GLAUCO GANCINE ESTURILIO

MODELAGEM E CONTROLE PREDITIVO ECONÔMICO DE UM REATOR DE AMÔNIA

São Paulo

2011

GLAUCO GANCINE ESTURILIO

MODELAGEM E CONTROLE PREDITIVO ECONÔMICO DE UM REATOR DE AMÔNIA

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do título de mestre em
Engenharia

São Paulo

2011

GLAUCO GANCINE ESTURILIO

MODELAGEM E CONTROLE PREDITIVO ECONÔMICO DE UM REATOR DE AMÔNIA

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do título de mestre em
Engenharia

Área de concentração: Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Darci Odloak

São Paulo

2012

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original sob responsabilidade única do autor e com anuência de seu orientador.

São Paulo, 10 de janeiro de 2012.

Assinatura do autor:

GLAUCO GANCINE ESTURILIO

Assinatura do orientador:

DARCI ODLOAK

FICHA CATALOGRÁFICA – EDIÇÃO REVISADA

Esturilio, Glaucine Gancine
Modelagem e controle preditivo econômico de um reator de amônia / G.G. Esturilio. -- ed. rev. -- São Paulo, 2012.
88 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

1. Controle preditivo de processos 2. Otimização econômica 3. Reator de amônia I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II. t.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Darci Odloak, pela orientação, paciência e pelas soluções propostas para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos constituintes da banca examinadora do exame de qualificação, pela contribuição dada através das sugestões, análise crítica e discussões.

A PETROBRAS, através dos colegas Ricardo Todt, Carlos Eduardo, Vinícius e Roberval, por ter cedido os dados fundamentais a este trabalho.

Aos colegas Paulo Ávila, Gleice Cardoso, Marco Antônio Duque e João Bosco Machado, por sempre acreditarem nos resultados deste estudo.

Ao colega Afonso Saraiva Neto, por ter revisado as explicações sobre o processo de fabricação de amônia.

À Patrícia Pantoja e à Luz Adriana, pelas informações, discussões e pela prestatividade e prontidão nos momentos em que precisei de apoio local em São Paulo.

À amiga e colega Melissa, por espontânea, gentil e pacientemente ter feito a revisão do texto.

À minha esposa Camila, pela compreensão nos diversos momentos de ausência, pela paciência de ter compartilhado a organização do nosso casamento com a confecção desta monografia e principalmente por me acompanhar em todas as jornadas.

Aos meus pais, e também ao Adelmo e à Fátima, pelo apoio incondicional em todas as decisões da minha vida.

A Deus, que silenciosamente orienta através da consciência e da paz de espírito.

“O seu trabalho no mundo (...) pode ser realizado somente por uma pessoa: você mesmo. E o seu trabalho pode ser denominado um “sucesso” somente quando, de alguma maneira, servir aos seus semelhantes”.

Paramahansa Yogananda

RESUMO

Este estudo mostra o desenvolvimento de um controlador da classe MPC – *Model Predictive Control*, ou controle preditivo com modelo, para ser utilizado no reator de amônia da Unidade de Fertilizantes Nitrogenados da Bahia – FAFEN-BA, da PETROBRAS, localizada em Camaçari/BA. A estratégia de controle visa manter as temperaturas de saída de cada um dos leitos catalíticos do reator dentro de limites adequados através da manipulação das válvulas de controle instaladas na corrente de alimentação do equipamento. O controlador escolhido foi de horizonte de predição infinito com faixas nas variáveis controladas. Adicionalmente, o controlador contém, em uma única camada, um componente de otimização econômica com o objetivo de maximizar o teor de amônia na saída do reator. A função econômica que dá a direção de otimização consiste em um modelo rigoroso de estado estacionário do reator capaz de calcular a fração molar de amônia na saída do equipamento quando são conhecidas as condições da corrente de alimentação e o valor das variáveis manipuladas do controlador. Os resultados das simulações mostraram que o controlador proposto tem bom desempenho, tanto sob o aspecto de controle, no sentido de controlar o sistema quando este sofre perturbações, quanto sob a ótica de otimização econômica, maximizando a conversão de reagentes em amônia sempre que existem graus de liberdade disponíveis no sistema. Foi verificado que a consideração de um MPC de horizonte de predição infinito elimina a necessidade de considerar o gradiente reduzido da função econômica na função objetivo do controlador. Uma sintonia adequada do controlador permite que se considere o gradiente completo da função econômica sem que haja desvio permanente, ou “*offset*”, nas variáveis controladas mesmo quando o ponto ótimo de operação se encontra além da faixa de controle.

Palavras-chave: controle preditivo com modelo, otimização econômica, reator de amônia.

ABSTRACT

This study shows the development of a Model Predictive Control (MPC) to the ammonia reactor of PETROBRAS' nitrogen fertilizers unit FAFEN-BA that is located in Camaçari/BA, Brazil. The main goal of the control strategy is to keep the temperature at the outlet of the catalyst beds inside adequate ranges by manipulating the feed flow rates to the reactor beds. It has been chosen an infinite horizon controller with control zones and an economic objective. The control and economic optimization are performed in a single layer structure where the objective is to maximize the ammonia content in the reactor outlet stream. The economic function which provides the optimization direction is based on a steady state rigorous model of the reactor that evaluates the ammonia molar fraction at the outlet stream assuming that the feed stream conditions and the manipulated variables are known. The proposed controller shows satisfactory performance in simulations either controlling the system when it faces external disturbances or optimizing the economic goal by increasing the ammonia conversion when degrees of freedom are available. It is shown that the adoption of the infinite horizon MPC eliminates the need to consider the reduced gradient of the economic function in the cost function of the controller. The proper tuning of the controller allows the consideration of the full gradient of economic function without producing offset in the controlled outputs even when the optimum operating point lays outside the control zones.

Keywords: model predictive control, economic optimization, ammonia reactor.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1 – Otimização em três camadas	18
Figura 2.2 – Otimização em duas camadas com otimizador linear	19
Figura 2.3 – Otimização em uma camada	21
Figura 3.1 – Taxa de reação versus temperatura para a síntese da amônia a diversas pressões ...	25
Figura 3.2 – Arranjos diversos para o <i>loop</i> de síntese	27
Figura 4.1 – Reator baseado na tecnologia Haldor Topsøe S-200 com dois trocadores de calor ...	30
Figura 4.2 – Diagrama de blocos do processo no reator de amônia	30
Figura 4.3 – Fluxograma de cálculo da simulação do reator de amônia	38
Figura 4.4 – Curva de equilíbrio da mistura reacional à pressão constante e curva de processo da mistura reacional ao ser submetida ao reator de amônia	42
Figura 4.5 – Curva de avanço da reação ao longo do comprimento linear percorrido na direção radial do catalisador	43
Figura 5.1 – Arquitetura da estratégia de controle proposta	46
Figura 5.2 – Resposta da variável controlada y_1 frente a um degrau na posição da válvula da corrente de alimentação E1A.	60
Figura 5.3 – Resposta da variável controlada y_1 frente a um degrau na posição da válvula da corrente de alimentação E2.	60
Figura 5.4 – Resposta da variável controlada y_2 frente a um degrau na posição da válvula da corrente de alimentação E1A.	60
Figura 5.5 – Resposta da variável controlada y_1 frente a perturbações na pressão de entrada do reator.....	61
Figura 5.6 – Resposta da variável controlada y_2 frente a perturbações na pressão de entrada do reator	61
Figura 5.7 – Resposta da variável controlada y_1 frente a perturbações na temperatura de entrada do reator.....	61
Figura 5.8 – Resposta da variável controlada y_2 frente a perturbações na temperatura de entrada do reator.....	62
Figura 6.1 – Simulação de referência – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)	65

Figura 6.2 – Simulação de referência – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)	65
Figura 6.3 – Simulação de referência – variável manipulada u_1	66
Figura 6.4 – Simulação de referência – variável manipulada u_2	66
Figura 6.5 – Simulação de referência – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica.....	66
Figura 6.6 – Simulação de referência – valor da função objetivo	67
Figura 6.7 – Simulação de referência – valores dos gradientes da função econômica.....	67
Figura 6.8 – Redução da temperatura de entrada – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)	69
Figura 6.9 – Redução da temperatura de entrada – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)	70
Figura 6.10 – Redução da temperatura de entrada – variável manipulada u_1	70
Figura 6.11 – Redução da temperatura de entrada – variável manipulada u_2	70
Figura 6.12 – Redução da temperatura de entrada – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica	71
Figura 6.13 – Redução da temperatura de entrada – valor da função objetivo	71
Figura 6.14 – Mapa da região operável do reator com curvas de nível indicando teor de amônia na corrente de saída em função das variáveis manipuladas u_1 e u_2	73
Figura 6.15 – Redução da pressão de entrada – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)	74
Figura 6.16 – Redução da pressão de entrada – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)	74
Figura 6.17 – Redução da pressão de entrada – variável manipulada u_1	74
Figura 6.18 – Redução da pressão de entrada – variável manipulada u_2	75
Figura 6.19 – Redução da pressão de entrada – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica.....	75
Figura 6.20 – Redução da pressão de entrada – valor da função objetivo.....	75
Figura 6.21 – Elevação da temperatura de entrada – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1).....	77
Figura 6.22 – Elevação da temperatura de entrada – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2).....	77

Figura 6.23 – Elevação da temperatura de entrada – variável manipulada u_1	77
Figura 6.24 – Elevação da temperatura de entrada – variável manipulada u_2	78
Figura 6.25 – Elevação da temperatura de entrada – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica	78
Figura 6.26 – Elevação da temperatura de entrada – valor da função objetivo.....	78
Figura 6.27 – Elevação da pressão de entrada – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)	79
Figura 6.28 – Elevação da pressão de entrada – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)	79
Figura 6.29 – Elevação da pressão de entrada – variável manipulada u_1	80
Figura 6.30 – Elevação da pressão de entrada – variável manipulada u_2	80
Figura 6.31 – Elevação da pressão de entrada – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica.....	80
Figura 6.32 – Elevação da pressão de entrada – valor da função objetivo.....	81

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 – Testes com o simulador estático para obtenção dos ganhos do modelo dinâmico do controlador OMPC	57
Tabela 5.2 – Valores dos ganhos obtidos através de simulação e ganhos utilizados no modelo do controlador OMPC (médias dos ganhos obtidos via simulação).....	57
Tabela 5.3 – Funções de transferência das variáveis controladas em relação às variáveis manipuladas	63
Tabela 5.4 – Funções de transferência das variáveis controladas em relação às perturbações.....	63
Tabela 6.1 – Sintonia do OMPC	64
Tabela 6.2 – Restrições das variáveis do OMPC	64

GLOSSÁRIO

SÍMBOLOS ROMANOS:

a	– parâmetro do modelo Redlich-Kwong-Soave
a_i	– atividade do componente i (adimensional)
A_t	– área de troca térmica (m^2), referente à modelagem de trocadores de calor
A_{cp}	– coeficiente de cálculo do calor específico à pressão constante, c_p (kJ/kmol.K)
b	– parâmetro do modelo Redlich-Kwong-Soave
b_i	– coeficientes do cálculo do coeficiente de efetividade ξ ($i = 0...6$)
B_{cp}	– coeficiente de cálculo do calor específico à pressão constante, c_p (kJ/kmol.K ²)
C	– capacidade calorífica (kJ/kmol)
C_{cp}	– coeficiente de cálculo do calor específico à pressão constante, c_p (kJ/kmol.K ³)
C_j	– concentração molar da espécie j (kmol/m ³)
c_p	– calor específico à pressão constante (kJ/kmol.K)
d_i	– gradiente da função econômica em relação à entrada u_i
$d_{i,j}^0$	– ganho estático obtido pela expansão em frações parciais de uma função de transferência
$d_{i,j,l}^d$	– ganho dinâmico obtido pela expansão em frações parciais de uma função de transferência
D^0	– matriz de ganhos estáticos do modelo OPOM
D^d	– matriz de ganhos dinâmicos do modelo OPOM
D_{cp}	– coeficiente de cálculo do calor específico à pressão constante, c_p (kJ/kmol.K ⁴)
D_p	– diâmetro de partícula (m)
$D_{y,d}$	– função de transferência em domínio de Laplace da saída y em relação ao distúrbio d
E_{cp}	– coeficiente de cálculo do calor específico à pressão constante, c_p (kJ.K/kmol)
f	– fugacidade do componente i
f_i^*	– fugacidade do componente i em um estado de referência arbitrário
f_i^o	– fugacidade do componente i em estado igual ao do sistema considerado
F	– matriz de pólos do modelo OPOM
F_{eco}	– função econômica
g	– aceleração da gravidade (9,81 m/s ²)
G	– matriz Hessiana da função econômica em relação às entradas u
$G_{y,u}$	– função de transferência em domínio de Laplace da saída y em relação à entrada u
h	– altura de leito catalítico (m)
ΔH_r	– entalpia de reação (kJ/kmol NH ₃)
J	– matriz auxiliar do modelo OPOM
J_j	– difusividade do componente j (kmol j/s)
k	– instante de amostragem
k_r	– constante da taxa reação (kmol/m ³ .s)
K_a	– constante de equilíbrio termodinâmico (adimensional)
m	– horizonte de controle
$\overline{M}_w$	– massa molar de uma mistura (kg/kmol)
N	– matriz auxiliar do modelo OPOM
NUT	– número de unidades de transferência (adimensional)
P	– pressão (bar)

P_G	– parâmetro de sintonia do controlador em relação ao gradiente da função econômica
q	– taxa de transferência de calor (kJ/s)
Q	– vazão volumétrica normal (Nm ³ /h referenciado a 0 °C e 1,01325 bar)
Q_u	– parâmetro de sintonia do controlador em relação às entradas u
Q_y	– parâmetro de sintonia do controlador em relação às saídas y
r	– distância ao longo de dimensão radial (m)
$r_{i,j,l}$	– pólos obtidos pela expansão em frações parciais de uma função de transferência
R	– constante universal dos gases (8,314 x 10 ⁻² m ³ .bar.kmol ⁻¹ .K ⁻¹)
R_i	– taxa de reação para o componente i (kmol i /s)
S	– função no domínio do tempo obtida por transformada inversa de Laplace aplicada a uma função de transferência
S_s	– parâmetro de sintonia do controlador em relação às variáveis de folga δ
S_u	– parâmetro de sintonia do controlador em relação às variáveis de folga δ^u
S_y	– parâmetro de sintonia do controlador em relação às variáveis de folga δ^y
T	– temperatura (K)
U	– coeficiente global de troca térmica (W/m ² .K)
u_i	– variável manipulada – entradas do controlador
Δu	– variação das entradas do controlador
Δu	– variação total das entradas do controlador ao longo do horizonte m
V_m	– volume molar (m ³ /kmol)
V	– valor da função objetivo do controlador
V_i	– taxa de formação/consumo do componente i por volume de catalisador utilizado (kmol i /m ³ _{cat} .s)
X_i	– fração molar do componente i
x	– vetor de estado, em modelos representados no espaço de estados
Y	– vetor fração molar [H ₂ N ₂ NH ₃ Ar CH ₄] (adimensional)
y_i	– variável controlada – saídas do controlador
$\hat{y}$	– variável controlada no estado estacionário – predição do controlador

SÍMBOLOS GREGOS:

δ	– variáveis de folga do controlador, ou <i>slack variables</i>
∇	– operador nabla
ϵ	– efetividade de troca térmica (adimensional)
ε	– porosidade (adimensional)
Φ	– matriz auxiliar do modelo OPOM
γ_i	– coeficiente de atividade do componente i (adimensional)
η	– conversão (adimensional)
λ	– condutividade térmica (kW/m.K)
μ	– viscosidade (Pa.s)
Ψ	– matriz auxiliar do modelo OPOM
v	– velocidade de escoamento (m/s)
v_{ij}	– coeficiente estequiométrico do componente j em relação ao componente i

ρ	– massa específica (kg/m ³)
ω	– vazão mássica (kg/s)
ξ	– coeficiente de efetividade (cinética de reação em meio poroso) (adimensional)
$\zeta_{u+\Delta u^-}$	– aproximação de primeira ordem do gradiente da função econômica

ÍNDICES:

