser calculado, um procedimento comum é executar uma segunda calibração depois da reação e estimar a mudança do valor da transferência de calor por interpolação linear entre estes dois valores. Este procedimento pode conduzir a falsos resultados ou não pode dar nenhuma informação sobre a mudança do valor de transferência de calor durante a reação, com objetivo de solucionar este problema os autores sugerem o TOC como método para determinar de forma on-line o valor da transferência de calor e da taxa de reação em reatores de tanque agitado.

O método de TOC faz uso somente do balanço de energia do reator para determinar o valor da transferência de calor e do fluxo de calor de forma simultânea durante a reação, requerendo somente o uso de um procedimento matemático para avaliação dos dados medidos e uma operação de processo ligeiramente modificada. Os autores observaram também, que durante a utilização do método de TOC, ocorre um forte aumento da viscosidade na massa do reator. Uma análise dos algoritmos para aplicação do TOC à luz dos dados industriais pode ser encontrada em (de LUCA & SCALI, 2002).

SCHMIDT & REICHERT (1988), declararam que durante os processos de polimerização de batelada ou semibatelada as fortes variações do coeficiente de transferência de calor entre o reator e jaqueta, como também, o aumento da área de transferência de calor deve ser considerado. Para superar estes problemas os autores simplesmente estimavam as temperaturas e usavam um modelo para identificar UA.

FAN & ALPAY (2004), basearam seus estudos no balanço de massa e energia de um reator de polimerização de metacrilato de metila (MMA); uma atenção particular foi dada à determinação do coeficiente de transferência de calor e energia adicionada para a bomba de reciclagem. De acordo com estes autores o coeficiente de transferência de calor pode mudar durante o curso da polimerização, porém neste trabalho a porcentagem por volume de monômero foi relativamente baixa e a taxa de reciclo foi mantida alta de tal modo que o coeficiente de transferência pode ser considerado constante. Quando os ruídos nas medidas são significativos a estimativa calorimétrica direta pode produzir

erros, portanto é necessário o emprego de um estimador de estado. O filtro de Kalman é mencionado como um excelente estimador de estado para sistemas lineares e neste trabalho a forma mais simples do filtro de Kalman foi utilizada; os resultados obtidos foram em excelente concordância com os dados obtidos das medidas de temperaturas. A aproximação não requer nenhum conhecimento da cinética e é por isso, de considerável facilidade para implementação em relação ao filtro de Kalman estendido.

2.3 Determinação Simultânea do Calor de Reação (Qr) e do Coeficiente de Transferência de Calor Global (UA).

Múltiplas variáveis em modelos não lineares são comuns em processos químicos, freqüentemente, algumas variáveis que mudam ao longo do tempo não são medidas. (GUO, et. al., 2001) investigam a utilização de um esquema adaptativo associado ao algoritmo de controle por modelo genérico (em inglês, GMC) com um observador não linear que é capaz de acompanhar mudanças no modelo do processo, este esquema de controle mostra-se bastante robusto devido à rápida convergência do observador não linear unida à ação integral introduzida pelo GMC. O esquema de controle tem algumas características importantes, em particular, afinação fácil do estimador e do controlador. A estratégia de controle adaptável foi aplicada prosperamente a um reator de batelada simulado e um tanque de pressão de laboratório. Ambos os exemplos demonstram efetivamente que o esquema de controle adaptável não linear é muito bom para localizar parâmetros que variam no tempo.

de LUCA & SCALI, (2002) separam a dinâmica de processo influenciada pela mudança de UA (dinâmica rápida) da dinâmica de processo influenciada pela taxa de reação (dinâmica lenta) e assim permitindo a estimação separada deles. Um método calorimétrico mais avançado usado por muitos autores (GUO, et. al., 2001; KRÄMER, et. al. 2004), usavam o observador não linear para calcular o calor da reação (Qr) e o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) simultaneamente, bem como também (FREIRE, et. al. 2004) que chamou de “cascata” o observador para calcular ambos os parâmetros.

O monitoramento de processo em reações calorimétricas é largamente utilizada como ferramenta para determinação do calor da reação (em reatores de batelada ou semibatelada), que uma vez combinada com o balanço de massa pode determinar em cada instante a conversão do produto no meio reacional. Geralmente, este conhecimento é suficiente para a maioria dos processos, porém, para uma operação segura em reatores exotérmicos o conhecimento do coeficiente de transferência de calor que governa a taxa de energia transferida entre o reator e a jaqueta de resfriamento é necessária.

BENAMOR,, et. al., (2002) apresentam um estimador de estado em cascata não linear de alto-ganho, como meio de investigar um dos problemas mais difíceis de superar no calorímetro de fluxo de calor que é a necessidade de conhecer UA a toda hora durante a reação.

Os problemas e operações de reatores de semibatelada tornarem-se difíceis. embora em alguns casos seja razoável fazer certas aproximações. Se não é possível ou não é desejável usar um modelo para UA um sensor adicional pode ser usado para prover contribuição como conversão ou sólidas medidas para ajudar no cálculo on-line de UA. Esta aproximação é chamada de calorímetro adaptável.

É mostrado um método para monitoramento on-line e simulação da estimação do calor de polimerização e o produto coeficiente de transferência de calor pela área usando

somente as medidas de temperaturas, a taxa do fluxo de alimentação e a técnica de estimação de estado. Este método propõe e prove Q_r e UA sem a necessidade de medidas de conversão global. É focado também o uso do calorímetro para estimadores de estados e de composição. A técnica desenvolvida está baseada no uso de uma "cascata" e dois observadores de estado.

Os autores desenvolveram e validaram um tipo simples de observador em cascata que permite usar calorímetro on-line para reações de polimerização. A vantagem deste observador é que pode ser usado sem prova on-line e não requer um modelo para a evolução de UA com conteúdo sólido. Desta forma, este método pode se usado em condições industriais realísticas até mesmo quando acontece de UA evoluir diferentemente de batelada para batelada. O único parâmetro que precisa ser bem conhecido é o valor inicial de UA , que pode ser calculado facilmente durante a fase de preparação de processo.

FREIRE, et al, (2004) atentam para o fato da propriedade e a qualidade do polímero serem basicamente determinadas durante a produção. Daí, o monitoramento e o sistema de controle on-line serem muito importantes no processo de polimerização assegurando que a produção final tenha as especificações exigidas. É utilizado um observador não linear em cascata para estimar simultaneamente Q_r e UA , sem a necessidade para adicionar medidas experimentais on-line. A dinâmica assumida para estimação conjunta de Q_r e UA é descrita por um simples modelo de passo aleatório (random walk). O resultado obtido por simulação mostra que esta aproximação pode prover boa estimativa de Q_r e UA , sendo a maior vantagem do calorímetro em cascata a sua habilidade para estimar as variáveis com precisão na presença de perturbações externas uma vez que somente o balanço de energia envolta do reator é empregado.

Os autores também descrevem o observador em cascata como um poderoso meio de obter informações sobre o avanço da polimerização. Isto não é complicado de implementar uma vez que requer somente a equação do balanço de energia, e as medidas de temperatura provendo estimações seguras na mudança de calor gerado no meio reacional (Q_r). Porém, requer continua atualização do coeficiente de transferência de calor que é uma função da viscosidade. Para estimação conjunta de Q_r e UA foi utilizado um observador de estado não linear em cascata para determinar as estimativas. O maior avanço do calorímetro em cascata se deu na sua habilidade de estimar corretamente variáveis na presença de perturbações externas.

O observador em cascata pode ser considerado um procedimento de calibração não ótimo, uma vez que confia na afinação dos parâmetros do filtro e faz correções em cada volta do algoritmo.

GESTHUISEN, et al., (2004), descrevem a estimação calorimétrica como uma técnica poderosa para monitorar o processo e permitir a estimação de Q_r e a taxa de reação que pode ser utilizada para determinar a conversão, UA também pode ser usado para maximizar a qualidade da produção e permitir uma análise segura da estimativa. Como atualmente não há uma única técnica de estimação de UA e Q_r simultaneamente para uma série de reatores de tamanhos variados, os autores, fazem um estudo comparativo da performance da utilização de um calorímetro de oscilação e o calorímetro de balanço de energia, utilizando um estimador de estado para reatores de tamanho intermediário.

KRÄMER & GESTHUISEN, (2005), desenvolvem um estudo teórico para reatores de batelada ou semibatelada, enfatizando que: se todas as temperaturas e volumes forem medidos e filtrados corretamente, o calor da reação (Q_r), pode ser estimada usando

calorímetros e os resultados são geralmente bons. Contudo, para uma segura operação em reatores exotérmicos o conhecimento do produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) muitas vezes se torna necessário.

A utilização de calorímetro é geralmente válida em modelos simplificados. Para grandes reatores, isto, causaria sérios problemas, uma vez que, as equações de balanço de energia não são lineares. Para solucionar este impasse, é proposta a aplicação do filtro de Kalman estendido (EKF) para estimar Q_r e UA simultaneamente. Porém é necessário considerar três fatores importantes:

Em Primeiro lugar e principalmente, a jaqueta de um reator é geralmente modelada como um tanque agitado. Ao olhar para reatores reais enjaquetados, a jaqueta se comporta como um reator tubular.

Em segundo lugar o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) é, para muitas reações, fortemente dependente no tempo de batelada.

Em terceiro lugar, a taxa de fluxo através da jaqueta e a segura subida da temperatura do reator influência fortemente a qualidade de estimação.

Os autores demonstram que o calor de reação e o coeficiente transferência de calor para reatores de batelada, semibatelada ou continuo podem ser estimados utilizando o filtro de Kalman estendido. Porém a geometria da jaqueta tem influencia na estimação do coeficiente de transferência de calor.

O EFK tem boa performance para reatores de pequenos tamanhos. embora no modelo da planta real a jaqueta se comporta mais como um reator de fluxo empistonado. No entanto, o ajuste cuidadoso do filtro é fundamental, pois, a taxa de fluxo na jaqueta tem uma forte influência na qualidade da observação. Uma adaptação da matriz de afinação é mostrada para compensar a influência da taxa de fluxo na jaqueta. Com tudo, um intercâmbio entre a boa performance do desempenho do observador e a remoção máxima do calor, pode ser feita. Poderia ainda ser sensato, na planta, reduzir a temperatura média da jaqueta, em lugar de aumento da taxa de fluxo. Assim, a suposição de uma jaqueta idealmente agitada só é razoável para estimação de estado se o tamanho de reator for pequeno, ficando óbvio que para reatores maiores a qualidade de estimação diminui consideravelmente com o tamanho de reator.

KRÄMER & GESTHUISEN, (2005) incorporaram uma extensão no modelo no caso em que a jaqueta do reator se comporta como um PFR. Isto foi alcançado aplicando colocação ortogonal na equação diferencial parcial que descreve a temperatura da jaqueta. Assim, uma extensão direta do comportamento da jaqueta foi considerada e a medida executada do sensor para o sistema. Se a jaqueta se comporta como um PFR, uma medida adicional na jaqueta melhora a qualidade da estimação.

Finalmente, como taxas de fluxo de massa mais altas na jaqueta resultam em uma degradação da qualidade da estimação, uma aproximação prática para calcular a mais baixa taxa de fluxo sensata da jaqueta foi apresentada porém, requer uma estimativa inicial de UA.

No caso prático, deveria ser analisada cuidadosamente a geometria do reator. O modelo deveria ser então ajustado *off-line* para essas condições. Depois disso, deveria ser feita uma simples calibração experimental e o modelo próprio precisaria ser executado. Os dados de reação, típicas, do modelo ajustando, podem ser aumentados e uma primeira suposição de UA pode ser obtida. A taxa de fluxo de massa mínima sensata precisa ser calculada e com dados de reação típicos o EKF precisa ser afinado.

SCALI, et. al., (1997), Focam a estimação de parâmetro utilizando filtros de Kalman estendido. É demonstrado que o uso de parâmetros adicionado como o estado do

sistema é apropriado sempre que há erros sistemáticos no modelo do processo. Semelhante ao caso dos filtros que são usados para estimar a qualidade das propriedades do polímero que não são medidos on-line em reatores de polimerização.

Segundo os autores o filtro de Kalman (também na versão estendida para sistemas não lineares) é impróprio para estimação de estado na presença de erro sistemático no modelo; para responder por este erro, é necessário incluir parâmetro que atualiza o algoritmo de estimação.

Com uma visão mais abrangente da importância do acompanhamento e do monitoramento do calor da reação (Q_r) e do produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) para obtenção de produtos com qualidades dentro das especificações exigidas, bem como um melhor aproveitamento das atuais instalações e dos reatores de polimerização de batelada/semibatelada, é verificado que vários autores, ainda não apontam para um método único que faça a estimativa de Q_r e UA simultaneamente de forma precisa. Neste contexto é ressaltada a relevância desta dissertação no que se refere à investigação do balanço de energia em tempo real (BETR) em um reator de polimerização que utilize formas alternativas para estimativa dos estados estocásticos Q_r e UA utilizando modelos estruturados para o filtro de Kalman. e ainda um estudo sobre a influência da atividade do controlador nos perfis de temperaturas, utilizadas como medidas para a estratégia de estimativa.

3. UM MODELO EMPÍRICO PARA UM REATOR DE POLIMERIZAÇÃO.

3.1 Introdução.

Com objetivo de estudar o desempenho do BETR concebido a partir de estratégias baseadas no filtro de Kalman, Foi utilizado um reator de polimerização do tipo tanque agitado com jaqueta de resfriamento, descrito em (CHYLLA & HASSE, 1993). Neste estudo de caso um reator industrial totalmente empírico onde poderiam ser testados vários produtos na planta piloto, podendo ainda ser feito de uma a cinco bateladas consecutivas de cada produto, uma vez que os fatores de incrustação na parede do reator são considerados. Neste estudo de caso, os dados referentes a cada produto e ao controle são manipulados para dois produtos A e B, estes valores estão disponíveis nas tabelas 2A e 3A em anexo.

O problema apresentado foca o controle de temperatura de múltiplos produtos de polimerização em reatores de semibatelada. Um bom controle de temperatura muitas vezes é difícil de ser alcançado uma vez que propriedades físicas como massa, capacidade térmica, coeficiente de transferência de calor, calor de reação, etc, variam de batelada para batelada.

Os reatores de tanque agitado com jaqueta de resfriamento são usados especialmente para fazer polímero em emulsão em processos de semibatelada, sendo este muitas vezes utilizado na indústria de substâncias químicas, para produzir uma grande variedade de produtos. Estes produtos, são geralmente caracterizados por viscosidade, cinética de reação, temperatura de reação, taxa de alimentação, tempo de adição de monômero, etc. o que torna o problema do controle de temperatura um desafio no sentido de projetar um sistema de monitoramento e controle capaz de acompanhar, bem como, manter a temperatura de reação desejada constante durante todo período de batelada, uma vez que, a produção de cada produto com qualidade aceitável está vinculada diretamente ao controle de temperatura da reação em todo período de batelada.

3.2 Configuração do Reator

O reator estudado é do tipo tanque agitado cilíndrico, com jaqueta de aquecimento e/ou resfriamento para circulação de água envolvendo toda a superfície do cilindro com exceção do topo. O volume interno foi projetado para um meio reacional de 100 litros. Os dados referentes à estrutura física do reator utilizado estão apresentados na tabela 1A, no anexo.

Para cada batelada o reator foi considerado carregado com todas as substâncias envolvidas, exceto o iniciador, a uma mesma temperatura uniforme (temperatura ambiente). Esta temperatura era elevada à temperatura de *setpoint* quando a reação tinha início com adição de monômero. A partir de então a polimerização era conduzida até ser encerrada a adição de monômero.

O reator modelado por Chylla e Hasse apresenta a seguinte configuração:

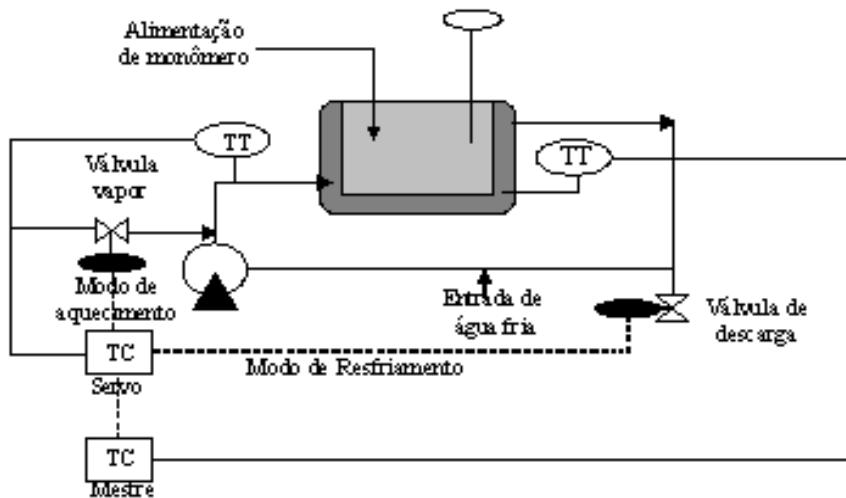


Fig. 3.1 Reator modelado por Chylla & Hasse

3.3 Cinética de Reação

Como o objetivo era a dinâmica do controle de temperatura, um modelo cinético simplificado pôde ser usado. O modelo proposto não tenta descrever a composição química, distribuições de pesos molecular, tamanhos de partícula, ou mecanismo de iniciação, mas apenas, o consumo global de monômero. Assim, uma vez que o volume do meio reacional é uma função de tempo no sistema de semibatelada, torna-se mais fácil modelar o balanço material em termos de número de moles de monômeros, em vez de sua concentração. Este modelo descreve razoavelmente a conversão com o tempo no comportamento do reator. Isto pode ser usado para modelar o balanço de energia sobre o reator e a recirculação do fluido refrigerante na jaqueta do reator. O modelo é apresentado para a polimerização de dois produtos, o modelo cinético global se expressa nas equações que seguem:

(3.1)

$$F_M(t) = \frac{\dot{m}_M(t)}{MW_M} \quad (3.2)$$



(3.3)

$$k(t) = k_\infty \exp [-6400 / (T_r + 460)]^{0.4} \quad (3.4)$$

Onde:

\dot{m}_M vazão mássica de alimentação de monômero
 F_M = vazão molar de monômeros no reator;
 N_m = número de moles de monômeros no reator;
 R_p = taxa de polimerização;
 Mw_M = peso molecular da mistura de monômero;
 i = fator de impureza;
 k = constante cinética de primeira ordem (min^{-1});
 k_o = fator pré - exponencial
 T_r = temperatura de reator
 = viscosidade da batelada

Os autores fazem uma única modificação no fator de impureza (i) que precede a constante cinética. O fator de impureza assume um valor randômico entre 0,8 e 1,2 para qualquer batelada. Esta é uma tentativa para modelar, de um modo simples, as flutuações aparentes na cinética causada por impurezas de batelada para batelada. A equação (3.4) mostra a influência da viscosidade da batelada na expressão de Arrhenius, modelando a mudança cinética da reação devido ao efeito gel.

Ao se processar a mistura é observada nitidamente na reação o aumento da viscosidade no reator que é uma função da fração de sólido presente na mistura. As equações (3.5 e 3.6) são uma correlação entre a viscosidade do produto A e a do produto B que são determinadas empiricamente a partir de dados experimentais.

Produto A

$$\mu(t) = (0.032) \cdot e^{[19.4f(t)]} \cdot 10^{[2.3(a-1.563)]} \quad (3.5)$$

Produto B

$$\mu(t) = (0.032) \cdot e^{[19.4f(t)]} \cdot 10^{[2.3(a-1.563)]} \quad (3.6)$$

Onde:

- (t) = viscosidade do produto
- $f(t)$ = fração de sólidos
- a = $1000/(T_r + 460)$

A fração de sólido pode ser calculada a qualquer instante com base nas seguintes definições:

$$f(t) = \frac{S(t)}{m_R(t)} \quad (3.7)$$

$$S(t) = S(0) + x(t) \cdot M_{MT}(t) \quad (3.8)$$

$$m_R(t) = S(t) + M_{MT}(t) \cdot [1 - x(t)] + W(0) \quad (3.9)$$

Nestas expressões.

S = massa de sólidos,

M_{MT} = massa total de monômero adicionada

W = massa de água constante durante a reação

x = conversão em qualquer instante

Em termos de números de moles, temos:

$$\frac{S}{M_{MT}} = \frac{x}{W} \quad (3.10)$$

Com esta expressão para a conversão, completa-se o conjunto de equações diferenciais para o balanço de massa no reator, com:

$$\frac{dS}{dt} = -k_p S^2 \quad (3.11)$$

3.4 Relação de Transferência de Calor

Com objetivo de incorporar a influência da viscosidade no meio, foram calculados coeficientes de transferência de calor (U) que decaem drasticamente durante a batelada, uma vez que o filme do coeficiente de transferência de calor é uma função da viscosidade. Portanto, foi utilizada a seguinte correlação:

$$U_{par} = U(T_{par}) \quad (3.12) \quad (3.18)$$

onde: $U_{par} = U(T_{par})$ e T_{par} é definida por:

$$T_{par} = \frac{T_R + \bar{T}_j}{2} \quad (3.13)$$

Admite-se ainda que o coeficiente global é também uma função das incrustações verificadas na parede, medida pelo parâmetro ($1/h_f$) determinado com base no número de operações realizadas previamente. Assim, tem-se para U.

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h} + \frac{1}{h_f}} \quad (3.14)$$

3.5 Modelo para o Balanço de Energia do Reator

A formulação para o balanço de energia no reator se refere ao meio reacional, a jaqueta e incorpora o comportamento dinâmico da temperatura de entrada do fluido refrigerante. Assim, podemos descrevê-la da seguinte forma:

$$m_R(t)C_R(t)\frac{dT_R(t)}{dt} = \dot{m}_M(t)C_{pm}[T_{amb} - T_R(t)] + R_p(t)(-\Delta H_p) - U(t).A(t).[T_R(t) - \bar{T}_j(t)] - (UA)_{per}[T_R(t) - T_{amb}] \quad (3.15)$$

Onde:

m_r = massa de componente no reator

C_{pm} = calor específico do componente

M = para monômero; W = para água; S = para sólidos.

T_{amb} = temperatura ambiente

$-\Delta H_p$ = calor de polimerização

U = coeficiente de transferência de calor

A = área de transferência de calor na jaqueta

\bar{T}_j = temperatura média da jaqueta

$(UA)_{per}$ = perda de calor para ambiente por unidade de temperatura

Do lado esquerdo da equação (3.15) da conta dos componentes dentro do reator. Enquanto que o termo do lado direito da equação da conta do calor sensível da mistura, calor gerado devido à reação, transferência de calor pela jaqueta e perda de calor para o meio ambiente, respectivamente.

