

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL E CONTROLE DOS REATORES DA FASE LÍQUIDA DO PROCESSO SPHERIPOL: UM ESTUDO COMPARATIVO ENTRE CONTROLE PID DE MALHA ÚNICA E CONTROLE EM CASCATA

**COMPUTATIONAL SIMULATION AND CONTROL OF THE LIQUID-PHASE
REACTORS OF THE SPHERIPOL PROCESS: A COMPARATIVE STUDY
BETWEEN SINGLE-LOOP PID CONTROL AND CASCADE CONTROL**

Engenharias • 08/09/2026

REGISTRO DOI: [10.70773/revistatopicos/788649712](https://doi.org/10.70773/revistatopicos/788649712)

Gustavo Anthunes Albuquerque da Silva¹

Geórgya Machado de Oliveira Fernandes²

Enzo Pietro Monteiro de Almeida³

Izabel Cabral Negreiros⁴

Ranna Theresa dos Santos Cajá⁵

Laíse Silvia da Silva Pinto⁶

RESUMO

Este artigo apresenta o desenvolvimento de um modelo dinâmico para os reatores de polimerização em fase líquida do processo Spheripol e sua aplicação na comparação entre duas estratégias de controle de temperatura. Partindo do modelo cinético de Reginato (2001) para reatores loop com catalisadores Ziegler-Natta multissítio, foi construído um simulador em Python que descreve, via método dos momentos, a evolução da concentração de monômeros e da distribuição de massa molar do polímero, incluindo a copolimerização propeno-eteno. Ao modelo cinético foi acoplado um balanço de energia não isotérmico, com dependência de Arrhenius e uma camisa de resfriamento com dinâmica térmica própria. Sobre essa planta simulada, projetou-se um controlador PID de malha única, que manipula a vazão de água de resfriamento a partir da temperatura do reator, e um controlador em cascata, no qual uma malha externa define o setpoint de temperatura da camisa para uma malha interna mais rápida. Ambos empregam anti-windup por retrocálculo. Os resultados mostram que o controle em cascata reduz em 5,3 vezes o erro integral absoluto na rejeição de uma perturbação na água de resfriamento, mas é de 7,0 a 14,8 vezes pior que a malha única no segmento de mudança de setpoint e na rejeição de uma perturbação que entra diretamente no reator. Conclui-se que a superioridade da cascata é condicional à origem física da perturbação, e não uma propriedade universal da arquitetura, resultado consistente com a literatura clássica de controle de processos.

Palavras-chave: processo Spheripol; polimerização Ziegler-Natta; controle em cascata; controle PID; simulação dinâmica de processos.

ABSTRACT

This paper presents the development of a dynamic model for the

liquid-phase polymerization reactors of the Spheripol process and its application to compare two temperature control strategies. Based on the kinetic model of Reginato (2001) for loop reactors with multi-site Ziegler-Natta catalysts, a Python simulator was built describing, via the method of moments, the dynamic evolution of monomer concentration and polymer molecular weight distribution, including propylene-ethylene copolymerization. A non-isothermal energy balance was coupled to the kinetic model, with Arrhenius dependence and a cooling jacket with its own thermal dynamics. On this simulated plant, a single-loop PID controller was designed, manipulating cooling water flow rate from reactor temperature, and a cascade controller, in which an outer loop sets the jacket temperature setpoint for a faster inner loop. Both employ back-calculation anti-windup. Results show that cascade control reduces the integral absolute error by 5.3 times when rejecting a cooling-water disturbance, but performs 7.0 to 14.8 times worse than the single loop for setpoint tracking and for rejecting a disturbance entering directly at the reactor. It is concluded that cascade superiority is conditional on the physical origin of the disturbance, rather than a universal property of the architecture, a result consistent with the classical process control literature.

Keywords: Spheripol process; Ziegler-Natta polymerization; cascade control; PID control; dynamic process simulation.

1. INTRODUÇÃO

O polipropileno (PP) é um dos polímeros termoplásticos de maior volume de produção mundial, presente em aplicações que vão de embalagens flexíveis a componentes automotivos de engenharia. Parte relevante da produção industrial de PP e de seus copolímeros com eteno é realizada por meio do processo Spheripol, que utiliza

reatores tubulares de recirculação — os chamados reatores loop — operando em fase líquida (bulk), com propeno líquido servindo simultaneamente como monômero e como meio reacional. A configuração típica emprega dois reatores loop em série, alimentados por catalisadores Ziegler-Natta de alta atividade, frequentemente compostos por mais de um tipo de sítio catalítico ativo, cada qual com sua própria cinética de propagação, transferência de cadeia e desativação (Reginato, 2001).

A operação desses reatores é fortemente exotérmica: a entalpia de polimerização do propeno é elevada frente à energia térmica disponível à temperatura de operação, de modo que a remoção eficiente do calor gerado pela reação é condição necessária tanto para a segurança da planta — evitando o disparo térmico (thermal runaway) — quanto para a qualidade do produto, já que a temperatura afeta diretamente as constantes cinéticas de propagação e, por consequência, a massa molar média e a distribuição de massas molares do polímero formado. O controle preciso da temperatura reacional é, portanto, um dos problemas centrais de controle de processos nesse tipo de planta.

A literatura clássica de controle de processos (Seborg et al., 2016; Marlin, 2000) recomenda o uso de controle em cascata quando existe uma variável secundária mensurável, situada entre a variável manipulada e a variável controlada primária, cuja dinâmica é significativamente mais rápida que a da malha primária, e quando as perturbações mais relevantes do processo atuam justamente sobre essa variável secundária. Sob essas condições, a malha interna da cascata rejeita a perturbação antes que ela se propague à variável controlada principal. Entretanto, essa recomendação é frequentemente citada de forma qualitativa, sem uma

demonstração quantitativa, em um processo industrial realista, de que a vantagem da cascata é condicional — isto é, de que ela pode não apenas deixar de ajudar, mas efetivamente piorar o desempenho de controle, quando a perturbação dominante não atua sobre a variável secundária.

O processo Spheripol oferece um estudo de caso particularmente adequado para essa investigação: a camisa de resfriamento do reator loop constitui uma variável secundária natural, fisicamente situada entre a variável manipulada (a vazão de água de resfriamento) e a variável controlada (a temperatura do reator). Isso permite comparar, sobre o mesmo modelo dinâmico, o desempenho de uma malha única e de uma malha em cascata frente a diferentes tipos de evento operacional: uma perturbação que entra pelo lado da camisa, uma mudança de setpoint (troca de grade de produto) e uma perturbação que entra diretamente no reator.