1, 2...	– relativo às entradas u ou às saídas y
1L	– relativo ao 1º leito de reação
2L	– relativo ao 2º leito de reação
d	– relativo ao estado dinâmico (sobrescrito)
e	– relativo à condição de entrada
f	– relativo ao fluido frio
Gl	– relativo ao gás ideal
k	– instante de amostragem
mín	– mínimo
max	– máximo
q	– relativo ao fluido quente
ref	– relativo a uma referência
s	– relativo ao estado estacionário, ou <i>steady state</i> (sobrescrito)
S	– relativo à condição de saída
sat	– relativo à condição de saturação no equilíbrio líquido-vapor
sp	– relativo ao <i>set point</i> (sobrescrito)
T	– matriz transposta (sobrescrito)
TC1	– relativo ao trocador de calor intermediário, ou <i>interbed heat exchanger</i>
TC2	– relativo ao trocador de calor final, ou <i>feed-effluent heat exchanger</i>

ABREVIATURAS, SIGLAS E REFERÊNCIAS A EQUIPAMENTOS:

105-D	– reator de amônia
122-C	– trocador de calor final, ou <i>feed-effluent heat exchanger</i>
122-CA	– trocador de calor intermediário, ou <i>interbed heat exchanger</i>
FAFEN-BA	– Fábrica de Fertilizantes Nitrogenados da Bahia
FAFEN-SE	– Fábrica de Fertilizantes Nitrogenados de Sergipe
IHMP	– <i>Infinite Horizon Model Predictive Control</i>
MatLAB®	– <i>MathWorks MATLAB</i>
MPC	– <i>Model Predictive Control</i>
OMPC	– <i>Model Predictive Control</i> com Otimização Econômica
OPOM	– <i>Output Prediction Oriented Model</i>
PETROBRAS	– Petróleo Brasileiro S.A.
PRBS	– <i>Pseudo Random Binary Sequence</i>
RTO	– <i>Real Time Optimization</i>

SUMÁRIO

1	Introdução	15
1.1	Controle Avançado de Processos	15
1.2	Motivação.....	16
1.3	Objetivo	17
1.4	Apresentação.....	17
2	Revisão Bibliográfica	18
2.1	Controle Preditivo e Otimização em Tempo Real	18
2.2	Modelagem de Reatores de Amônia	22
3	Processo de Fabricação de Amônia	25
4	Modelagem do Reator de Amônia.....	29
4.1	Descrição do Equipamento	29
4.2	Leitos Catalíticos	31
4.3	Trocadores de Calor	37
4.4	Roteiro de Cálculo.....	38
4.5	Resultados do Modelo Desenvolvido	41
5	Desenvolvimento do Controlador.....	45
5.1	Descrição do Problema de Controle.....	45
5.2	Modelo OPOM – Output Prediction Oriented Model	47
5.3	Controlador IHMPC por Faixas	49
5.4	Controlador IHMPC por Faixas com Alvos para as Entradas.....	51
5.5	Controlador OMPC – MPC com Otimização Econômica	53
5.6	Identificação do sistema	55
5.6.1	Obtenção dos ganhos estáticos – modelo do controlador	56
5.6.2	Obtenção dos ganhos estáticos – modelo do processo.....	57
5.6.3	Obtenção dos componentes dinâmicos.....	58
6	Resultados	64
6.1	Simulação de Referência – Sem Perturbações.....	65
6.2	Simulações com Perturbações	68
6.3	Método do Gradiente Reduzido.....	82
7	Conclusões.....	84
	REFERÊNCIAS	86

1 Introdução

1.1 Controle Avançado de Processos

A complexidade dos processos da indústria química, a acirrada concorrência entre fabricantes na competição por suas fatias de mercado aliada ao conseqüente estreitamento das margens de lucro, a segurança operacional das unidades industriais tanto para os trabalhadores quanto para as instalações e a crescente cobrança por responsabilidade ambiental, tanto de órgãos governamentais através de legislação quanto da própria sociedade, exigem cada vez mais que os processos produtivos sejam estáveis e de alta eficiência.

A utilização do controle clássico, composto por malhas do tipo PID – proporcional-integral-derivativo (do inglês, *proportional-integral-derivative*), é satisfatória para aplicações simples. No entanto suas características limitam seu desempenho quando é necessário controlar sistemas complexos como os que possuem reciclo, integração energética, resposta inversa ou sistemas com característica de não linearidade pronunciada.

Dentro da área da ciência de controle de processos chamada Controle Avançado de Processos estão os controladores do tipo MPC – do inglês, *Model Predictive Control*, ou controle preditivo baseado em modelos. Como o próprio nome sugere, tais controladores se utilizam de modelos matemáticos do sistema a ser controlado para antecipar a resposta deste frente a alterações em seus parâmetros operacionais ou a distúrbios. Tais controladores são aplicáveis a sistemas multivariáveis e se propõem a dar maior estabilidade ao que se controla, minimizando a duração dos períodos transientes. O número de instantes à frente preditos pelo controlador é normalmente chamado de *horizonte de controle*, o qual pode ser extrapolado para o infinito através de artifícios matemáticos.

Para garantir que a estabilização do sistema se dará em pontos ótimos operacionais, é possível acoplar aos controladores preditivos cálculos que conduzam os parâmetros de operação de forma suave e controlada para uma condição ótima, esta por sua vez calculada através de modelos rigorosos dos processos. Pode-se chamar otimização econômica quando da existência de uma função cujo ponto ótimo perseguido resulta em operação quantificavelmente mais econômica.

Este trabalho propõe um controlador preditivo de horizonte infinito com otimização econômica para controlar e otimizar a operação do reator de amônia da Unidade de Fertilizantes Nitrogenados da Bahia, FAFEN-BA, da PETROBRAS. A função de otimização econômica consiste em calcular o teor de amônia na saída do equipamento, e portanto a conversão por passe, através de um modelo rigoroso do reator. A otimização econômica, neste caso, se propõe a aumentar a quantidade de amônia produzida pelo reator, e conseqüentemente na planta, dada uma mesma quantidade de matéria-prima a ela alimentada, ou então produzir uma quantidade fixa de amônia consumindo menor quantidade de gás natural.

1.2 Motivação

A FAFEN-BA foi submetida recentemente a um intenso processo de modernização em seus sistemas de automação e controle, tendo sido substituído o antigo sistema analógico por um novo de base digital.

Além dos resultados já obtidos entre agosto de 2009 e o presente momento acerca de questões como segurança e continuidade operacional, a maximização dos resultados deste processo de modernização pode ser alcançada através da implantação de sistemas de controle avançado. Dentre os equipamentos principais da unidade, cujo desempenho está diretamente ligado à continuidade operacional e à produtividade, está o reator de amônia.

Considerando as unidades de fertilizantes existentes da PETROBRAS e os projetos em execução nesta área, foi averiguado que, considerando tecnologias distintas, os reatores industriais de amônia são equipamentos complexos de comportamento potencialmente oscilatório cujo controle é costumeiramente manual em razão de sua sensibilidade.

Assim, a motivação deste trabalho partiu da possibilidade de se explorar a operação ótima dos reatores de amônia, obtendo da planta como um todo maior rendimento e, conseqüentemente, melhor eficiência energética, o que resulta tanto em maior lucratividade para o negócio quanto em menor influência para o meio-ambiente.

1.3 Objetivo

O objetivo deste estudo é obter um controlador preditivo de horizonte infinito que se mostre capaz de controlar e otimizar economicamente o reator industrial de produção de amônia da FAFEN-BA, sendo a estrutura de controle e do cálculo de otimização em uma única camada.

Paralelamente, tendo em vista o objetivo de otimização econômica supracitado, deseja-se também produzir um modelo rigoroso de estado estacionário do reator em questão, o qual será utilizado para calcular a direção de otimização do controlador proposto.

1.4 Apresentação

O trabalho consiste em 8 capítulos, incluída esta introdução, assim divididos: o capítulo 2 traz a revisão bibliográfica, tanto a respeito de controle preditivo com otimização integrada quanto a respeito da modelagem de reatores de amônia. Os capítulos 3 e 4 trazem a história e a importância do processo de produção industrial de amônia bem como a descrição detalhada da modelagem utilizada como simulação rigorosa para otimização do reator estudado. O quinto capítulo descreve o problema de controle, a formulação do controlador e o processo de identificação do sistema a ser controlado. O Capítulo 6 mostra os resultados dos testes de simulação do controlador proposto e o Capítulo 7 condensa as conclusões obtidas a partir destes testes. Finalizando, o oitavo e último capítulo traz sugestões para a continuidade do trabalho apresentado nesta dissertação.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Controle Preditivo e Otimização em Tempo Real

A implementação clássica das estratégias de otimização em tempo real, RTO (do inglês, *Real Time Optimization*) é feita em três camadas (ROTAVA; ZANIN, 2005). Nesta proposta, uma camada de otimização não-linear envia a uma segunda camada de otimização valores ótimos de operação para as entradas e saídas que serão utilizadas no algoritmo de programação linear (PL), ou de programação quadrática (PQ) baseada em modelo linear, para a obtenção de novos pontos ótimos de operação. Os resultados são inseridos como alvos em um controlador, correspondente à terceira camada, que utiliza modelos dinâmicos lineares e um algoritmo de controle multivariável para manter a unidade industrial operando com os valores ótimos de operação das variáveis controladas e manipuladas. A camada da otimização não-linear é executada numa frequência relativamente baixa, que depende da complexidade do processo, podendo o intervalo entre uma execução e outra chegar a horas, já a otimização linear e o controlador são resolvidos seqüencialmente e na mesma frequência na ordem de minutos. Esta estratégia é ilustrada na Figura 2.1.

Figura 2.1 – Otimização em três camadas

Na estratégia de duas camadas, a camada de otimização obtém, através de um algoritmo de programação não-linear, os valores-alvos (ou *setpoints*, no inglês) ótimos das variáveis para o estado estacionário, baseando-se para tal em informações das variáveis controladas, restrições do processo, graus de liberdade e função objetivo econômico. Os resultados são enviados para a camada de controle, que os utiliza como *setpoints* das variáveis manipuladas e controladas. A cada nova execução, novos valores de referência são calculados e reenviados ao controlador. A sintonia do controlador pode ser realizada com técnicas de controle robusto (GOUVÊA, 1997; TRIERWEILER et al., 2001).

A estratégia de duas camadas com otimizador linear, ilustrada na Figura 2.2 é a mais utilizada para o controle multivariável em indústrias de processo. As duas camadas, embora independentes, são executadas na mesma frequência.

Figura 2.2 – Otimização em duas camadas com otimizador linear

Uma comparação entre as estratégias de duas e três camadas foi feita por Ying e Joseph (1999) e traz a conclusão de que, se a otimização não-linear for executada na mesma frequência do controlador multivariável, não há vantagem na utilização da estratégia em três camadas. Já para os casos em que a modelagem do processo é de alta complexidade, a estratégia de três camadas é vantajosa por motivos tais como:

- (a) melhor desempenho econômico no estado estacionário. O otimizador linear desloca os valores ótimos obtidos pela camada de otimização não-linear quando da ocorrência de perturbações para uma condição melhor do ponto de vista econômico. Na estratégia de três camadas ocorre retroalimentação do processo, atualizando o

efeito das perturbações nas variáveis controladas, já que as duas camadas inferiores são executadas na mesma frequência.

(b) eliminação de desvios permanentes, ou *offsets*, nas variáveis controladas. Devido às perturbações do sistema, pode haver saturação de variáveis e perda de graus de liberdade, impossibilitando a implementação da solução apresentada pelo otimizador não-linear da estratégia de duas camadas. Na estrutura de três camadas, a camada de otimização intermediária (linear) detecta as perturbações e determina uma nova solução ótima que elimina os *offsets* nas variáveis controladas.

(c) melhor desempenho dinâmico. A estratégia de duas camadas, devido à característica de sua função objetivo, tende a suprimir grandes variações nas variáveis manipuladas, tornando o controlador muito lento e podendo causar desvios em relação aos valores ótimos das variáveis controladas. Na estratégia de três camadas, no entanto, a camada intermediária detecta as perturbações e ajustes podem ser realizados para os novos valores ótimos das variáveis manipuladas e controladas antes que estes sejam finalmente encaminhados para a camada controladora.

Zanin (2001) propõe outra forma de implementar a otimização não-linear, utilizando o modelo rigoroso do processo apenas para obter as derivadas parciais da função objetivo econômico em relação às variáveis manipuladas. Neste caso, é utilizado um controlador de duas camadas, na qual a camada superior é uma PL (Programação Linear) que minimiza a função objetivo definida por:

$$\min_{u^*} \frac{\partial f}{\partial u} u^* \quad (2.1)$$

em que $\frac{\partial f}{\partial u}$ corresponde ao vetor das derivadas parciais da função objetivo econômico em relação às variáveis manipuladas, obtidas através do referido modelo rigoroso do processo por um programa executado de forma independente do algoritmo de otimização, e u^* são

os valores ótimos a serem enviados para o controlador. Na estrutura proposta, a otimização é efetuada através de um algoritmo de programação linear cujos coeficientes $(\frac{\partial f}{\partial u})$ da função objetivo são atualizados através do modelo rigoroso do processo nos diferentes pontos de operação.

Se o problema de otimização estática não-linear for resolvido simultaneamente com o problema de controle preditivo multivariável, tem-se a estratégia de uma camada (GOUVÊA, 1997), conforme ilustrado pela Figura 2.3.

Figura 2.3 – Otimização em uma camada

A formulação do controle dinâmico linear, as equações de lucratividade e o modelo do sistema no estado estacionário estão incluídas na função objetivo. Neste caso, a camada única contendo otimização e controlador será resolvida através de um algoritmo de programação não linear juntamente com as restrições estáticas e dinâmicas. A frequência de execução do algoritmo deve ser alta para que seja possível rejeitar adequadamente as perturbações dinâmicas do processo (GOUVÊA; ODLOAK, 1998; PORFÍRIO, 2011).

Gouvêa e Odloak (1998) apresentam uma aplicação do otimizador não-linear integrado ao controle para a maximização da produção de gás liquefeito de petróleo em uma unidade de craqueamento catalítico. O problema dinâmico é formulado de maneira a impor trajetórias para as variáveis controladas. Os autores comparam a estratégia de otimização em uma camada com a otimização não-linear em duas camadas e concluem que a primeira, além de assimilar mais rapidamente as mudanças nos objetivos econômicos da unidade, apresenta uma resposta mais suave, estabilizando o processo. Todavia, a lentidão da resposta reduz o desempenho do algoritmo na rejeição de fortes perturbações que eventualmente venham a ser adicionadas ao processo.

É importante mencionar que erros no modelo do processo podem afetar o ponto ótimo de operação tanto no caso de otimização em uma camada quanto nos casos em que são utilizadas duas ou três camadas (PORFÍRIO, 2011).

Souza (2007) apresenta uma estratégia desenvolvida em uma camada na qual os problemas de controle e otimização são resolvidos simultaneamente no mesmo algoritmo. A função objetivo econômica é inserida no controlador na forma diferencial através de seu gradiente. A função objetivo do controlador incorpora portanto componentes dinâmicos e estáticos. Se a solução de controle indicar previsão de violações das restrições das variáveis controladas, o gradiente da função objetivo econômica é então inserido no controlador em sua forma reduzida, isto é, ficam cancelados enquanto necessário os componentes do gradiente que estejam forçando o sistema para uma região além das restrições existentes.

O bom desempenho relatado nos resultados simulados por Souza (2007) ao utilizar o modelo não-linear rigoroso de uma unidade de craqueamento catalítico apresentado por Moro e Odloak (1995) levou Porfírio (2011) a implementar o controlador com otimização econômica em uma camada em uma coluna de destilação de tolueno pertencente a unidade de recuperação de aromáticos da Refinaria Presidente Bernardes, Cubatão/SP. O trabalho relata o bom funcionamento contínuo do controlador, confirmando sua aplicabilidade.

Alvarez e Odloak (2010) aplicam a mesma estratégia de otimização econômica em uma camada através do gradiente da função econômica a um processo de polimerização de estireno em um reator tanque de mistura perfeita. Porém, ao contrário dos demais trabalhos, os autores utilizam o algoritmo de controlador de horizonte infinito com faixas nas variáveis controladas. É utilizada uma função econômica hipotética com o formato de um parabolóide elíptico contendo o máximo na região viável, considerando operação nas condições nominais. A conclusão mostra que determinadas perturbações podem tornar tal ponto ótimo inatingível, situação na qual o controlador conduz o sistema para a melhor condição econômica alcançável.