3.6 Modelo para o Balanço de Energia da Jaqueta

Para o balanço de energia da jaqueta, temos:

$$w c_j \frac{dT_j(t)}{dt} = F_w C_p w [T_{ji}(t - \theta_l) - T_j(t)] + U(t).A(t).[T_R(t) - \bar{T}_j(t)] \quad (3.16)$$

Sendo

$$\bar{T}_j = \frac{(T_j + T_{ji})}{2}$$

Onde:

- τ_1 = atraso por transporte dentro da jaqueta (min)
 Cp_w = capacidade de calor de resfriamento da jaqueta (Btu. / lb °F)

$$\frac{dT_{ji}(t)}{dt} = \frac{dT_j(t - \theta_2)}{dt} + [T_j(t - \theta_2) - T_{ji}(t)] + \frac{K_p}{\tau_p} [C(t)] \quad (3.17)$$

Este modelo (Eq. 3.17) foi apresentado nesta forma no artigo original, onde o segundo termo do lado direito deveria ser dividido por τ_p para manter a consistência com o modelo descrito.

Onde:

- θ_2 = atraso por transporte na volta de recirculação
 K_p = ganho para o aquecimento / resfriamento do processo
 τ_p = constante de tempo para aquecimento / resfriamento
 $C(t)$ = sinal de saída do controlador (0-100%)

Uma análise dos termos envolvidos no balanço de energia do reator e da jaqueta nos mostra que juntamente com as variáveis de estado $T_R(t)$ e $T_j(t)$ existem variáveis e parâmetros que dependem das reações processadas no reator (R_p , Cr, mr, U, A), que são calculadas a partir das equações do balanço de massa, enquanto que outras dependem somente do aspecto construtivo do equipamento (W_{cj}) e outras relativas às condições operacionais.

3.7 Sistema de Controle

O controle para a temperatura do reator (T_R) é efetivado a partir de uma estrutura em cascata. A malha externa ajusta a referência para temperatura do fluido circulante no circuito de refrigeração. Esta referencia, é então utilizada pela malha interna no sentido de estabelecer a temperatura requerida. A malha externa usa um controlador PID, enquanto a interna um PI. Onde, K_C^e , τ_I^e e τ_D^e são os parâmetros do controlador, ajustados empiricamente de modo a garantir suavidade e rapidez para ambas as temperaturas. As escolhas destes controladores se deram para que fosse mantido o vínculo com artigo motivador (CHYLLA & HASSE, 1993).

Os valores dos parâmetros para o controlador são:

Para PID.

$$K_C^e = 5$$

$$\tau_I^e = 5$$

$$\tau_D = 2$$

Para PI.

$$K_C^e = 2$$

$$\tau_I^e = 2$$

Estes controladores, assumidos como contínuos, foram aqui, modelados segundo as expressões que seguem:

PID



(3.18)

onde:



(3.19)



(3.20)



(3.21)

PI

$$C(t) = 50.0 + K_C^e E^I(t) + \frac{1}{\tau_I^e} \cdot I_{erro}^i(t) \quad (3.22)$$

onde:



(3.23)

Os parâmetros referentes aos controladores foram também ajustados por tentativas e erros. Limites mínimo e máximo (0/100) para os valores de C(t) foram implementados e para evitar os indesejáveis efeitos de saturação na ação integral, o cálculo de I_{erro} era interrompido sempre que um dos limites fosse alcançado.

3.8 Os Controladores

Neste momento vale ressaltar que ao fazer a leitura do artigo original (CHYLLA & HASSE, 1993), foi observado que o segundo termo do lado direito da equação (3.17) deveria ser dividido pelo constante de tempo para aquecimento / resfriamento (τ_p). Este erro foi corrigido por (ALMEIDA, 1997), de modo torná-la consistente com o próprio sistema descrito pelos autores (Eq. 3.25). Posteriormente, os autores (CHYLLA & HASSE, (1993b)), fizeram a correção do artigo original utilizando um outro grupo de valores obtidos de forma empírica.

O controlador corrigido pelos autores mostrou-se mais ativo que o sugerido por Almeida. Esta diferença nos permitiu testar as estratégias para o filtro de Kalman, tanto para o controlador suave, como, para o controlador ativo.

3.8.1 Controle corrigido por Almeida.

Esta equação teve que ser modificada em relação ao artigo original, de modo a torná-lo consistente com o próprio sistema descrito (ALMEIDA, 1997).

A forma da equação:

$$\frac{dT_{ji}(t)}{dt} = \frac{dT_j(t - \Theta_2)}{dt} + \frac{(T_j(t - \Theta_2) - T_{ji}(t))}{\tau_p} + \frac{K_p(t)}{\tau_p} [C(t) - 50] \quad (3.25)$$

onde:

- Θ_2 = tempo morto para o circuito de fluido refrigerante.
- K_p = ganho no processo de aquecimento e resfriamento.
- τ_p = constante de tempo para aquecimento e resfriamento.
- $C(t)$ = sinal de saída do controlador (0 – 100).
- T_{ji} = Temperatura de entrada de água.

Em função do tipo de comportamento necessário para a jaqueta, tem-se, determinado pelo sinal de saída do controlador, os seguintes valores e ganho:

$$K_p = \begin{cases} 3.21 \times 10^{-3} (30)^{\frac{-C(t)}{50}} (T_j - T_{ji}) & 0 \leq C(t) \leq 49 \\ 0 & C = 50 \\ 0.511 (30)^{\frac{C(t)-2}{50}} & 51 \leq C(t) \leq 100 \end{cases} \quad (3.26)$$

3.8.2 Controle corrigido por Chylla e Hasse

Como havia um erro na publicação original optou-se por apresentar o controlador na sua forma corrigida pelos autores Chylla e Hasse. A forma correta da equação (CHYLLA & HASSE (1993b)) é a seguinte:

$$\frac{dT_{ji}(t)}{dt} = \frac{dT_j(t-\theta_2)}{dt} + \frac{(T_j(t-\theta_2) - T_{ji}(t))}{\tau_p} + \frac{K_p(t)}{\tau_p} \quad (3.27)$$

onde:

θ_2 = retardo de transporte na volta de recirculação.
 K_p = aquecimento e resfriamento no processo de ganho.

$$K_p = \begin{cases} 0.8(30)^{\frac{-C(t)}{50}} (T_{ji} - T_j) (^{\circ}\text{F}) & 0 \leq C(t) \leq 49 \\ 0 & C = 50 \\ 0.15(30)^{\frac{C(t)-2}{50}} (T_{steam} - T_j) (^{\circ}\text{F}) & 51 \leq C(t) \leq 100 \end{cases} \quad (3.28)$$

3.9 Calculo de Conversão

Como visto em Almeida (1997), obtemos a conversão a partir da integração da equação (3.29). Durante a entrada de monômero no reator o balanço teria o seguinte modelo:

$$\frac{dx(t)}{dt} + x \frac{F_N}{N_{MT}} - \frac{R_p}{N_{MT}} = 0 \quad \text{como,} \quad R_p = \frac{Q_R}{(-\Delta H_p)};$$

$$\frac{dx}{dt} + x \frac{F_N}{N_{MT}} - \frac{Q_R}{(-\Delta H_p) N_{MT}} = 0 \quad (3.29)$$

Fazendo,

$$\pi_1 = \frac{F_N}{N_{MT}} \quad e \quad \pi_2 = \frac{Q_R}{(-\Delta H_p) N_{MT}}$$

$$\frac{dx}{dt} = \pi_1 x - \pi_2 = 0$$

temos como solução analítica para h quando $\pi_1 = \text{constante}$

$$x(k+1) = e^{-\pi_1 h} x(k) + \frac{\pi_2}{\pi_1} (1 - e^{-\pi_1 h}) \quad (3.30)$$

Quando a alimentação de monômeros é encerrada a equação diferencial de conversão perde o termo de adição de monômero ficando:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{R_p}{N_{MT}} \quad (3.31)$$

$$\int_{x(k)}^{x(k+h)} dx = \int_{t(k)}^{t(k+h)} \frac{R_p}{N_{MT}} dt \quad (3.32)$$

$$x_{(k+1)} - x_{(k)} = \frac{R_p}{N_{MT}} (t_{k+1} - t_k) \quad (3.33)$$

$$x_{(k+1)} = \frac{R_p}{N_{MT}} h + x_{(k)} \quad \text{sendo} \quad R_p = \frac{Q_r}{(-\Delta H_p)}$$

$$x_{(k+1)} = x_{(k)} + \pi_2 h \quad (3.34)$$

4. ESTRATÉGIAS DE ESTIMAÇÃO

4.1 Filtro de Kalman

O filtro estimador de estado, chamado de Filtro de Kalman (FK), foi desenvolvido por Rudolph Emil Kalman em 1959. Este estimador realiza o processamento das medidas em tempo real e ainda em suas equações o ruído dinâmico tem participação na estimação dos estados.

São duas as hipóteses básicas para derivação do FK: A primeira é que as equações sejam lineares e a segunda é que os ruídos sejam gaussianos com média zero. Estes são assumidos como não correlacionados uns com os outros e com o estado inicial. Quando estas suposições são satisfeitas; o FK é ótimo no sentido do erro quadrático médio.

Quando o sistema sob consideração é não-linear, a primeira condição é violada e o Filtro de Kalman Estendido (FKE) é aplicado como um filtro subótimo. No FKE, os termos não lineares são aproximados pelos termos lineares de primeira ordem pela expansão em uma série de Taylor.

O FK é um conjunto de equações que fornece uma solução recursiva para a estimação do vetor de estados combinando todas as medidas coletadas juntamente com o conhecimento anterior (*a priori*) da dinâmica do sistema e dos equipamentos de medidas, mais a estatística do ruído dinâmico e finalmente os erros nas medidas. Portanto, o FK é um algoritmo recursivo ótimo, utilizado para estimar os estados de um sistema dinâmico, baseado na medição da confiabilidade dos dados observados a partir de uma matriz denominada matriz de covariância que é calculado a cada novo processo de estimação que utiliza o filtro. A partir de uma posição inicial conhecida este algoritmo combina todos os dados disponíveis adicionados ao conhecimento anterior do sistema e de seus dispositivos, para produzir uma estimativa das variáveis desejadas, de tal sorte que o erro seja reduzido ao longo do processo recursivo.

O filtro de Kalman estendido, quando utilizado no contexto do BETR, tem como característica utilizar como base de cálculo, para as derivadas envolvidas, as próprias equações de balanço de energia. Portanto, os valores determinísticos e os valores estocásticos são determinados simultaneamente de forma a satisfazer o modelo dinâmico do processo durante todo o modo de operação do reator, o que nos permite acompanhar as ações corretivas baseadas no erro entre o valor obtido pelo modelo e aquele efetivamente medido para os estados do sistema em cada tempo de amostragem. Acrescido a isto, este Filtro nos permite ainda, se necessário, estimar simultaneamente outros parâmetros não conhecidos do sistema. Logo, o estudo de formas diferenciadas de utilização da potencialidade do filtro se faz necessária e de grande valia.

A formulação geral para o problema de estimação com base FKE, parte do conjunto de equações diferenciais que descreve o balanço de energia a partir de variações de temperatura para o reator e para a jaqueta no sistema. O sistema de equações para os estados determinísticos (índices “d” determinístico; “s” estocástico) poderia ser expresso pela equação diferencial (4.1), sendo esta, já na forma linearizada, onde:

$\underline{\underline{A}}$ corresponde aos termos determinísticos, $\underline{\underline{B}}$ corresponde aos termos estocásticos e \underline{d} corresponde ao vetor dos termos independentes, os vetores \underline{x}^d e \underline{x}^s correspondem aos estados determinísticos e estocásticos respectivamente.

$$\frac{dx^d(t)}{dt} = \underline{\underline{A}}(t) \cdot \underline{x}^d(t) + \underline{\underline{B}}(t) \cdot \underline{x}^s(t) + \underline{d}(t) \quad (4.1)$$

após a discretização para o instante $t_k = kh$, resultaria em:

$$\underline{x}_{k+1}^d = \underline{\underline{\Phi}}_k \cdot \underline{x}_k^d + \underline{\underline{\Theta}}_k \cdot \underline{x}_k^s + \underline{\varphi}_k^d + \underline{\omega}_k^d \quad (4.2)$$

Onde:

$$\underline{\underline{\Phi}}_k = \exp[\underline{\underline{A}}(t_k) h] \quad (4.3)$$

$$\underline{\underline{\Theta}}_k = \underline{\underline{A}}^{-1}(t_k) \cdot (\underline{\underline{\Phi}}_k - \underline{\underline{I}}) \cdot \underline{\underline{B}}(t_k) \quad (4.4)$$

$$\underline{\varphi}_k^d = \underline{\underline{A}}^{-1}(t_k) \cdot (\underline{\underline{\Phi}}_k - \underline{\underline{I}}) \cdot \underline{d}(t_k) \quad (4.5)$$

Considerando uma política puramente aleatória para os estados estocásticos, ter-se-ia a seguinte representação:

$$\underline{x}_{k+1}^s = \underline{x}_k^s + \underline{\omega}_k \quad (4.6)$$

Na perspectiva da estimação conjunta dos estados determinísticos e estocásticos, um modelo dinâmico global envolvendo ambos, seria expresso por:

$$\underline{x}_{k+1} = \underline{\underline{\Omega}}_k \cdot \underline{x}_k + \underline{\Psi}_k + \underline{\omega}_k \quad (4.7)$$

Neste caso tem-se que:

$$\underline{x}_k = [\underline{x}_k^d \quad \underline{x}_k^s]^T \quad (4.8)$$

$$\underline{\Psi}_k = [\underline{\Phi}_k \quad \underline{0}]^T \quad (4.9)$$

$$\underline{\omega}_k = [\underline{\omega}_k^d \quad \underline{\omega}_k^s]^T \quad (4.10)$$

$$\underline{\Omega}_k = \begin{array}{|c|c|} \hline & \underline{\Phi}_k & \underline{\Theta}_k \\ \hline \underline{O} & & \underline{I} \\ \hline \end{array} \quad (4.11)$$

As variáveis de saída expressas como funções lineares dos estados poderiam ser modeladas como:

$$\underline{y}_{k+1} = \underline{\underline{H}} \cdot \underline{x}_{k+1} + \underline{\Omega}_{k+1} \quad (4.12)$$

No modelo apresentado acima foram considerados os possíveis erros (ou ruídos), tanto para o processo $\underline{\Omega}$ como para \underline{y} .

Como base nesta representação do sistema, a estimativa é conduzida pelo conjunto de equações recursivas que compõem a versão discreta do filtro de Kalman (JAZWINSK, 1970).

Predição:

$$\underline{x}(k+1/k) = \underline{\Omega}(k/k) \cdot \underline{x}(k/k) + \underline{\Psi}(k/k) \quad (4.13)$$

$$\underline{\underline{P}}(k+1/k) = \underline{\Omega}(k/k) \cdot \underline{\underline{P}}(k/k) \cdot \underline{\Omega}^T(k/k) + \underline{\underline{R}}_w \quad (4.14)$$

Correção:

$$\underline{x}(k+1/k+1) = \underline{x}(k+1/k) + \underline{\underline{K}}(k+1/k) \cdot [\underline{\hat{y}}(k+1) - \underline{\underline{H}} \cdot \underline{x}(k+1/k)] \quad (4.15)$$

$$\underline{\underline{P}}(k+1/k+1) = \underline{\underline{P}}(k+1/k) - \underline{\underline{K}}(k+1/k) \cdot \underline{\underline{H}} \cdot \underline{\underline{P}}(k+1/k) \quad (4.16)$$

Ganho de Kalman:

$$\underline{\underline{K}}(k+1/k) = \underline{\underline{P}}(k+1/k) \cdot \underline{\underline{H}}^T \cdot \left[\underline{\underline{H}} \cdot \underline{\underline{P}}(k+1/k) \cdot \underline{\underline{H}}^T + \underline{\underline{R}}_v \right]^{-1} \quad (4.17)$$

Nas equações acima, a notação (k / j) refere-se a valores computados no tempo t_k com medidas disponíveis até o tempo t_j ; $\underline{\underline{P}}$ é uma matriz de covariância para as estimativas e $\underline{\hat{y}}$ o vetor com os valores efetivamente medidos.

Como hipótese implícita na própria concepção do filtro de Kalman está que os ruídos devem ser independentes, gaussianos, bem como não correlacionados com o estado inicial. Assim ter-se-ia:

$$E[\underline{x}(0)] = \underline{x}_0 = \underline{x}(0/0) \quad (4.18)$$

$$E[\underline{\omega t}] = \underline{0} \quad (4.19)$$

$$E[\underline{\omega t}] = \underline{0} \quad (4.20)$$

$$E[\underline{\omega t_k} \cdot \underline{\omega^T(t_j)}] = \underline{\delta_{kj}} \underline{\underline{R_w}} \quad (4.21)$$

$$E[\underline{\omega t_k} \cdot \underline{\omega^T(t_j)}] = \underline{\delta_{kj}} \underline{\underline{R_v}} \quad (4.22)$$

$$E[\underline{\omega t} \cdot \underline{x^T(0)}] = E[\underline{\omega t} \cdot \underline{x^T(0)}] = E[\underline{\omega t} \cdot \underline{\omega^T(t)}] = \underline{0}; \forall \quad (4.23)$$

$$E[(\underline{x}_0 - \underline{x}(0)) \cdot (\underline{x}_0 - \underline{x}(0))^T] = \underline{\underline{P}_0} = \underline{\underline{P}}(0/0) \quad (4.24)$$

Onde, $\underline{\underline{R}_w}$, $\underline{\underline{R}_v}$ e $\underline{\underline{P}}_0$, são as matrizes de covariância, consideradas constantes dos erros no modelo, medida e estado inicial respectivamente.

4.2 – Considerações para o modelo do balanço de energia para o reator e jaqueta

Uma vez que as equações de balanço de energia do reator e da jaqueta são não lineares, elas devem ser linearizadas utilizando a série de Taylor truncada no segundo membro, para isso, levamos em consideração os seguintes itens, em relação ao modelo real (CHYLLA & HASSE, 1992):

- Não considerar os tempos mortos, uma vez que o nosso objetivo de interesse na modelagem é para o filtro. O tempo morto não terá efeito significativo já que sua influência maior restringe-se ao controle.

- $Q_R = R_p \cdot (-\Delta H_p)$ para o cálculo da conversão.
- É mantida a hipótese de média de temperatura para \bar{T}_j .
- Tomando o mesmo ponto para a linearização e discretização como requer o algoritmo do filtro de Kalman $\underline{\underline{A}}(t) \cdot \underline{\underline{A}}(t_k) = \underline{\underline{A}}$.
- A capacidade calorífica $C_r(t)$, embora seja função do tempo e varie conforme o andamento da reação, para efeito da estratégia aqui descrita é tomado como constante com um valor especificado inicialmente.

4.2.1 Balanço de energia para o reator:

$$m_R C_R \frac{dT_R(t)}{dt} = \dot{m}_M C_{p_M} [T_{amb} - T_R(t)] + Q_R(t) - UA(t) [T_R(t) - \bar{T}_j(t)] - (UA)_{per} [T_R(t) - T_{amb}] \quad (4.25)$$

Os termos do lado direito da equação acima se referem ao calor sensível, calor da reação, calor transferido para jaqueta e o calor perdido para o meio ambiente, respectivamente.

Linearizando o balanço de energia para o reator em torno de $t_k = k.h$ temos:

$$\begin{aligned} \frac{dT_R(t)}{dt} &= -\frac{(\dot{m}_M C_{p_M} + UA + UA_{per})}{m_R C_R} T_R(t) + \frac{UA}{m_R C_R} \bar{T}_j(t) + \frac{(T_j + T_{ji})}{2} - T_R \\ &+ \frac{\left(T_R - \frac{T_j}{2}\right) UA + (\dot{m}_M C_{p_M} + UA_{per}) T_{amb}}{m_R C_R} \end{aligned} \quad (4.26)$$

4.2.2 Balanço de energia para jaqueta:

$$Wc_j \frac{dT_j(t)}{dt} = F_w C_{p_w} [T_{ji}(t) - T_j(t)] + UA(t) [T_R(t) - \bar{T}_j(t)] \quad (4.27)$$

O primeiro termo do lado direito da equação acima se refere ao calor sensível enquanto que o segundo termos refere-se ao coeficiente de transferência de calor.

$$\bar{T}_j = \frac{T_j + T_{ji}}{2} \quad (4.28)$$

Linearizando o balanço de energia para jaqueta em termos de $t_k = k \cdot h$ temos:

$$\frac{dT_j(t)}{dt} = \frac{UA}{Wcj} T_R(t) - \left(\frac{\frac{UA}{2} + F_w C p_w}{Wcj} \right) T_j(t) + \frac{T_R - \frac{(T_j + T_{ji})}{2}}{Wcj} UA(t) + \frac{F_w C p_w T_{ji} - \left(T_R - \frac{T_j}{2} \right) UA}{Wcj} \quad (4.29)$$

Assim a matriz $\underline{\underline{A}}$, relativa aos termos determinísticos do balanço de energia para o reator e para jaqueta é dada por:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{(\dot{m}_M C p_M + UA + UA_{per})}{m_R C_R} & \frac{UA}{2} \\ \frac{UA}{Wcj} & -\frac{\left(\frac{UA}{2} + F_w C p_w \right)}{Wcj} \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

A matriz $\underline{\underline{B}}$ esta relacionada com os termos estocásticos do balanço de energia para o reator e para jaqueta que é dada por:

$$\underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \frac{(T_j + T_{ji})}{2} - T_R & \frac{1}{m_R C_R} \\ \frac{T_R - \frac{(T_j + T_{ji})}{2}}{Wcj} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

O vetor \underline{d} , referente aos termos independentes do balanço de energia para o reator e para jaqueta, é dado por:

$$\underline{d} = \begin{bmatrix} \frac{\left(T_R - \frac{T_j}{2} \right) UA + (\dot{m}_M C p_M + UA_{per}) T_{amb}}{m_R C_R} \\ \frac{F_w C p_w T_{ji} - \left(T_R - \frac{T_j}{2} \right) UA}{Wcj} \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

Os vetores \underline{x}^d , \underline{x}^s , são relativos aos termos determinístico e estocásticos respectivamente do balanço de energia para o reator e para jaqueta, é dada por:

$$\underline{x}^d = \begin{bmatrix} T_R(t) \\ T_j(t) \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

$$\underline{x}^s = \begin{bmatrix} UA(t) \\ Q_R(t) \end{bmatrix} \quad (4.34)$$

4.3 Alternativas para Estruturas de Estimação

4.3.1 – Modelo passo aleatório (random walk)

MACGREGOR, J. F., (1986), observa que o principal objetivo da estimação é a reconstrução do calor gerado (Q_r) no meio reacional e o valor do coeficiente de transferência de calor (U) para jaqueta. Enquanto que (VALLIÈRE & BONVIN, 1990c), apresentam dois modelos para estimação de parâmetros, classificando-os em duas categorias: passo aleatório e rampa aleatória.