O objetivo geral deste trabalho é desenvolver um modelo dinâmico dos reatores de polimerização em fase líquida do processo Spheripol e utilizá-lo para avaliar comparativamente duas estratégias de controle de temperatura. Os objetivos específicos são: (a) implementar um modelo cinético de polimerização Ziegler-Natta multissítio, via método dos momentos, capaz de descrever a evolução dinâmica da concentração de monômero(s) e das propriedades de massa molar do polímero em reatores CSTR em série; (b) estender esse modelo à copolimerização propeno-eteno; (c) acoplar ao modelo cinético um balanço de energia não isotérmico, com dependência de Arrhenius e uma camisa de resfriamento com dinâmica térmica própria; (d) projetar um controlador PID de malha única e um controlador em cascata para a temperatura do reator,

ambos com anti-windup; e (e) comparar quantitativamente o desempenho das duas estratégias em cenários operacionais distintos, por meio de métricas de desempenho de malha fechada.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. O Processo Spheripol

O processo Spheripol produz polipropileno homopolímero e copolímeros heterofásicos (impact copolymers) e randômicos (random copolymers) por meio de polimerização em fase líquida (bulk), utilizando o próprio propeno líquido, sob pressão, como meio reacional. A configuração de referência utiliza dois reatores tubulares de recirculação (reatores loop) dispostos em série: o catalisador Ziegler-Natta, ativado por um cocatalisador de alquil-alumínio e, tipicamente, um doador de elétrons externo, é alimentado ao primeiro reator; a corrente de saída do primeiro reator — contendo monômero não convertido, polímero em suspensão e sítios catalíticos ainda ativos — segue para o segundo reator, ao qual se soma uma alimentação adicional de monômero fresco, sem novo catalisador (Reginato, 2001). Dados de planta piloto dessa configuração de dois reatores em série (Spheripol II) confirmam sua aplicação tanto para homopolímeros quanto para copolímeros propeno-eteno de composição controlada (Wang et al., 2020).

Cada reator loop pode ser descrito, para efeitos de modelagem em regime de mistura perfeita, como um reator CSTR (continuous stirred-tank reactor) ideal: a elevada vazão de recirculação interna, promovida por uma bomba axial, garante uma condição próxima da mistura perfeita instantânea ao longo da seção transversal do laço, de modo que a composição e a temperatura no interior do reator

podem ser tratadas como uniformes e iguais às da corrente de saída. Essa é a hipótese central adotada neste trabalho, consistente com a prática de modelagem já reportada para reatores loop industriais operando em condições de alta razão de recirculação (Fontoura et al., 2021).

Do ponto de vista térmico, cada reator loop é envolvido por uma camisa de resfriamento, através da qual circula água que remove o calor liberado pela reação de polimerização, fortemente exotérmica. A temperatura de operação típica situa-se na faixa de 60 a 80 °C, com Reginato (2001) tabulando as constantes de velocidade a 70 °C (343,15 K), condição de referência adotada também neste trabalho. O dimensionamento do volume do reator e da capacidade de troca térmica da camisa, em projetos industriais desse tipo de reator, é definido a partir da capacidade de produção desejada e dos limites de transferência de calor disponíveis (Abedini; Shahrokhi; Emami, 2009), lógica de projeto seguida neste trabalho para a definição dos parâmetros da Tabela 3 (Seção 3.5).

2.2. Cinética de Polimerização Ziegler-Natta Multissítio

Catalisadores Ziegler-Natta heterogêneos, amplamente empregados na produção industrial de poliolefinas, caracterizam-se pela presença de múltiplos tipos de sítios ativos na mesma partícula catalítica, cada um com sua própria atividade, estereosseletividade e sensibilidade a agentes de transferência de cadeia. Essa heterogeneidade de sítios é a principal responsável pela ampla distribuição de massas molares tipicamente observada em poliolefinas produzidas por esse tipo de catalisador — distribuições que, para um único tipo de sítio operando em um CSTR ideal,

tenderiam à distribuição de Flory (mais provável), com índice de polidispersão teórico igual a 2.

O modelo cinético adotado neste trabalho, seguindo Reginato (2001), descreve cada sítio catalítico por meio de um conjunto de reações elementares: ativação de sítios potenciais, iniciação de cadeia, propagação (adição de unidades de monômero à cadeia em crescimento), transferência de cadeia — por hidrogênio, por monômero ou espontânea — e desativação de sítios, esta última podendo ocorrer diretamente ou por meio de uma transformação de um tipo de sítio em outro. A evolução dessas populações de cadeias é tratada pelo método dos momentos, no qual, em vez de acompanhar a concentração de cada espécie de cadeia de comprimento n individualmente, acompanham-se apenas os momentos estatísticos (de ordem zero, um e dois) da distribuição de comprimentos de cadeia, tanto para o polímero “vivo” (cadeias ainda em crescimento) quanto para o polímero “morto” ou bulk (cadeias já terminadas). A partir desses momentos, obtêm-se diretamente a massa molar média numérica (M_n), a massa molar média ponderal (M_w) e o índice de polidispersão ($PDI = M_w/M_n$), conforme detalhado na Seção 3. Essa mesma abordagem — reator loop com transformação reversível entre dois tipos de sítio ativo, tratada pelo método dos momentos — foi empregada por Manuyko et al. (2022) na modelagem da polimerização de propeno com catalisadores de titânio-magnésio, confirmando sua adequação para a descrição desse tipo de sistema catalítico.

Quando mais de um monômero está presente — como no caso da copolimerização propeno-eteno —, a cinética de propagação passa a depender não apenas do monômero sendo adicionado, mas também do último monômero incorporado à extremidade da cadeia

em crescimento, no que a literatura denomina modelo terminal (terminal model) de copolimerização. Isso implica que cada sítio catalítico passa a ser caracterizado por até quatro constantes de propagação distintas, cujas razões (as razões de reatividade) determinam se a copolimerização tende a produzir sequências alternadas, bloqueadas ou aleatórias, e permitem prever a composição do copolímero resultante em função da composição da alimentação.