2.2 Modelagem de Reatores de Amônia

Singh e Saraf (1979) apontam que, sendo a reação de formação da amônia exotérmica, todos os projetos de reatores possuem aparato para remover a energia gerada

nos leitos catalíticos à medida do avanço da reação. Com objetivo de representar os diversos arranjos existentes, os autores modelam um reator com três leitos adiabáticos e outro do tipo autotérmico.

Como a reação de formação de amônia é de baixa conversão por passe, é necessário reciclar os gases não reagidos, os quais representam uma vazão volumétrica muito maior que a de reposição (FRANCO; NETO, 2007). É evidente, portanto, que a perda de carga no reator impacta diretamente a eficiência energética do processo produtivo de amônia como um todo. Yamamoto (1998) afirma que o projeto de reatores de amônia resulta de uma busca por um perfil ótimo de temperatura, capaz de garantir ao mesmo tempo níveis satisfatórios de conversão, segurança e investimento, e minimização da perda de carga nos leitos catalíticos com o objetivo de minimizar o custo de compressão dos gases.

Assim, conclui-se que os diferentes projetos de reatores de amônia diferem entre si basicamente quanto à estratégia de integração energética e às soluções para obter menor perda de carga possível.

Do ponto de vista do controle de temperatura, os diferentes projetos são divididos em dois principais grupos: reatores com vários leitos, e resfriamento intermediário entre eles, e reatores casco-e-tubo multitubulares de leito fixo (PEDERNERA; BORIO; PORRAS, 1996).

Os reatores com vários leitos podem ser classificados quanto ao método de resfriamento em dois tipos diferentes: reatores com trocador de calor interno e reatores resfriados por *quench*, quando há injeção direta de reagentes frescos no espaço entre os leitos catalíticos (YAMAMOTO, 1998).

Segundo Topsøe (2011), os modelos de reator com trocador de calor apresentam a vantagem de que todo o volume de reagentes é exposto à totalidade da carga catalítica, isto é, não se dilui o produto final desejado devido à injeção intermediária de reagentes frescos. Isso equivale a dizer que, para uma dada produção de amônia, o volume de catalisador utilizado neste tipo de reator é menor do que nos do tipo *quench*. Yamamoto (1998), por outro lado, ressalta que para os reatores do tipo *quench* economiza-se o custo relacionado aos trocadores de calor e obtém-se controle de temperatura mais rápido, dado o fato de que os reatores com trocador interno possuem limitação de troca térmica vinculada à carga alimentada.

Dentre as soluções para minimizar perda de carga, destaca-se a direção do fluxo através dos leitos catalíticos, a qual pode ser radial, axial ou mista (axial-radial). Segundo Reis (1992), o menor volume de catalisador empregado nos reatores de fluxo radial e o fato de que neles o leito catalítico representa apenas uma fina camada pela qual o gás flui levam à minimização da queda de pressão. Zardi e Bonvin (1992) destacam que as principais vantagens do reator de fluxo axial-radial são a menor perda de carga, quando comparado a reatores de fluxo puramente axial, e mais bem aproveitada utilização do catalisador, quando comparado aos reatores de fluxo puramente radial, sendo portanto mais eficiente.

Do ponto de vista dinâmico, um reator de amônia do tipo *quench* foi modelado por Morud e Skogestad (1998) para explicar as causas da instabilidade detectada em uma unidade industrial alemã em 1989. Os autores conseguem reproduzir o comportamento oscilatório inserindo no modelo perturbação semelhante àquela ocorrida na unidade real: súbita queda de pressão no reator. O teste é feito em três etapas: redução de pressão de 200 bar para 170 bar, mantendo o reator ainda estável, e nova redução após 20 minutos para 150 bar, quando o comportamento oscilatório se manifesta. Após 120 minutos, o nível de pressão inicial (200 bar) é restabelecido e o reator retorna para suas condições originais. O trabalho mostra que a análise puramente de estados estacionários proposta por van Heerden (1953) não é suficiente para explicar o comportamento oscilatório e apresenta complementarmente uma análise linear convencional, baseada nos diagramas de Bode e Nyquist, cujos resultados condizem com os obtidos pela simulação não-linear. A explicação física dada pelos autores remete à resposta inversa que se manifesta na temperatura de saída do reator quando suas condições de entrada se alteram. O impacto imediato causado por uma variação na temperatura de entrada do reator, por exemplo, é em seguida sobreposto pela resposta positiva da integração térmica. É importante observar que a oscilação somente se manifesta a partir de certa intensidade das perturbações.

Em complementação, Mancusi *et al.* (2000) fazem uma análise dinâmica mais profunda do mesmo modelo proposto por Morud e Skogestad (1998) e trazem como resposta a existência de múltiplos estados estacionários. Novamente, os comportamentos oscilatórios somente se manifestam frente a perturbações bastante intensas, como variação de pressão de 200 bar para valores menores do que 140 bar.

3 Processo de Fabricação de Amônia

A amônia é industrialmente produzida através da reação entre nitrogênio e hidrogênio:

A formação da amônia como descrita na equação (3.1) é termodinamicamente viável à temperatura e pressão ambientes, porém não é cineticamente factível. A alta temperatura necessária para o favorecimento cinético, sem o necessário incremento na pressão, torna a reação termodinamicamente inviável.

A Figura 3.1 mostra a taxa de reação em função da temperatura, em diversas pressões, para a síntese de amônia em catalisador Haldor Topsøe KM1 com mistura contendo 10% de inertes, 12% de amônia e proporção molar 3:1 entre hidrogênio e nitrogênio.

Figura 3.1 – Taxa de reação versus temperatura para a síntese da amônia a diversas pressões

Em 1908, Fritz Haber (1868-1934) e seu ajudante Robert Le Rossignol (1884-1976) projetaram, construíram e modificaram até que funcionasse um aparato para sintetizar amônia a partir de seus gases fundamentais, hidrogênio e nitrogênio, a 200 atm, pressão para a qual, a 600 °C, os cálculos indicavam um teor de amônia teórico no produto de 8%. A mistura reagente era introduzida em um reator vertical após ser pré-aquecida com o calor

da própria reação. Os produtos eram então resfriados até a condensação da amônia para que os gases não reagidos retornassem ao reator. Uma equipe da BASF (Badische Anilin und Soda-Fabrik) liderada por Carl Bosch (1874-1940) no início do século XX levou o experimento de bancada de Haber, com produção de 100 g de NH_3/h , à escala industrial em apenas 4 anos em uma unidade que produzia 200 kg de NH_3/h (CHAGAS, 2007).

Os resultados obtidos por Haber, e levados à escala industrial por Bosch, mostraram que a incógnita da síntese de amônia a partir de hidrogênio e nitrogênio havia finalmente sido desvendada sob o aspecto do favorecimento simultâneo termodinâmico e cinético. Mais que isso, a solução conceitual de processo que viabilizou a produção industrial de amônia fora então desenvolvida.

Atualmente, os principais licenciadores de tecnologia para produção de amônia são a dinamarquesa Haldor Topsøe, a alemã UHDE, a italiana Ammonia Casale e a norte-americana KBR, fusão das antigas M.W. Kellogg e Brown & Root.

Industrialmente, após as etapas de geração de hidrogênio, separação de CO_2 e purificação, o gás de síntese de amônia, contendo hidrogênio e nitrogênio na proporção adequada, é inserido em um ciclo constituído por etapas de compressão, reação de formação de amônia, condensação de amônia e purga de gases inertes. É neste ciclo que o reator de amônia, objeto de estudo deste trabalho, se insere no processo de produção.

Appl (2006) apresenta diversos arranjos possíveis para o ciclo de síntese, conforme ilustrado pela Figura 3.2. O caso “A” mostra o ciclo configurado para o caso em que o gás de síntese fresco, ou *makeup gas*, é puro e seco, chamado “*loop seco*”. Neste caso, a água é removida antes da seção de síntese e não há necessidade de se condensar nada entre a compressão e o reator. O caso B ilustra a condensação de amônia após a compressão do gás de reciclo enquanto o caso C mostra a condensação antes da recompressão dos gases não reagidos. O caso D, finalmente, mostra a condensação de amônia em duas partes: uma com auxílio de ciclo de refrigeração e outra a temperatura ambiente, processos que são conhecidos no jargão industrial e de projeto, respectivamente, como condensação de amônia fria e de amônia morna.

Estes arranjos podem ainda ser combinados a depender de fatores como, por exemplo, dos diversos processos à montante do ciclo, do compressor a ser utilizado, do perfil de temperatura do reator, do balanço de utilidades da unidade a respeito de

refrigeração e da necessidade de mercado de cada planta em cada localidade de se produzir mais ou menos amônia morna.

Figura 3.2 – Arranjos diversos para o *loop* de síntese. Equipamentos: a) reator de síntese com trocadores de calor; b) condensação de amônia fria; c) condensação de amônia morna; d) compressor de gás de síntese; e) compressor de gás de reciclo. (Fonte: APPL, 2006)

A reação dentro do conversor de amônia se procede com catalisador composto por ferro enriquecido com promotores de óxidos de outros metais tais como alumínio, potássio, cálcio ou magnésio. A temperatura ótima de operação para este catalisador está na faixa dos 400 °C, a pressões variando de 150 atm a 300 atm (BENCIC, 2001).

Segundo Strelzoff (1988), o funcionamento do catalisador se baseia no fato de que a superfície do ferro possibilita a formação de um composto nitrogenado com ligações fracas o bastante para permitir a dessorção da amônia formada, o que não acontece quando da quimissorção do nitrogênio em outros metais como lítio, cálcio ou alumínio.

Bencic (2001) afirma que o ferro, sendo um metal de transição com bandas-d parcialmente ocupadas, constitui uma superfície favorável à adsorção e dissociação do nitrogênio gasoso. Afirma ainda que estudos com catalisadores de ferro em conformação cúbica de corpo centrado mostram que a orientação dos cristais tem grande impacto na taxa de reação.

Considerando-se * um sítio ativo disponível sobre a superfície do catalisador, um mecanismo proposto para a reação é:

(FONTES: APPL, 2006; BENCIC, 2001; YAMAMOTO, 1998; ERTL, 1991)

Estudos evidenciam que a etapa lenta, portanto determinante da taxa de reação, é a que corresponde à adsorção dissociativa do nitrogênio, conforme explicitado pela equação (3.4). Há contestações, no entanto, que afirmam que a etapa mais lenta seria a hidrogenação do nitrogênio atômico adsorvido, conforme a equação (3.5) (APPL, 2006; BENCIC, 2001).

4 Modelagem do Reator de Amônia

4.1 Descrição do Equipamento

O modelo matemático desenvolvido para atuar na estrutura de otimização do controlador proposto é estacionário não-linear e reproduz o reator baseado no modelo S-200 da tecnologia Haldor Topsøe instalado na Fábrica de Fertilizantes Nitrogenados da Bahia – FAFEN-BA, localizada em Camaçari, pertencente à PETROBRAS.

A principal característica deste tipo de reator é a existência de dois leitos catalíticos com um trocador de calor entre os leitos, também chamado *interbed heat exchanger*, sendo o fluxo 100% radial através de cada um dos leitos (Topsøe, 2011).

A versão do S-200 utilizada como base neste trabalho, representada pela Figura 4.1, possui um trocador de calor embutido entre os leitos catalíticos (*interbed heat exchanger*) para resfriar a mistura reacional e um segundo trocador para pré-aquecer os reagentes e resfriar o produto final, também chamado *feed-effluent heat exchanger*.

O processo interno do reator modelado consiste primeiramente em dividir a corrente de alimentação em três partes: a entrada E2 é encaminhada diretamente ao primeiro leito de reação (1L). Uma das demais partes é inserida no trocador *interbed* (entrada E1A) e a terceira é alimentada primeiramente ao casco do equipamento, a fim de mantê-lo resfriado, e em seguida é direcionada ao trocador *feed-effluent* (entrada E1B). Após os processos de troca térmica, as correntes de entrada E1A e E1B se misturam à corrente E2 e são então direcionadas para o ânulo externo de 1L, atravessando-o radialmente no sentido de fora para dentro. O ponto de mistura das três correntes se encontra em destaque na Figura 4.2.

A energia liberada pela reação de formação da amônia é removida da corrente de produtos de 1L no trocador *interbed* e, em seguida, a corrente parcialmente convertida é encaminhada para o ânulo externo do segundo leito catalítico (2L). O leito 2L é também atravessado radialmente no sentido de fora para seu centro até o tubo coletor. Este tubo transporta os produtos para o trocador *feed-effluent*, após o qual finalmente a corrente contendo amônia é devolvida ao processo.

Figura 4.1 – Reator baseado na tecnologia Haldor Topsøe S-200 com dois trocadores de calor

Esquemáticamente, pode-se representar este processo conforme o diagrama de blocos a seguir:

Figura 4.2 – Diagrama de blocos do processo no reator de amônia

A corrente tracejada corresponde à troca térmica entre parte dos reagentes e o casco do equipamento e foi desprezada nesta modelagem.

4.2 Leitos Catalíticos

A modelagem dos leitos catalíticos foi baseada na proposição de Zardi e Bonvin (1992), que sugerem partir da solução simultânea do balanço de quantidade de movimento, balanço de massa e balanço de energia para se obter as condições de saída de cada leito:

$$\rho v \cdot \nabla v = -\nabla P + \mu \nabla^2 v + \rho g \quad (4.1)$$

$$\nabla(\rho v) = 0 \quad (4.2)$$

$$\rho v \cdot \nabla(C_j / \rho) + \nabla \cdot J_j = \sum_i v_{ij} R_i \quad (4.3)$$

$$\rho c_p v \cdot \nabla T = \sum_i (-\Delta H_r)_i R_i + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (4.4)$$

onde:

ρ	– massa específica (kg/m ³)
v	– velocidade de escoamento (m/s)
P	– pressão (bar)
μ	– viscosidade (Pa.s)
g	– aceleração da gravidade (9,81 m/s ²)
C_j	– concentração molar da espécie j (kmol/m ³)
J_j	– difusividade do componente j (kmol j /s)
v_{ij}	– coeficiente estequiométrico do componente j em relação ao componente i
R_i	– taxa de reação para o componente i (kmol i /s)
c_p	– calor específico à pressão constante (kJ/kmol.K)
T	– temperatura (K)
$(-\Delta H_r)_i$	– entalpia de reação em relação a 1 mol do componente i (kJ/kmol i)
λ	– condutividade térmica (kW/m.K)

O comportamento fluidodinâmico do sistema, isto é, os perfis de pressão e velocidade, são definidos pela solução das equações (4.1) e (4.2).

Para levar em conta a presença do catalisador, o termo da força viscosa na equação (4.1) é substituído pela expressão de escoamento em leito poroso proposta por Ergun:

$$\mu \nabla^2 v = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2 \mu v}{\varepsilon^3 D_p^2} + 1,75 \frac{(1-\varepsilon) \rho v^2}{\varepsilon^3 D_p} \quad (4.5)$$

onde ε é a porosidade do leito catalítico e D_p é o diâmetro das partículas de catalisador.

A ordem de grandeza dos termos da equação de Ergun é muito maior do que a obtida quando da multiplicação da massa específica pela velocidade ou pela gravidade, ou seja, pode-se desprezar o primeiro membro da equação (4.1), bem como o elemento gravitacional. Os leitos catalíticos no reator modelado são cilíndricos com centro oco e o fluxo através deles se dá apenas na direção radial. Assim, o comportamento fluidodinâmico unidimensional em coordenadas cilíndricas, aplicando-se as simplificações propostas, pode ser escrito como:

$$\frac{dP}{dr} = -150 \frac{(1-\varepsilon)^2 \mu v}{\varepsilon^3 D_p^2} + 1,75 \frac{(1-\varepsilon) \rho v^2}{\varepsilon^3 D_p} \quad (4.6)$$

$$\frac{d(\rho v)}{dr} + \frac{\rho v}{r} = 0 \quad (4.7)$$

onde r corresponde à posição na dimensão radial do leito catalítico cilíndrico.