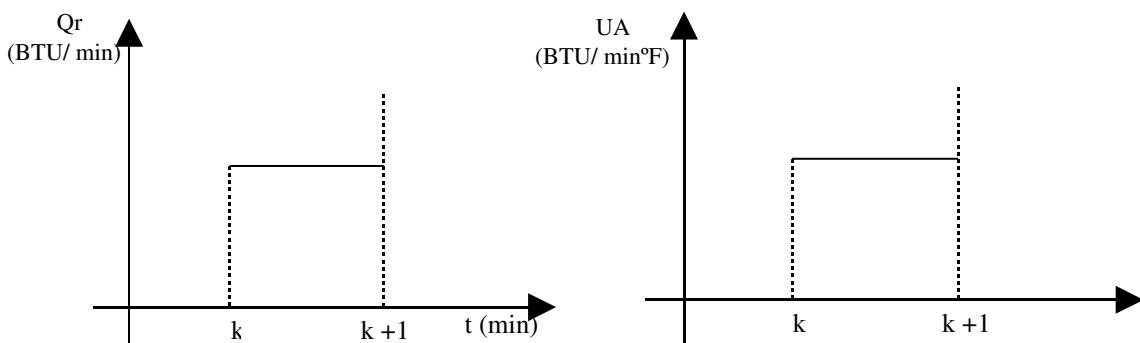
Para o modelo de passo aleatório temos:

$$\frac{dx}{dt} = 0 \quad \int_{x(k)}^{x(k+1)} dx = 0 \int dt \quad x_{(k+1)} - x_k = 0 \quad \boxed{x_{(k+1)} = x_k + \omega} \quad (4.35)$$

Assim:

ω é um processo de ruído branco que descreve a natureza estocástica do parâmetro x . Este modelo assume que o parâmetro não tem nenhuma variação determinística e consequentemente parece imprópria para seguir claramente um parâmetro de acúmulo. Podendo render bons resultados se o tempo de convergência do filtro for muito mais curto que o tempo que leva para o parâmetro mudar significativamente ou se a variação de x é verdadeiramente do tipo passo aleatório. Se não considerarmos o acumulo um processo de passo aleatório este esquema conduzirá a estimativas parciais (VALLIÈRE & BONVIN, 1990c).

Aplicando o modelo de passo aleatório para o valor de Q_r e UA temos:



t (min)

$$\frac{d\bar{x}^s}{dt} = 0 + \omega_p$$

Discretizando Qr e UA no tempo tk vem:

$$Qr_{k+1} = Qr_k + \omega_p \quad UA_{k+1} = UA_k + \omega_p \quad (4.36)$$

Assim as matrizes $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$ e os vetores \underline{d} , \underline{x}^d , \underline{x}^s , para o modelo de passo aleatório

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{(\dot{m}_M C p_M + UA + UA_{per})}{m_R C_R} & \frac{UA}{2} \\ \frac{UA}{Wc_j} & -\left(\frac{UA}{2} + F_w C p_w\right) \end{bmatrix} \quad \underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \frac{(T_j + T_{ji})}{2} - T_R & \frac{1}{m_R C_R} \\ T_R - \frac{(T_j + T_{ji})}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

(4.37) (4.38)

$$\underline{d} = \begin{bmatrix} \left(T_R - \frac{T_j}{2}\right) UA + (\dot{m}_M C p_M + UA_{per}) T_{amb} \\ m_R C_R \\ F_w C p_w T_{ji} - \left(T_R - \frac{T_j}{2}\right) UA \end{bmatrix} \quad \underline{x}^d = \begin{bmatrix} T_R(t) \\ T_j(t) \end{bmatrix} \quad \underline{x}^s = \begin{bmatrix} UA(t) \\ Q_R(t) \end{bmatrix} \quad (4.39)$$

Portanto, aplicando as equações pertinentes ao filtro de Kalman estendido (4.11 - 4.27) obtemos a matriz global para o modelo de passo aleatório.

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \underline{x}^s \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \phi_{11} & \phi_{12} & \theta_{13} & \theta_{14} \\ \phi_{21} & \phi_{22} & \theta_{23} & \theta_{24} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \underline{0} & \underline{0} & \underline{I} & \underline{0} \end{bmatrix}_k \cdot \begin{bmatrix} Tr \\ Tj \\ UA \\ Qr \end{bmatrix} \quad (4.40)$$

(4.41)

Considerando que somente as temperaturas do reator e da jaqueta são medidas o modelo para estas medidas seria representada pela equação 4.12 com matriz $\underline{\underline{H}}$, a seguir:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

Obs:

Embora T_{ji} e F_w também sejam medidos na mesma freqüência, entram nesta formulação como parâmetros e não como estado.

4.3.2 – Modelo de rampa aleatória (random ramp)

Na visão de VALLIÈRE & BONVIN, 1990c, o modelo de rampa aleatória mostrou-se experimentalmente recompensador, já que os valores aleatórios pertinentes ao (α) são estimados junto com o estado do reator e que se torna mais fácil um algoritmo de identificação para estimar dois parâmetros que se comportam de acordo com um modelo dinâmico que um para o qual o modelo é desconhecido.

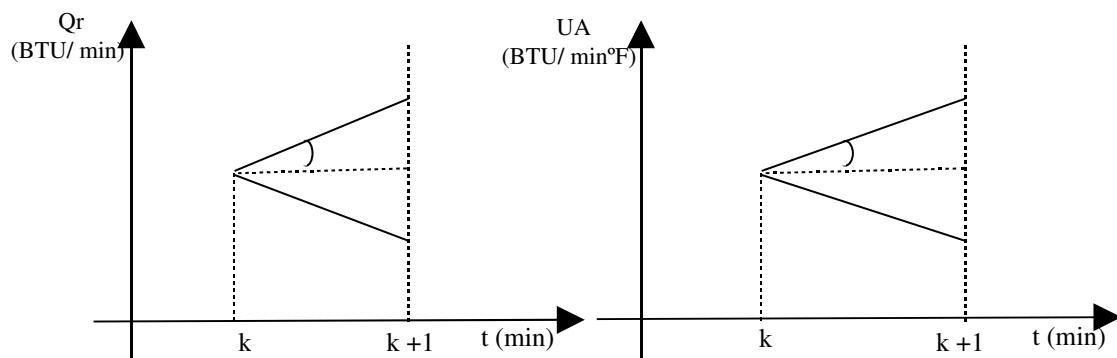
$$\frac{dx}{dt} = \alpha \quad \int_{x(k)}^{x(k+1)} dx = \alpha \int_k^{k+1} dt \quad x_{k+1} - x_k = \alpha(k+1 - k) \quad \boxed{x_{k+1} = \alpha \cdot \Delta h + x_k} \quad (4.43)$$

Discretizando em t_k temos:

$$\frac{d\alpha}{dt} = 0 \quad \int_{\alpha(k)}^{\alpha(k+1)} d\alpha = 0 \int dt \quad \alpha_{(k+1)} - \alpha_k = 0 \quad \boxed{\alpha_{(k+1)} = \alpha_k + \omega_p} \quad (4.44)$$

Aplicando o modelo rampa aleatória o modelo para UA e Q_r é:

$$\frac{d\underline{x}^s}{dt} = \underline{\alpha} \quad \frac{d\alpha}{dt} = 0 + \omega_p \quad (4.45)$$



Discretizando Qr e UA no tempo t_k vem:

$$Qr_{k+1} = \alpha_{(Qr)} h + Qr_k \quad UA_{k+1} = \alpha_{(UA)} h + UA_k \quad (4.46)$$

$$\alpha_{(Qr)} = \alpha_k + \omega_p \quad \alpha_{(UA)} = \alpha_k + \omega_p \quad (4.47)$$

Assim as matrizes $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$ e os vetores \underline{d} , \underline{x}^d , \underline{x}^s , para o modelo de rampa aleatória.

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{(\dot{m}_M C p_M + UA + UA_{per})}{m_R C_R} & +\frac{UA}{2} & \frac{(T_j + T_{ji})}{2} - T_R & +\frac{1}{m_R C_R} \\ \frac{UA}{W_{cj}} & -\frac{\left(\frac{UA}{2} + F_w C p_w\right)}{W_{cj}} & T_R & -\frac{(T_j + T_{ji})}{2} \\ & & \frac{T_R}{W_{cj}} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.48) \quad (4.49)$$

$$\underline{d} = \begin{bmatrix} \left(T_R - \frac{T_j}{2}\right) UA + (\dot{m}_M C p_M + UA_{per}) T_{amb} \\ m_R C_R \end{bmatrix} \quad \underline{x}^d = \begin{bmatrix} T_R(t) \\ T_j(t) \end{bmatrix} \quad \underline{x}^s = \begin{bmatrix} UA(t) \\ Qr(t) \\ \alpha u \\ \alpha q \end{bmatrix}$$

Portanto, aplicando as equações pertinentes ao Filtro de Kalman estendido (4.11 - 4.27) obtemos a matriz global para o modelo de rampa aleatória, é dada por:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \phi_{11} & \phi_{12} & \phi_{13} & \phi_{14} & 0 & 0 \\ \phi_{21} & \phi_{22} & \phi_{23} & \phi_{24} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_k \begin{bmatrix} Tr \\ Tj \\ UA \\ QR \\ \alpha u \\ \alpha q \end{bmatrix} \quad (4.50)$$

Onde a matriz $\underline{\underline{\Omega}}_k$ no tempo t_k é dada por:

$$\underline{\underline{\Omega}}_k = \begin{bmatrix} \underline{\underline{\Phi}}_k & \underline{\underline{\Theta}}_k & \underline{\underline{O}} \\ \underline{\underline{O}} & \underline{\underline{I}} & \underline{\underline{h1}} \\ \underline{\underline{O}} & \underline{\underline{O}} & \underline{\underline{I}} \end{bmatrix} \quad (4.51)$$

Considerando que somente as temperaturas do reator e da jaqueta são medidas o modelo para estas medidas seria representada pela equação 4.12 com matriz $\underline{\underline{H}}$, a seguir:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.52)$$

4.3.3 – Modelo exponencial

A estrutura para o modelo exponencial parte da premissa do conhecimento de como os termos estocásticos se comportam. Daí a matriz $\underline{\underline{A}}$ ser composta totalmente por valores presumidamente conhecidos e a matriz $\underline{\underline{B}}$ está associada ao termos estocásticos.

Comportamento para UA e Au.

$$\frac{dUA}{dt} = Au \cdot UA \quad (4.53)$$

$$\int_k^{k+1} \frac{dUA}{UA} = Au \int_k^{k+1} dt$$

$$\ln(UA)|_{k+1} - \ln(UA)|_k = Au \cdot (t_{k+1} - t_k)$$

$$\ln\left(\frac{UA_{k+1}}{UA_k}\right) = Au \cdot \Delta t$$

$$\frac{UA_{k+1}}{UA_k} = \exp(Au \cdot \Delta t)$$

$$UA_{k+1} = UA_k \exp(Au \cdot \Delta t) \longrightarrow \text{Comportamento não linear} \quad (4.54)$$

Comportamento para Q_r e A_q .

$$\frac{dQr}{dt} = Aq \cdot Qr \quad (4.55)$$

$$\int_k^{k+1} \frac{dQr}{Qr} = Aq \int_k^{k+1} dt$$

$$\ln(Qr)|_{k+1} - \ln(Qr)|_k = Aq \cdot (t_{k+1} - t_k)$$

$$\ln\left(\frac{Qr_{k+1}}{Qr_k}\right) = Aq \cdot \Delta t$$

$$\frac{Qr_{k+1}}{Qr_k} = \exp(Aq \cdot \Delta t)$$

$$\longrightarrow \text{Comportamento não linear} \quad (4.56)$$

Podemos então verificar que este modelo não é linear, portanto devemos escrever a nova estrutura de forma exponencial da seguinte maneira:

$$\frac{dT_r}{dt} = f_1(T_r, T_j, UA, Qr)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = f_2(T_r, T_j, UA, Qr)$$

$$\frac{dUA}{dt} = f_1(Au, UA)$$

$$\frac{dQr}{dt} = f_2(Aq, Qr)$$

Linearizando UA, Qr e os coeficientes Aq e Au através de uma série de Taylor truncada no segundo membro temos:

$$\begin{aligned}\frac{dUA}{dt} &= Au(k)UA(t) + Au(t)UA(k) - UA(k)Au(k) \\ \frac{dQr}{dt} &= Aq(k)Qr(t) + Aq(t)Qr(k) - Qr(k)Aq(k)\end{aligned}\quad (4.58)$$

Desta forma as novas matrizes $\underline{\underline{A}}$ e $\underline{\underline{B}}$ bem como os vetores \underline{d} , \underline{x}^d , \underline{x}^s ficam:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} \frac{(m_M C p_M + UA + UA_{per})}{m_R C_R} & \frac{UA}{2} & \frac{(T_j + T_{ji})}{2} - T_R & \frac{1}{m} \\ \frac{UA}{W_{cj}} & \left(\frac{UA}{2} + F_w C p_w \right) & T_R - \frac{(T_j - T_{ji})}{W_{cj}} & \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ UA & 0 \\ 0 & Qr \end{bmatrix} \\ 0 & 0 & Au & \\ 0 & 0 & 0 & Au \\ 0 & 0 & 0 & Aq \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^d = \begin{bmatrix} T_R(t) \\ T_j(t) \\ UA(t) \\ Qr(t) \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^s = \begin{bmatrix} Au(t) \\ Aq(t) \end{bmatrix}$$

Portanto, aplicando as equações pertinentes ao filtro de Kalman estendido (4.11 - 4.27) obtemos a matriz global para o modelo exponencial, é dada por:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \phi_{11} & \phi_{12} & \phi_{13} & \phi_{14} & 0 & 0 \\ \phi_{21} & \phi_{22} & \phi_{23} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Au & 0 & UA & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Aq & 0 & Qr \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_k \begin{bmatrix} Tr \\ Tj \\ UA \\ Qr \\ Au \\ Aq \end{bmatrix} \quad (4.59)$$

Onde a matriz $\underline{\underline{\Phi}}$ no tempo t_k é dada por:

$$\underline{\underline{\Phi}} = \begin{bmatrix} \Phi & \Theta \\ 0 & I \end{bmatrix} \quad (4.60)$$

Considerando que somente as temperaturas do reator e da jaqueta são medidas o modelo para estas medidas seria representada pela equação 4.12 com matriz $\underline{\underline{H}}$, a seguir:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.61)$$

4.4 – Modelos Híbridos

Uma vez que já apresentamos as estruturadas das matrizes $\underline{\underline{A}}$ e $\underline{\underline{B}}$ e os vetores \underline{d} , \underline{x}^d , \underline{x}^s que compõem os modelos de passo aleatório, rampa aleatória e o modelo exponencial, com objetivo de analisar de forma mais eficiente os modelos aqui propostos e verificar uma maior interação entre eles, é apresentado neste momento somente a estrutura das matrizes globais que compõem o filtro de Kalman para os modelos híbridos de passo, rampa e exponencial.

4.4.1 – Modelos de passo aleatório (Qr) e rampa aleatória (UA)

Esta estrutura tem como base para o calculo do calor gerado (Qr) o modelo de passo aleatório e para o coeficiente de transferência de calor (UA) o modelo de rampa aleatória. Desta forma utilizando as equações de (4.11 - 4.27) na estrutura do filtro de Kalman estendido temos:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} & \Theta_{13} & \Theta_{14} & 0 \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} & \Theta_{23} & \Theta_{24} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & h \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_k \cdot \begin{bmatrix} Tr \\ Tj \\ UA \\ Qr \\ \alpha u \end{bmatrix} \quad (4.62)$$

Onde a matriz $\underline{\underline{\Omega}}$ global no tempo k é dada por:

$$\underline{\underline{\Omega}} = \begin{bmatrix} \Phi & \Theta & O \\ O & I & h1 \end{bmatrix} \quad (4.63)$$

Considerando que somente as temperaturas do reator e da jaqueta são medidas o modelo para estas medidas seria representada pela equação 4.12 com matriz $\underline{\underline{H}}$, a seguir:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.64)$$

4.4.2 – Modelos de passo aleatório (UA) e rampa aleatória (Qr)

Esta estrutura tem como base para o calculo do coeficiente de transferência de calor (UA) o modelo de passo aleatório e para o calculo do calor gerado (Qr) o modelo de rampa aleatória.

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} & \Theta_{13} & \Theta_{14} & 0 \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} & \Theta_{23} & \Theta_{24} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_k \cdot \begin{bmatrix} Tr \\ Tj \\ UA \\ Qr \\ \alpha q \end{bmatrix} \quad (4.65)$$

Onde a matriz $\underline{\underline{\Omega}}$ no tempo k é dada por:

$$\underline{\underline{\Omega}} = \begin{bmatrix} \Phi & \Theta & O \\ O & I & h1 \end{bmatrix} \quad (4.66)$$

Considerando que somente as temperaturas do reator e da jaqueta são medidas o modelo para estas medidas seria representada pela equação 4.12 com matriz $\underline{\underline{H}}$, a seguir:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.67)$$

4.4.3 – Modelo exponencial (Qr) e passo aleatório (UA)

Para esta nova condição proposta, consideramos como estados determinísticos T_r , T_j , Q_r e como estados estocásticos U_A , q onde as duas ultimas variáveis representam respectivamente coeficiente de transferência de calor e o coeficiente angular. O que nos leva a determinação de novas matrizes $\underline{\underline{A}}$ e $\underline{\underline{B}}$ bem como os vetores \underline{d} , \underline{x}^d , \underline{x}^s sendo elas:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{(\dot{m}_M C_p_M + U_A + U_{A_{per}})}{m_R C_R} & \frac{U_A}{2} & \frac{1}{m_R C_R} \\ \frac{U_A}{W_{cj}} & -\frac{(U_A/2 + F_w C_p_w)}{W_{cj}} & 0 \\ 0 & 0 & Aq \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \frac{(T_j + T_{ji}) - T_r}{2} & 0 \\ \frac{T_r - (T_j + T_{ji})}{W_{cj}} & 0 \\ 0 & Q_r \end{bmatrix} \quad \underline{d} = \begin{bmatrix} \frac{\left(T_r - \frac{T_j}{2}\right) U_A + (\dot{m}_M C_p_M + U_{A_{per}}) T_{amb}}{m_R C_R} \\ \frac{F_w C_p_w T_{ji} - \left(T_r - \frac{T_j}{2}\right) U_A}{W_{cj}} \\ -Q_r A q \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^d = \begin{bmatrix} T_r \\ T_j \\ Q_r \end{bmatrix} \quad \underline{x}^s = \begin{bmatrix} U_A \\ \alpha q \end{bmatrix}$$

Portanto, aplicando as equações pertinentes ao filtro de Kalman estendido (4.11 - 4.27) obtemos a matriz global para o modelo exponencial para Q_r e de passo aleatório para U_A , que é dada por:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} & \Phi_{13} & \Theta_{14} & 0 \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} & 0 & \Theta_{24} & 0 \\ 0 & 0 & Aq & 0 & Q_r \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_k \begin{bmatrix} T_R \\ T_j \\ Q_r \\ U_A \\ Aq \end{bmatrix} \quad (4.68)$$

Assim a matriz $\underline{\underline{A}}$ no tempo t_k é dada por:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} \Phi & \Theta \\ 0 & I \end{bmatrix} \quad (4.69)$$

Considerando que somente as temperaturas do reator e da jaqueta são medidas o modelo para estas medidas seria representada pela equação 4.12 com matriz $\underline{\underline{H}}$, a seguir:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.70)$$

4.4.4 – Modelo exponencial (Q_r) e rampa aleatória (U_A)

Para esta nova condição proposta consideramos como variáveis determinísticas T_R , T_j , Q_r e como variáveis estocásticas U_A , Aq e Aua onde as duas ultimas variáveis representam respectivamente o coeficiente angular de Q_r e U_A . O que nos leva a determinação de novas matrizes $\underline{\underline{A}}$ e $\underline{\underline{B}}$ bem como os vetores \underline{d} , \underline{x}^d , \underline{x}^s sendo elas:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{(m_M C_p_M + U_A + U_{A_{per}})}{m_R C_R} & \frac{U_A}{2 m_R C_R} & \frac{1}{m_R C_R} \\ \frac{U_A}{W_{cj}} & \frac{\left(\frac{U_A}{2} + F_w C_p_w\right)}{W_{cj}} & 0 \\ 0 & 0 & Aq \end{bmatrix} \quad (4.71)$$

$$\underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \frac{(T_j + T_{ji})}{2} - T_r \\ \frac{T_r - (T_j + T_{ji})}{W_{cj}} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \underline{d} = \begin{bmatrix} \left(T_r - \frac{T_j}{2} \right) U_A + (\dot{m}_M C_p_M + U A_{per}) T_{amb} \\ \frac{F_w C p_w T_{ji} - \left(T_r - \frac{T_j}{2} \right) U_A}{W_{cj}} \\ -Q_r A q \end{bmatrix}$$

$$\underline{x}^d = \begin{bmatrix} T_r \\ T_j \\ Q_r \end{bmatrix} \quad \underline{x}^s = \begin{bmatrix} U_A \\ A q \\ \alpha u \end{bmatrix}$$

Portanto, aplicando as equações pertinentes ao Filtro de Kalman estendido (4.11 - 4.27) obtemos a matriz global para o modelo exponencial para (Qr) e rampa aleatória para (UA), que é dada por:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \phi_{11} & \phi_{12} & \theta_{13} & \theta_{14} & 0 & 0 \\ \phi_{21} & \phi_{22} & 0 & \theta_{24} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A q & 0 & Q_r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_k \cdot \begin{bmatrix} T_r \\ T_j \\ Q_r \\ U_A \\ A q \\ \alpha u \end{bmatrix} \quad (4.72)$$

Assim a matriz $\underline{\underline{\Sigma}}$ no tempo k é dada por:

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \begin{bmatrix} \Phi & \Theta \\ O & h1 \end{bmatrix} \quad (4.73)$$

Considerando que somente as temperaturas do reator e da jaqueta são medidas o modelo para estas medidas seria representada pela equação 4.12 com matriz $\underline{\underline{H}}$, a seguir:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.74)$$

4.5 – Modelo de Passo aleatório com T_{ji} variando no tempo

Até o momento em nosso estudo para a temperatura do fluido circulante na jaqueta era assumido a média da temperatura ou seja, $\bar{T}_j = \frac{(T_j + T_{ji})}{2}$. Com objetivo de

investigar uma nova estratégia optamos por estudar o comportamento de T_{ji} não como parâmetro e sim como um estado estocástico. Portanto, partindo do balanço de energia do reator e da jaqueta temos uma nova linearização para o modelo de passo aleatório. O que nos remete a novas matrizes de $\underline{\underline{A}}$ e $\underline{\underline{B}}$ bem como os vetores \underline{d} , \underline{x}^d , \underline{x}^s sendo elas:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{(m_M C_p_M + UA + UA_{per})}{m_R C_R} & \frac{UA}{2 m_R C_R} \\ \frac{UA}{W_{cj}} & -\frac{\frac{UA}{2} + F_w C_p_w}{W_{cj}} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \frac{UA}{2 m_R C_R} & -\frac{(T_R - \frac{T_j}{2} - \frac{T_{ji}}{2})}{m_R C_R} & \frac{1}{m_R C_R} \\ \frac{F_w C_p_w - \frac{UA}{2}}{W_{cj}} & \frac{(T_R - \frac{T_j}{2} - \frac{T_{ji}}{2})}{W_{cj}} & 0 \end{bmatrix} \quad \underline{x}^d = \begin{bmatrix} T_R \\ T_j \end{bmatrix}$$

$$\underline{d} = \begin{bmatrix} \frac{(m_M C_p_M + UAp)T_{amb} + (T_R - \frac{T_j}{2} - \frac{T_{ji}}{2})UA}{m_R C_R} \\ \frac{(-T_R + \frac{T_j}{2} + \frac{T_{ji}}{2})UA}{W_{cj}} \end{bmatrix} \quad \underline{x}^s = \begin{bmatrix} T_{ji} \\ UA \\ Q_R \end{bmatrix}$$