2.3. Fundamentos de Controle em Cascata

O controle em cascata é uma das estruturas de controle multimalha mais empregadas na indústria de processos químicos. Sua motivação clássica (Seborg et al., 2016; Marlin, 2000; Stephanopoulos, 1984) surge quando a dinâmica entre a variável manipulada (MV) e a variável controlada primária (PV) é lenta e sujeita a perturbações que atuam sobre uma variável intermediária, mensurável e de dinâmica mais rápida. Nessas condições, em vez de um único controlador atuando diretamente sobre a MV a partir do erro na PV, emprega-se uma estrutura de duas malhas aninhadas: a malha externa (primária), que mede a variável controlada principal e gera, como sua saída, o setpoint da malha interna; e a malha interna (secundária), que mede a variável intermediária e manipula a variável de processo real, atuando de forma consideravelmente mais rápida que a malha externa. Essa arquitetura específica — malha externa medindo a temperatura do reator e gerando o setpoint de temperatura da camisa para uma malha interna que manipula a válvula de resfriamento — é a mesma empregada por Reddy e Rani (2014) no controle de um reator de polimerização semibatelada multiproduto, e por Kristanto e Hermawan (2020) em uma comparação direta entre controle PI convencional e cascata em reatores tubulares.

O benefício central dessa arquitetura é que perturbações que atuam sobre a variável intermediária são detectadas e corrigidas pela malha interna antes que cheguem a afetar de forma significativa a variável controlada principal. Por outro lado, a literatura também é explícita quanto às condições em que essa vantagem se manifesta: a malha interna deve ser sintonizada de forma consideravelmente mais rápida que a externa (tipicamente com uma razão de constantes de tempo de 3 a 10 vezes) para garantir estabilidade e para que a rejeição de perturbação na malha interna realmente se complete antes de a malha externa precisar atuar. Essa exigência de separação de escalas de tempo tem como contrapartida uma malha externa deliberadamente mais lenta e conservadora — o que, como este trabalho demonstra quantitativamente na Seção 4, penaliza o desempenho da cascata em cenários nos quais a perturbação não entra pela variável intermediária, ou nos quais se deseja simplesmente seguir uma nova referência (setpoint tracking). Esse resultado contrasta com o de Kristanto e Hermawan (2020), que reportam desempenho superior da cascata em todos os cenários testados em seu estudo — contraste que reforça o argumento central deste trabalho de que a superioridade da cascata é condicional ao tipo de perturbação avaliado, e não uma propriedade universal da arquitetura.

Um segundo aspecto de projeto relevante para controladores com ação integral é o fenômeno de windup: quando a variável manipulada satura em seu limite físico, o termo integral do controlador continua a acumular erro caso a lei de controle não seja modificada, resultando em um comportamento transitório com sobressinal excessivo e tempo de acomodação longo assim que a saturação é removida. A técnica de anti-windup por retrocálculo (back-calculation), empregada neste trabalho, corrige esse efeito

realimentando a diferença entre a saída não saturada e a saída efetivamente aplicada de volta ao termo integral, com uma constante de tempo de rastreamento que determina a velocidade dessa correção — técnica descrita originalmente por Åström e Rundqwist (1989) e hoje um dos métodos de anti-windup mais empregados industrialmente.

3. METODOLOGIA

3.1. Hipóteses e Simplificações

O modelo desenvolvido parte da formulação cinética de Reginato (2001) para os reatores loop do processo Spheripol, adotando um conjunto de simplificações deliberadas para manter o sistema de equações diferenciais tratável computacionalmente. As principais hipóteses são: (H1) cada reator loop é tratado como um CSTR ideal, com volume constante e vazão de saída igual à de entrada; (H2) o catalisador é alimentado já ativado (sítios vagos), sem modelagem explícita da etapa de ativação por alquil-alumínio; (H3) as reações consideradas são iniciação, propagação, transferência de cadeia por hidrogênio e desativação de sítios (espontânea ou por transformação de um tipo de sítio em outro); (H4) a energia de ativação de Arrhenius ($E_a = 41,86 \text{ MJ/kmol}$, Tabela 1) é aplicada às constantes de propagação, permanecendo as demais constantes cinéticas independentes da temperatura, por ausência de valores de energia de ativação para essas reações na fonte consultada; (H5) um conjunto de parâmetros físicos e operacionais não disponíveis na fonte cinética consultada — detalhados e com sua origem declarada na Seção 3.5 — foi necessário para fechar o balanço de energia do modelo.

3.2. Cinética e Balanços de Momentos

Para um reator com N_s sítios catalíticos, segundo o método dos momentos, e tratando o caso de homopolimerização (momento agregado, sem distinção de monômero terminal), as equações de balanço no3

$$dC_M/dt = (C_{M,alim} - C_M)/\tau - R_{i0} - k_p \cdot C_M \cdot \mu_0 \quad (1)$$

$$d\mu_0/dt = (\mu_{0,alim} - \mu_0)/\tau + R_{i0} - (k_{cH} \cdot C_H + k_{dSp}) \cdot \mu_0 \quad (2)$$

$$d\mu_1/dt = (\mu_{1,alim} - \mu_1)/\tau + R_{i0} + k_p \cdot C_M \cdot \mu_0 - (k_{cH} \cdot C_H + k_{dSp}) \cdot \mu_1 \quad (3)$$

$$d\mu_2/dt = (\mu_{2,alim} - \mu_2)/\tau + R_{i0} + k_p \cdot C_M \cdot (2\mu_1 + \mu_0) - (k_{cH} \cdot C_H + k_{dSp}) \cdot \mu_2 \quad (4)$$

em que τ é o tempo espacial de residência (V/Q), C_M e C_H são as concentrações de monômero e hidrogênio, k_p , k_{cH} e k_{dSp} são as constantes de propagação, transferência de cadeia por hidrogênio e desativação espontânea, e a taxa de iniciação é dada por:

$$R_{i0} = k_p \cdot P_0 \cdot C_M \quad (5)$$

com P_0 a concentração de sítios vagos. Os momentos do polímero bulk ($\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$) recebem, como termo fonte, as cadeias que deixam a população “viva” por transferência ou desativação:

$$d\lambda_k/dt = (\lambda_{k,alim} - \lambda_k)/\tau + (k_{cH} \cdot C_H + k_{dSp}) \cdot \mu_k, \quad k = 0,1,2 \quad (6)$$

A partir dos momentos bulk, obtêm-se as propriedades médias do polímero:

$$M_n = (\lambda_1/\lambda_0) \cdot M_{monômero} \quad PDI = (\lambda_2 \cdot \lambda_0)/\lambda_1^2 \quad M_w = M_n \cdot PDI \quad (7-9)$$