Como a vazão mássica é constante, a expressão para calcular a velocidade pode ser obtida reescrevendo a equação (4.7) na forma:

$$v = \frac{\omega}{\rho 2\pi r h} \quad (4.8)$$

onde ω corresponde à vazão mássica e h à altura do leito do leito catalítico cilíndrico.

O balanço de massa para as espécies não inertes e o balanço de energia, considerando a estequiometria de reação, no sistema de coordenadas proposto, é descrito por:

$$\frac{d[H_2]}{dr} = -\xi V_{NH_3} \frac{3/2}{\rho v} \quad (4.9)$$

$$\frac{d[N_2]}{dr} = -\xi V_{NH_3} \frac{1/2}{\rho v} \quad (4.10)$$

$$\frac{d[NH_3]}{dr} = \xi V_{NH_3} \frac{1}{\rho v} \quad (4.11)$$

$$\frac{dT}{dr} = \xi V_{NH_3} \frac{-\Delta H_r \overline{M}_w}{\rho v c_p} \quad (4.12)$$

onde:

- $[H_2]$ – concentração de hidrogênio (kmol H_2 /kg de mistura)
- $[N_2]$ – concentração de nitrogênio (kmol N_2 /kg de mistura)
- $[NH_3]$ – concentração de amônia (kmol NH_3 /kg de mistura)
- ξ – coeficiente de efetividade para o tipo de catalisador utilizado
- V_{NH_3} – taxa de formação de amônia (kmol NH_3 /m³_{catalisador}.s)
- $\overline{M}_w$ – massa molar da mistura (kg/kmol)

As propriedades do fluido, como massa específica ρ e viscosidade μ , são calculadas a cada passo de integração com o modelo termodinâmico Redlich-Kwong-Soave, conforme descrito por Poling, Prausnitz e O'Connell (2000) e por Smith, van Ness e Abbott (2000). Considerando que a integração ocorre em pequenos passos ao longo da direção radial e que a variação destas propriedades em cada passo é desprezível, é razoável escrever as equações diferenciais de forma que em cada elemento de espaço através do qual a integração é computada as propriedades ρ e μ sejam consideradas constantes. O mesmo vale para a massa molar da mistura, entalpia de reação, velocidade de escoamento, calor específico.

A taxa de formação de amônia é escrita conforme a expressão de Temkin (1950):

$$V_{NH_3} = 2k_r \left[K_a^2 a_{N_2} \left(\frac{a_{H_2}^3}{a_{NH_3}^2} \right)^\alpha - \left(\frac{a_{NH_3}^2}{a_{H_2}^3} \right)^{1-\alpha} \right] \quad (4.13)$$

onde:

- k_r – constante da taxa reação (kmol/m³.s)
- K_a – constante de equilíbrio termodinâmico (adimensional)
- a_{H_2} – atividade do gás hidrogênio (adimensional)
- a_{N_2} – atividade do gás nitrogênio (adimensional)
- a_{NH_3} – atividade da amônia (adimensional)
- α – parâmetro cinético (adimensional)

A constante da taxa de reação é calculada de acordo com o proposto por Dyson e Simon (1968):

$$2k_r = \left(\frac{1}{3600} \right) 1,7698 \times 10^{15} e^{\frac{-40765}{1,987T}} \quad (4.14)$$

A constante de equilíbrio termodinâmico, K_a , é calculada conforme expressão de Gillespie e Beatie (1930):

$$\log_{10} K_a = -2,691122 \log_{10} T - 5,519265 \times 10^{-5} T + 1,848863 \times 10^{-7} T^2 + \frac{2001,6}{T} + 2,6899 \quad (4.15)$$

As atividades a_i podem ser definidas com a seguinte expressão:

$$a_i = \frac{f_i}{f_i^*} \quad (4.16)$$

na qual f_i^* é a fugacidade do componente i em um estado de referência. Fazendo com que a referência seja o componente puro na pressão de 1 atm e temperatura igual a do sistema considerado, pode-se reescrever a expressão (4.16):

$$a_i = f_i = X_i f_i^o \quad (4.17)$$

na qual X_i é a fração molar do componente i e f_i^o é a fugacidade do componente i puro na temperatura e pressão do sistema. A fugacidade de componentes puros pode ser escrita na forma:

$$f_i^o = \gamma_i P \quad (4.18)$$

na qual P corresponde à pressão total do sistema e γ_i , ao coeficiente de atividade do componente i .

Os coeficientes de atividade para as três espécies da reação são calculados através das seguintes equações, considerando pressão em bar e temperatura em Kelvin:

$$\begin{aligned} \gamma_{H_2} = \exp \left\{ \left(\frac{P}{1,01325} \right) e^{(-3,8402T^{0,125} + 0,541)} - \left(\frac{P}{1,01325} \right)^2 e^{(-0,1263T^{0,5} - 15,980)} \right. \\ \left. + 300 \left[e^{(-0,011901T - 5,941)} \right] \left[-1 + e^{\left(\frac{P}{1,01325} \right)^{1/300}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{N_2} = 0,93431737 + 0,3101804 \times 10^{-3} T + 0,295896 \times 10^{-3} \left(\frac{P}{1,01325} \right) \\ - 0,2707279 \times 10^{-6} T^2 + 0,4775207 \times 10^{-6} \left(\frac{P}{1,01325} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{NH_3} = 0,1438996 + 0,2028538 \times 10^{-2} T + 0,4487672 \times 10^{-3} \left(\frac{P}{1,01325} \right) \\ - 0,1142945 \times 10^{-5} T^2 + 0,2761216 \times 10^{-6} \left(\frac{P}{1,01325} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.21)$$

O coeficiente de efetividade ξ para o tipo de catalisador utilizado, isto é, partículas de ferro com diâmetro entre 6 e 10 mm, é calculado pela expressão apresentada por Dyson e Simon (1968):

$$\xi = b_0 + b_1 T + b_2 \eta + b_3 T^2 + b_4 \eta^2 + b_5 T^3 + b_6 \eta^3 \quad (4.22)$$

onde η corresponde à conversão dos reagentes em amônia. As expressões para o cálculo dos parâmetros b_0 a b_6 em função da pressão P foram obtidas a partir de regressão

linear dos pontos apresentados por Dyson e Simon (1968). Essas expressões estão apresentadas nas equações (4.23) a (4.29) a seguir:

$$b_0 = 0,12509147 P - 36,29130401 \quad (4.23)$$

$$b_1 = -0,0005490221 P - 0,1592812870 \quad (4.24)$$

$$b_2 = 0,009472480 P + 8,321420000 \quad (4.25)$$

$$b_3 = 0,0000007722621 P - 0,0002240472432 \quad (4.26)$$

$$b_4 = 0,07406747 P - 37,53481000 \quad (4.27)$$

$$b_5 = -3,514473 \times 10^{-10} P + 1,019612 \times 10^{-7} \quad (4.28)$$

$$b_6 = -0,1473765 P + 61,0437500 \quad (4.29)$$

A entalpia de reação, ΔH_r , é calculada conforme a expressão apresentada por Gillespie e Beatie (1930):

$$\Delta H_r = 4,1868 \left[- \left(0,54526 + \frac{840,609}{T} + \frac{459,734 \times 10^6}{T^3} \right) \left(\frac{P}{1,01325} \right) - 5,34685 T - 0,2525 \times 10^{-3} T^2 + 1,69167 \times 10^{-6} T^3 - 9157,09 \right] \quad (4.30)$$

Dyson e Simon (1968) reportam que dois valores distintos para o parâmetro cinético α foram utilizados por pesquisadores para ajustar dados experimentais: 0,50 e 0,75. Neste trabalho, o valor de 0,50 foi utilizado.

Conforme exposto, as variáveis de processo nos leitos catalíticos são representadas por um sistema de equações diferenciais, isto é, equações (4.6) e (4.9) a (4.12), juntamente com as demais equações algébricas que modelam a reação de formação de amônia e ainda todo o conjunto de equações do modelo termodinâmico. Essas equações são resolvidas simultaneamente pela função *ode15s* do *MATLAB*® para obtenção das condições de saída de cada leito, isto é, pressão, temperatura e composição da corrente de saída, em função das condições de entrada da corrente de alimentação do leito e ainda de características físicas como altura e diâmetros externo e interno dos leitos cilíndricos, diâmetro da partícula do catalisador e porosidade do leito.

4.3 Trocadores de Calor

Os fenômenos de troca térmica foram simplificados calculados pelo Método da Efetividade na forma apresentada por Holman (1983) para trocadores de calor com fluxos posicionados em contracorrente. Sejam os índices q referente ao fluido quente e f referente ao fluido frio, tem-se que:

$$C_q = \frac{\omega_q c_{p_q}}{M_w} \quad (4.31)$$

$$C_f = \frac{\omega_f c_{p_f}}{M_w} \quad (4.32)$$

$$C_{máx} = \max(C_q, C_f), C_{mín} = \min(C_q, C_f), C = C_{mín} / C_{máx} \quad (4.33)$$

$$NUT = UA_t / C_{mín} \quad (4.34)$$

$$\epsilon = \frac{1 - \exp[-NUT(1-C)]}{1 - C \exp[-NUT(1-C)]} \quad (4.35)$$

$$q_{máx} = C_{mín} (T_{qe} - T_{fe}) \quad (4.36)$$

$$q = \epsilon q_{máx} \quad (4.37)$$

onde:

C	– capacidade calorífica (kJ/s)
ω	– vazão mássica (kg/s)
c_p	– calor específico à pressão constante (kJ/kmol.K)
NUT	– número de unidades de transferência (adimensional)
U	– coeficiente global de troca térmica (W/m ² .K)
A_t	– área de troca térmica (m ²)
ϵ	– efetividade de troca térmica (adimensional)
T_{qe}	– temperatura do fluido quente na entrada do trocador de calor (K)

T_{fe} – temperatura do fluido frio na entrada do trocador de calor (K)

q – taxa de transferência de calor (kJ/s)

$\overline{M}_w$ – massa molar da mistura (kg/kmol)

O cálculo é iterativo, sendo repetido até que se obtenha convergência na variável de taxa de troca de calor q . Por simplificação, nos módulos que calculam os trocadores de calor, a capacidade calorífica dos gases na entrada dos trocadores é calculada a cada iteração como a média aritmética entre a última condição de entrada utilizada e a condição de saída obtida a cada ciclo de cálculo.

4.4 Roteiro de Cálculo

Os principais fenômenos reproduzidos pelo modelo apresentado, reação de formação de amônia em leito catalítico fixo e troca de calor em trocadores de calor do tipo casco e tubos, foram agrupados em módulos os quais são resolvidos por uma rotina de cálculo iterativa. Este método de cálculo de simulação é conhecido como “seqüencial-modular”. A seqüência de cálculo utilizada para obter a condição de saída da corrente de produto de reação, dadas as condições de entrada, é apresentada na Figura 4.3:

Figura 4.3 – Fluxograma de cálculo da simulação do reator de amônia

onde:

- P_e – pressão da corrente de entrada do reator
- T_e – temperatura da corrente de entrada do reator
- Q_{E1A} – vazão volumétrica em condição normal do ramal de alimentação E1A
- Q_{E1B} – vazão volumétrica em condição normal do ramal de alimentação E1B
- Q_{E2} – vazão volumétrica em condição normal do ramal de alimentação E2
- Y_e – vetor das frações molares de alimentação na forma $[H_2 \ N_2 \ NH_3 \ Ar \ CH_4]$
- T_{E1L} – temperatura de entrada dos reagentes no 1º leito catalítico

A variável de amarração do *loop* de cálculo escolhida foi a temperatura de entrada do 1º leito catalítico, T_{E1L} .

Ao fim do cálculo dos dois módulos de reação e dos dois trocadores de calor, partindo de uma estimativa para a temperatura de entrada da corrente de alimentação do primeiro leito catalítico, obtém-se também as temperaturas das correntes E1A e E1B da Figura 4.2. Essas correntes são misturadas à corrente E2 para formar a corrente de alimentação dos leitos catalíticos.

O balanço de massa e de energia aplicado ao nó em destaque na Figura 4.2, correspondente à mistura das correntes E1A, E1B e E2 após as devidas trocas térmicas, pode ser escrito como:

$$\omega = \omega_{E1A} + \omega_{E1B} + \omega_{E2} \quad (4.38)$$

$$H_\omega = \frac{\omega_{E1A} H_{E1A} + \omega_{E1B} H_{E1B} + \omega_{E2} H_{E2}}{\omega} \quad (4.39)$$

onde:

- ω – vazão mássica total de alimentação do reator (kg/s)
- ω_{E1A} – vazão mássica do ramal de alimentação E1A (kg/s)
- ω_{E1B} – vazão mássica do ramal de alimentação E1B (kg/s)

ω_{E2} – vazão mássica do ramal de alimentação E2 (kg/s)

H_{ω} – entalpia da corrente de alimentação do reator (kJ/kg)

H_{E1A} – entalpia da corrente referente ao ramal de alimentação (kJ/kg)

H_{E1B} – entalpia da corrente referente ao ramal de alimentação E1B (kJ/kg)

H_{E2} – entalpia da corrente referente ao ramal de alimentação E2 (kJ/kg)

Como a composição da corrente de reagentes é conhecida, e sua entalpia pode ser calculada através da equação (4.39), é possível obter também sua temperatura, T_{E1L} , através das seguintes expressões encontradas em Poling, Prausnitz e O'Connell (2000):

$$H_{\omega} = \left[\frac{bRT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m + b} - \left(\frac{3a}{2b} \right) \log \left(\frac{V_m + b}{V_m} \right) \right] + H_{\omega}^{GI} \quad (4.40)$$

$$H_{\omega}^{GI} = \int_{T_{ref}}^{T_{\omega}} c_P dT \quad (4.41)$$

$$c_P(T) = A_{cp} + B_{cp}T + C_{cp}T^2 + D_{cp}T^3 + \frac{E_{cp}}{T^2} \quad (4.42)$$

onde:

a, b – parâmetros do modelo termodinâmico Redlich-Kwong-Soave

V_m – volume molar (m^3/kmol)

R – constante universal dos gases ($8,314 \times 10^{-2} \text{ m}^3 \cdot \text{bar} \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)

H_{ω}^{GI} – entalpia da corrente de alimentação do reator no estado de gás ideal (kJ/kg)

T_{ω} – temperatura da corrente de alimentação do reator (K)

T_{ref} – temperatura de referência do cálculo de entalpia (K)

$$A_{cp}, B_{cp},$$

$$C_{cp}, D_{cp}, \quad - \text{coeficiente de cálculo do calor específico}$$

$$E_{cp}$$

A composição e dados físico-químicos dos componentes puros são necessários para obter os coeficientes A_{cp} , B_{cp} , C_{cp} , D_{cp} e E_{cp} do cálculo do calor específico e para obtenção dos parâmetros a e b do modelo Redlich-Kwong-Soave. O procedimento de cálculo dos referidos coeficientes e parâmetros podem ser consultados em Poling, Prausnitz e O'Connell (2000). O volume molar V_m é obtido da solução da equação de estado cúbica proposta pelo modelo Redlich-Kwong-Soave:

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m(V_m + b)} \quad (4.43)$$

Com a temperatura de entrada do 1º leito, T_{E1L} , agora calculada através do balanço de energia, aplica-se o método numérico Newton-Raphson para se calcular qual deve ser a estimativa de T_{E1L} a ser utilizada para a iteração seguinte, caso necessário.

4.5 Resultados do Modelo Desenvolvido

Seja o teor de amônia de saída do reator em operação normal considerado como 100% e a ausência de amônia como 0%. A curva que descreve as operações de troca térmica e reação dentro do reator pode ser colocada em um gráfico juntamente com a curva de equilíbrio amônia vs. temperatura à pressão constante, conforme Figura 4.4:

Figura 4.4 – Curva de equilíbrio da mistura reacional à pressão constante e curva de processo da mistura reacional ao ser submetida ao reator de amônia

Nesta figura, o ponto A representa a condição da corrente de alimentação antes de ser dividida nos ramais E1A, E1B e E2 apresentados na Figura 4.2. O ponto F representa a corrente de saída do reator. As curvas B-C e D-E correspondem ao aumento do teor de amônia e da temperatura em função da reação no primeiro e no segundo leito catalítico, respectivamente. A reta C-D representa o resfriamento do efluente do primeiro leito ao passar pelo trocador de calor 122-CA e a reta E-F representa o resfriamento do produto do segundo leito no trocador 122-C. A energia removida nestas etapas de resfriamento é transferida para os reagentes nos referidos trocadores de calor, causando o aquecimento representado pelo segmento A-B.