Portanto, aplicando as equações pertinentes ao Filtro de Kalman estendido (4.11 - 4.27) obtemos a matriz global para o modelo de passo aleatório onde T_{ji} é estado estocástico. Ou seja, T_{ji} varia no tempo, que é dada por:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix}_{k+1} = \begin{bmatrix} \phi_{11} & \phi_{12} & \theta_{13} & \theta_{14} & \theta_{15} \\ \phi_{21} & \phi_{22} & \theta_{23} & \theta_{24} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_k \cdot \begin{bmatrix} Tr \\ Tj \\ Tji \\ UA \\ Qr \end{bmatrix} \quad (4.74)$$

Assim a matriz $\underline{\underline{H}}$ no tempo k é dada por:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} \Phi & \Theta \\ O & I \end{bmatrix} \quad (4.75)$$

Considerando que somente as temperaturas do reator e da jaqueta são medidas o modelo para estas medidas seria representada pela equação 4.12 com matriz $\underline{\underline{H}}$, a seguir:

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.76)$$

5. ANÁLISE DOS RESULTADOS.

5.1 Dados Gerados: Simulação do Reator.

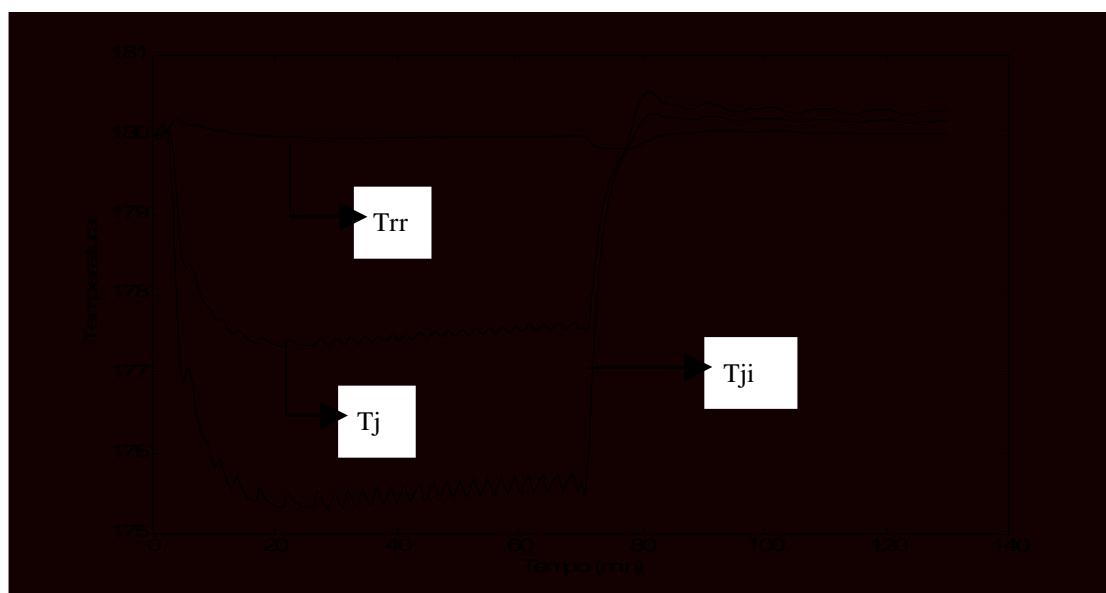
Nas estratégias, concebidas a partir do filtro de Kalman as variáveis Tr, Tj foram consideradas como estados determinísticos e disponíveis a cada tempo de amostragem, e Qr, UA como estados estocásticos. As variáveis como Fw, T_{amb}, UA_{per} bem como, Cr, Cpw, Wcj, foram tomadas como constantes e as variáveis relacionadas com a alimentação do reator seguiram exatamente os respectivos procedimentos operacionais, expostos no artigo (CHYLLA & HASSE, 1992). Em relação ao Cr embora o seu valor seja função do andamento da reação, logo, variando no tempo, para efeito de estimativa para análise foi considerada como constante, tomada em seu valor médio.

Durante a leitura do artigo motivador foi observado um erro nas equações que compõem o balanço de energia da jaqueta (Eq. 3.17), o mesmo, foi corrigido por Almeida, 1997 para manter a consistência com o sistema descrito. Os autores Chylla & Hasse, 1993 fizeram a correção do artigo original utilizando novos valores para o controle proposto.

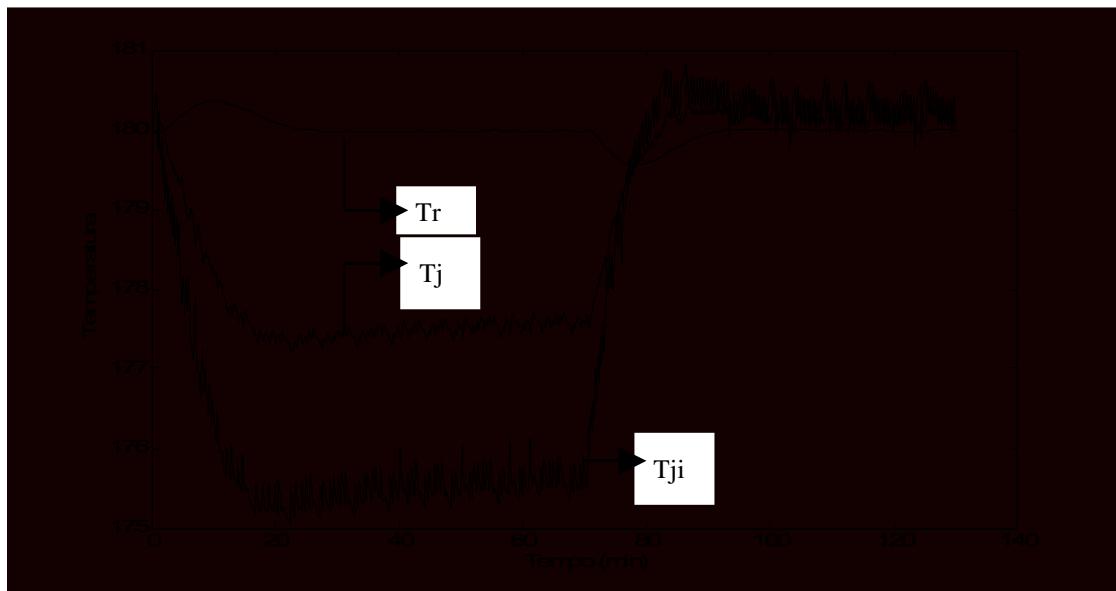
O controlador corrigido por Almeida apresenta uma influencia suave nos perfis de temperatura, enquanto que o controlador corrigido por Chylla & Hasse apresenta uma influencia mais ativa nos perfis de temperatura. Assim, com objetivo de avaliar a influencia dos sistemas de controle sobre o filtro de Kalman, são testados os dois controladores.

Optou-se por apresentar os gráficos do perfil de temperatura dos controladores, com linhas contínuas para facilitar a observação de como variam as temperaturas de T_r , T_j , e T_{ji} tanto para o produto A como para o produto B.

Gráficos das temperaturas para produto A.

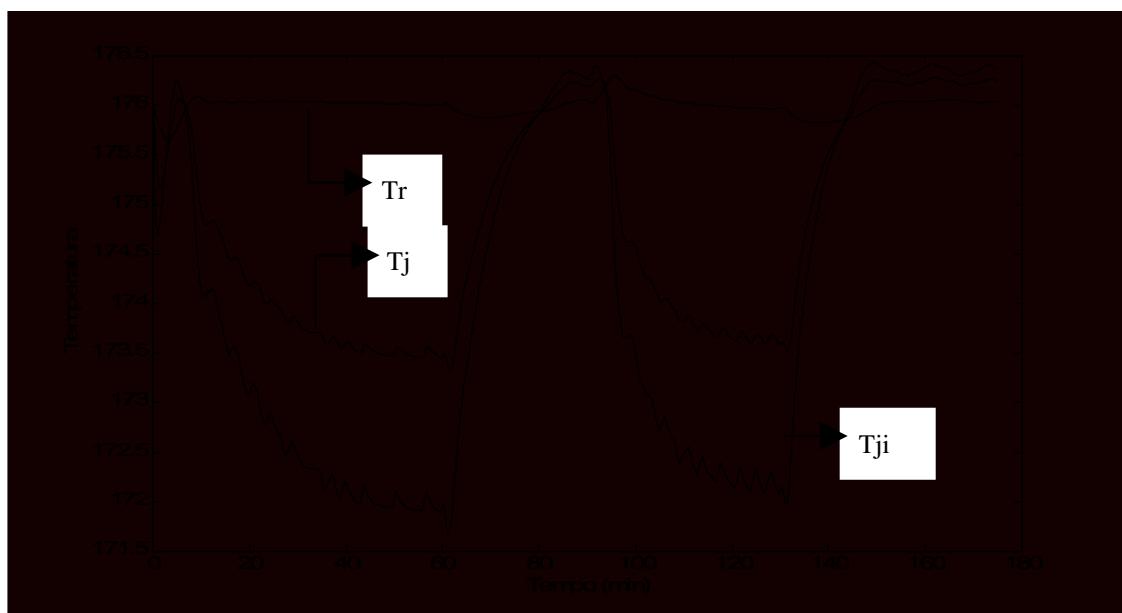


**Fig. 5.1 – Controlador mais suave. produto A;
Temperaturas (°F).**

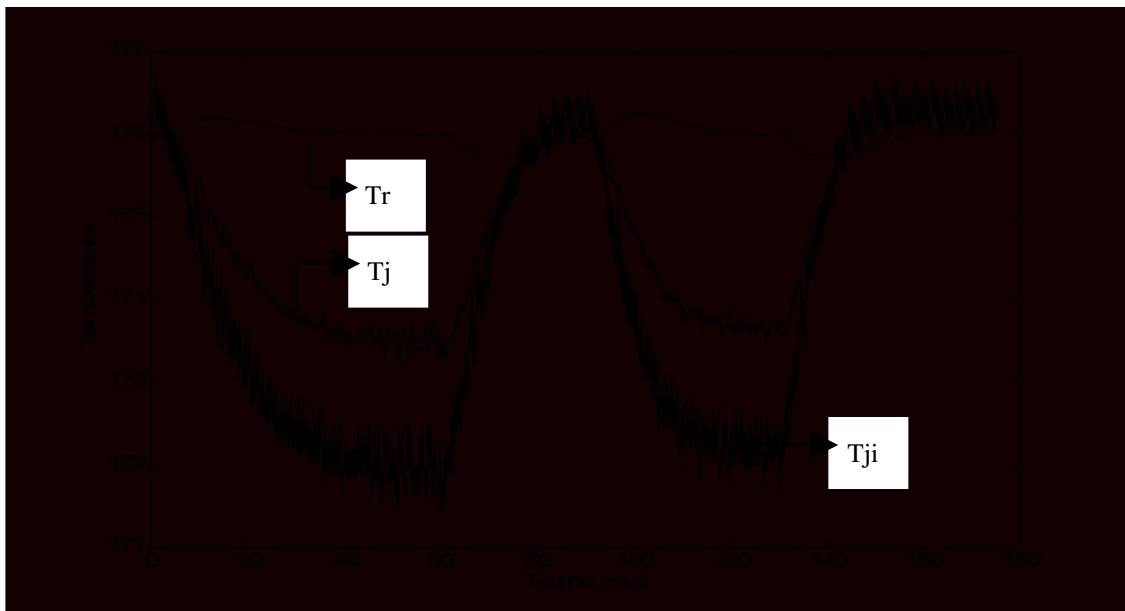


**Fig. 5.2 – Controlador mais ativo. produto A;
Temperaturas (°F).**

Gráficos das temperaturas para produto B.



**Fig. 5.3 – Controlador mais suave. produto B;
Temperaturas (°F).**



**Fig. 5.4 – Controlador mais ativo. produto B;
Temperaturas (°F).**

Neste modelo para o balanço de energia em torno do reator está totalmente definido e para estimação admite-se a hipótese de media das temperaturas tanto para o conteúdo do reator como para a jaqueta de aquecimento/resfriamento, considera-se ainda, que a parede do reator se encontra à mesma temperatura da jaqueta.

Primeiramente o reator é carregado com uma quantidade estipulada de água e sólidos iniciais, ambos em temperatura ambiente, e elevado à temperatura especificada de *setpoint*, sendo o reator alimentado com monômeros à vazão de lb/min. O tempo de amostragem é de 0.1 min (6 segundos), e os procedimentos para a condução da reação seguem fielmente o roteiro apresentado no artigo motivador e são apresentado a seguir:

Produto A,

- Alimentação de monômero a uma taxa de 1,0 lb/min durante 70 minutos;
- Ao termo do período de adição de monômero, o reator é mantido à temperatura de reação por mais 60 minutos, quando a operação se conclui.

Produto B,

- Alimentação de monômero a uma taxa de 0,8 lb/min durante 60 minutos;
- Ao termo do primeiro período de adição, manter a temperatura da reação por 30 minutos.
- No segundo período de adição alimentação de monômero a uma taxa de 0,8 lb/min por 40 min;
- Ao termo do segundo período de adição manter o reator por mais 45 minutos. Quando a operação se encerra.

As unidades aqui utilizadas apesar de não serem de uso comum foram mantidas durante todo o trabalho para manter o vínculo com o artigo de origem.

Tab. 5.1 – Unidades adotadas para toda dissertação.

Variável	Unidade
tempo	min
massa	lb
U	BTU/min°Fft ²
A	ft ²
Q _r	BTU/min
Calor específico	BTU/lb°F
Temperaturas	°F

5.2 Metodologia de Análise.

Independente da estratégia analisada, o objetivo da estimativa se volta para obtenção direta dos valores do calor gerado na reação (Q_r) e o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA). Em todos os casos foi utilizado o filtro de Kalman estendido uma vez que as equações de balanço de energia não são lineares. O ajuste efetivo do filtro se deu ao longo de um árduo trabalho de tentativas e análise dos dados gerados. A cada teste executado na matriz de ajuste os valores encontrados para os erros absolutos e relativos eram confrontados com o resultado do teste anterior. Assim, o processo de ajuste foi sendo administrado até que os resultados não mais sofressem alterações significativas para os valores de Q_r e UA. Os erros absolutos e relativos foram determinados utilizando as equações abaixo:

$$E_{ab} = |V_r - V_{est}| \quad (5.1) \quad E_{re} = \frac{|V_r - V_{est}|}{V_r}$$

(5.2)

onde:

E_{ab} = Erro absoluto V_r = Valor real E_{re} = Erro relativo V_{est} = Valor estimado

O erro absoluto e o erro relativo foram também analisados com base nos seus valores médios mediante os seguintes modelos:

$$E_{abm} = \frac{\sum |V_r - V_{est}|}{N} \quad (5.3)$$

$$E_{rlm} = \frac{\sum |V_r - V_{est}|}{V_r} \quad (5.4)$$

onde:

E_{abm} = Erro absoluto médio, E_{rlm} = Erro relativo médio, N = Número de estimativas.

Foram calculados os erros absolutos e relativos para todo o período de batelada. Sendo usada como estratégia para evitar a divisão por zero a colocação do valor 1 para o calor da reação quando este assumia um valor menor que 1, vale ressaltar que esta estratégia não influencia substancialmente no cálculo do erro total.

Para efeito de comparação optou-se por tabelar também os valores dos erros somente para o período em que o calor da reação era maior que o valor 1.

Com objetivo de acompanhar o andamento e o comportamento dos valores de Q_r e UA durante todo período de batelada enfocamos a análise dos erros nos períodos em que ocorre variação na alimentação de monômero, assim:

Produto A:

(0 a 20min) período inicial de alimentação de monômero;

(35 a 50 min) intervalo intermediário onde a alimentação de monômero é

constante;

(65 a 85 min) período em que encerra a adição de monômero;

(100 a 120min) último período de análise, região onde não ocorre reação;

Produto B:

(0 a 20 min) início da primeira alimentação de monômero;

(50 a 70 min) período em que encerrava a primeira alimentação de monômero;

(80 a 100 min) início da retomada de alimentação de monômero;

(120 a 140 min) último período de análise, região onde não ocorre reação;

5.3 – Avaliação das Estratégias.

Julgou-se ser oportuno apresentar todas as estratégias para cada modelo do filtro, na seguinte ordem: passo aleatório, rampa aleatória, exponencial, e os modelos híbridos. Por fim, o modelo de passo aleatório onde T_{ji} é visto como estado estocástico.

Para facilitar a visualização dos dados: é mostrado primeiro as tabelas dos parâmetros adotados para as matrizes diagonais, em seguida, os erros absolutos e relativos para batelada total (130 mim produto A; 175 min produto B), e para o período em que o calor da reação é maior que 1, (70 mim produto A; 130 min produto B) e a conversão obtida na batelada de cada produto. Também, são apresentados os erros em cada período em que ocorre variação na alimentação de monômero em cada produto. Por fim, os gráficos que confrontam os valores reais com os valores estimados de Q_r e U_A , bem como, a conversão para os produtos A e B. Os valores iniciais para os parâmetros durante todas as simulações dos produtos são:

Produto A

$$Tr, Tj, \quad T_{ji} = 180$$

$$Q_r = 0.0$$

$$U_A = 67$$

Produto B

$$Tr, Tj, T_{ji} = 176$$

$$Q_r = 0.0$$

$$U_A = 54$$

Vale ressaltar que para os modelos de passo aleatório, rampa aleatória e exponencial os gráficos dos erros efetivos e relativos são apresentados.

5.3.1 – Modelo de passo aleatório (random walk).

Os parâmetros da matriz diagonal R utilizada para ajuste do filtro são respectivamente Tr , Tj , U_A , Q_r , e as figuras 5.6 e 5.8 mostram graficamente o comportamento dos erros para os produtos A e B.

Tab. 5.2 – Parâmetros de ajuste do filtro. Modelo passo aleatório.

PARAMETROS		PRODUTOS	
		A	B
Matrizes Diagonais			
P(0/0)		[0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0]
R		[1e-6, 1e-6, 5e-5, 6]	[1e-6, 1e-6, 1e-3, 6]
R		[0, 0]	[0, 0]

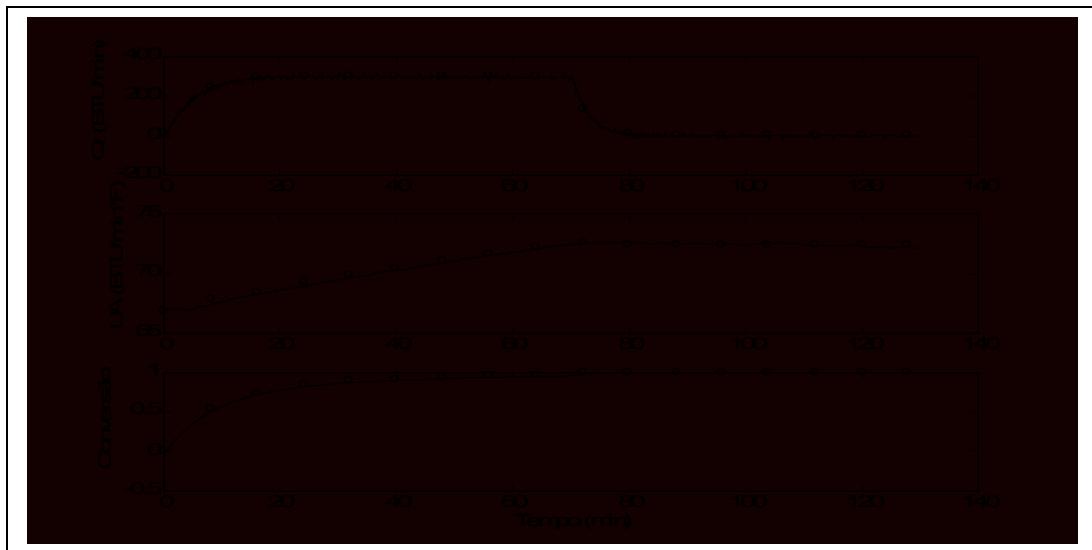
Tab. 5.3 – Erro geral e parcial médio. Modelo passo aleatório.

Erro Médio Qr	PRODUTOS		Erro Médio UA	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	3,9970	5,7306	Absoluto	0,1597	0,2082
Relativo	0,9256	0,5599	Relativo	0,0023	0,0036
	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	4,1472	5,3563	Absoluto	0,1988	0,1701
Relativo	0,0238	0,1004	Relativo	0,0029	0,0030
Conversão produto A (130 min)		Conversão produto B (175 min)			
Absoluto	0,0069		Absoluto	0,0191	
Relativo	0,0166		Relativo	0,0256	

Tab. 5.4 – Erros em intervalos para produto A. Modelo passo aleatório.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	6,2327	0,0554	0,2415	0,0036
35 – 50	3,0364	0,0102	0,1930	0,0027
65 – 85	7,2487	0,7306	0,1114	0,0015

100 – 120	2,2117	2,2117	0,0882	0,0012
-----------	--------	--------	--------	--------



Produto A. Modelo de passo aleatório; (real (o); estimado (-)).

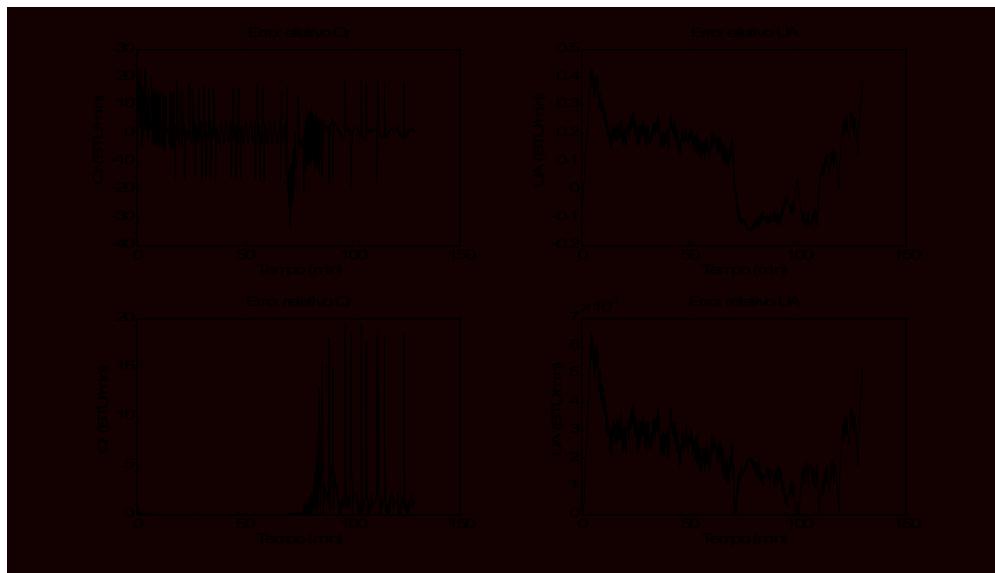


Fig 5.6 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA; produto A. Modelo de passo aleatório.