Quando o catalisador apresenta dois tipos de sítios, o sistema de Equações 1–6 é replicado para cada sítio, com constantes cinéticas próprias tabeladas por Reginato (2001, Tabela 1 deste trabalho), e um termo adicional de transformação espontânea do sítio 1 em sítio 2 é incluído nos balanços — o sítio 1 não desativa diretamente, transformando-se no sítio 2, que é quem efetivamente desativa. Na copolimerização propeno-eteno, a propagação passa a depender do monômero terminal da cadeia, exigindo a expansão dos momentos de ordem zero e um por monômero terminal i , mantendo o momento de ordem dois agregado. Contabiliza-se, para cada sítio, a quantidade acumulada de cada monômero incorporada ao polímero (INC_i), permitindo calcular a composição molar do copolímero:

$$F_{C2} = INC_{C2} / (INC_{C3} + INC_{C2}) \quad (10)$$

3.3. Balanço de Energia do Reator e da Camisa

O acoplamento térmico do modelo é feito por dois balanços de energia dinâmicos: um para o reator (temperatura T) e outro para a água de resfriamento na camisa (temperatura T_j), tratada como um volume de controle com massa térmica própria — decisão de modelagem central para permitir a comparação entre malha única e cascata (Seção 3.4). O balanço de energia do reator é:

$$dT/dt = (T_{alim} - T)/\tau + [Q_{ger} - Q_{transf}] / (\rho \cdot Cp \cdot V) \quad (11)$$

$$Q_{ger} = (-\Delta H_p) \cdot R_{p,reação} \cdot V \quad Q_{transf} = UA \cdot (T - T_j) \quad (12-13)$$

A camisa recebe o calor Q_{transf} do reator e o remove por meio do escoamento de água à vazão mássica F_w , entrando à temperatura

$T_{cw,in}$:

$$dT_j/dt = [F_w \cdot Cp_w \cdot (T_{cw,in} - T_j) + Q_{transf}] / (M_j \cdot Cp_w) \quad (14)$$

com M_j a massa de água contida na camisa e Cp_w seu calor específico. A dependência das constantes de propagação com a temperatura segue a lei de Arrhenius, com $T_{ref} = 343,15$ K (70 °C):

$$k_p(T) = k_{p,ref} \cdot \exp[-(E_a/R) \cdot (1/T - 1/T_{ref})] \quad (15)$$

É essa dependência de Arrhenius que fecha o acoplamento bidirecional entre cinética e energia: a temperatura afeta a taxa de reação, que determina o calor gerado, que determina a própria temperatura — um laço de realimentação positiva que, sem remoção de calor suficiente, pode levar ao disparo térmico, fenômeno observado em uma etapa preliminar de desenvolvimento deste modelo (Seção 3.6). Um tratamento mais detalhado do acoplamento massa-energia em reatores loop, incluindo efeitos de transporte interfásico não considerados neste trabalho, é apresentado por Fontoura et al. (2021).

3.4. Estrutura das Malhas de Controle

Duas arquiteturas de controle de temperatura foram implementadas e comparadas, ambas manipulando a vazão de água de resfriamento F_w como variável final de atuação, e ambas sintonizadas como controladores proporcional-integral (PI).

$$e(t) = T(t) - T_{sp} \quad F_w(t) = F_{w,base} + K_p \cdot e(t) + K_i \cdot I(t) \quad (16-17)$$

$$T_{j,sp}(t) = T_{j,base} - [K_{p,ext} \cdot e_{ext}(t) + K_{i,ext} \cdot I_{ext}(t)] \quad (18-19)$$

$$F_w(t) = F_{w,base} + K_{p,int} \cdot e_{int}(t) + K_{i,int} \cdot I_{int}(t) \quad (20-21)$$

A estabilidade e a efetividade da cascata exigem que a malha interna responda substancialmente mais rápido que a externa; neste trabalho, essa separação de escalas de tempo foi obtida por meio de ganhos consideravelmente mais conservadores na malha externa (Tabela 4).

$$dl/dt = e(t) - (1/T_t) \cdot [u_{n\tilde{a}o-sat}(t) - u_{sat}(t)] \quad (22)$$

Em que $u_{n\tilde{a}o-sat}$ é a saída do controlador antes da saturação, u_{sat} é a saída efetivamente aplicada e T_t é a constante de tempo de rastreamento, seguindo a formulação clássica de Åström e Rundqwist (1989). Nas primeiras tentativas de simulação da malha em cascata sem anti-windup adequado, o reator sofreu disparo térmico simulado (temperatura superior a 340 °C), resultado de a vazão de resfriamento permanecer presa no valor mínimo devido ao acúmulo de um termo integral extremamente negativo durante a partida a frio — episódio que ilustra, de forma concreta, um modo de falha real de sistemas de controle industriais com ação integral sujeita a saturação.

3.5. Parâmetros Cinéticos, de Processo e Físicos

Os parâmetros cinéticos foram extraídos da Tabela 3.2 de Reginato (2001), referentes à polimerização de propeno a 70 °C com catalisador Ziegler-Natta de dois sítios (Tabela 1). Os parâmetros de processo foram extraídos da Tabela 3.3 da mesma referência (Tabela 2).

Tabela 1. Parâmetros cinéticos (Reginato, 2001, Tabela 3.2).

Parâmetro	Símbolo	Sítio 1	Sítio 2	Unidade
Propagação C3 → C3	kp11	342,4	34,24	m ³ /kmol·s
Propagação C2 → C3 (terminal C2)	kp21	918,0	203,1	m ³ /kmol·s
Propagação C3 → C2 (terminal C3)	kp12	2642	584,6	m ³ /kmol·s
Propagação C2 → C2	kp22	7084	10402	m ³ /kmol·s
Transferência de cadeia por H2	kcH	166,0 (ambos)	—	m ³ /kmol·s
Transformação sítio 1 → 2	ktSp12	2,28×10 ⁻⁴	—	s ⁻¹
Desativação espontânea	kdSp	transforma-se em sítio 2	8,1×10 ⁻⁵	s ⁻¹
Energia de ativação (propagação)	Ea	41,86 (todas)		MJ/kmol
Fração inicial de sítios	fca	0,8064	0,1936	—

Tabela 2. Parâmetros de processo (Reginato, 2001, Tabela 3.3).