A curva de equilíbrio apresentada se refere à condição de pressão constante de 145,2 bar, igual a pressão de alimentação do reator em condições normais de operação. É possível notar que os pontos C e E não atingem o equilíbrio, o que é esperado visto que a condição de equilíbrio só pode ser alcançada, teoricamente, utilizando-se um volume infinito de catalisador.

Além da curva de avanço da reação em função da temperatura, é possível analisar o avanço em função do espaço percorrido na presença de catalisador. Conforme descrito na seção 4.1, em cada um dos leitos catalíticos o catalisador fica disposto na forma de um cilindro com espaço anular vazio. Os reagentes atravessam os leitos fixos de catalisador na direção radial e no sentido de fora para dentro. Considerando o comprimento linear total percorrido pelos reagentes na direção radial, pode-se representar o avanço da reação ao longo desse comprimento linear através do gráfico da Figura 4.5:

Figura 4.5 – Curva de avanço da reação ao longo do comprimento linear percorrido na direção radial do catalisador

O ponto 1 representa a condição de entrada do fluido de alimentação. Este ponto também se refere à condição dos pontos A e B da Figura 4.4. O trecho entre os pontos 1 e 2 mostra o incremento do teor de amônia à medida que a mistura reacional percorre o primeiro leito na direção radial (curva B-C na Figura 4.4) e o trecho entre os pontos 2 e 3 se refere ao segundo leito catalítico (curva D-E na Figura 4.4).

A menor quantidade de amônia na entrada do primeiro leito faz com que o ponto 1 esteja mais distante do equilíbrio se comparado ao ponto 2. Isso faz com que a velocidade

da reação seja máxima na entrada deste leito, o que pode ser verificado pela inclinação do trecho inicial da curva 1-2, claramente maior que a inclinação inicial da curva 2-3.

O primeiro leito, embora represente uma fração menor do catalisador, tem sua saída mais distante da condição de equilíbrio do que o segundo leito. Isto pode ser mais facilmente percebido pela inclinação do trecho final das curvas 1-2 e 2-3: quanto mais próximo da horizontal, mais próximo do equilíbrio a mistura terá chegado.

O teor de amônia calculado pelo modelo matemático apresentado para a saída do reator é utilizado no controlador proposto no capítulo 5 como função econômica a ser maximizada.

5 Desenvolvimento do Controlador

5.1 Descrição do Problema de Controle

A malha de controle escolhida é do tipo múltiplas entradas e múltiplas saídas com dimensões 2x2, isto é, duas entradas e duas saídas, e ainda com duas perturbações.

As saídas y_1 e y_2 , ou variáveis controladas, escolhidas para este sistema são:

$$y_1 = T_{S1L} \quad (5.1)$$

$$y_2 = T_{S2L} \quad (5.2)$$

onde:

T_{S1L} – temperatura de saída do primeiro leito catalítico (K)

T_{S2L} – temperatura de saída do segundo leito catalítico (K)

Como o reator é um equipamento integrante de um circuito fechado, não convém se controlar sua vazão total de alimentação, pois tal ação resultaria em perturbação imediata para todos os demais componentes do circuito. Por este motivo, as entradas u , ou variáveis manipuladas, foram definidas em termos de frações da vazão total de alimentação:

$$u_1 = Q_{E1A} / Q_{E1B} \quad (5.3)$$

$$u_2 = Q_{E2} / Q \quad (5.4)$$

$$Q = Q_{E1A} + Q_{E1B} + Q_{E2} \quad (5.5)$$

A entrada u_1 corresponde à razão entre a vazão de alimentação do lado frio do trocador 122-CA (*interbed*), Q_{E1A} , e a vazão de alimentação do lado frio do trocador 122-C (*feed-effluent*), Q_{E1B} . A entrada u_2 corresponde à fração da vazão total Q direcionada diretamente ao 1º leito catalítico, Q_{E2} . Os ramais de alimentação E1A, E1B e E2 podem ser mais facilmente visualizados na Figura 4.2.

Com esta estratégia, tem-se que a vazão total não constitui uma variável manipulada, pois a entrada u_1 depende sempre da diferença entre a vazão total e a vazão do ramal E2. Vale ressaltar que as entradas u foram escolhidas de forma compatível com a configuração atualmente instalada na FAFEN-BA, que possui uma válvula manual de campo na linha da corrente E1B (ver Figura 4.2). A estratégia foi elaborada prevendo a obtenção de melhores vantagens da aplicação de controle para o caso de a válvula citada ser substituída por outra com acionamento remoto. Caso isso não venha a ocorrer, a estratégia proposta continua sendo viável, pois a razão entre as vazões E1A e E1B é manipulável, dentro de certa faixa, através apenas da válvula automática existente na linha da corrente E1A.

As perturbações possíveis no sistema, além da vazão total já mencionada, são as condições da corrente de entrada: pressão, temperatura e composição. Neste trabalho, foram estudados os efeitos de variação de pressão e temperatura de alimentação.

A Figura 5.1 ilustra o arranjo de processo interno do reator, conforme apresentado na Figura 4.2, contendo adicionalmente a estratégia de controle proposta: indicação do controlador OMPC (MPC com Otimização Econômica), variáveis controladas (y_1 e y_2), variáveis manipuladas (u_1 e u_2), ocorrência e leitura de perturbações, controladores de vazão locais com elementos primários de medição de vazão e blocos lógicos de cálculo para determinação das vazões Q_{E1A} , Q_{E1B} e Q_{E2} partindo-se das saídas do controlador, u_1 e u_2 .

Figura 5.1 – Arquitetura da estratégia de controle proposta

A função econômica que será considerada neste estudo e que deve ser maximizada pelo controlador OMPC é o teor de amônia na saída do equipamento em função das condições da corrente de alimentação e das entradas u_1 e u_2 acima descritas.

Para efeito de implementação, é importante observar que é necessária a instalação dos componentes de medição de vazão e recomendável uma válvula de controle na corrente E1B em substituição à válvula manual atualmente instalada.

5.2 Modelo OPOM – Output Prediction Oriented Model

Como o próprio nome sugere, os controladores da classe MPC, ou *Model Predictive Control*, baseiam-se em modelos dinâmicos do processo a ser controlado para fazer a predição da sua resposta frente às ações de controle e, no caso de perturbações medidas, frente a tais perturbações.

Seja a resposta dinâmica de um sistema frente a um degrau escrita como uma função S no domínio do tempo na forma a seguir:

$$S_{i,j}(k) = d_{i,j}^0 + \sum_{l=1}^{na} [d_{i,j,l}^d] e^{r_{i,j,l} kT} \quad (5.6)$$

onde os coeficientes $d_{i,j}^0$ e $d_{i,j,l}^d$ correspondem aos ganhos obtidos através do procedimento de expansão em frações parciais das funções de transferência no domínio de Laplace e os coeficientes $r_{i,j,l}$ correspondem aos pólos. Nesta expressão, k é o instante de amostragem e T o período de amostragem.

É possível agrupar estes coeficientes na forma matricial, distinguindo-os entre componentes estáticos e dinâmicos:

$$D^0 = \begin{bmatrix} d_{1,1}^0 & \cdots & d_{1,nu}^0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{ny,1}^0 & \cdots & d_{ny,nu}^0 \end{bmatrix}, D^0 \in \mathbb{R}^{ny \times nu} \quad (5.7)$$

$$D^d = \text{diag} \left(\begin{matrix} d_{1,1,1}^d & \cdots & d_{1,1,na}^d & \cdots & d_{1,nu,1}^d & \cdots & d_{1,nu,na}^d & \cdots \\ & & & & d_{ny,1,1}^d & \cdots & d_{ny,1,na}^d & \cdots \\ & & & & & & d_{ny,nu,1}^d & \cdots & d_{ny,nu,na}^d \end{matrix} \right), \quad (5.8)$$

$$D^d \in \mathbb{C}^{nd \times nd}$$

Os pólos podem ser agrupados na seguinte matriz:

$$F = \text{diag} \begin{pmatrix} e^{r_{1,1,1}} & \dots & e^{r_{1,1,na}} & \dots & e^{r_{1,nu,1}} & \dots & e^{r_{1,nu,na}} & \dots \\ & & & & e^{r_{ny,1,1}} & \dots & e^{r_{ny,1,na}} & \dots & e^{r_{ny,nu,1}} & \dots & e^{r_{ny,nu,na}} \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

$$F \in \mathbb{C}^{nd \times nd}$$

No caso de sistemas estáveis em malha aberta, Odloak (2004) apresenta uma forma matematicamente conveniente de se utilizar no controlador o modelo dinâmico descrito acima. O método consiste em reescrever o modelo de variáveis de estado a partir da divisão em duas partes distintas, estática e dinâmica, conforme mostrado abaixo:

$$\begin{bmatrix} x^s(k+1) \\ x^d(k+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{ny} & 0 \\ 0 & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^s(k) \\ x^d(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D^0 \\ D^d FN \end{bmatrix} \Delta u(k)$$

$$y(k) = \begin{bmatrix} I_{ny} & \psi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^s(k) \\ x^d(k) \end{bmatrix} \quad (5.10)$$

$$x^s = \begin{bmatrix} x_1 & \dots & x_{ny} \end{bmatrix}^T, \quad x^s \in \mathbb{R}^{ny} \quad (5.11)$$

$$x^d = \begin{bmatrix} x_{ny+1} & x_{ny+2} & \dots & x_{ny(nu,na+1)} \end{bmatrix}^T, \quad x^d \in \mathbb{C}^{nd}, \quad nd = nu,na.ny \quad (5.12)$$

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Phi & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \Phi \end{bmatrix}, \quad \Psi \in \mathbb{R}^{ny \times ny}, \quad \Phi = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad \Phi \in \mathbb{R}^{nu \times na} \quad (5.13)$$

$$N = \begin{bmatrix} J_1 \\ \vdots \\ J_{ny} \end{bmatrix}, \quad N \in \mathbb{R}^{nd \times nu}, \quad J = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad J \in \mathbb{R}^{nu,na \times nu} \quad (5.14)$$

onde x^d é o vetor contendo a parte dinâmica e x^s , a parte estática. As matrizes D^d , D^0 e F são obtidas do modelo de respostas ao degrau, conforme apresentado nas equações (5.6)

a (5.9). As matrizes Ψ , Φ , N e J são auxiliares e possibilitam a representação do modelo na forma de variáveis de estado apresentada na equação (5.10).

A parte dinâmica representa o comportamento ao longo do tempo do sistema até que este alcance finalmente o estado estacionário, representado pela outra parte do modelo. A construção do modelo varia de acordo com as características específicas de cada sistema, isto é, presença ou ausência de tempo-morto, presença ou ausência de zeros e ainda existência ou não de característica integradora. Uma abordagem mais específica acerca de MPC aplicado a sistemas integradores e com tempo morto utilizando modelo OPOM é apresentada por Santoro (2011).

5.3 Controlador IHMPC por Faixas

O controlador MPC de horizonte infinito proposto em Odloak (2004) estendido para o controle das saídas controladas por faixas é baseado na solução do seguinte problema:

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\Delta u_k, y_k^{sp} \\ \delta_k^s}} V_k = & \sum_{j=0}^{\infty} \left(y(k+j|k) - y_k^{sp} - \delta_k^s \right)^T Q_y \left(y(k+j|k) - y_k^{sp} - \delta_k^s \right) \\ & + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j|k)^T Q_u \Delta u(k+j|k) \\ & + \delta_k^{s^T} S_s \delta_k^s \end{aligned} \quad (5.15)$$

Sujeito às seguintes restrições:

$$x^s(k+m|k) - y_k^{sp} + \delta_k^s = 0 \quad (5.16)$$

$$y_{\min} \leq y_k^{sp} \leq y_{\max} \quad (5.17)$$

$$-\Delta u_{\max} \leq \Delta u(k+j|k) \leq \Delta u_{\max} \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \quad (5.18)$$

$$u_{\min} \leq u(k+j|k) \leq u_{\max} \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \quad (5.19)$$

onde:

V_k	– valor da função objetivo no instante k
$y(k+j k)$	– vetor de predição para o instante $k+j$ das variáveis controladas y calculado no instante k
y_k^{sp}	– vetor dos valores-alvo, ou set points, das variáveis controladas y no instante k
δ_k^s	– vetor das variáveis de folga δ^s no instante k
$\Delta u(k+j k)$	– vetor de variações das variáveis manipuladas u a ser aplicado no instante $k+j$ calculado no instante k
Q_y	– matriz de pesos dos desvios da predição das variáveis controladas y em relação a y^{sp}
Q_u	– matriz de pesos das variações das variáveis manipuladas Δu
S_s	– matriz de pesos das variáveis de folga δ^s
$x^s(k+m k)$	– vetor de predição para o instante $k+j$ dos estados estáticos x^s calculado no instante k
$y_{\min}, y_{\max}$	– vetores com os limites mínimos e máximos das variáveis controladas y
$u_{\min}, u_{\max}$	– vetores com os limites mínimos e máximos das variáveis manipuladas u
$\Delta u_{\max}$	– vetor com os limites máximos das variações das variáveis manipuladas u
m	– horizonte de controle

A restrição representada pela equação (5.16) garante que V_k é limitada e pode ser considerada uma condição terminal que força x^s a convergir para y^{sp} . A restrição apresentada em (5.17) define as faixas dentro das quais as variáveis controladas deverão permanecer, a depender das limitações do processo a respeito de seus equipamentos, processos interligados e/ou requisitos de qualidade. As restrições (5.18) e (5.19) aplicam-se às entradas u e também são relacionadas às restrições físicas do processo e ao quanto se permite ao controlar movimentá-las a cada ação de controle implementada.

As variáveis de folga, δ^s , são incluídas para garantir a existência de solução viável ao problema que define o controlador quando perturbações vierem a diminuir esta região de viabilidade. Assim, a matriz de pesos das variáveis de folga S_s precisa ser grande o suficiente para garantir que tais folgas somente serão diferentes de zero para os casos de solução inviável.

5.4 Controlador IHMPC por Faixas com Alvos para as Entradas

Gonzalez e Odloak (2009) apresentaram um algoritmo para o controlador preditivo de horizonte infinito preparado para receber valores ótimos para as entradas calculados por uma camada RTO. Na formulação em questão, tem-se o algoritmo do controlador com a seguinte função objetivo:

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\Delta u_k, \delta_{y,k}, \\ y_{sp,k}, \delta_{u,k}}} V_k = & \sum_{j=0}^{\infty} \left(y(k+j/k) - y_k^{sp} - \delta_k^y \right)^T Q_y \left(y(k+j/k) - y_k^{sp} - \delta_k^y \right) \\ & + \sum_{j=0}^{\infty} \left(u(k+j/k) - u_{des} - \delta_k^u \right)^T Q_{u_{des}} \left(u(k+j/k) - u_{des} - \delta_k^u \right) \\ & + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j/k)^T Q_u \Delta u(k+j/k) + \delta_k^{yT} S_y \delta_k^y + \delta_k^{uT} S_u \delta_k^u \end{aligned} \quad (5.20)$$

sujeita a:

$$x^s(k) - y_k^{sp} + \tilde{D}^0 \Delta u_k - \delta_k^y = 0 \quad (5.21)$$

$$u(k-1) + \tilde{D}^u \Delta u_k - u_{des} - \delta_k^u = 0 \quad (5.22)$$

$$y_{\min} \leq y_k^{sp} \leq y_{\max} \quad (5.23)$$

$$-\Delta u_{\max} \leq \Delta u(k+j) \leq \Delta u_{\max} \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \quad (5.24)$$

$$u_{\min} \leq u(k+j) \leq u_{\max} \quad j = 0, 1, \dots, m-1 \quad (5.25)$$

$$\tilde{D}^0 = \begin{bmatrix} D^0 & \cdots & D^0 \\ \underbrace{\hspace{1.5cm}}_m \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

$$\tilde{D}^u = \begin{bmatrix} I_{nu} & \cdots & I_{nu} \\ \underbrace{\hspace{1.5cm}}_m \end{bmatrix} \quad (5.27)$$

onde:

- u_{des} – vetor dos valores-alvo, ou *set points*, das variáveis manipuladas u no instante k
- δ_k^y – vetor das variáveis de folga relativas às variáveis controladas no instante k
- δ_k^u – vetor das variáveis de folga relativas às variáveis manipuladas no instante k
- $Q_{u_{des}}$ – matriz de pesos dos desvios dos valores calculados das variáveis manipuladas u em relação a u_{des}
- S_y – matriz de pesos das variáveis de folga relativas às variáveis controladas δ^y
- S_u – matriz de pesos das variáveis de folga relativas às variáveis manipuladas δ^u
- I_{nu} – matriz identidade de dimensões iguais ao número de variáveis manipuladas u

As restrições (5.21) e (5.22) são necessárias para garantir que a função objetivo tem sempre um valor limitado.