Tab. 5.5 – Erros em intervalos para produto B. Modelo passo aleatório.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	4,1920	0,0857	0,2906	0,0053
50 – 70	5,2162	0,0324	0,1481	0,0025

80 – 100	10,8573	0,4085	0,2958	0,0051
120 – 140	5,8067	0,0471	0,1568	0,0027

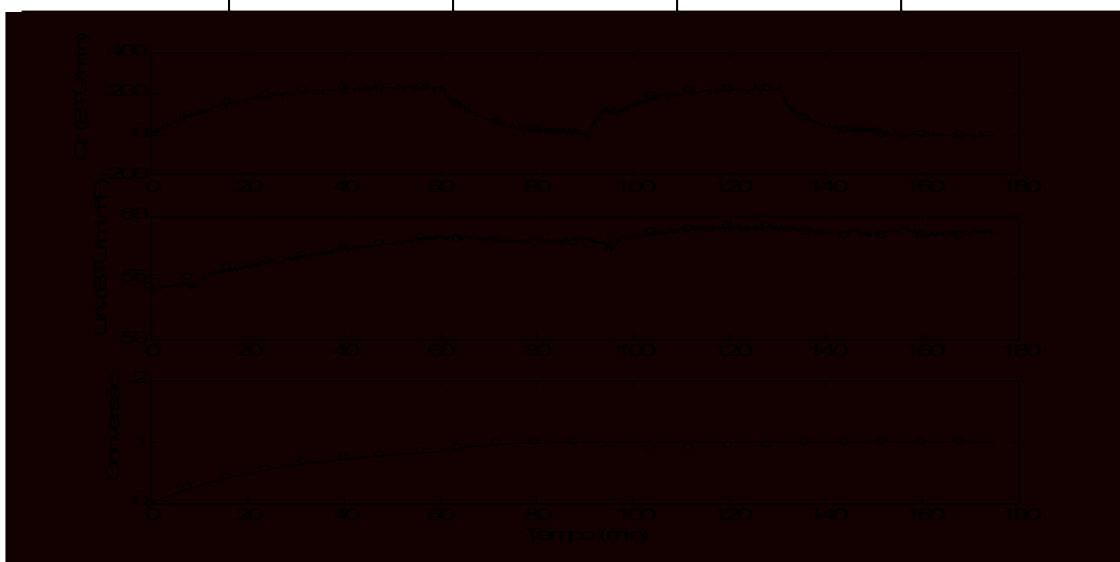


Fig. 5.7 – Calor da reação (Q_r); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto B. Modelo de passo aleatório; (real (o); estimado (-)).

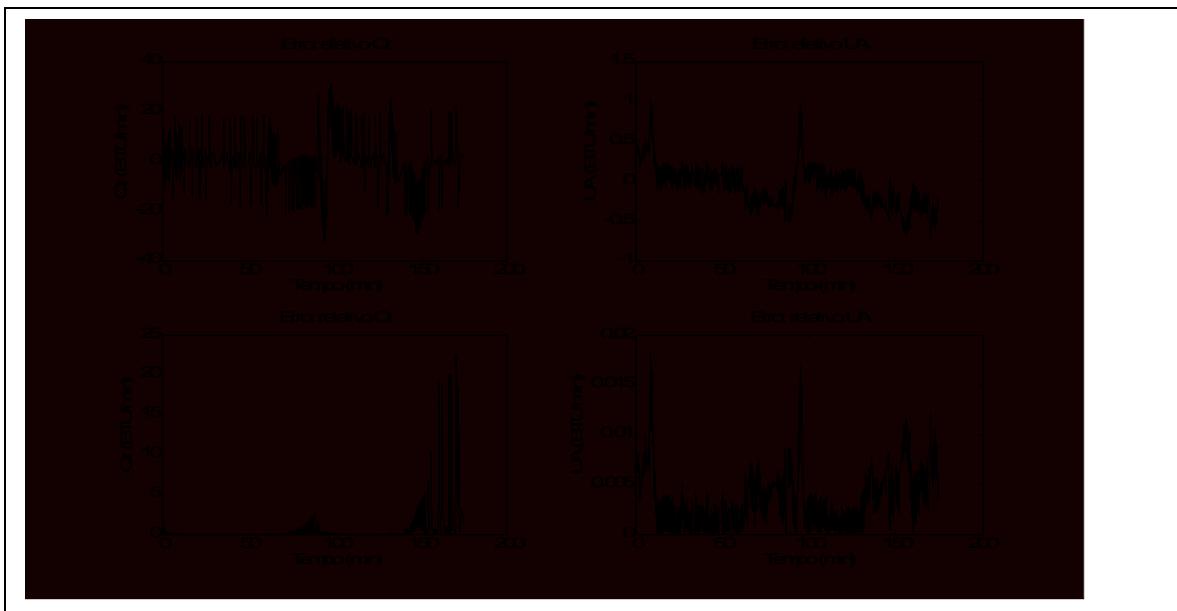


Fig 5.8 – Erro absoluto e relativo para Q_r e UA; produto B. Modelo de passo aleatório.

Por ser o filtro de Kalman um filtro estatístico são necessárias algumas iterações, para que se inicie o acompanhamento efetivo dos valores

reais pelos valores estimados. Este efeito, é perfeitamente visível no início da alimentação do produto A (0 a 20 min; Fig. 5.5) e nas duas alimentações do produto B (0 a 20 min e 80 a 100 min; Fig. 5.7), apresentando-se de forma mais acentuada para os valores estimados para o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA).

No produto A é observado um aumento no erro absoluto e relativo no período de (65 a 85 min; Tab. 5.4) este fato se dá pelo encerramento da adição de monômero, ou seja, o calor da reação tende a zero e o filtro tenta corrigir um valor que já não existe.

O modelo de passo aleatório mantém os valores estimados em torno do valor real durante todos os períodos de alimentação de monômero para os produtos A e B. Nos períodos em que quase nenhuma reação ocorre ou quando Q_r chega a zero a estrutura do modelo do balanço de energia é alterada e o filtro tende atribuir a origem dos erros de predição nos estados medidos, e não nos estados estocásticos estimados simultaneamente. Vale registrar, que este modelo acompanha, muito bem, os valores reais de UA, Q_r e da conversão durante todo período de batelada.

Uma vez que a conversão é dada pela integração do calor da reação, e que este modelo se apresenta com boa performance para os valores estimados de Q_r , os valores da conversão também se apresentam muito bons.

5.3.2 – Modelo de passo aleatório sob ação de ruídos.

Os parâmetros da matriz diagonal R utilizada para ajuste do filtro são respectivamente T_r , T_j , U_A , Q_r , e os ruídos R .

Os resultados agora apresentados estão estimados mediante ação de ruídos nas medidas de temperaturas (T_r , T_j , T_{ji}), onde a variância utilizada para a estratégia de estimação é de 0.08 ($^{\circ}F$)².

Tab. 5.6 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. passo aleatório com ruídos.

PARAMETROS	PRODUTOS	
	A	B
Matrizes Diagonais		
$P(0/0)$	[0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0]
R	[1e-6, 1e-6, 5e-6, 6]	[1e-6, 1e-6, 1e-3, 6]
R	[25e-4, 5e-4]	[25e-3, 2e-3]

Tab. 5.7 – Erro geral e parcial médio. Mod. passo aleatório com ruídos.

Erro Médio Qr	PRODUTOS		Erro Médio UA	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	13,4931	16,5215	Absoluto	1,2766	0,5689
Relativo	3,4957	1,2571	Relativo	0,0179	0,0099
	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	12,7148	15,4861	Absoluto	1,2670	0,5311
Relativo	0,0708	0,2175	Relativo	0,0180	0,0093
Conversão Produto A (130 min)			Conversão Produto B (175 min)		
Absoluto	0,0378		Absoluto	0,0415	
Relativo	0,0688		Relativo	0,0863	

Tab. 5.8 – Erros em intervalos produto A. Mod. passo aleatório com ruídos.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA		Relativo
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo	
00 – 20	21,2390	0,1699	0,8015	0,0118	
35 – 50	8,9091	0,0298	1,5060	0,0213	
65 – 85	24,3068	1,5078	1,4191	0,0196	
100 – 120	10,0744	10,0744	1,2407	0,0171	



Fig. 5.9 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto A. Modelo passo aleatório com ruídos; (real (o); estimado (-)).

Tab. 5.9 – Erros em intervalos produto B. Mod. passo aleatório com ruídos.

Intervalos de estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	17,4702	0,2746	1,0197	0,0184
50 – 70	21,5528	0,1660	0,4012	0,0069
80 – 100	19,9220	0,5708	0,4810	0,0083
120 – 140	27,4223	0,2831	0,2173	0,0037

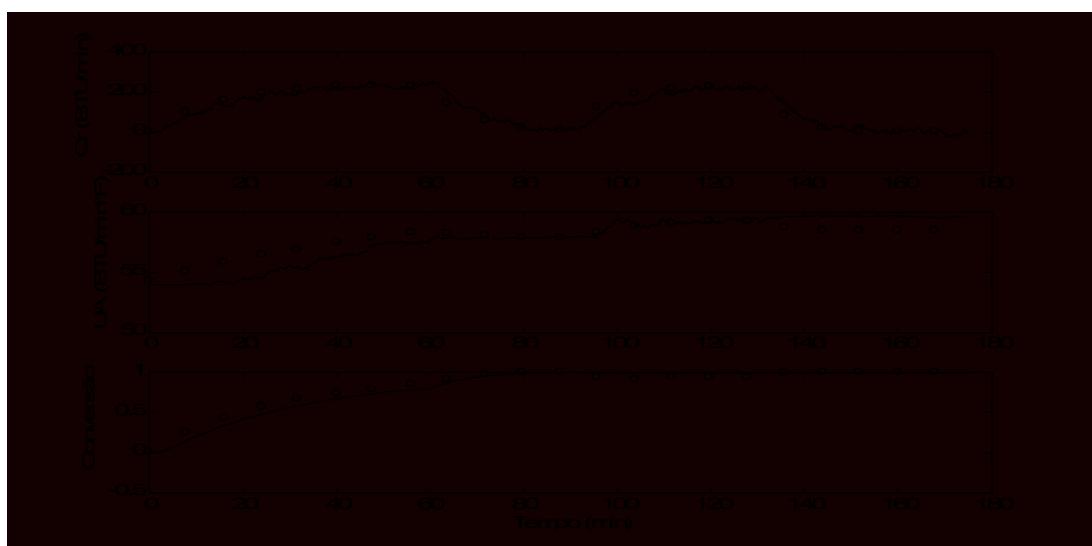


Fig. 5.10 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;

Produto B. Modelo passo aleatório com ruídos; (real (o); estimado (-)).

Neste modelo o efeito de ruídos nas medidas de temperaturas T_r , T_j , T_{ji} faz com que o filtro estime os valores estocásticos do calor da reação (Q_r) em torno dos valores reais. No que se refere ao produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) a estimativa acompanha com defasagem os valores reais porque as ações de ruídos colocam fortes resistências para a adaptação simultânea do filtro, (Fig. 5.9 e 5.10).

Em relação ao cálculo da conversão, tanto para o produto A como para o produto B os mesmos apresentam-se muito bons, mesmo sofrendo uma ação intensa dos ruídos.

5.3.3 – Modelo de passo aleatório com controlador ativo.

Os parâmetros da matriz diagonal R utilizada para ajuste do filtro são respectivamente T_r , T_j , UA, Q_r .

Tab. 5.10 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. de passo com cont. ativo.

PARAMETRO	PRODUTOS	
	A	B
S Matrizes Diagonais		
P(0/0)	[0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0]
R	[1e-6, 1e-6, 4e-6, 6]	[1e-6, 1e-6, 1e-3, 6]
R	[0, 0]	[0, 0]

Tab. 5.11 – Erro geral e parcial médio. Mod. de passo com cont. ativo.

Erro Médio Qr	PRODUTOS		Erro Médio UA	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	7,856	12,0196	Absoluto	0,9703	7,0931
Relativo	2,9042	1,5954	Relativo	0,0135	0,1224
	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	7,1210	10,8386	Absoluto	0,4924	5,6051
Relativo	0,0357	0,1880	Relativo	0,0070	0,0973
Conversão Produto A (130 min)			Conversão Produto B (175 min)		
Absoluto	0,0041		Absoluto	0,0210	
Relativo	0,0130		Relativo	0,0350	

Tab. 5.12 – Erros em intervalos produto A. Mod. de passo com cont. ativo.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	8,4932	0,0700	0,4521	0,0066
35 – 50	6,4728	0,0217	0,5988	0,0085
65 – 85	9,7375	1,0342	1,8511	0,0255
100 – 120	7,6847	7,6847	0,5987	0,0083



Fig. 5.11 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;

Produto A. Modelo de passo com controlador ativo; (real (o); estimado (-)).

Tab. 5.13 – Erros em intervalos produto B. Mod. de passo com cont. ativo.

Intervalos de estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	9,6172	0,1488	4,9928	0,0903
50 – 70	14,2191	0,0948	3,6265	0,0624
80 – 100	13,7945	0,7145	19,2587	0,3321
120 – 140	15,6957	0,1506	3,7576	0,0640

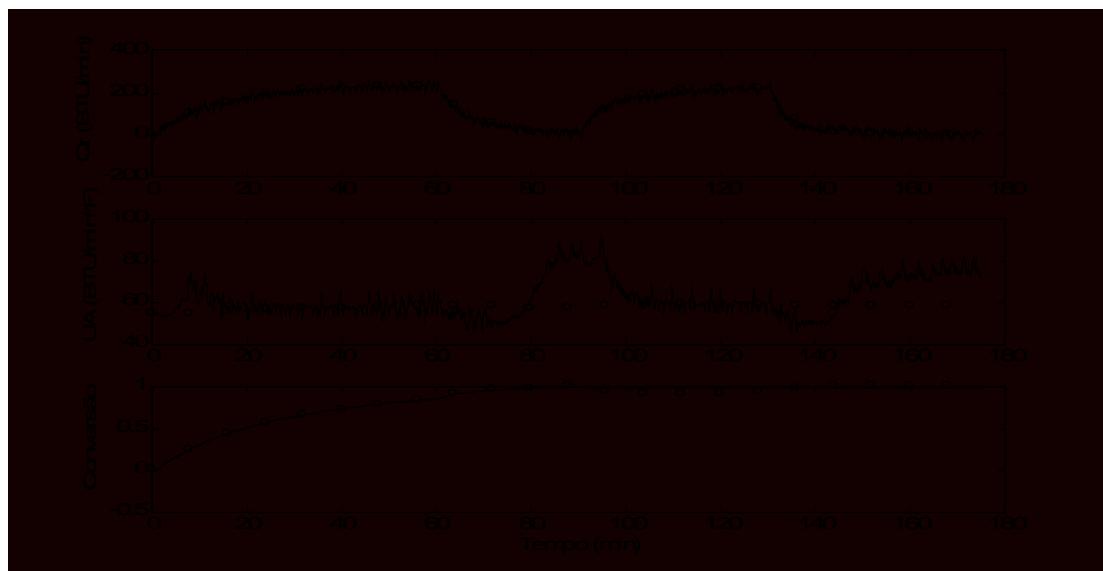


Fig. 5.12 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;

Produto B. Modelo de passo com controlador ativo; (real (o); estimado (-)).

Uma vez que Q_r aparece somente na equação de balanço de energia do reator, sua estimação sempre se apresenta boa, mesmo nos períodos em que quase nenhuma reação ocorre isto fica evidente nas figuras 5.11 e 5.12. Enquanto que, U_A por estar presente tanto na equação de balanço de energia do reator e na jaqueta, sofre uma maior influência da variação das temperaturas uma vez que estas estão sob ação de um controle mais ativo, fazendo com que o filtro tenha dificuldade em acompanhar essas mudanças durante o processo de batelada.

Apesar de varias tentativas de ajuste do filtro os valores estimados de U_A divergem dos valores reais tanto para o produto A, como, para o produto B. Este efeito se dá devido à ação de controle que é bastante pronunciada, e a consideração de que T_{ji} não influencia nos valores estimados.

Outro fato que merece destaque é a conversão, que mesmo com os valores estimados mostrando um acompanhamento ruim em relação aos valores reais, para os dois produtos a conversão se mostra muito boa.

5.3.4 – Modelo de passo aleatório com controlador ativo sob ação de ruídos.

Os parâmetros da matriz diagonal R utilizada para ajuste do filtro são respectivamente T_r , T_j , U_A , Q_r , e os ruídos R .

Tab. 5.14 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. passo; cont. ativo; ruído.

PARAMETRO S Matrizes Diagonais	PRODUTOS	
	A	B
$P(0/0)$	[0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0]
R	[1e-6, 1e-6, 5e-5, 6]	[1e-6, 1e-6, 1e-3, 6]
R	[25e-4, 5e-4]	[25e-4, 5e-4]

Tab. 5.15 – Erro geral e parcial médio. Mod. passo; cont. ativo; ruído.

Erro Médio Q_r	PRODUTOS		Erro Médio U_A	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	13,9104	15,0488	Absoluto	1,3891	1,7808
Relativo	3,6405	1,8705	Relativo	0,0194	0,0307

	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	13,8331	14,4416	Absoluto	1,0187	1,5103
Relativo	0,0709	0,2849	Relativo	0,0145	0,0261
Conversão Produto A (130 min)			Conversão Produto B (175 min)		
Absoluto		0,0338	Absoluto		0,0318
Relativo		0,0611	Relativo		0,0683

Tab. 5.16 – Erros em intervalos produto A. Mod. passo; cont. ativo; ruído.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	21,8652	0,1592	0,5334	0,0078
35 – 50	9,8967	0,0331	1,1433	0,0162
65 – 85	22,9821	1,6688	1,7643	0,0243
100 – 120	10,0499	10,0499	1,7723	0,0245

Fig. 5.13 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;

Produto A. Modelo de passo; controlador ativo e ruído; (real (o); estimado (-)).

Tab. 5.17 – Erros em intervalos produto B. Mod. passo; cont. ativo; ruído.

Intervalos de estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	13,0584	0,2319	1,0215	0,0184
50 – 70	17,0864	0,1081	1,1491	0,0198
80 – 100	16,4567	1,0851	2,5269	0,0436
120 – 140	17,0195	0,1292	1,5010	0,0255



Fig. 5.14 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;

Produto B. Modelo de passo; controlador ativo e ruído; (real (o); estimado (-)).

Os resultados agora apresentados estão estimados mediante ação de ruídos nas medidas de temperaturas de T_r , T_j , T_{ji} . Onde a variância utilizada para a estratégia de estimativa é de 0.08 ($^{\circ}\text{F}$)².

Este modelo reforça o fato de que, um controle mais ativo influencia as medidas de temperaturas de T_r , T_j , T_{ji} que por sua vez dificulta o acompanhamento de Q_r e UA pelo filtro. Somado a estas dificuldades acrescentamos ainda o ruído nas medidas que cria uma defasagem entre os valores reais e os valores estimados tanto para Q_r como para UA .

Com a influência de um controle ativo sob ação de ruídos, mais uma vez, o cálculo para Q_r mostra-se muito bom o que faz a conversão também ser muito boa. mesmo com estimativas muito ruins para Q_r e UA .

5.3.5 – Modelo de rampa aleatória (random ramp).

O modelo rampa aleatória, parte do princípio de que é mais fácil estimar dois parâmetros que se comportam de acordo com um modelo dinâmico, do que, um para o qual o modelo é desconhecido. Isto é, a equação da reta descreverá o caminho assumido por UA e Qr, de modo que, os valores estocásticos a serem calculados passam a ser o coeficiente angular da reta (φ), tanto para UA como para Qr.

Os parâmetros para a matriz diagonal R_{ω} utilizada no ajuste do filtro para os produtos A e B são respectivamente Tr, Tj, UA, Qr, u, q.

Onde:

- ⇒ é o coeficiente angular de UA;
- ⇒ é o coeficiente angular de Qr;

Tab. 5.18 – Parâmetros de ajuste do filtro. Modelo rampa aleatória.

PARAMETR OS	PRODUTOS	
	A	B
Matrizes Diagonais		
P(0/0)	[0, 0, 0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0, 0, 0]
R	[1e-6, 1e-6, 1e-4, 6, 1e-4, 5e-1]	[1e-6, 1e-6, 1e-5, 6, 1e-4, 5e-1]
R	[0, 0]	[0, 0]

Tab. 5.19 – Erro geral e parcial médio. Modelo rampa aleatória.