Parâmetro	Reator 1	Reator 2	Unidade
Vazão de monômero (C3) alimentado	8,33	3,88 (intermediária)	kg/s
Vazão de catalisador	2,08×10 ⁻⁴	— (sem catalisador novo)	kg/s

Fração molar de H ₂ na alimentação	$8,0 \times 10^{-4}$	$8,0 \times 10^{-4}$	—
Fração molar de propano (inerte)	0,05	0,05	—
Sítios ativos por massa de catalisador	$1,67 \times 10^{-4}$	—	kmol/kg

Para os estudos de copolimerização, assumiu-se uma fração molar de eteno na alimentação de 3,0%, valor não especificado na fonte cinética consultada para o caso específico de copolimerização, mas consistente com teores típicos de comonômero em copolímeros randômicos propeno-eteno de grau comercial.

Um conjunto adicional de parâmetros físicos e de projeto do sistema de resfriamento não constava na fonte cinética consultada. Dois deles — a massa específica (ρ) e o calor específico (C_p) do propeno líquido — puderam ser obtidos de fonte confiável: a biblioteca CoolProp (Bell et al., 2014), que fornece propriedades termodinâmicas de fluidos puros com base em equações de estado de referência do NIST/REFPROP. As propriedades foram consultadas para o propeno líquido a 343,15 K (70 °C) e 40 bar — pressão escolhida dentro da faixa industrial tipicamente reportada para reatores loop Spheripol (20-80 bar), com margem de segurança acima da pressão de saturação do propeno nessa temperatura (30,8 bar), garantindo fase líquida estável. É importante notar que 70 °C está relativamente próximo da temperatura crítica do propeno (91,7 °C), o que explica tanto o valor de C_p obtido — sensivelmente mais alto que o de um líquido em condições afastadas do ponto crítico — quanto sua acentuada sensibilidade à pressão nessa região.

Os demais parâmetros da Tabela 3 seguem sem lastro bibliográfico direto, obtidos por dois procedimentos, discriminados na coluna “Origem”: (i) estimativa própria, valor de ordem de grandeza fisicamente plausível, escolhido por critério de engenharia, sem cálculo ou consulta a fonte específica; e (ii) retroajuste (reverse engineering), valor calculado deliberadamente a partir do próprio balanço de energia do modelo (Equações 11–14) para que a temperatura de regime permanente convergisse para 70 °C, condição de referência da Tabela 1 — o que torna esses valores consistentes com o modelo por construção, e não uma validação externa dele. Um parâmetro adicional, o calor específico da água (Cpw), corresponde a um valor físico tabelado e amplamente estabelecido.

Tabela 3. Parâmetros físicos do balanço de energia, com origem declarada.

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade	Origem
Massa específica do propeno líquido	ρ	417,65	kg/m ³	Literatura (CoolProp/NIST)
Calor específico do propeno líquido	Cp	3,538	kJ/kg·K	Literatura (CoolProp/NIST)
Volume de cada reator	V	72	m ³	Retroajustado
Entalpia de polimerização (C3 / C2)	ΔH_p	-89000 / -93000	kJ/kmol	Estimativa própria
Temperatura de alimentação	T _{in}	298,15 (25°C)	K	Estimativa própria

do monômero				
Coeficiente global reator-camisa	UA	≈1000	kW/K	Retroajustado
Massa de água na camisa	Mj	5000	kg	Estimativa própria
Calor específico da água	Cpw	4,18	kJ/kg·K	Valor físico conhecido
Temperatura da água de resfriamento	Tcw,in	298,15 (25°C)	K	Estimativa própria
Vazão nominal de água de resfriamento	Fw,base	≈65	kg/s	Retroajustado
Limites da vazão de água de resfriamento	Fw,min–Fw,max	10–250	kg/s	Estimativa própria

Essa correção teve um efeito de propagação relevante sobre o restante do modelo: como a densidade determina diretamente a vazão volumétrica de alimentação ($Q_f = \text{vazão mássica}/\rho$) e, por consequência, a concentração molar de monômero e o tempo de residência, o volume dos reatores foi recalculado (de um valor inicialmente assumido de 50 m³ para 72 m³) para preservar o tempo de residência de aproximadamente 1 hora mencionado qualitativamente por Reginato (2001), e o coeficiente UA e a vazão de água de resfriamento (Fw,base) foram retroajustados a partir do balanço de energia corrigido — o procedimento de retroajuste em si é o mesmo descrito acima, apenas repetido com a base física correta. Todos os resultados apresentados na Seção 4 refletem essa correção. A entalpia de polimerização assumida ($\Delta H_{p,C3} = -89.000$

kJ/kmol) permanece dentro de 7% do valor determinado experimentalmente por Kettner, Valaei e Bartke (2020), -83.000 kJ/kmol , e a lógica de retroajuste de V e UA continua consistente com o procedimento de projeto descrito por Abedini, Shahrokhi e Emami (2009) para reatores loop de propeno.

3.6. Procedimento de Simulação e Sintonia

Todas as simulações foram implementadas em Python 3, utilizando a biblioteca SciPy (função `solve_ivp`) para integração numérica dos sistemas de equações diferenciais ordinárias. Os métodos empregados foram BDF (Backward Differentiation Formula), adequado a sistemas rígidos, nos modelos puramente cinéticos, e LSODA — que alterna automaticamente entre formulações rígidas e não rígidas — nos modelos com controle, cuja combinação de dinâmicas rápidas (malha interna da cascata) e lentas (concentração de monômero, tempo de residência) e de não linearidades (saturação da variável manipulada, dependência de Arrhenius) exigia maior robustez do integrador.

A sintonia dos controladores foi realizada de forma manual e iterativa, e não por um método formal (como Ziegler–Nichols ou síntese por modelo interno). Os ganhos finais empregados são apresentados na Tabela 4.

Tabela 4. Ganhos dos controladores empregados nas simulações.

Malha	Kp	Ki	Tt (anti-windup)
Única ($T \rightarrow Fw$)	40,0 kg/s por K	0,03 kg/s por K·s	300 s

Cascata — externa ($T \rightarrow T_{j,sp}$)	1,5 K por K	0,0005 K por K·s	600 s
Cascata — interna ($T_j \rightarrow F_w$)	8,0 kg/s por K	0,15 kg/s por K·s	60 s

Um aspecto metodológico crítico para a validade da comparação foi o procedimento de obtenção da condição inicial de cada cenário de teste. Em uma primeira tentativa, ambas as malhas foram simuladas a partir de uma partida a frio comum (25 °C), e a perturbação foi aplicada após um tempo fixo de aquecimento — procedimento que se revelou inadequado, pois a malha externa da cascata, deliberadamente lenta, ainda não havia atingido seu próprio regime permanente no instante em que a perturbação foi aplicada, contaminando a métrica de desempenho com um transitório de partida não relacionado à perturbação em si. O procedimento foi corrigido em duas etapas: (i) cada malha foi simulada isoladamente, a partir da partida a frio, por 20 horas (mais de 19 tempos de residência), garantindo a convergência tanto das variáveis de processo quanto dos próprios estados integrais dos controladores; (ii) a partir desse estado estacionário completo, cada cenário de perturbação ou de mudança de setpoint da Seção 4 foi então simulado independentemente.