Devido à possibilidade de se receber externamente valores ótimos para as entradas, este controlador traz em sua formulação o vetor u_{des} , correspondente aos valores desejados para as variáveis manipuladas. A função objetivo penaliza então os desvios existentes entre estes alvos e os valores reais em cada instante através da matriz Q_u .

Como o controlador descrito nesta formulação recebe os valores ótimos das entradas u de uma camada externa de otimização, sua utilização é preferencial para sistemas complexos cuja obtenção dos valores ótimos demande grande esforço computacional. Neste caso, a frequência de cálculo dos pontos ótimos tende a ser menor do que a frequência com que se resolve o problema de controle.

Neste estudo, será aplicado um controlador com otimização econômica em uma única camada, não sendo portanto necessária a utilização da formulação com alvos para as entradas.

5.5 Controlador OMPC – MPC com Otimização Econômica

Uma forma alternativa de integrar a função de otimização da operação em tempo real com o controle preditivo foi apresentada por Alvarez e Odloak (2011). Assim como na proposta apresentada pelos autores, o presente trabalho utiliza um controlador da classe MPC do tipo horizonte infinito com faixas nas variáveis controladas ao qual está acoplado um componente de otimização baseado no cálculo do gradiente de uma função econômica.

A utilização do gradiente com mesma formulação também foi aplicada por Souza (2007) e Porfírio (2011), porém em controladores de horizonte finito. Nesta outra abordagem, os autores aplicam o método de otimização do gradiente reduzido nas restrições do controlador para evitar que a direção de otimização force as variáveis controladas para fora de suas faixas de controle. O capítulo 6 apresenta uma discussão onde se mostra porque o método do gradiente reduzido não é aplicável ao controlador de horizonte infinito.

Seja uma função econômica F_{eco} escrita genericamente na forma:

$$F_{eco} \equiv f(\hat{y}, u) \quad (5.28)$$

onde $\hat{y}$ representa um vetor com as variáveis controladas em um estado estacionário previsto correspondente ao conjunto de entradas u .

Ao alterar o vetor de controle para $u + \Delta \bar{u}$, tem-se:

$$\zeta_{u+\Delta \bar{u}} = \left. \frac{dF_{eco}}{du} \right|_{u+\Delta \bar{u}} = \left. \frac{dF_{eco}}{du} \right|_u + \frac{d^2 F_{eco}}{du^2} \Delta \bar{u} \quad (5.29)$$

onde $\zeta_{u+\Delta \bar{u}}$ representa a aproximação de primeira ordem para o gradiente da função econômica F_{eco} .

Como o gradiente aponta para o máximo da função, então o cálculo apresentado na equação (5.29) é uma direção que leva ao ótimo econômico indicado pela função F_{eco} e quando este gradiente for igual a zero tem-se o conjunto de entradas u que levam a este ótimo.

Da equação (5.28) tem-se que:

$$\frac{dF_{eco}}{du} = \frac{\partial F_{eco}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial u} + \frac{\partial F_{eco}}{\partial u} \quad (5.30)$$

$$\frac{d^2 F_{eco}}{du^2} = \left[\left(\frac{\partial \hat{y}}{\partial u} \right)^T \frac{\partial^2 F_{eco}}{(\partial \hat{y})^2} + \frac{\partial^2 F_{eco}}{\partial \hat{y} \partial u} \right] \frac{\partial \hat{y}}{\partial u} + \frac{\partial F_{eco}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial u^2} + \left[\frac{\partial \hat{y}}{\partial u} \right]^T \frac{\partial^2 F_{eco}}{\partial u \partial \hat{y}} + \frac{\partial^2 F_{eco}}{\partial u^2} \quad (5.31)$$

Uma vez que o modelo rigoroso em estado estacionário é conhecido, conforme apresentado no capítulo 4, as derivadas correspondentes a $\frac{\partial \hat{y}}{\partial u}$ e $\frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial u^2}$ podem ser facilmente obtidas executando o modelo diversas vezes, cada uma com variações pequenas nas entradas u .

Assumindo que tais variações são suficientemente pequenas, as derivadas de primeira ordem saem então diretamente da relação $\frac{\Delta \hat{y}}{\Delta u}$. O cálculo das derivadas de segunda ordem se utiliza de dois valores distintos de derivadas de primeira ordem:

$$\frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial u^2} \cong \frac{\left(\frac{\Delta \hat{y}}{\Delta u} \right)_A - \left(\frac{\Delta \hat{y}}{\Delta u} \right)_B}{\Delta u_{A-B}} \quad (5.32)$$

onde os índices A e B são referentes a variações suficientemente pequenas e distintas no vetor u que produzem como consequência variações distintas nos valores preditos de y , ou $\hat{y}$.

Sob o aspecto da ciência de controle, o vetor das derivadas $\frac{\partial \hat{y}}{\partial u}$ contém, na verdade, os ganhos estáticos que correlacionam cada entrada com cada saída, também denominados K_p . Reescrevendo a equação (5.29) tem-se:

$$\zeta_{u+\Delta \bar{u}} = \left[\frac{\partial F}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial u} + \frac{\partial F}{\partial u} \right] + \left[K_p^T \frac{\partial^2 F}{(\partial \hat{y})^2} K_p + \frac{\partial^2 F}{\partial \hat{y} \partial u} K_p + \frac{\partial F}{\partial \hat{y}} \left(\frac{\partial^2 \hat{y}}{\partial u^2} \right) + K_p^T \frac{\partial^2 F}{\partial u \partial \hat{y}} + \frac{\partial^2 F}{\partial u^2} \right] \Delta \bar{u} \quad (5.33)$$

Ou, simplificadaamente:

$$\zeta_{u+\Delta \bar{u}} = d + G \Delta \bar{u} \quad (5.34)$$

sendo d o vetor gradiente da função econômica e G sua matriz Hessiana. O vetor $\Delta \bar{u}$ corresponde ao movimento total da ação de controle calculado dentro do horizonte de controle m . Sua definição é incorporada à solução do problema de otimização através da seguinte restrição de igualdade:

$$\Delta \bar{u} = (u(k+m-1) - u(k-1)) \quad (5.35)$$

A função objetivo do controlador é finalmente definida pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \min_{\substack{\Delta u_k, y^{sp} \\ \delta_{s,k}}} V_k = & \sum_{j=0}^{\infty} \left(y(k+j|k) - y_k^{sp} - \delta_k^s \right)^T Q_y \left(y(k+j|k) - y_k^{sp} - \delta_k^s \right) \\ & + \sum_{j=0}^{m-1} \Delta u(k+j|k)^T Q_u \Delta u(k+j|k) \\ & + (d + G\Delta \bar{u})^T P_G (d + G\Delta \bar{u}) + \delta_k^{s^T} S_s \delta_k^s \end{aligned} \quad (5.36)$$

sujeita às mesmas restrições definidas nas equações de (5.16) a (5.19) e, adicionalmente, à restrição referente à definição do conceito de movimento total das entradas apresentada na equação (5.35). A matriz P_G se refere ao peso do componente de otimização econômica.

A função proposta pela equação (5.33) pode ser escrita na forma de um problema de programação quadrática e, portanto, pode ser minimizada por *solvers* convencionais.

5.6 Identificação do sistema

Dois modelos dinâmicos distintos foram utilizados para a realização das simulações propostas no capítulo 6: um para simular o processo, isto é, simular a resposta dinâmica da planta, e outro para atuar como modelo interno do controlador a fim de realizar as previsões do comportamento da planta.

Ambos os modelos podem ser divididos em duas partes: estática e dinâmica. O componente estático, também conhecido como ganho, indica a magnitude do efeito da variação de uma determinada entrada em uma determinada saída após tempo suficiente para que um novo estado estacionário se estabeleça. O componente dinâmico representa,

por sua vez, a fase transiente pela qual um sistema passa quando é submetido a mudanças em suas entradas.

O modelo utilizado pelo OMPC para efetuar as predições do comportamento do sistema é um modelo dinâmico linear nos ganhos e na dinâmica com parâmetros constantes, isto é, o modelo independe de quaisquer fatores a ele alheios, inclusive da quantidade de tempo pela qual o modelo é utilizado. Independentemente de quais são as condições de operação do sistema, intensidade ou direção das variações das entradas, o modelo se mantém inalterado e permanecem constantes os parâmetros que definem seus componentes estático e dinâmico.

O modelo que representa a resposta do reator possui componente dinâmico linear e ganho não-linear. Embora se tenha assumido como hipótese simplificadora que a dinâmica é independente das condições de operação, o ganho é constantemente atualizado para que represente com mais fidelidade a resposta do sistema.

Tal concepção não é utilizada no modelo do controlador porque o controlador em si é de natureza linear.

5.6.1 Obtenção dos ganhos estáticos – modelo do controlador

O modelo estacionário do reator de amônia descrito no Capítulo 4 foi utilizado para a obtenção dos ganhos estáticos do modelo dinâmico linear utilizado no controlador OMPC. Estabelecendo-se a condição de operação de projeto como caso base, simulou-se o reator diversas vezes, cada uma com pequenas variações em cada um dos parâmetros operacionais, conforme Tabela 5.1. Os novos valores obtidos em cada simulação para as temperaturas de saída dos leitos, isto é, T_{s1L} (y_1) e T_{s2L} (y_2), foram utilizados no cálculo dos ganhos conforme equação (5.37):

$$K_p = \Delta y / \Delta u \quad (5.37)$$

Devido à não-linearidade do sistema, os ganhos obtidos em cada simulação, considerando uma mesma entrada ou perturbação, foram diferentes. Foi assumida para o

modelo do controlador uma média entre os ganhos obtidos, de acordo com o apresentado na Tabela 5.2.

Tabela 5.1 – Testes com o simulador estático para obtenção dos ganhos do modelo dinâmico do controlador OMPC

Simulação	Parâmetro variado	Descrição	Intensidade
1	P	Pressão de entrada	+10%
2			-5%
3			+10%
4	T	Temperatura de entrada	-10%
5			+9%
6	$u_1 = Q_{E1A} / Q_{E1B}$	Razão entre as vazões de alimentação dos trocadores 122-CA e 122-C	-10%
7			+10%
8			-10%

Tabela 5.2 – Valores dos ganhos obtidos através de simulação e ganhos utilizados no modelo do controlador OMPC (médias dos ganhos obtidos via simulação)

Simulação	Ganhos em relação a y_1	Média dos ganhos - y_1	Ganhos em relação a y_2	Média dos ganhos - y_2	Unidades
1	0,56502	0,58711	0,48225	0,50596	°C/bar
2	0,60921		0,52966		
3	0,20046		0,25416		
4	0,20938	0,20492	0,26823	0,26120	°C/°C
5	-16,8756		-15,5814		
6	-18,9464	-88,6357	-18,5768	-17,0791	°C
7	-93,7987		-56,5514		
8	-83,4728		-41,0300		

5.6.2 Obtenção dos ganhos estáticos – modelo do processo

O modelo estacionário do reator de amônia descrito no Capítulo 4 é também utilizado para a obtenção dos ganhos estáticos do modelo dinâmico utilizado para simular o comportamento do sistema.

A cada instante de amostragem, o algoritmo do controlador demanda a execução do simulador estático diversas vezes para computar o gradiente d e a matriz Hessiana G necessários à otimização econômica, conforme equação (5.33). Nesta mesma equação, está explicitado o vetor dos ganhos estáticos: para computar o gradiente e a matriz Hessiana, é necessário executar o simulador com pequenas variações nas entradas u em torno do ponto de operação no qual o sistema se encontra. As razões entre as variações das saídas y e as pequenas variações aplicadas nas entradas u , conforme equação (5.37), correspondem aos ganhos estáticos referentes à condição de operação do reator em cada instante de amostragem.

Tais ganhos são atualizados no modelo do processo em cada instante de amostragem, fazendo com que a não-linearidade observada na obtenção dos ganhos do modelo do controlador seja de fato considerada no modelo que representa a dinâmica do reator. O mesmo foi feito a respeito dos ganhos das perturbações.

5.6.3 Obtenção dos componentes dinâmicos

Os componentes dinâmicos de ambos os modelos, isto é, do controlador e do processo, foram obtidos da mesma forma: dados reais de variações em degrau na unidade FAFEN-BA foram coletados e alimentados à função PEM do pacote de identificação de sistemas do MatLAB®, a qual obtém os parâmetros que forem solicitados pelo usuário, dentre tempos característicos, ganho estático, tempo-morto e zeros.

Os testes na unidade industrial consistiram em coletar dados de respostas das variáveis y_1 e y_2 , com a unidade estável, frente a movimentos em degrau nas válvulas instaladas nas linhas de alimentação E1A e E2 (Figura 4.2). Levando em consideração que os ganhos estáticos obtidos dos testes em degrau na planta foram descartados em detrimento dos valores obtidos através do simulador, foi possível admitir que o componente dinâmico do modelo obtido com este teste representa com fidelidade a dinâmica que obter-se-ia caso houvesse medição de vazão em cada um dos ramais, afinal, neste caso os testes em degrau nas vazões seriam feitos justamente através da manipulação das mesmas válvulas.

Em se mantendo a vazão total de alimentação constante, é impossível fazer com que uma variação na abertura de uma das válvulas dos ramais não provoque variação de vazão

nos dois demais ramais. Este efeito cruzado, no entanto, é detectado nos testes, já que as variáveis controladas se situam fisicamente em pontos após a mistura das três correntes de alimentação. Como hipótese simplificadora, assumiu-se que este efeito não provoca não-linearidades nas dinâmicas de resposta.

Os modelos dinâmicos das perturbações foram obtidos de forma semelhante, analisando-se para isso a pressão de entrada no reator e a temperatura da corrente de alimentação.

Os gráficos dos dados que originaram os componentes dinâmicos dos modelos utilizados no controlador e dos modelos utilizados para reproduzir o comportamento do processo estão apresentados a partir da Figura 5.2 até a Figura 5.8.

Foram observadas as respostas das variáveis controladas frente a variações nas variáveis manipuladas e a variações na pressão e temperatura de entrada do reator.

A Figura 5.2 mostra a resposta medida da variável y_1 , ou temperatura de saída do 1º leito catalítico, quando é aplicado ao reator um degrau na abertura da válvula existente no ramal de alimentação E1A. Este degrau, conforme já mencionado, provoca uma resposta cuja dinâmica é semelhante a que seria produzida por um degrau na variável manipulada u_1 , ou razão entre vazões de alimentação fria dos trocadores 122-CA e 122-C.

A Figura 5.3 mostra a resposta medida da variável y_1 , quando é aplicado ao reator um degrau na abertura da válvula existente no ramal de alimentação E2. Este degrau tem dinâmica semelhante a de um degrau na variável manipulada u_2 , ou fração da vazão total alimentada diretamente ao 1º leito (vazão de *quench*).

A Figura 5.4 mostra a resposta medida da variável y_2 , ou temperatura de saída do 1º leito catalítico, quando é aplicado ao reator um degrau na abertura da válvula existente no ramal de alimentação E1A (semelhante a u_1).

Por indisponibilidade de dados reais, e para efeito de realização deste trabalho, a dinâmica da variável controlada y_2 em relação à manipulada u_2 foi assumida como semelhante à dinâmica de y_1 em relação a u_2 .

Na Figura 5.5 e na Figura 5.6 estão representadas as respostas das saídas y_1 e y_2 quando o sistema sofre perturbações na pressão de entrada, respectivamente. A respostas das variáveis controladas frente a perturbações na temperatura de entrada são mostradas na Figura 5.7 e na Figura 5.8.