Erro Médio	PRODUTOS		Erro Médio	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		UA	A (130 min)
Qr					

Absoluto	4,0030	5,9544	Absoluto	0,3367	0,2282
Relativo	1,0127	0,6073	Relativo	0,0047	0,0040
	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	4,2452	5,5581	Absoluto	0,1048	0,1998
Relativo	0,0207	0,1049	Relativo	0,0015	0,0035
	Conversão produto A (130 min)		Conversão produto B (175 min)		
Absoluto	0,0029		Absoluto	0,0194	
Relativo	0,0113		Relativo	0,0302	

Tab. 5.20 – Erros em intervalos para produto A. Modelo rampa aleatória.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Q_r		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	5,8875	0,0422	0,2148	0,0032
35 – 50	3,2793	0,0110	0,0652	0,0009
65 – 85	6,5576	0,8371	0,1975	0,0027
100 – 120	2,3646	2,3646	0,8829	0,0122

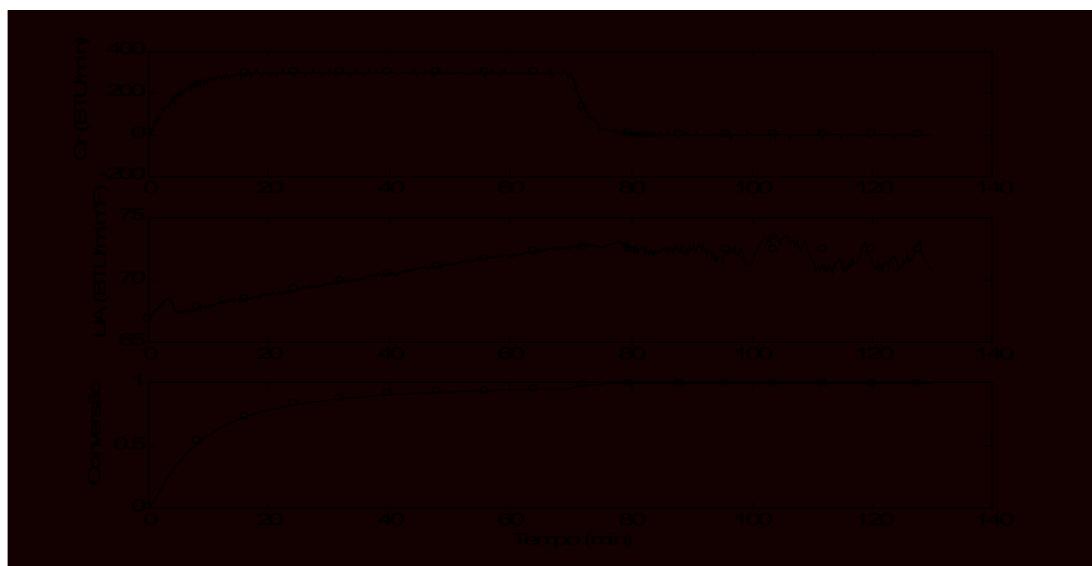
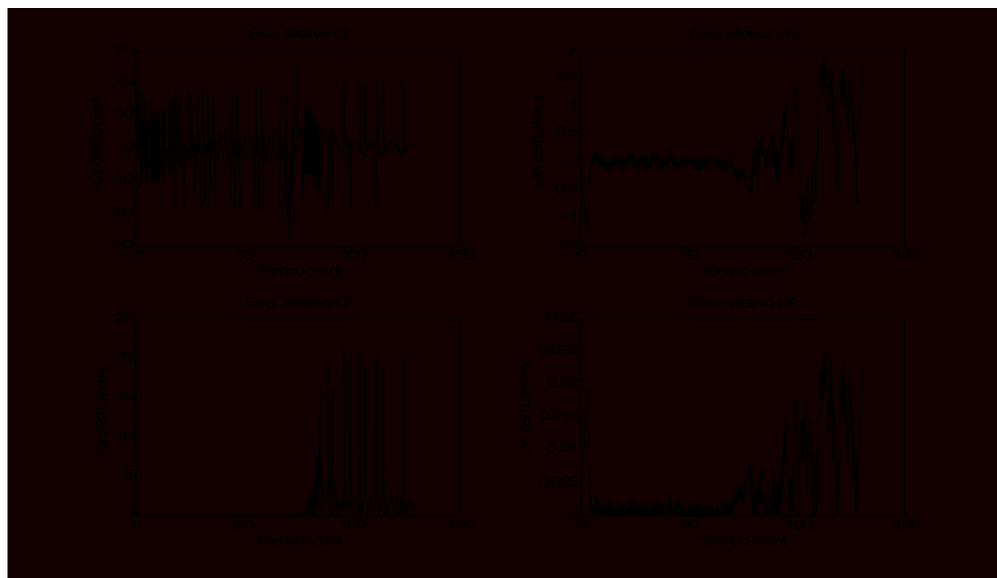


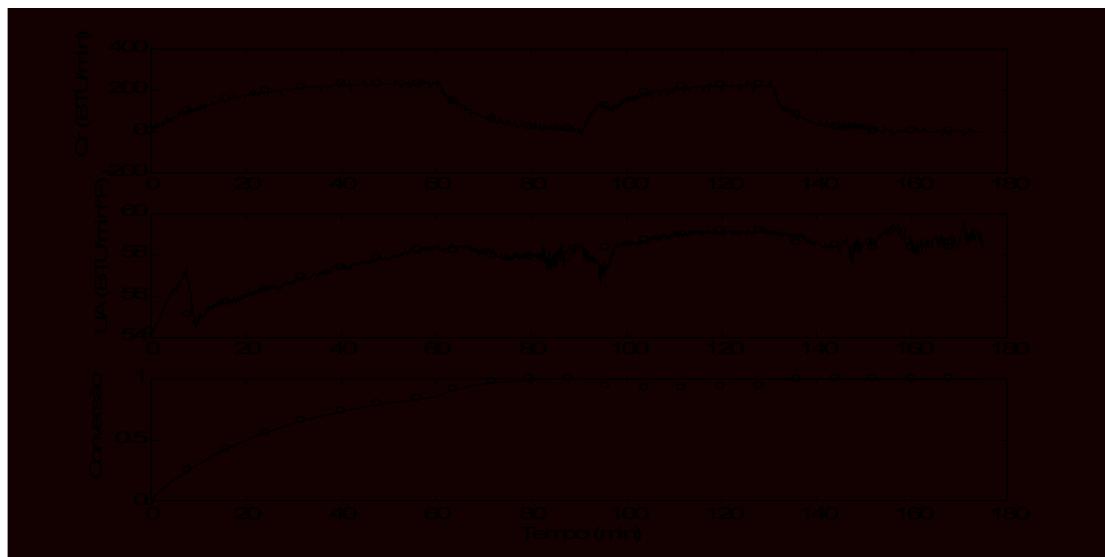
Fig. 5.15 – Calor da reação (Q_r); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto A. Modelo de rampa aleatória; (real (o); estimado (-)).



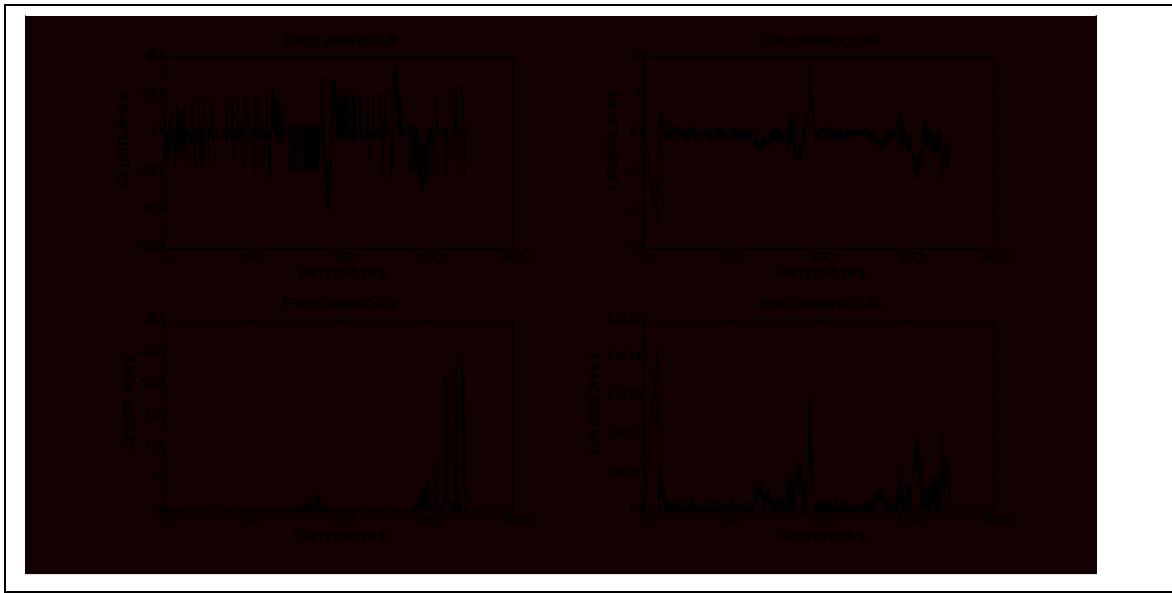
**Fig 5.16 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA;
produto A. Modelo de rampa aleatória.**

Tab. 5.21 – Erros em intervalos para produto B. Modelo rampa aleatória.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	4,3556	0,0880	0,5671	0,0103
50 – 70	5,4467	0,0311	0,1287	0,0022
80 – 100	11,6898	0,4336	0,3630	0,0063
120 – 140	6,8313	0,0497	0,1226	0,0021



**Fig. 5.17 – Calor da reação (Qr); Coef. Transferência de calor (UA); Conversão;
Produto B. Modelo de rampa aleatória; (real (o); estimado (-)).**



**Fig 5.18 – Erro absoluto e relativo para Q_r e UA ;
produto B. Modelo de rampa aleatória.**

Uma vez que o calor da reação está presente somente na equação de balanço de energia do reator, enquanto que, o produto do coeficiente de transferência de calor pela área esta, presente na equação do balanço de energia do reator e da jaqueta (Eqs. 3.15; 3.16; 3.17) fazendo com que o calor da reação também se mostre no modelo de rampa muito bom. Porém, nos período em que quase nenhuma reação ocorre ou quando Q_r chega a zero, este modelo se mostra mais ativo que o modelo de passo aleatório.

Analizando o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) nos períodos em que consideramos somente o tempo necessário para reação ou seja, períodos onde não ocorre alimentação, o produto A (acima de 70 min; Fig. 5.15), sofre influência mais ativa do modelo, por ter um tempo de reação maior. O produto B, apesar de ter dois períodos onde não ocorre alimentação (60 a 90 min e 130 a 175 min; Fig. 5.17), o primeiro período é pequeno, porém, é acrescida a ele a necessidade do filtro ter pontos estimados para iniciar o acompanhamento efetivo dos valores reais de (UA), no segundo período, o tempo de reação é maior que o primeiro, porém, a reação é encerrada.

As figuras 5.16 e 5.18 mostram os erros absolutos e relativos para UA e Q_r . Os erros relativos de ambos produtos evidenciam claramente o período em que é encerrada a alimentação de monômero para o produto A, e os períodos onde se encerra e se retoma a alimentação de monômero, e o termino definitivo da alimentação para o produto B.

Durante o período em que a alimentação de monômero é constante o modelo de rampa mostra-se um bom estimador, assim como a conversão para ambos produtos.

5.3.6 – Modelo exponencial.

Os parâmetros para a matriz diagonal R_{ω} utilizada no ajuste do filtro para os produtos A e B é respectivamente Tr, Tj, UA, Qr, Au, Aq.

Neste modelo é assumido o comportamento exponencial para UA e Qr ou seja, as variáveis Tr, Tj, Tji, UA, Qr são assumidas com valores determinísticos enquanto que Au e Aq são assumidas como estados estocásticos.

Tab. 5.22 – Parâmetros de ajuste do filtro. Modelo exponencial.

PARAMETRO S Matrizes Diagonais	PRODUTOS	
	A	B
P(0/0)	[0, 0, 0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0, 0, 0]
R	[1e-6, 1e-6, 2e-4, 4, 4e-4, 2e-2]	[1e-6, 1e-6, 2e-3, 4, 1e-2, 1e-2]
R	[0, 0]	[0, 0]

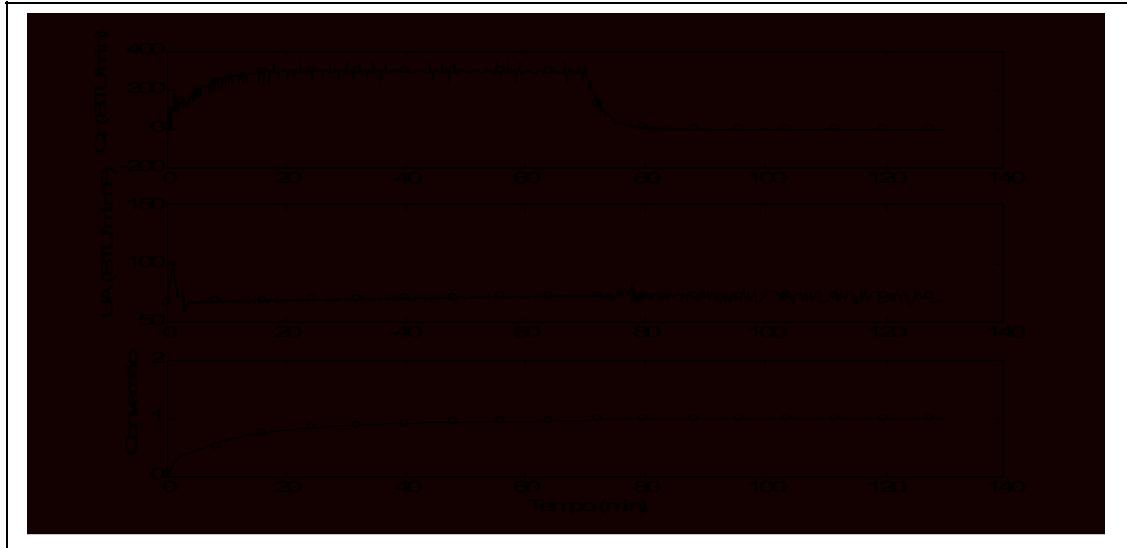
Tab. 5.23 – Erro geral e parcial médio. Modelo exponencial.

Erro Médio Qr	PRODUTOS		Erro Médio UA	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	6,1232	17,3214	Absoluto	1,6737	4,4268
Relativo	0,4875	0,8050	Relativo	0,0235	0,0768
	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	9,3912	19,2955	Absoluto	0,9802	3,6374
Relativo	0,0645	0,2105	Relativo	0,0144	0,0636
Conversão produto A (130 min)			Conversão produto B (175 min)		
Absoluto	0,0090		Absoluto	0,0973	
Relativo	0,0280		Relativo	0,1195	

Tab. 5.24 – Erros em intervalos para produto A. Modelo exponencial.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo

00 – 20	16,0380	0,1693	2,4446	0,0364
35 – 50	5,9398	0,0199	0,3962	0,0056
65 – 85	6,5116	0,4423	1,4289	0,0197
100 – 120	1,0585	1,0585	2,8535	0,0394



Produto A. Modelo exponencial; (real (o); estimado (-)).



**Fig 5.20 – Erro absoluto e relativo para Qr e UA;
produto A. Modelo exponencial.**

Tab. 5.25 – Erros em intervalos para produto B. Modelo exponencial.

Intervalos de estudo (min)	Erros em Q_r		Erros em U_A	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	11,9250	0,1580	5,4014	0,0983
50 – 70	22,5289	0,1319	1,7385	0,0299
80 – 100	16,2179	0,5950	8,3216	0,1437
120 – 140	23,6795	0,1672	2,0784	0,0353

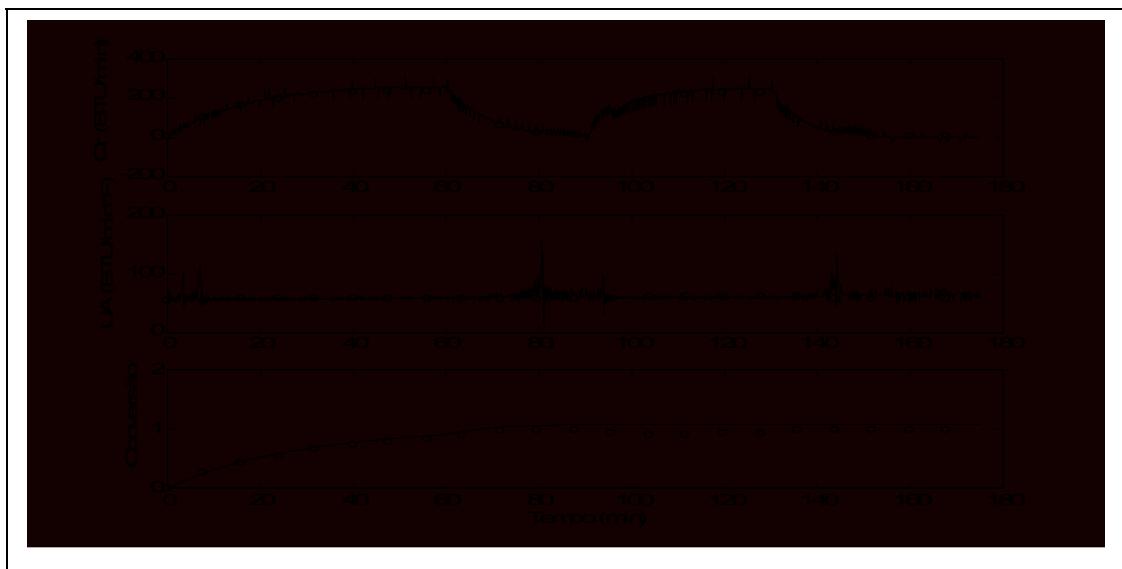
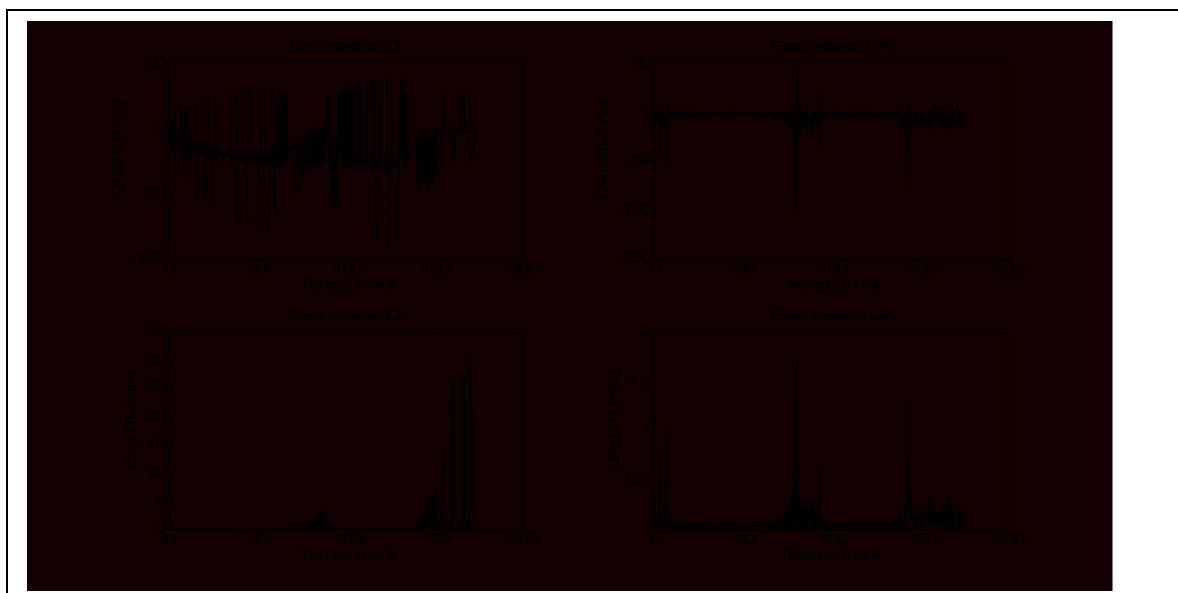


Fig. 5.21 – Calor da reação (Q_r); Coef. transferência de calor (U_A); Conversão; Produto B. Modelo exponencial; (real (o); estimado (-)).



**Fig. 5.22 – Erro absoluto e relativo para Q_r e UA ;
produto B. Modelo exponencial.**

Uma vez que o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) influência tanto o balanço de energia do reator como a jaqueta, é observada de forma enfática, esta influência no período de 00 a 20 min de batelada para o produto A (Fig. 5.19), e para o produto B, (Fig. 5.21), ou seja, o filtro é muito sensível ao ajuste de forma que qualquer alteração por mínima que seja em UA ocasiona uma variação significativa para Q_r .

Nos períodos em que a alimentação de monômero é constante a resposta da estimação é boa. Porém, quando é encerrada a fase de alimentação o calor da reação tende a zero e o filtro mostra-se bom para Q_r e muito ruim para UA . Todavia nota-se que mesmo com a flutuação dos pontos estimados em torno dos valores reais ocorre pico de oscilação muito elevado nas estimações nos períodos sem alimentação. A conversão também não é precisa, porém, seu comportamento acompanha o valor real durante a batelada. Vale o registro de que os períodos sem alimentação influenciam diretamente na qualidade do modelo. Este comportamento é ilustrado nos gráficos dos erros, figuras 5.20; 5.22.

5.3.7 – Análise comparativa dos modelos de passo, rampa e exponencial.

Em uma avaliação geral a estrutura para o filtro de Kalman que melhor estima os valores estocásticos de Q_r e UA simultaneamente é o modelo de passo aleatório por apresentar os melhores resultados referentes aos erros absolutos e relativos e estimar os valores estocásticos em torno dos valores reais mesmo durante os períodos em que pouca ou nenhuma reação ocorre durante a batelada.

Com objetivo de facilitar uma análise através dos erros absolutos e relativos dos modelos investigados até aqui. Optou-se por apresentá-los de forma tabelada, os períodos de batelada total (130 min produto A e 175 min produto B) e os períodos de batelada parcial (70 min produto A e 130 min produto B).

Tab. 5.26 – Erros absolutos do produto A para os modelos estruturados.

Estudo dos erros absolutos	Produto A			
	130 min		70 min	
	Q_r	UA	Q_r	UA
Passo aleatório (cont. suave)	3,9970	0,1597	4,1472	0,1988
Passo aleatório (cont. suave / ruído)	13,4931	12,766	12,7148	1,2670
Passo aleatório (cont. ativo)	7,7856	0,9703	7,1210	0,4924

Passo aleatório (cont. ativo/ruído)	13,9104	1,3891	13,8331	1,0187
Rampa aleatória (cont. suave)	4,0030	0,3367	4,2452	0,1048
Exponencial (cont. suave)	6,1232	1,6737	9,3912	0,9802

Tab. 5.27 – Erros relativos do produto A para os modelos estruturados.

Estudo dos erros Relativos	Produto A			
	130 min		70 min	
	Qr	UA	Qr	UA
Passo aleatório (cont. suave)	0,9256	0,0023	0,0238	0,0029
Passo aleatório (cont. suave / ruído)	3,4957	0,0179	0,0708	0,0180
Passo aleatório (cont. ativo)	2,9042	0,0135	0,0357	0,0070
Passo aleatório (cont. ativo/ruído)	3,6405	0,0194	0,0709	0,0145
Rampa aleatória (cont. suave)	1,0127	0,0047	0,0207	0,0015
Exponencial (cont. suave)	0,4875	0,0235	0,0645	0,0144

Tab. 5.28 – Erros absolutos do produto B para os modelos estruturados.

Estudo dos erros Absolutos	Produto B			
	175 min		130 min	
	Qr	UA	Qr	UA
Passo aleatório (cont. suave)	5,7306	0,2082	5,3563	0,1701
Passo aleatório (cont. suave / ruído)	16,5215	0,5689	15,4861	0,5311
Passo aleatório (cont. ativo)	12,0196	7,0931	10,8386	5,6051
Passo aleatório (cont. ativo/ruído)	15,0488	1,7808	14,4416	1,5103
Rampa aleatória (cont. suave)	5,9544	0,2282	5,5581	0,1998
Exponencial (cont. suave)	17,3214	4,4268	19,2955	3,6374

Tab. 5.29 – Erros relativos do produto B para os modelos estruturados.

Estudo dos erros Relativos	Produto B			
	175 min		130 min	
	Qr	UA	Qr	UA
Passo aleatório (cont. suave)	0,5599	0,0036	0,1004	0,0030
Passo aleatório (cont. suave / ruído)	1,2571	0,0099	0,2175	0,0093
Passo aleatório (cont. ativo)	1,5954	0,1224	0,1880	0,0973
Passo aleatório (cont. ativo/ruído)	1,8705	0,0307	0,2849	0,0261
Rampa aleatória (cont. suave)	0,6073	0,0040	0,1049	0,0035
Exponencial (cont. suave)	0,8050	0,0768	0,2105	0,0636

5.3.8 – Modelos híbridos.