O desempenho de cada malha, em cada cenário, foi quantificado pelo desvio máximo absoluto em relação ao setpoint e pelo índice de erro absoluto integral (IAE):

$$IAE = \int |T(t) - T_{sp}(t)| dt \quad (23)$$

calculado sobre uma janela padronizada de três horas após cada perturbação ou mudança de setpoint.

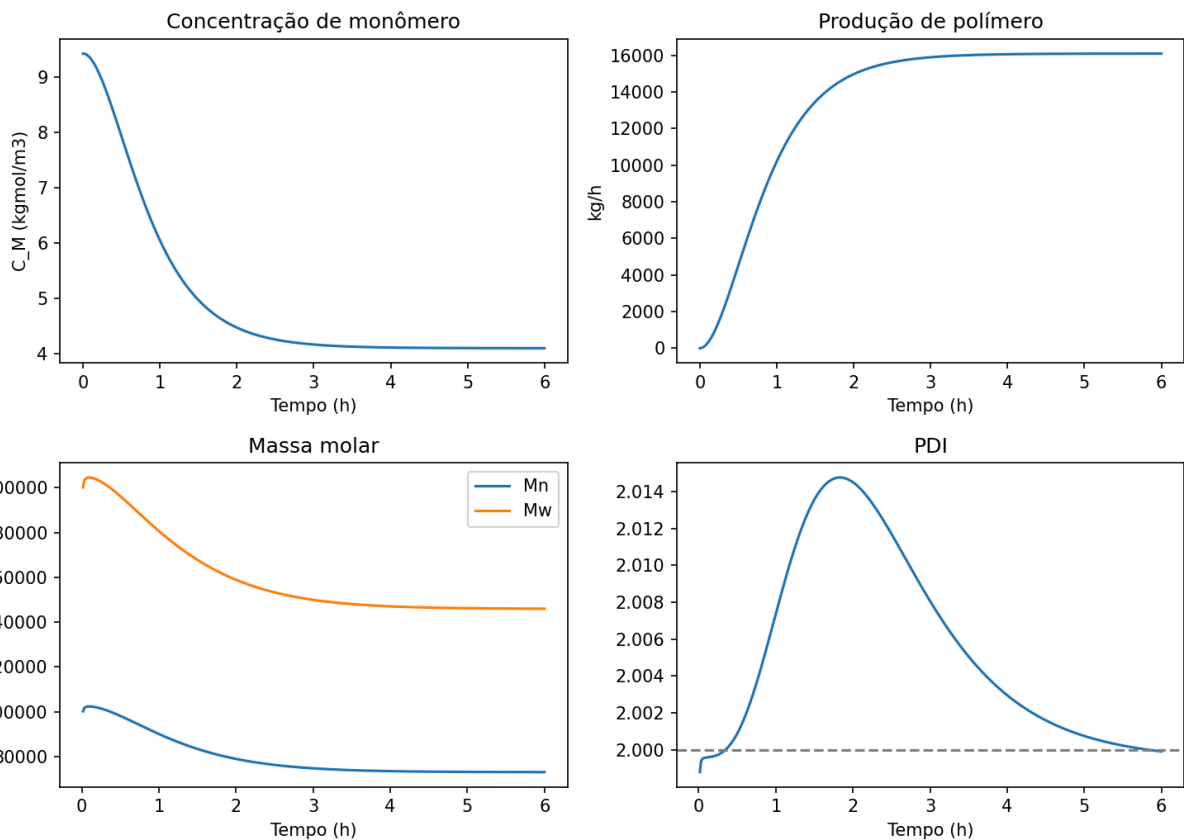
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Esta seção apresenta os resultados em ordem de complexidade crescente: inicia-se pela validação do modelo cinético isotérmico de sítio único (4.1), avança-se para o efeito de dois sítios catalíticos (4.2) e para a copolimerização propeno-eteno (4.3), acopla-se o balanço de energia não isotérmico (4.4) e, por fim, apresenta-se o núcleo comparativo deste trabalho: o desempenho das malhas de controle PID de malha única e em cascata sob três cenários operacionais distintos (4.5 a 4.7), sintetizado em 4.8.

4.1. Validação do Modelo Base: Homopolimerização, Sítio Único

O primeiro modelo implementado descreve um único reator CSTR ideal, isotérmico (70 °C), operando com um único tipo de sítio catalítico, em homopolimerização de propeno. Este caso constitui o teste de sanidade mais fundamental do arcabouço de momentos empregado: para um único tipo de sítio operando em regime permanente em um CSTR ideal, a teoria clássica de polimerização prevê que a distribuição de massas molares tenda à distribuição de Flory, cujo índice de polidispersão teórico é exatamente 2. O modelo implementado reproduziu esse resultado com precisão: PDI = 2,000 em regime permanente, com conversão de monômero de 56,6%, $M_n \approx 73.000$ kg/kmol e produção de aproximadamente 16.100 kg/h.

Figura 1. Reator único, sítio único, isotérmico: evolução dinâmica da concentração de monômero, produção, massas molares médias e índice de polidispersão até o regime permanente.