Figura 5.2 – Resposta da variável controlada y_1 frente a um degrau na posição da válvula da corrente de alimentação E1A.

Figura 5.3 – Resposta da variável controlada y_1 frente a um degrau na posição da válvula da corrente de alimentação E2.

Figura 5.4 – Resposta da variável controlada y_2 frente a um degrau na posição da válvula da corrente de alimentação E1A.

Figura 5.5 – Resposta da variável controlada y_1 frente a perturbações na pressão de entrada do reator

Figura 5.6 – Resposta da variável controlada y_2 frente a perturbações na pressão de entrada do reator

Figura 5.7 – Resposta da variável controlada y_1 frente a perturbações na temperatura de entrada do reator

Figura 5.8 – Resposta da variável controlada y_2 frente a perturbações na temperatura de entrada do reator

A esses dados experimentais foram ajustados modelos de primeira ordem, primeira ordem com tempo morto e segunda ordem. Após procedimento de validação, avaliando-se o modelo que melhor representa os dados fornecidos de saída quando submetido às mesmas entradas que o geraram, foram selecionados os modelos apresentados na Tabela 5.3 para as variáveis controladas e os da Tabela 5.4 para as perturbações. As funções de transferência para as perturbações foram obtidas de maneira semelhante à obtenção dos modelos das variáveis controladas. As unidades dos ganhos podem ser consultadas na Tabela 5.2. Os tempos característicos apresentados estão em minutos.

Devido à impossibilidade de se aplicar um sinal PRBS (*Pseudo Random Binary Sequence*) nas entradas para analisar a autocovariância do sistema e assim se determinar o melhor tempo de amostragem, conforme sugerido por Garcia (2007), foi utilizada a regra geral também sugerida pelo mesmo autor a qual recomenda definir um tempo de amostragem aproximadamente igual a um décimo do tempo de resposta do sistema. Aplicando o critério ao sistema mais rápido, isto é, resposta de y_1 a u_2 , foi estabelecido um tempo de amostragem igual a trinta segundos.

Tabela 5.3 – Funções de transferência das variáveis controladas em relação às variáveis manipuladas

	u_1	u_2
y_1	$G_{1,2}(s) = \frac{K_{1,1}}{14,0933s + 1}$	$G_{1,2}(s) = \frac{K_{1,2}}{3,5033s + 1}$
y_2	$G_{2,1}(s) = \frac{K_{2,1}}{59,9239s^2 + 18,4720s + 1}$	$G_{2,2}(s) = \frac{K_{2,2}}{14,5972s^2 + 7,6700s + 1}$

Observação: os tempos característicos da tabela acima estão em minutos

Tabela 5.4 – Funções de transferência das variáveis controladas em relação às perturbações

	Pressão de entrada (P)	Temperatura de entrada (T)
y_1	$D_{1,P}(s) = \frac{K_{1,P}}{3,6275s + 1}$	$D_{1,T}(s) = \frac{K_{1,T}}{10,9890s + 1}$
y_2	$D_{2,P}(s) = \frac{K_{2,P}}{11,8674s^2 + 6,8898s + 1}$	$D_{2,T}(s) = \frac{K_{2,T}}{16,1005s + 1}$

Observação: os tempos característicos da tabela acima estão em minutos

6 Resultados

Foram realizadas simulações para avaliar a possibilidade de aumento da conversão em amônia por passe no reator ao se utilizar o controlador OMPC descrito na seção 5.5 aplicado ao reator de síntese de amônia apresentado na seção 4.1.

Para avaliar a ação do OMPC na ausência de perturbações, foi realizada uma simulação de referência cujos resultados são apresentados na seção 6.1. Também foram consideradas simulações com perturbações, as quais consistiram em provocar variações positivas e negativas nas condições de pressão e temperatura da corrente de alimentação do reator. Essas simulações são discutidas na seção 6.2.

Foram observadas as variáveis controladas, variáveis manipuladas, valor da função objetivo que enuncia o problema de controle, valor do resultado da função econômica e os gradientes calculados através dela.

A sintonia do controlador utilizada nas simulações está apresentada na Tabela 6.1. Os valores limites para as variáveis controladas e manipuladas são apresentados na Tabela 6.2.

Adicionalmente, foi avaliada na seção 6.3 a aplicação do método do gradiente reduzido à função econômica.

Tabela 6.1 – Sintonia do OMPC	
Parâmetro	Valor
Q_y	$\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
Q_u	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 8 \end{bmatrix}$
S_s	$10^8 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
P_G	$10^6 \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
m	4

Tabela 6.2 – Restrições das variáveis do OMPC	
Parâmetro	Valor
$y_{1máx}$	783 K
$y_{1mín}$	760 K
$y_{2máx}$	740 K
$y_{2mín}$	725 K
$\Delta u_{1máx}$	0,05
$u_{1máx}$	3,1
$u_{1mín}$	0,01
$\Delta u_{2máx}$	0,01
$u_{2máx}$	0,495
$u_{2mín}$	0,01

6.1 Simulação de Referência – Sem Perturbações

A fim de avaliar o desempenho da otimização econômica sem a interferência de perturbações, foi realizada uma simulação de referência com duração de 200 minutos na qual o ponto de partida foi o reator controlado com as variáveis manipuladas e com a corrente de alimentação nas condições normais de operação. Os resultados deste teste podem ser visualizados a partir da Figura 6.1 até a Figura 6.7.

Figura 6.1 – Simulação de referência – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)

Figura 6.2 – Simulação de referência – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)

Figura 6.3 – Simulação de referência – variável manipulada u_1

Figura 6.4 – Simulação de referência – variável manipulada u_2

Figura 6.5 – Simulação de referência – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica

Figura 6.6 – Simulação de referência – valor da função objetivo

Figura 6.7 – Simulação de referência – valores dos gradientes da função econômica

A Figura 6.1 e a Figura 6.2 mostram o comportamento das variáveis controladas y_1 e y_2 ao longo da simulação de referência. É possível perceber que o OMPC age sobre ambas desde o primeiro instante de simulação para obter maior teor de amônia na saída do reator, o que pode ser verificado na Figura 6.5.

Nesta mesma figura, observa-se que o teor de amônia obtido no novo estado estacionário é maior que o inicial porém menor do que o atingido na fase que compreende dos 20 aos 50 minutos de simulação. Isto ocorre porque o controlador posiciona as variáveis controladas u_1 e u_2 , durante o período de tempo em que a variável y_2 ainda não atingiu seu limite inferior, em valores que de fato promoveriam maior conversão dos reagentes em

amônia caso pudessem ser utilizados em um novo estado estacionário sem no entanto causar violação de restrições. À medida que y_2 se aproxima do limite mínimo, o controlador recua a ação de otimização em detrimento de respeitar a restrição desta variável controlada. Como a função econômica consiste em um modelo rigoroso de estado estacionário, o teor de amônia que dela resulta corresponde ao previsto num horizonte infinito de predição no qual as variáveis manipuladas fossem mantidas inalteradas, e não ao valor que seria obtido na saída do reator naquele instante de simulação.

Os valores da função objetivo e dos gradientes são apresentados na Figura 6.6 e na Figura 6.7. O decréscimo do valor da função objetivo do controlador indica que a orientação das variáveis manipuladas no sentido indicado pelos gradientes leva o sistema para uma condição otimizada. O fato de os gradientes não terem sido zerados significa que existem restrições ativas impedindo o controlador de levar o sistema para o ponto ótimo calculado pela função econômica, por outro lado o fato de seus valores ao fim da simulação serem menores que os valores iniciais indicam a eficácia do método proposto quando aplicado a este sistema.

A variável y_1 ultrapassa seu limite máximo no início da simulação, sendo no entanto reconduzida para dentro de seus limites rapidamente. Embora a variável y_2 atinja o limite mínimo estabelecido, sua manutenção dentro das faixas limítrofes é garantida pela formulação do IHMPC: a restrição de estado terminal, representada pela equação (5.16), força a predição das saídas a estar dentro da faixa estabelecida ao fim do horizonte de controle m .

6.2 Simulações com Perturbações

Para avaliar o desempenho do OMPC considerando a ocorrência de perturbações, foram feitas simulações nas quais inicialmente o reator está controlado e com as variáveis manipuladas nas condições normais de operação. Decorridos 50 minutos, é adicionada uma perturbação após a qual se acompanha o comportamento do sistema até a estabilização.

Foram avaliados quatro tipos distintos de perturbações: variações positivas e negativas da pressão de entrada da corrente de alimentação do reator e variações positivas

e negativas da temperatura desta mesma corrente. A intensidade das perturbações, em ambos os sentidos, foi de 5 bar para a pressão e de 15 °C para a temperatura.

Para cada um dos quatro tipos de perturbações, foram consideradas duas formulações distintas para o controlador:

- CASO A – dinâmicas das perturbações informadas ao controlador;
- CASO B – dinâmicas das perturbações não informadas ao controlador;

Em ambos os casos, as perturbações são informadas ao modelo rigoroso utilizado no cálculo da função econômica.

Após os 50 minutos iniciais de simulação durante os quais o OMPC atua em busca do objetivo econômico sem que o sistema seja afetado por perturbações, a variável y_2 é levada para uma região muito próxima de seu limite inferior em todos os casos. A adição de perturbações geraram resultados que se dividem em dois grandes grupos: perturbações que levam y_2 para valores ainda menores e a fazem ultrapassar seu limite mínimo, e perturbações que provocam aumento em y_2 e portanto a afastam de seu limite mínimo.

Como exemplo de uma perturbação que leva y_2 para fora de seu limite tem-se o caso da redução da temperatura de alimentação. Os resultados da simulação com esta perturbação podem ser visualizados a partir da Figura 6.8 até a Figura 6.13.

Figura 6.8 – Redução da temperatura de entrada – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)

Figura 6.9 – Redução da temperatura de entrada – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)

Figura 6.10 – Redução da temperatura de entrada – variável manipulada u_1

Figura 6.11 – Redução da temperatura de entrada – variável manipulada u_2

Figura 6.12 – Redução da temperatura de entrada – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica

Figura 6.13 – Redução da temperatura de entrada – valor da função objetivo

Após a ocorrência da perturbação, o OMPC não tem graus de liberdade para perseguir a otimização econômica devido à violação da restrição de valor mínimo de y_2 , ficando portanto limitado a manter as variáveis controladas dentro de suas faixas.

A Figura 6.12 mostra que a redução da temperatura de alimentação é uma perturbação favorável ao objetivo econômico. O simulador rigoroso do reator prevê, para o estado estacionário correspondente ao instante da perturbação, uma elevação do teor de amônia na corrente efluente do reator. Esse aumento, no entanto, tem de ser suprimido pelo controlador a fim de manter a variável controlada y_2 dentro da zona de controle.

Nota-se aí uma expressiva diferença entre os casos A e B: a existência de modelos dinâmicos para as perturbações faz com que o valor da função objetivo do problema de controle assuma um valor muito elevado no instante em que a perturbação ocorre, conforme pode ser observado na Figura 6.13. Como consequência, as ações de controle para compensar a perturbação no CASO A são mais enérgicas que as do CASO B, sobretudo em relação à variável controlada u_1 (Figura 6.10). Isso faz ainda com que no primeiro caso o modelo rigoroso reflita mais rapidamente a redução da fração de amônia na corrente de produtos do que no segundo caso (Figura 6.12). Ainda assim, conforme discutido posteriormente, as vantagens obtidas com a formulação utilizada no CASO A não são expressivas o suficiente para justificar sua utilização.

Do ponto de vista de processo, a necessidade de um limite inferior para as temperaturas de saída dos leitos decorre na natureza exotérmica da reação e da energia de ativação necessária para que a reação se inicie. A reação nos leitos catalíticos é exotérmica e limitada pelo equilíbrio termodinâmico. Os reagentes frescos resfriam o efluente do primeiro leito para afastá-lo da condição de equilíbrio, cedendo margem para que a reação prossiga no segundo leito. Assim, o rendimento da reação será tão maior quanto menor for a temperatura de entrada do fluido de alimentação. No entanto, se esta temperatura fizer com que a corrente de saída dos leitos se torne excessivamente fria, o pré-aquecimento dos reagentes frescos pode ser insuficiente para fornecer a energia de ativação necessária para iniciar a reação e neste caso os leitos progressivamente se resfriam até o apagamento completo do sistema reacional.

A fim de identificar e ilustrar esta peculiaridade da operação do reator, foram avaliados os limites operacionais que podem levar o reator à condição sem reação através do simulador rigoroso e traçado um mapa com curvas de nível indicando o teor de amônia na corrente de saída do equipamento para o caso de temperatura e pressão de entrada normais de operação. Este mapa é apresentado na Figura 6.14. A região acinzentada corresponde aos pares de u_1 e u_2 para os quais a reação não ocorre devido aos motivos explicados anteriormente. Além da região de operabilidade, o mapa deixa evidente que a direção de otimização dada pela função econômica, isto é, aumento de u_1 e diminuição de u_2 , leva à situação desejada de maximização da conversão de amônia. A explicação para isto sob o aspecto de processo remete ao reaproveitamento interno de energia no reator.

Figura 6.14 – Mapa da região operável do reator com curvas de nível indicando teor de amônia na corrente de saída em função das variáveis manipuladas u_1 e u_2

Ainda que o aumento de u_2 , considerando u_1 constante, implique redução da temperatura de alimentação do primeiro leito, o que favorece o rendimento de acordo com os as explicações apresentadas e com o mapa acima, é preciso observar que, se esta corrente for alimentada diretamente aos leitos catalíticos, quantidade equivalente de gás frio deixa de ser utilizada para reaproveitamento de energia nos trocadores de calor internos do reator. À medida que se evita a alimentação fria diretamente ao leito catalítico com a redução de u_2 , e que se utiliza a corrente fria para resfriar ao máximo a alimentação do segundo leito em detrimento do resfriamento do efluente final através do aumento de u_1 , obtém-se simultaneamente alimentações mais frias para ambos os leitos, maximizando a conversão dos reagentes em amônia. A direção de aumento da função apresentada na Figura 6.14 é uma consequência de tal efeito.

A redução da pressão de entrada da corrente de alimentação do reator provoca nas variáveis controladas uma resposta semelhante à da redução de temperatura. Os resultados da simulação referente a esta perturbação podem ser visualizados a partir da Figura 6.15 até a Figura 6.20.

Figura 6.15 – Redução da pressão de entrada – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)

Figura 6.16 – Redução da pressão de entrada – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)

Figura 6.17 – Redução da pressão de entrada – variável manipulada u_1

Figura 6.18 – Redução da pressão de entrada – variável manipulada u_2

Figura 6.19 – Redução da pressão de entrada – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica

Figura 6.20 – Redução da pressão de entrada – valor da função objetivo

Ainda que a redução da pressão da corrente de alimentação cause o mesmo efeito de diminuição da temperatura de saída de ambos os leitos catalíticos causado pela redução da temperatura da corrente de entrada, o efeito de cada uma dessas perturbações no objetivo econômico é oposto.

No caso da redução de pressão de alimentação, a Figura 6.19 mostra que o simulador rigoroso detecta a perda no rendimento em amônia em função da perturbação. No entanto, vale notar que, mesmo o OMPC estando com atuação limitada pelas restrições das variáveis controladas, as ações de otimização executadas antes da ocorrência da perturbação fizeram com que o teor de amônia de saída do reator fosse mantido em um nível maior do que o inicial, considerando o novo estado estacionário obtido após a estabilização do sistema.

As diferenças entre os casos A e B são irrelevantes, sendo a maior delas referente ao valor da função objetivo no momento em que a perturbação ocorre (Figura 6.20). Vale a mesma análise feita no caso do valor da função objetivo para o caso de redução da temperatura de entrada: a inclusão dos modelos dinâmicos das perturbações no algoritmo de controle faz com que a função objetivo reflita de forma instantânea e intensa a ocorrência de perturbações.

Os benefícios da utilização do OMPC se pronunciam no segundo grande grupo de resultados, isto é, aqueles em que a perturbação afasta a variável y_2 de sua restrição de valor mínimo. Esta situação se manifesta, por exemplo, quando ocorre elevação da temperatura da carga do reator (ver Figura 6.21 a Figura 6.26).