Os modelos híbridos são apresentados como alternativas de melhoria para os resultados de estimação e nas estruturas de passo, rampa e exponencial. Contudo, foi verificado que estas relações afetam muito pouco o dado já demonstrado pelas estruturas apresentadas, vejamos:

1º) Modelo de passo aleatório para calor da reação (Qr) e de rampa aleatória para o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA). Os parâmetros para a matriz diagonal \mathbf{R}_ω utilizada no ajuste do filtro para os produtos A e B são respectivamente Tr, Tj, UA, Qr.

Tab. 5.30 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. passo (Qr); rampa (UA).

PARAMETROS	PRODUTOS	
	A	B
Matrizes Diagonais		
P(0/0)	[0, 0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0, 0]
R	[1e-6, 1e-6, 1e-4, 6, 1e-4]	[1e-6, 1e-6, 1e-5, 6, 1e-4]
R	[0, 0]	[0, 0]

Tab. 5.31 – Erro geral e parcial médio. Mod. passo (Qr); rampa (UA).

Erro Médio Qr Mod. passo	PRODUTOS		Erro Médio UA Mod. rampa	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	3,9918	7,1149	Absoluto	0,3368	0,2282
Relativo	0,9244	0,5678	Relativo	0,0047	0,0040
	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	4,1356	7,2007	Absoluto	0,1048	0,1999
Relativo	0,0237	0,1112	Relativo	0,0015	0,0035
Conversão produto A (130 min)		Conversão produto B (175 min)			
Absoluto	0,0088		Absoluto	0,0947	
Relativo	0,0218		Relativo	0,1129	

Tab. 5.32 – Erros em intervalos para produto A. Mod. passo (Qr); rampa (UA).

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr .Mod. passo		Erros em UA Mod. rampa	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	6,1849	0,0551	0,2148	0,0032
35 – 50	3,0364	0,0102	0,0652	0,0009
65 – 85	7,2646	0,7304	0,1979	0,0027
100 – 120	2,2088	2,2088	0,8829	0,0122

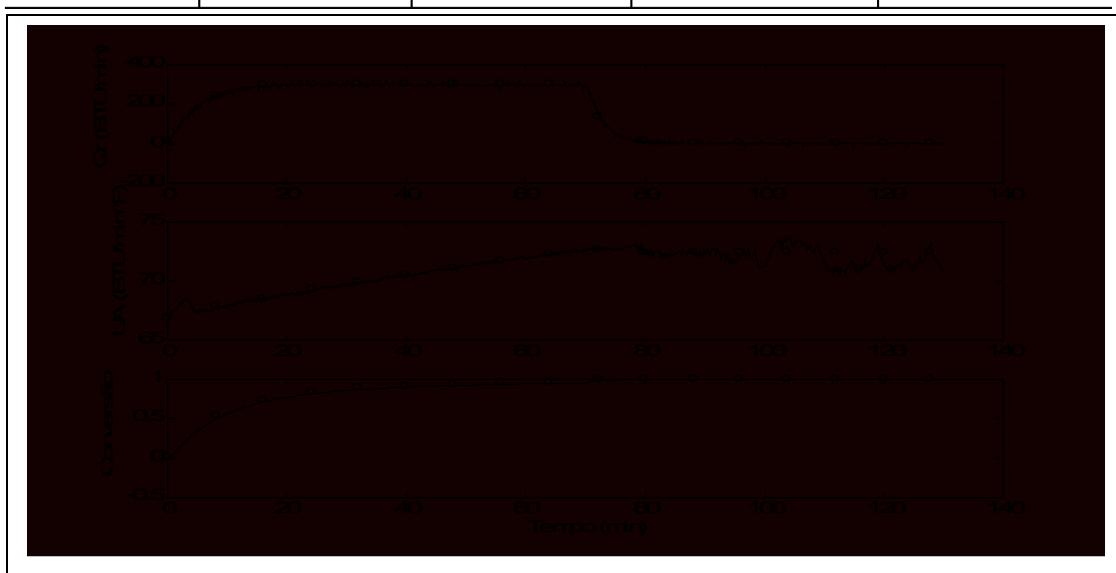


Fig. 5.23 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto A. Modelo passo (Qr); rampa (UA); (real (o); estimado (-)).

Tab. 5.33 – Erros em intervalos para produto B. Mod. passo (Qr); rampa (UA)

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr Mod.: passo		Erros em UA Mod.:rampa	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	6,3346	0,1172	0,5673	0,0103
50 – 70	7,1805	0,0409	0,1288	0,0022
80 – 100	10,7332	0,4028	0,3631	0,0063
120 – 140	7,6533	0,0554	0,1224	0,0021



Fig. 5.24 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto B. Modelo passo(Qr); rampa(UA); (real (o); estimado (-)).

2º) Modelo de passo aleatório para, o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA) e o de rampa aleatória para o calor da reação (Qr). Os parâmetros para a matriz diagonal \mathbf{R}_ω utilizada no ajuste do filtro para os produtos A e B são respectivamente Tr, Tj, UA, Qr, q.

Tab. 5.34 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. passo (UA); rampa (Qr).

PARAMETROS		PRODUTOS	
		A	B
Matrizes Diagonais			
P(0/0)		[0, 0, 0, 0, 0,]	[0, 0, 0, 0, 0,]
R		[1e-6, 1e-6, 5e-5, 6, 5e-1]	[1e-6, 1e-6, 1e-3, 6, 5e-1]
R		[0, 0]	[0, 0]

Tab. 5.35 – Erro geral e parcial médio. Mod. passo (UA); rampa (Qr).

Erro Médio Qr Mod.: Rampa	PRODUTOS		Erro Médio UA Mod.: Passo	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	3,9887	7,9540	Absoluto	0,1597	0,2081
Relativo	1,0139	0,6223	Relativo	0,0023	0,0036
	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	4,2214	8,2199	Absoluto	0,1988	0,1699
Relativo	0,0206	0,2155	Relativo	0,0029	0,0030
Conversão Produto A (130min)		Conversão Produto B (175min)			
Absoluto	0,0034		Absoluto	0,0933	
Relativo	0,0119		Relativo	0,1159	

Tab. 5.36 – Erros em intervalos produto A. Mod. passo (UA); rampa (Qr).

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr Mod.: rampa		Erros em UA Mod.:passo	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	5,8189	0,0419	0,2413	0,0036
35 – 50	3,2808	0,0110	0,1930	0,0027
65 – 85	6,5461	0,8377	0,1114	0,0015

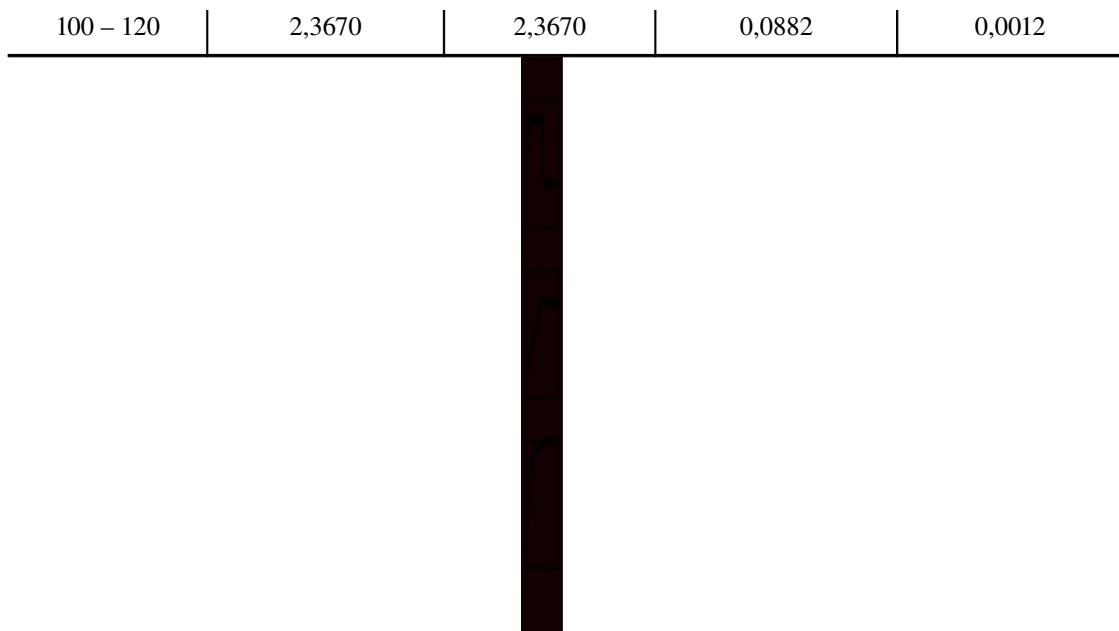


Fig. 5.25 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto A. Modelo de passo (UA); rampa (Qr); (real (o); estimado (-))

Tab. 5.37– Erros em intervalos produto B. Mod. passo (UA); rampa (Qr).

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr Mod. rampa		Erros em UA Mod. passo	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	8,6647	0,1599	0,2900	0,0053
50 – 70	7,3902	0,0395	0,1479	0,0025
80 – 100	11,9881	0,4306	0,2957	0,0051
120 – 140	8,8429	0,0592	0,1570	0,0027

Fig. 5.26 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto B. Modelo de passo (UA); rampa (Qr) ; (real (o); estimado (-))

3º) Modelo exponencial para calor da reação (Qr) e de passo aleatório para, o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA). Os parâmetros para a matriz diagonal \mathbf{R}_{co} utilizada no ajuste do filtro para os produtos A e B são respectivamente Tr, Tj, Qr, UA, Aq.

Tab. 5.38 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. exponencial (Qr); passo (UA).

PARAMETROS	PRODUTOS	
	A	B
Matrizes Diagonais		
P(0/0)	[0, 0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0, 0]
R	[1e-6, 1e-6, 4, 1e-4, 1e-2]	[1e-6, 1e-6, 4, 1e-3, 1e-3]
R	[0, 0]	[0, 0]

Tab. 5.39 – Erro geral e parcial médio. Mod. exponencial (Qr); passo (UA).

Erro Médio Qr Mod. estru.	PRODUTOS		Erro Médio UA Mod. passo.	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	6,0136	8,4949	Absoluto	0,1521	0,2087
Relativo	0,5137	0,4580	Relativo	0,0021	0,0036
	A (70 min)	B (130 min)		A (70 min)	B (130 min)
Absoluto	9,2511	9,2321	Absoluto	0,1472	0,1708
Relativo	0,0674	0,1720	Relativo	0,0021	0,0030
Conversão produto A (130 min)			Conversão produto B (175 min)		
Absoluto	0,0139		Absoluto	0,0588	
Relativo	0,0374		Relativo	0,1421	

Tab. 5.40 – Erros em intervalos produto A. Mod. exponencial (Qr); passo (UA).

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr Mod. estru.		Erros em UA Mod. passo	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	16,5394	0,1828	0,1899	0,0028
35 – 50	5,6274	0,0188	0,1398	0,0020
65 – 85	6,0576	0,4650	0,1164	0,0016
100 – 120	1,0902	1,0902	0,1386	0,0019

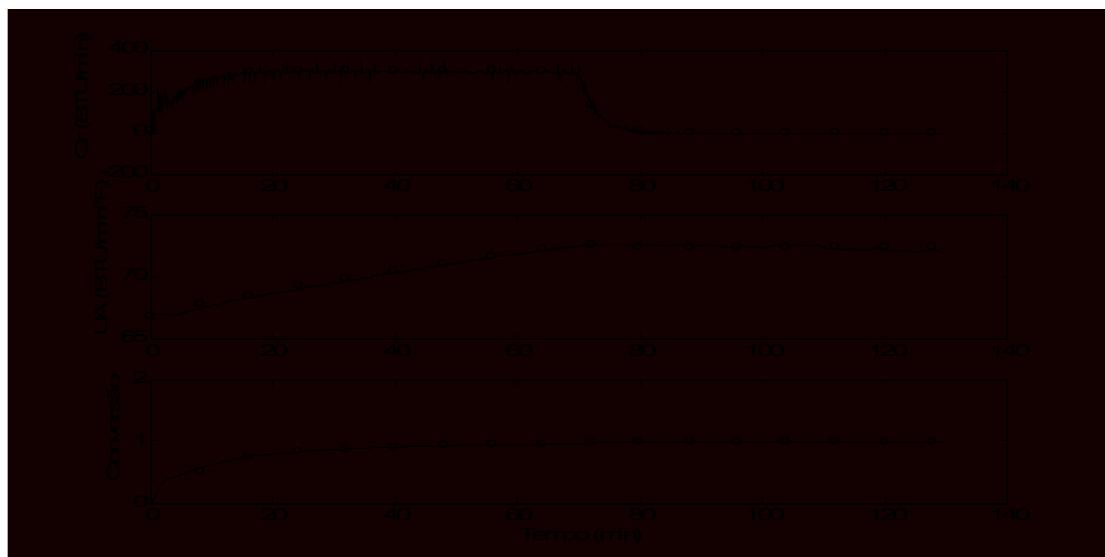


Fig. 5.27 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto A. Modelo exponencial (Qr); passo (UA) ; (real (o); estimado (-)).

Tab. 5.41 – Erros em intervalos produto B. Mod. exponencial (Qr); passo (UA).

Intervalos de estudo (min)	Erros em Qr Mod. Estru.		Erros em UA Mod. passo	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	21,5990	0,5634	0,2963	0,0054
50 – 70	7,1338	0,0403	0,1477	0,0025
80 – 100	11,9983	0,3718	0,2958	0,0051
120 – 140	8,3580	0,0559	0,1569	0,0027

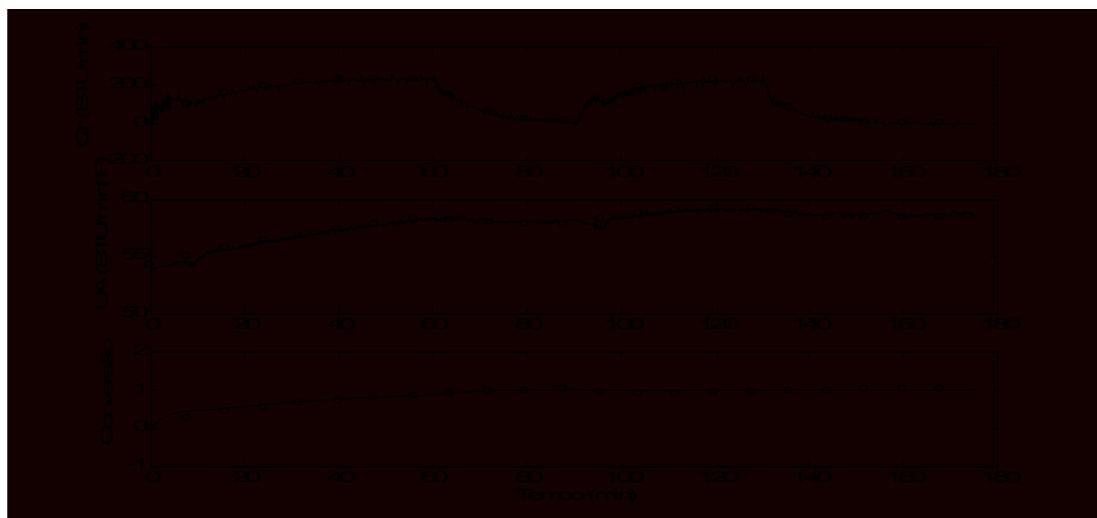


Fig. 5.28 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;

Produto B. Modelo exponencial (Qr); passo (UA); (real (o); estimado (-)).

4º) Modelo exponencial para calor da reação (Qr) e de rampa aleatória para, o produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA). Os parâmetros para a matriz diagonal \mathbf{R}_∞ utilizada no ajuste do filtro para os produtos A e B são respectivamente Tr, Tj, Qr, UA, Aq, u

Tab. 5.42 – Parâmetros de ajuste do filtro. Mod. exponencial (Qr); rampa (UA).

PARAMETRO S Matrizes Diagonais	PRODUTOS	
	A	B
P(0/0)	[0, 0, 0, 0, 0, 0]	[0, 0, 0, 0, 0, 0]
R	[1e-6, 1e-6, 4, 1e-4, 5e-2, 2e-4]	[1e-6, 1e-6, 4, 1e-4, 5e-2, 2e-4]
R	[0, 0]	[0, 0]

Tab. 5.43 – Erro geral e parcial médio. Mod. exponencial (Qr); rampa (UA).

Erro Médio Qr Mod. estru.	PRODUTOS		Erro Médio UA Mod. rampa.	PRODUTOS	
	A (130 min)	B (175 min)		A (130 min)	B (175 min)
Absoluto	6,3284	9,0148	Absoluto	0,7209	0,9493
Relativo	0,4634	0,3258	Relativo	0,0100	0,0164
	A (70 min)	B (130		A (70 min)	B (130 min)

Absoluto	9,6510	min)	Absoluto	0,3129	0,7076
Relativo	0,0627	0,1545	Relativo	0,0045	0,0123
Conversão Produto A (130 min)			Conversão Produto B (175 min)		
Absoluto	0,0055		Absoluto	0,0224	
Relativo	0,0201		Relativo	0,0568	

Tab. 5.44 – Erros em intervalos produto A. Mod. exponencial (Qr); rampa (UA).

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr Mod. Estru.		Erros em UA Mod. rampa	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
	16,2355	0,1605	0,3702	0,0055
00 – 20	6,1499	0,0206	0,2833	0,0040
35 – 50	7,1774	0,4107	1,0385	0,0143
65 – 85	1,0338	1,0338	1,3051	0,0180
100 – 120				

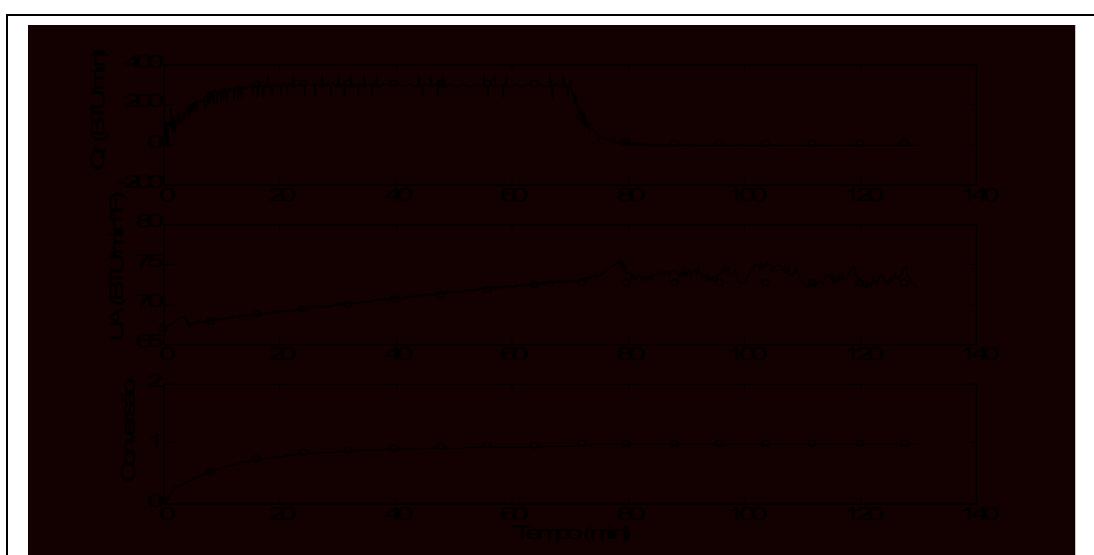


Fig. 5.29 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto A. Modelo exponencial (Qr); rampa (UA); (real (o); estimado (-)).

Tab. 5.45 – Erros em intervalos produto B. Mod. exponencial (Qr); rampa (UA).

Intervalos de estudo (min)	Erros em Qr Mod. Estru.		Erros em UA Mod. rampa	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	10,0594	0,3256	0,6553	0,0119
50 – 70	10,8478	0,0641	0,4891	0,0084
80 – 100	13,4749	0,4010	1,5947	0,0275
120 – 140	11,2932	0,0777	0,6138	0,0104

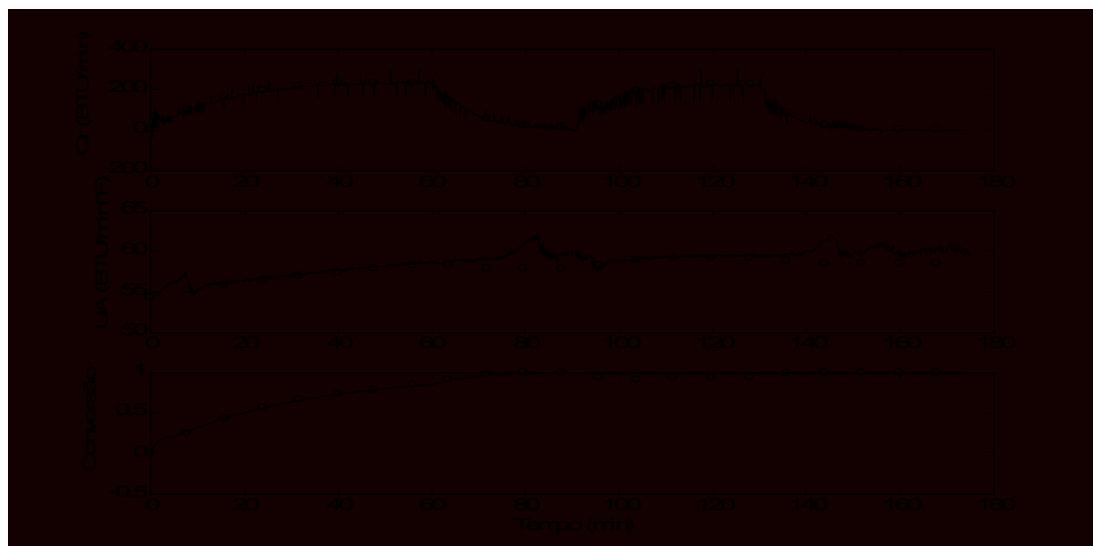


Fig. 5.30 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto B. Modelo exponencial (Qr); rampa (UA); (real (o); estimado (-)).

Uma análise geral, pode ser feita para as estruturas utilizadas nos modelos híbridos, já que a performance das estruturas de passo, rampa e exponencial se repetem. Os valores estimados para o calor da reação (Qr) apresentam-se bons em qualquer estrutura adotada para o modelo. Mesmo para o modelo exponencial onde ocorre uma oscilação forte no inicio da estimação devido à sensibilidade da estrutura do filtro aos ajustes do filtro.

Apesar da utilização simultânea de estratégias diferenciada para o cálculo de UA e Qr o comportamento independente de cada estrutura permanece, e a pequenas variações existentes nos dados calculados se dá pelo fato do filtro ser muito sensível aos parâmetros de ajuste dos modelos.