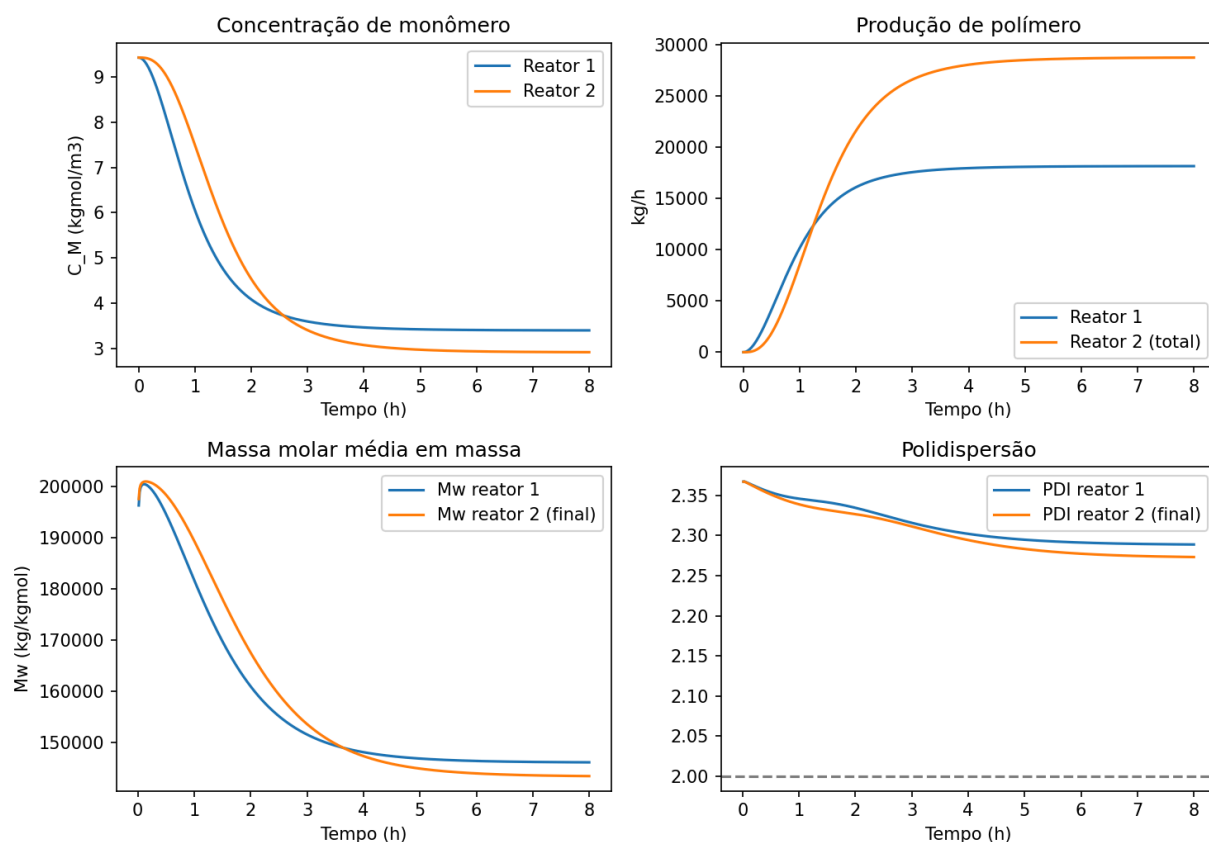
A extensão para dois reatores CSTR em série — replicando a configuração industrial real do processo Spheripol — preservou o índice de polidispersão teórico ($PDI = 2,000$ na saída do segundo reator) e permitiu quantificar a distribuição da produção entre os dois reatores: aproximadamente 68% da massa de polímero produzida origina-se no primeiro reator e 32% no segundo, proporção consistente com o fato de o primeiro reator receber mais que o dobro da vazão de monômero fresco em relação ao segundo — essa proporção, por depender apenas da razão entre as vazões de alimentação, mostrou-se invariante à correção das propriedades físicas descrita na Seção 3.5.

4.2. Efeito de Múltiplos Sítios Catalíticos

A introdução do segundo tipo de sítio catalítico — seguindo o mecanismo descrito na Tabela 1, segundo o qual o sítio 1 se transforma no sítio 2, que é quem efetivamente desativa — produziu o efeito qualitativo esperado para catalisadores multissítio: o índice

de polidispersão elevou-se de 2,0 para aproximadamente 2,27–2,29, resultado da soma de duas distribuições de Flory com massas molares médias distintas, já que a constante de propagação do sítio 1 é aproximadamente dez vezes maior que a do sítio 2.

Figura 2. Dois reatores em série, dois sítios catalíticos: o PDI final ($\approx 2,27$) excede o valor teórico de sítio único (2,0), assinatura característica de catalisadores Ziegler-Natta multissítio.