Esta perturbação, ao mesmo tempo em que prejudica o objetivo econômico por fazer com que a mistura reacional seja submetida à presença do catalisador numa condição mais próxima a do equilíbrio termodinâmico, confere graus de liberdade ao controlador OMPC por deslocar o novo estado estacionário para uma região em que as variáveis controladas se encontram distantes dos limites.

Figura 6.21 – Elevação da temperatura de entrada – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)

Figura 6.22 – Elevação da temperatura de entrada – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)

Figura 6.23 – Elevação da temperatura de entrada – variável manipulada u_1

Figura 6.24 – Elevação da temperatura de entrada – variável manipulada u_2

Figura 6.25 – Elevação da temperatura de entrada – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica

Figura 6.26 – Elevação da temperatura de entrada – valor da função objetivo

Quando ocorre a perturbação, o controlador inicia uma trajetória rumo a um novo estado estacionário otimizado. Este efeito é mais facilmente visualizável observado a Figura 6.25, correspondente ao teor de amônia previsto no estado estacionário pelo modelo rigoroso. Nota-se que, no momento da entrada da perturbação, uma redução na fração de amônia de saída é prevista, no entanto a ação de otimização do OMPC faz com que este efeito contrário ao objetivo econômico seja revertido.

A simulação com elevação de pressão na entrada reflete o efeito cinético e termodinâmico desta variável no sistema reacional. Os resultados desta simulação estão apresentados a partir da Figura 6.27 a Figura 6.32.

Figura 6.27 – Elevação da pressão de entrada – temperatura de saída do 1º leito (variável controlada y_1)

Figura 6.28 – Elevação da pressão de entrada – temperatura de saída do 2º leito (variável controlada y_2)

Figura 6.29 – Elevação da pressão de entrada – variável manipulada u_1

Figura 6.30 – Elevação da pressão de entrada – variável manipulada u_2

Figura 6.31 – Elevação da pressão de entrada – teor de amônia na saída do reator previsto pela função econômica

Figura 6.32 – Elevação da pressão de entrada – valor da função objetivo

Como era de se esperar, em consonância com o exposto na Figura 3.1, a elevação da pressão favorece a produção de amônia. A curva de equilíbrio termodinâmico é deslocada favoravelmente no sentido da síntese, o que permite que maiores temperaturas sejam atingidas antes de o equilíbrio ser alcançado. Assim, o aumento de pressão de entrada causa tanto um aumento no rendimento da reação (Figura 6.31) quanto um aumento no valor das variáveis controladas (Figura 6.27 e Figura 6.28), as quais ganham nova margem de otimização por se afastarem do limite inferior ao qual o OMPC as tinha conduzido durante os 50 minutos iniciais de simulação.

Enquanto a elevação da pressão da corrente de alimentação provoca efeito de elevação do teor de amônia na saída do reator por dois efeitos, isto é, tanto por favorecer a reação quanto por conferir ao OMPC graus de liberdade ao afastar y_2 de seu limite inferior, a redução da pressão causa efeitos opostos e elimina a margem de otimização, limitando o teor de amônia àquele correspondente ao novo estacionário obtido. A análise de processo pode ser efetuada de maneira analogamente inversa ao caso de elevação da pressão: a redução de pressão prejudica a taxa de reação e traz o equilíbrio termodinâmico para temperaturas mais baixas. A temperatura de saída do segundo leito catalítico, y_2 , que após os 50 minutos iniciais de simulação já se encontrava próxima ao seu limite mínimo, sofre redução por efeito da perturbação e a ação de controle a reconduz para dentro da faixa estabelecida (Figura 6.16). O teor de amônia na saída, prejudicado pela redução da pressão, não pode ser melhorado porque há uma restrição ativa (Figura 6.19).

Embora nesta estratégia de controle o ciclo de síntese de amônia não esteja incluído, o que faz com que a pressão não seja uma variável controlada pelo controlador proposto, vale ressaltar que a pressão de operação não pode ser excessivamente baixa, pois do contrário o equilíbrio é deslocado para uma faixa de temperaturas tão baixa que impossibilita o pré-aquecimento necessário para que os reagentes frescos possam reagir no leito catalítico. Além disso, a taxa de reação também é diminuída por efeito de redução de pressão, o que contribui negativamente para a necessária elevação da temperatura que ocorre devido ao avanço da reação exotérmica.

Comparando o desempenho do controlador com as formulações apresentadas, isto é, com as dinâmicas das perturbações sendo informadas ou não ao controlador (CASO A e CASO B, respectivamente), é possível verificar que a primeira fornece melhores resultados sob dois aspectos: menor variabilidade das variáveis controladas e menor tempo de restabelecimento da condição otimizada após perturbações. A menor variabilidade implica também em menor duração do período no qual as variáveis controladas ficam fora de seus limites, nos casos em que a perturbação causa tal efeito. A Figura 6.9 ilustra claramente essa diferença.

Todavia, levando em consideração que informar as dinâmicas das perturbações ao controlador requer o levantamento cuidadoso de modelos dinâmicos a partir de dados da unidade industrial e que a inclusão dos modelos das perturbações aumenta a complexidade do algoritmo de controle, no sistema em estudo o desempenho da formulação sem tais modelos pode ser considerado suficientemente satisfatório quando considerada a magnitude das perturbações simuladas.

6.3 *Método do Gradiente Reduzido*

Souza (2007) e Porfírio (2011) relatam que a presença do componente de otimização na formulação do algoritmo do controlador pode forçar uma ou mais variáveis controladas para fora da faixa desejada e sugere a aplicação do método do gradiente reduzido para evitar o problema, obtendo sucesso para o caso do MPC com horizonte de controle finito.

Conforme apresentado por Souza (2007) e Porfírio (2011), a aplicação do método do gradiente reduzido nos problemas de controle com otimização econômica consiste em

avaliar se o resultado da predição das variáveis controladas sinaliza que uma ou mais delas estarão fora da faixa de controle ao fim do horizonte de predição. Em caso afirmativo, o problema de otimização deve ser resolvido mais uma vez no mesmo instante de amostragem incluindo novas restrições de igualdade que obrigam, ao fim do horizonte de predição, ser zero a variação das variáveis que violam a região delimitada por suas faixas. Isto equivale a:

$$\Delta y_i = \sum_{j=1}^{nu} K_{i,j} \Delta \bar{u}_j = 0 \quad (6.1)$$

Desta forma, as variáveis controladas que tenham atingido suas restrições, ou cujos valores preditos ao fim do horizonte de predição indiquem violação das restrições, não são consideradas livres e, portanto, não podem ser levadas para além da faixa desejada.

Este método evita que o componente de otimização da função objetivo do controlador force as variáveis controladas para além de seus limites no caso de haver restrições ativas nestas variáveis impedindo que o sistema atinja o ponto ótimo perseguido pela função econômica. Esta condição é detectada pelo valor não nulo do gradiente da função econômica descrito na equação (5.34).

Para o controlador de horizonte infinito de predição, no entanto, a aplicação desta formulação não é necessária. Ao se estender o horizonte de predição ao infinito, a condição de estado terminal conforme equação (5.16) impõe como restrição à função objetivo do controlador o fato de que não deve haver diferença entre a predição da variável controlada em seu novo estado estacionário e o valor lido desta variável, desde que as variáveis de folga δ_i incluídas nesta mesma equação possuam peso suficiente. Isto significa que, mesmo no caso de a otimização econômica estar indicando um alvo para as variáveis controladas cujo valor ultrapasse um dos limites, superior ou inferior, a existência da condição de estado terminal e uma sintonia adequada do controlador garantem que tais restrições serão respeitadas ao se estabelecer um novo estado estacionário, ainda que elas sejam temporariamente violadas em decorrência de perturbações.

7 Conclusões

As simulações de utilização do MPC Econômico (OMPC) em um reator de amônia do tipo fluxo radial com resfriador intermediário mostraram a eficácia do método quando aplicado ao referido sistema, obtendo-se otimização das ações de controle em função de um objetivo econômico calculado a partir de um modelo estacionário rigoroso do equipamento.

O controlador também mostrou desempenho satisfatório quando o sistema foi submetido a perturbações. Duas formulações distintas foram testadas: perturbações medidas tanto pelo controlador quanto pelo modelo rigoroso e perturbações medidas apenas pelo modelo rigoroso. O desempenho do controlador sem informação das dinâmicas das perturbações foi suficientemente satisfatório.

O modelo de controlador utilizado como base, o IHMPC, ou controlador preditivo de horizonte infinito, mostrou-se eficiente quando a ele se incorpora o gradiente da função econômica como parte da função objetivo a ser minimizada por programação quadrática.

A não linearidade moderada do sistema a ser controlado não prejudicou a utilização do controlador preditivo não robusto baseado em modelos lineares.

Foi apresentada discussão na qual se constatou que a consideração de horizonte de predição infinito do IHMPC é suficiente para evitar que o componente de otimização force as variáveis controladas para fora de seus limites, não sendo necessária a inclusão do método do gradiente reduzido. Observou-se em simulações não apresentadas neste trabalho que a inclusão do gradiente reduzido conjugada a um controlador IHMPC causa desvios permanentes nas variáveis controladas quando uma perturbação as leva para fora de seus limites, pois as restrições impostas por sua formulação impedem que o controlador de horizonte infinito reconduza as variáveis controladas para dentro de suas faixas.

Com o intuito de dar continuidade aos estudos e validar as simulações aqui apresentadas, ficam como recomendações as seguintes propostas:

- desenvolver um modelo dinâmico rigoroso para o reator de amônia;
- desenvolver um modelo dinâmico, rigoroso ou linearizado, que simule o *loop* de síntese como um todo simultaneamente ao reator controlado pelo OMPC;
- aplicar as propostas destes estudos em uma unidade industrial;

- desenvolver um teorema que indique a ordem de grandeza mínima da matriz de peso das variáveis de folga, S_s , para que se obtenha controlabilidade garantida do OMPC.

REFERÊNCIAS

- ALVAREZ, L. A.; ODLOAK, D. A simplified RTO-MPC algorithm with infinite horizon for industrial process operation. **Proceedings of 19th International Congress of Chemical and Process Engineering CHISA 2010**, Praga.
- APPL, M. Ammonia. **Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry**, Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2006.
- BENCIC, S. **Ammonia Synthesis Promoted by Iron Catalysts**. East Lansing, 2001. Literature Report – Department of Chemistry, Michigan State University.
- CHAGAS, A. P. A Síntese da Amônia: Alguns Aspectos Históricos, **Química Nova**, v. 30, n. 1, p. 240-247, 2007.
- DE SOUZA, G. F.; ODLOAK, D.; ZANIN, A.C. Real time optimization (RTO) with model predictive control (MPC), **Computers and Chemical Engineering**, v. 34, p. 1999-2006, 2010.
- DYSON D. C.; SIMON J. M. A Kinetic Expression with Diffusion Correction for Ammonia Synthesis on Industrial Catalyst, **I&EC Fundamentals**, v. 7, n. 4, p. 605-610, 1968.
- ERTL, G. Elementary Steps in Ammonia Synthesis. In: **Catalytic Ammonia Synthesis: Fundamentals and Practice**, pp. 109-132, New York: Plenum Press, 1991.
- FRANCO, J. A. M.; NETO, A. S. **Produção de Fertilizantes Nitrogenados e Suprimento de Matéria-Prima**, International Plant Nutrition Institute – IPNI, Piracicaba/SP, 2007.
- GILLESPIE, L. J.; BEATTIE, J. A. The Thermodynamic Treatment of Chemical Equilibria in Systems Composed of Real Gases. II. A Relation for the Heat of Reaction Applied to the Ammonia Synthesis Reaction. The Energy and Entropy Constants for Ammonia. **Physical Review**, v. 36, p. 1008-1013, 1930.
- GARCIA, C. **Identificação de Sistemas e Estimação de Parâmetros**, São Paulo, 2007 (Apostila).
- GONZÁLEZ, A.; ODLOAK, D. A Stable Model Predictive Control With Zone Control, **Journal of Process Control**, n. 19, p. 110-122, 2009.
- GOUVÊA, M. T. **Uso de um algoritmo SQP na otimização de processos químicos contínuos em tempo real**. São Paulo, 1997. Tese de Doutorado – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.

- GOUVÊA, M. T.; ODLOAK, D. One-layer real time optimization of LPG production in the FCC unit: procedure, advantages and disadvantages. **Computers and Chemical Engineering**, v. 22, Suppl., p. 191, 1998.
- HOLMAN, J. P. **Transferência de Calor**. São Paulo: McGraw-Hill, 1983.
- MANCUSI, E.; MEROLA, G.; CRESCITELLI, S.; MAFFETTONE, P. L. Multistability and Hysteresis in an Industrial Ammonia Reactor, **AIChE Journal**, v. 46, n. 4, p. 824-828, 2000.
- MORO, L. F. L.; ODLOAK, D. Constrained Multivariable Control of Fluid Catalytic Cracking Converters, **Journal of Process Control**, v. 5, n. 1, p. 29-39, 1995.
- MORUD, J. C.; SKOGESTAD, S. Analysis of Instability in an Industrial Ammonia Reactor, **AIChE Journal**, v. 44, n. 4, p. 888-895, 1998.
- ODLOAK, D. Extended Robust Model Predictive Control, **AIChE Journal**, v. 50, n. 8, p. 1824-1836, 2004.
- PEDERNERA, M.; BORIO, D. O.; PORRAS, J. A. A New Cocurrent Reactor for Ammonia Synthesis, **Chemical Engineering Science**, v. 51, n. 11, p. 2927-2932, 1996.
- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. **The Properties of Gases and Liquids**. 5ª edição, Editora McGraw-Hill, 2000.
- PORFÍRIO, C. R. **Implantação de otimizador online acoplado ao controle preditivo (MPC) de uma coluna de Tolueno**. São Paulo, 2011. Tese de doutoramento – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.
- REIS, J. A. D. **Simulação de uma Unidade de Síntese de Amônia**. Campinas, 1992. Dissertação de Mestrado – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas.
- ROTAVA, O.; ZANIN, A. C. Multivariate Control and real time optimization – An Industrial Practical View, **Hydrocarbon Processing**, v. 84, n.6, p. 61-71, 2005.
- SANTORO, B. F. **Controle Preditivo de Horizonte Infinito para Sistemas Integradores e com Tempo Morto**. São Paulo, 2011. Dissertação de mestrado – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.
- SINGH, C. P. P.; SARAF, D. N. Simulation of Ammonia Synthesis Reactors, **Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.**, v. 18, n. 3, p. 364-370, 1979.
- SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. 5ª edição, Rio de Janeiro: Editora LTC, 2000.

- SOUZA, G. F. **Integração da Otimização em Tempo Real com Controle Preditivo**. São Paulo, 2007. Dissertação de mestrado – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.
- STRELZOFF, S. **Technology and Manufacture of Ammonia**, New York: John Wiley & Sons, Inc., 1988.
- TEMKIN, M. **The Journal of Physical Chemistry** (USSR) v. 24, p. 1312, 1950.
- TOPSØE, 2011, **Radial Flow Ammonia Synthesis Converters** – Haldor Topsøe, disponível em <http://www.topsoe.com/>, acessado em 23 de janeiro de 2011.
- TRIERWEILER, J. O.; FARINA, L. A.; DURAIKI R. G. **RPN Tuning strategy for model predictive control**. DYCOPS, p. 283-289, Jeju Island, Korea, 2001.
- YAMAMOTO, C. I. **Modelagem Matemática e Otimização do Processo Industrial de Síntese de Amônia Utilizando Redes Neurais**. São Paulo, 1998. Tese de doutoramento – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.
- YING, C. M.; JOSEPH, B. Performance and Stability Analysis of LP-MPC and QPMPC Cascade Control Systems, **AIChE Journal**, v. 45, n. 7, p. 1521-1534, 1999.
- ZANIN, A. C. **Implementação Industrial de um Otimizador em Tempo Real**. São Paulo, 2001. Tese de doutoramento – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.
- ZARDI, F.; BONVIN, D. Modeling, Simulation and Model Validation for an Axial-Radial Ammonia Synthesis Reactor, **Chemical Engineering Science**, v. 47, n. 9-11, p. 2523-2528, 1992.