Uma visão otimista para os modelos híbridos se dá em relação ao modelo exponencial para (Qr) e passo aleatório para (UA) que se mostrou,

ter seu comportamento melhorado no que diz respeito ao acompanhamento dos valores reais pelos valores estimados (Fig. 5.28 e 5.30).

5.4 – Modelo de Passo Aleatório Tendo Tji como Estado Estocástico.

Com o objetivo de analisar Tji como estado estocástico são apresentados os resultados das estimativas para o produto A utilizando o modelo de passo aleatório.

Foram utilizados os dois controladores, os parâmetros da matriz diagonal utilizado para ajuste no filtro são respectivamente Tr, Tj, Tji, UA, Qr.

Tab. 5.46 – Parâmetros de ajuste dos filtros. Mod. passo Tji estocástico.

PARAMETROS	PRODUTO A
Matrizes Diagonais	
P(0/0)	[0, 0, 0, 0, 0]
R	[1e-3, 1e-2, 3e-2, 3, 1e-1]
R	[0, 0, 1e-1]

Tab. 5.47 – Erro geral e parcial médio. Controladores Ativo e Suave.

PRODUTO A

		Ativo		Suave	
Erro Médio Qr		130 min	70 min	Erro Médio Qr	130 min
Absoluto	6,9987	5,4624		Absoluto	11,4024
Relativo	2,7908	0,0299		Relativo	6,5111
Erro Médio UA	130 min	70 min		Erro Médio UA	130 min
Absoluto	0,6585	0,7853		Absoluto	1,0781
Relativo	0,0093	0,0112		Relativo	0,0150
Conversão		Conversão		Conversão	
Absoluto		0,0149		Absoluto	0,0113
Relativo		0,0240		Relativo	0,0209

Tab. 5.48 – Erros em intervalos produto A. controlador Suave.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	9,1014	0,0728	0,2049	0,0030
35 – 50	5,4025	0,0181	0,7628	0,0108
65 – 85	12,3959	1,9942	1,8022	0,0249
100 – 120	20,3181	20,3181	1,5017	0,0207



Fig. 5.31 – Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão;

Produto A. Modelo de passo e Tji estimado, controlador suave (real (o); estimado (-)).

Tab. 5.49 – Erros em intervalos produto A. controlador Ativo.

Intervalos de Estudo (min)	Erros em Qr		Erros em UA	
	Absoluto	Relativo	Absoluto	Relativo
00 – 20	7,1470	0,0644	0,6992	0,0103
35 – 50	4,6436	0,0155	0,8367	0,0118
65 – 85	11,4863	1,8544	0,5650	0,0078
100 – 120	7,6334	7,6334	0,5007	0,0069



Fig. 5.32– Calor da reação (Qr); Coef. transferência de calor (UA); Conversão; Produto A. Modelo de passo; Tji estimado, controlador ativo (real (o); estimado (-)).

Ao darmos enfoque a Tji como estado estocástico, observamos algumas mudanças significativas para os estados estimados. No controlador suave (Eq. 3.25 e 3.26), é visto um aumento das oscilações dos valores estimados em torno dos valores reais quando o calor da reação chega a zero associado ao longo período sem reação como é visto para Qr. Para UA, apesar da defasagem, entre a estimativa e o real, o modelo acompanha muito bem os valores reais durante todo período de batelada, inclusive no período em que quase não ocorre reação e quando Qr chega a

zero. Em relação à conversão à mesma se comporta muito bem durante todo período de batelada.

O mesmo enfoque dado a T_{ji} , utilizando o controlador ativo (Eq. 3.27 e 3.28), se verifica para o calor da reação, uma leve oscilação no período inicial da batelada onde ainda não há dados suficientes para o inicio correto do acompanhamento da estimativa, e uma oscilação ainda maior no período onde o calor da reação chega a zero sendo este erro acrescido pelo tempo muito longo de batelada sem alimentação. Porém, o produto do coeficiente de transferência de calor pela área, mostra-se muito mais promissor durante todo período de batelada inclusive com melhores estimativas em torno dos valores reais, durante o período de alimentação e no período em que quase não ocorre reação e quando Q_r chega a zero. A conversão também se mostra mais sensível a este modelo.

Para efeito de comparação apresentamos os gráficos onde o primeiro refere-se à estimativa em que T_{ji} é visto como um estado determinístico e o segundo onde T_{ji} é visto como estado estocástico.

Controlador Suave.



Fig. 5.33 – Calor de reação, controlador suave;
1º T_{ji} determinístico; 2º T_{ji} estimado; (real (o); estimado (-)).

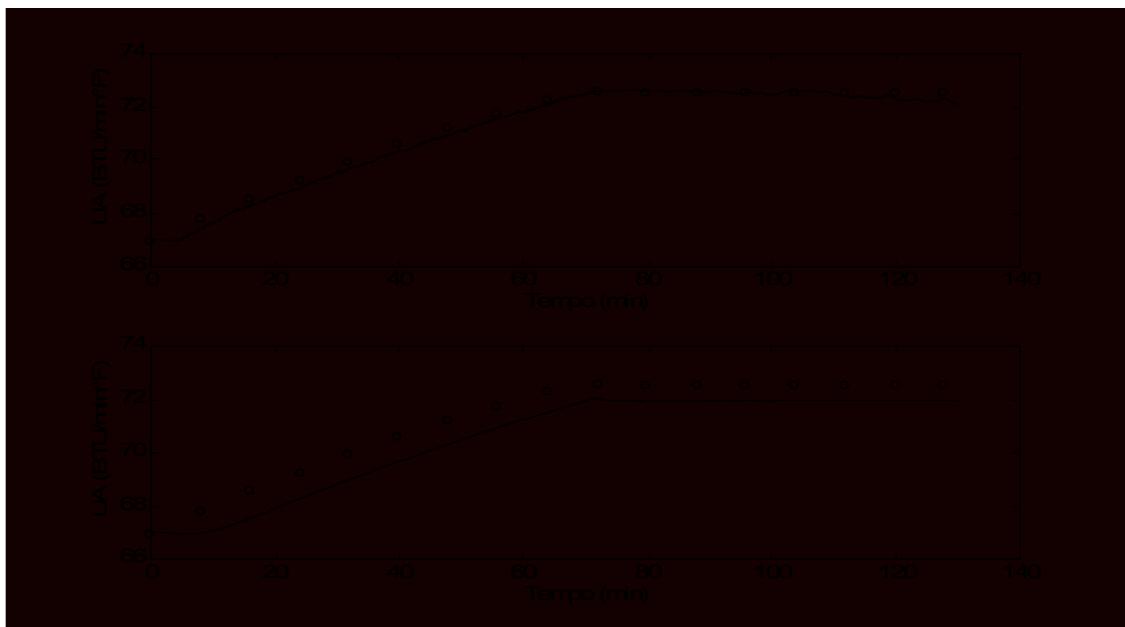


Fig. 5.34 – Coeficiente de transf. de calor, controlador suave;

1º T_{ji} determinístico; 2º T_{ji} estimado; (real (o); estimado (-)).

Controlador Ativo.

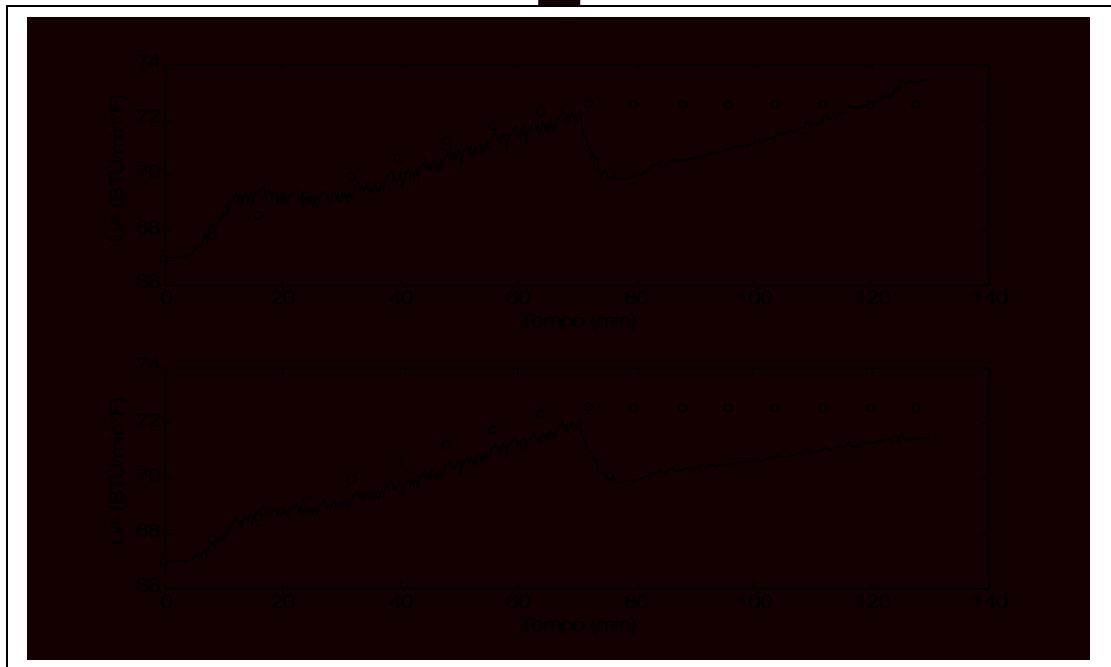


Fig. 5.36 – Coeficiente de transf. de calor, controlador ativo;
1º T_{ji} determinístico; 2º T_{ji} estimado; (real (o); estimado (-)).

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Pretende-se com esta conclusão oferecer uma síntese dos resultados obtidos com as simulações, as quais tiveram como objetivo o cálculo simultâneo do calor de reação (Q_r) e do produto do coeficiente de transferência de calor pela área (UA).

Durante o processo de simulação o modelo de passo aleatório (random walk) mostrou-se ser a melhor estratégia para estimar os valores de Q_r e UA . Pois, os valores estimados pelo filtro flutuam, durante todo período de batelada, em torno do valor real mesmo quando o período de descanso é longo ou o calor da reação chega a zero.

Em relação ao modelo de rampa aleatória (random ramp) embora citado por VALLIÈRE & BONVIN, 1990c, como um dos caminhos mais apropriados para o cálculo simultâneo de Q_r e UA . Foi verificado durante análise que este modelo, especialmente para UA apresenta um acompanhamento satisfatório somente no período de adição de monômero, pois, no decorrer dos períodos em que não há alimentação ou o tempo de reação é longo, o modelo do filtro não acompanha os valores reais de forma esperada. O que permite afirmar que o modelo de rampa é bom em determinado período da batelada, enquanto o modelo de passo aleatório se mostra bom durante todo período de batelada.

Na análise dos modelos híbridos foi constatado que, os valores estimados para Q_r e U_A são os mesmos encontrados para cada modelo separadamente. Este fato não corrobora a idéia inicial de que melhorias significativas poderiam ser alcançadas com um enlace entre os modelos.

Um aspecto que merece destaque é a avaliação da qualidade da metodologia com base em medidas exclusivas de conversão. Deve-se ter em mente que razoáveis estimativas para a conversão podem ser obtidas, acompanhadas de péssimos resultados para as demais variáveis. Uma vez que a conversão pode ser obtida a partir da integração do taxa de reação que é obtida de forma muito boa em qualquer estratégia utilizada.

Com relação ao filtro de Kalman é observada sua dificuldade em acompanhar mudanças de comportamento súbitas e muito rápidas na variável estimada, o que se reflete de forma mais freqüente em relação ao calor de reação. Aliado ao fato de que para uma boa estimação é preciso um bom ajuste dos parâmetros do filtro, independente da estratégia de estimação usada.

No modelo de passo aleatório com o controlador mais ativo ocorre uma divergência quando o calor da reação chega a zero, porém, quando o modelo de passo aleatório é utilizado com ruído o comportamento do filtro é de acompanhar o valor real com uma pequena defasagem devido ao próprio ruído.

Sem o objetivo de uma análise mais aprofundada foi possível evidenciar que a estratégia de estimação onde T_{ji} é visto como estado estocástico, nos leva a resultados promissores no que se refere ao cálculo simultâneo de Q_r e U_A , visto que pode eliminar as correções realizadas em U_A mas que na realidade são devidas às variações de T_{ji} .

Ao concluirmos esta dissertação esperamos ter colaborado com um estudo significativo para a utilização do filtro de Kalman estendido na estimação simultânea de Q_r e U_A . Bem como, ter ressaltado a relevância da ação de controle para os modelos desenvolvidos.

Como ponto de partida para trabalhos futuros apresentamos as seguintes sugestões:

- Verificar se os novos modelos para o comportamento dinâmico dos estados estocásticos podem trazer benefícios para estimações com maiores tempos de amostragem. Esta pode ser uma necessidade quando as medidas se encontrarem disponíveis em freqüências menores.
- Fazer uma investigação com maior aprofundamento sobre a influência de T_{ji} como estado estocástico em vez de variável.
- Fazer uma comparação com outras abordagens (p.ex: Redes Neurais).

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Almeida, A.**, “Polimerização em emulsão: investigação de estratégias de controle inferencial não-linear”, Dissertação para exame de qualificação (D.Sc.), COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil, (1991).
- Almeida, A.**, “Balanço de energia em tempo real para o monitoramento e controle de reatores de polimerização não-contínuos” [Rio de Janeiro] 1997 VI, 192p. 29, 7 cm (COPPE/UFRJ D.Sc. Engenharia Química, (1997).
- BenAmor S., Colombié D. and McKenna T.**, “Online reaction calorimetry. Applications to the monitoring of emulsion polymerization without samples or models of the heat- transfer coefficient”, Ind. Engng. Chem. Res. 41, 4233 - 4241. (2002).
- Bonvin D., de Vallière, and D.W.T. Rippin**, “Application of estimation techniques to batch reactors – I. Modelling thermal effects”, Comp. Chem. Engng. vol. 13, pp. 1–9, (1989).

Bonvin, D. and U. Saner, “On line procedures for supervising the operation of batch reactors”, Comp. Chem. Engng. 12, 371 - 376, (1988).

Cott B. J. and Macchietto S., “Temperature control of exothermic batch reactor using generic model control”, Ind. Engng. Chem. Res. Vol. 28, 1177 – 1184, 1989.

Chylla R. W. and Haase D. R. “Temperature control of semi batch polymerization reactors”, Comp. Chem. Engng, Vol. 17, No. 3, pp. 257- 264, (1993).

Chylla R. W. and Haase D. R. Temperature control of semi batch polymerization reactors. Comp. Chem. Engng. Vol 17, No. 12, pp. 1213, (1993b).

Freire F. B. et. al., “A new approach to the joined estimation of the heat generated by a semi continuous emulsion polymerization Q_r and the overall heat exchange parameter UA ”, Brazilian Journal of Chemical Engng., Vol. 21, n. 2, pp 293 – 305, (2004).

Fan, S., Alpay E., “Calorimetric estimation for a batch - loop emulsion polymerization reactor”, Chem. Engng. Science 59, 2811- 2815, (2004).

Gesthuisen R., et. al, “Determining the best reaction calorimetry technique: Theoretical development”, comp. Chem. Engng, 29, 349 – 365, (2004).

Guo Bingjun, et. al, “Nonlinear adaptive control for multivariable chemical process”, Chem. Engng. Science, 56, 6781 – 6791, 2001.

Jazwinsky, A. H., “Stochastic Processes and Filtering Theory”, Academic Press, New York, (1970).

Karlsen, L. G. and Villadsen J., “Isothermal reaction calorimeters – 2. Data treatment”, Chem. Engng. Sci., 42, 1165 – 1173, (1987b).

Kramer S. and Gesthuisen R., , “Simultaneous estimation of the heat of reaction and the heat transfer coefficient by calorimetry: estimation problems due to model simplification and high jacket flow rates - theoretical development”, Chemical Engineering Science 60, 4233 - 4248, (2005).

Kramer S., et. al, “Determining the best reaction calorimetry technique: Theoretical development”, comp. Chem. Engng, 29, 349 – 365, (2004)

de Luca P. G. and Scali C., “Temperature oscillation calorimetry: Robustness analysis of different algorithms for the evaluation of the heat transfer coefficient”, Chem. Engng. Science 57, 2077 – 2087, (2002).

MacGregor J. F., “On-line reactor energy balances via Kalman filtering”, Proc. IFAC, *PRP-6*, Automation, Akron, Ohio, USA (1986).

Semino D., Morretta M., Scali C., “**Parameter Estimation in Extended Kalman Filters for quality control in polymerization reactors**”, *Comp. Chem. Engng.* Vol 20, s913 – s918, 1996.

Scali C., M. Morretta and D. Semino, “**Control of the quality of polymer products in continuous reactors: Comparison of performance of state estimators with and without updating of parameters**”, *J. proc. Con.* Vol. 7 n.5, pp. 357 – 369, 1997.

Schuler H., and Schmidt C. U., “Calorimetric-state estimators for chemical reactor diagnosis and control. Review of methods and applications”, *Chem. Engng. Sci.*, 47, nº. 4, 899 – 915, 1992.

Schuler, H. and Haas, K., “Semibatch reactor dynamics and state estimation”, IFAC DYCOP, 1986.

Schmidt, C. U. and Reichert K. H., "Reaction calorimeter. A contribution to safe operation of exothermic polymerizations". *Chem. Engng. Sci.*, 43, 2133, (1988).

Tietze A., Lüdke I., Reichert K. H., “**Temperature oscillation calorimetry in stirred tank reactors**”, *Chem. Engng. Science*, Vol 51, n. 11 pp. 3133 – 3137, (1996).

de Vallière, and Bonvin D., “Application of estimation techniques to batch reactors – II. Experimental studies in state and parameter estimation”, *Comp. Chem. Engng.*, vol. 13, nº. 1/2, pp.11 – 20, (1989).

de Vallière, and Bonvin D., “Application of estimation techniques to batch reactors – III. Modelling refinements which improve the quality of state and parameter estimation”, *Comp. Chem. Engng.*, 14, nº. 7, pp. 799 – 808, (1990).

ANEXO

Tab. 1A - Dados para o reator e o meio de refrigeração

Diâmetro do reator	19,5	in.
Altura	21,0	in.
Volume de trabalho	30,0	gal.
Volume da jaqueta	5,7	gal.
Área do fundo da jaqueta	1,8	ft ²
Área lateral da jaqueta	5,23 x altura	ft ²
Área de reposição (temperatura / inverno)	42	°F

Área de reposição (temperatura / verão)	70	°F
Ambiente (temperatura / inverno)	45	°F
Ambiente (temperatura / verão)	90	°F
UA _{per} (Coef. transferência de calor perdido)	10,74	BTU/h°F
Wcj (Capacidade calorífica jaqueta/parede)	47,3	BTU/F
Fw (Vazão Mássica do fluido refrigerante)	124,5	lbs/min
Cpw (Capacidade Calorífica do fluido refreg.)	1,0	BTU/lb°F
₁ (Retardo por transporte na jaqueta)	0,38	min.
₂ (Retardo por trans. na volta de recirculação)	0,25	min.
_p (constante de tempo de aquecimento)	0,67	min.
_c (constante de tempo de aquecimento)	0,55	min.

Tab. 2A - Valores utilizados como dados iniciais para o produto A

Fator pré – exponencial	k _o	3300,0	min ⁻¹
Calor de polimerização	(-H _p)	30160,0	BTU /lbmol
Peso molecular – monômero	MW _M	104	lb/lbmol
Calor específico – monômero	Cp _M	0,4	BTU/lb °F
Calor específico – água	Cp _w	1,0	BTU/lb °F
Calor específico – sólidos	Cps	0,75	BTU/lb °F
Densidade relativa – monômero	_M	0,9	-----
Densidade relativa – água	_w	1,0	-----
Densidade relativa – sólidos	_s	1,04	-----
Carga inicial	S(0)	119,0	lb
Fração de sólidos	-----	0,208	-----
Fração de água	-----	0,792	-----
Fração de monômero	-----	0,000	-----
Temperatura de reação	T _{set}	180,0	°F

Tab. 3A - Valores utilizados como dados iniciais para o produto B

Fator pré – exponencial	k _o	1200,0	min ⁻¹
Calor de polimerização	(-H _p)	28.200,0	BTU /lbmol
Peso molecular – monômero	MW _M	106	lb/lbmol
Calor específico – monômero	Cp _M	0,4	BTU/lb °F
Calor específico – água	Cp _w	1,0	BTU/lb °F
Calor específico – sólido	Cps	0,75	BTU/lb °F
Densidade relativa – monômero	_M	0,9	-----
Densidade relativa – água	_w	1,0	-----
Densidade relativa – sólidos	_s	1,04	-----

Carga inicial	S(0)	93,3	lb
Fração de sólidos	-----	0,204	-----
Fração de água	-----	0,796	-----
Fração de monômero	-----	0,000	-----
Temperatura de reação	T _{set}	176,0	°F

Tab. 4A - Valores utilizados como dados iniciais para programação do produto A

Significado	Variável	Valor	Unidade
Tempo de amostragem	h	0,1	min
Massa total dos componentes da mistura	m _R	85.475,0	g
Vazão mássica de alimentação de monômero	mm	1,0	lb/min
Calor específico da mistura	Cr	0,935	Btu/lb°F
Calor específico do monômero	Cpm	0,4	Btu/lb°F
Calor específico do fluido refrigerante (água)	Cpw	1,0	Btu/lb°F
Valor inicial para o coef. de transf. de calor	UA	67	Btu/min°F
Valor coef. de transf. de calor perdido	UA _{per}	0,179	Btu/min°F
Capacidade calorífica (jaqueta + parede)	Wcj	47,3	Btu/°F
Vazão mássica do fluido refrigerante	Fw	124,5	lb/min
Temperatura do reator	T _R	180	°F
Temperatura da jaqueta	T _j	180	°F
Temperatura inicial da jaqueta	T _{ji}	180	°F
Temperatura ambiente	T _{amb}	90	°F
Calor da reação	Qr	0,0	Btu/min

Tab. 5A - Valores utilizados como dados iniciais para programação do produto B

Significado	Variável	Valor	Unidade
Tempo de amostragem	h	0,1	min
Massa total dos componentes da mistura	m _R	85.475	g
Vazão mássica de alimentação de monômero	mm	0,8	lb/min
Calor específico da mistura	Cr	0,935	Btu/lb°F
Calor específico do monômero	Cpm	0,4	Btu/lb°F
Calor específico do fluido refrigerante (água)	Cpw	1,0	Btu/lb°F
Valor inicial para o coef. de transf. de calor	UA	54	Btu/min°F
Valor coef. de transf. de calor perdido	UA _{per}	0,179	Btu/min°F
Capacidade calorífica (jaqueta + parede)	Wcj	47,3	Btu/°F

Vazão mássica do fluido refrigerante	F_w	124,5	lb/min
Temperatura do reator	T_R	176	°F
Temperatura da jaqueta	T_j	176	°F
Temperatura inicial da jaqueta	T_{ji}	176	°F
Temperatura ambiente	T_{amb}	90	°F
Calor da reação	Q_r	0,0	Btu/min