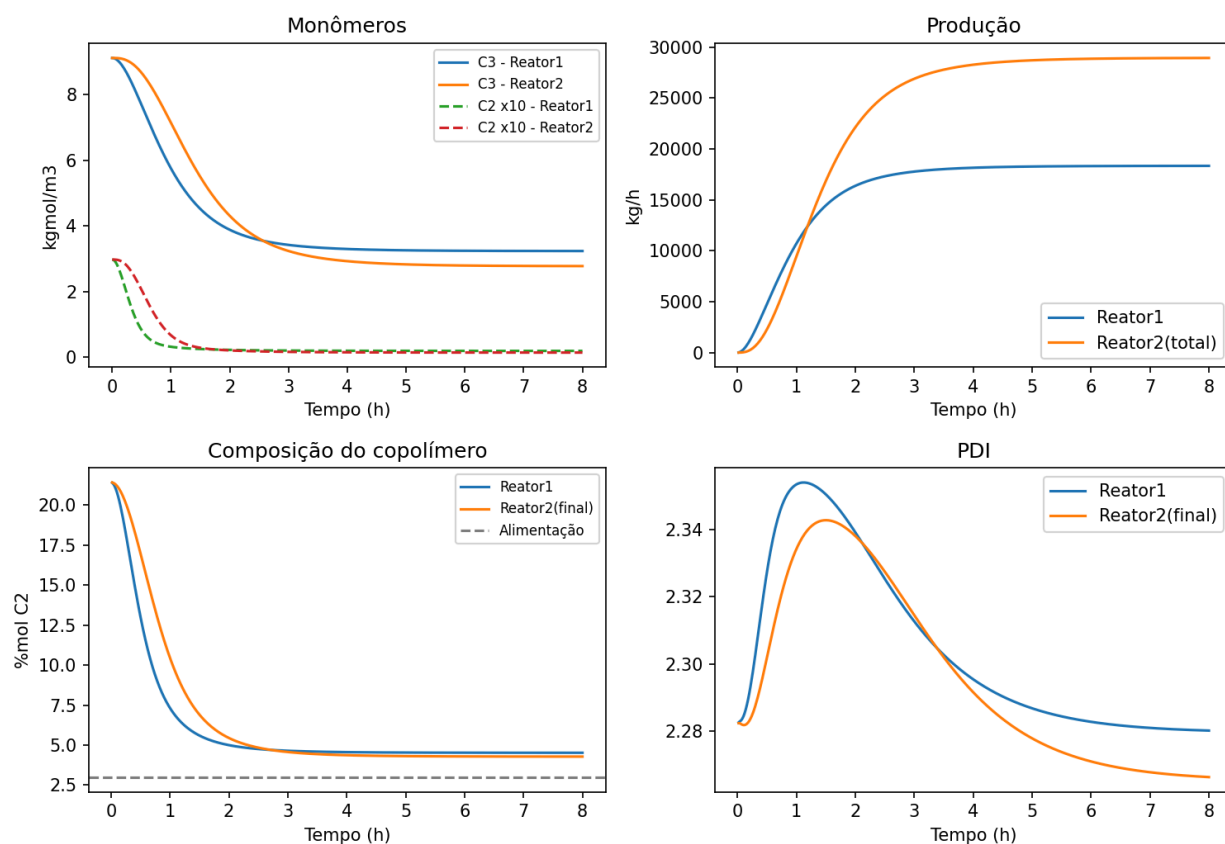


Embora o sítio 1 represente inicialmente apenas 80,6% da população de sítios ativos do catalisador, ele é responsável por aproximadamente 98,3% da massa de polímero produzida — consequência direta de sua constante de propagação muito mais elevada. O sítio 2, apesar de mais persistente (menor constante de desativação), propaga devagar demais para competir de forma significativa em termos de produtividade.

4.3. Copolimerização Propeno-Eteno

A extensão do modelo para a copolimerização propeno(C3)-eteno(C2), com dois sítios catalíticos e o modelo terminal de copolimerização, permitiu calcular a composição do copolímero formado. As razões de reatividade calculadas a partir das constantes de propagação da Tabela 1 ($r_{C2} \approx 7,7$ para o sítio 1 e $\approx 51,2$ para o sítio 2) indicam forte preferência de ambos os sítios por adicionar um novo eteno a uma cadeia já terminada em eteno, efeito que se manifesta macroscopicamente como enriquecimento do copolímero em eteno frente à composição da alimentação.

Figura 3. Copolimerização C3/C2: composição do copolímero converge para aproximadamente 4,3% mol de C2, acima da fração de 3,0% mol na alimentação.



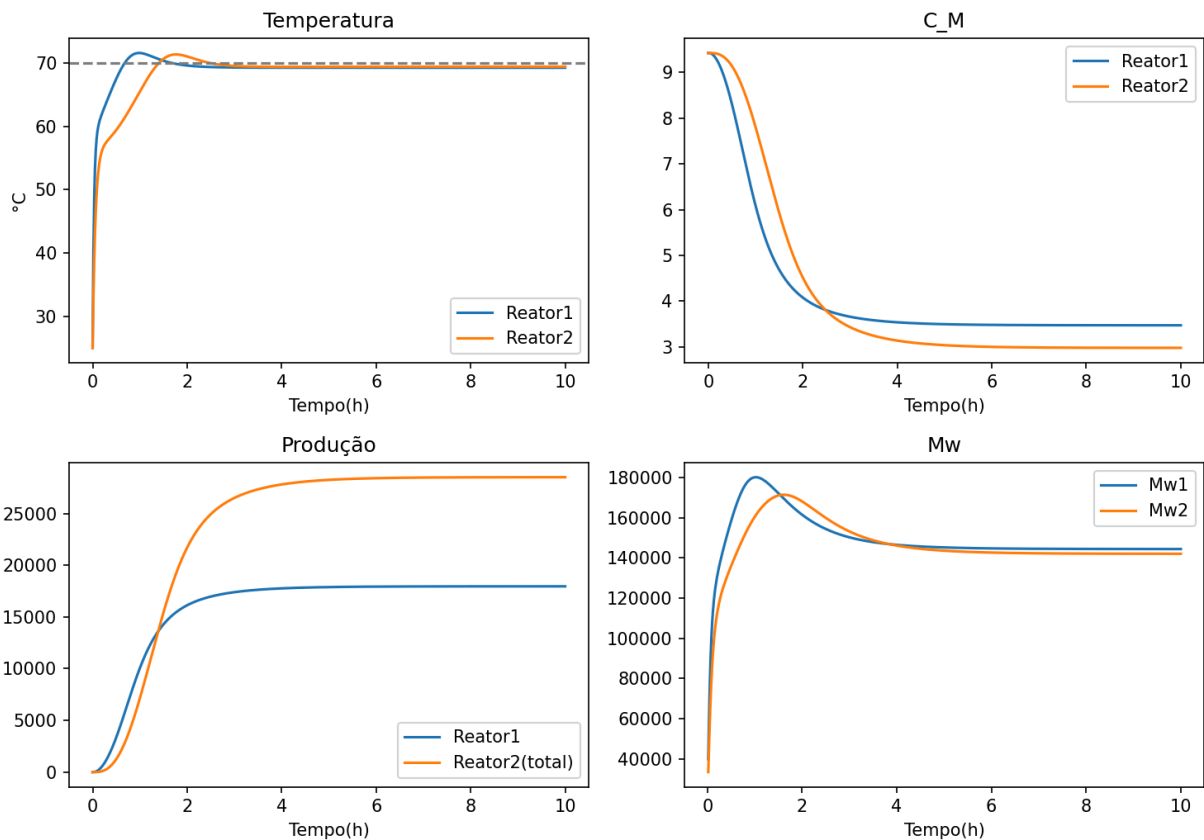
Partindo de uma alimentação com 3,0% molar de eteno, o copolímero final apresentou composição de aproximadamente 4,3% molar de C2, com conversão de C3 de 69,6% e de C2 de 95,3% — a maior reatividade do eteno se traduz em conversão praticamente

completa desse comonômero. Observou-se também heterogeneidade de composição entre os sítios, coerente com sua razão de reatividade substancialmente maior no sítio 2 — heterogeneidade documentada na literatura de catalisadores Ziegler-Natta multissítio, com implicações diretas sobre propriedades mecânicas do produto final.

4.4. Acoplamento com o Balanço de Energia Não Isotérmico

A introdução do balanço de energia, com a dependência de Arrhenius aplicada às constantes de propagação, permitiu simular a operação não isotérmica dos reatores. Como teste de consistência, o coeficiente UA foi dimensionado (Tabela 3) de modo que a temperatura de regime permanente converge para próximo de 343,15 K (70 °C), a mesma condição de referência de Reginato (2001), permitindo verificar que o modelo não isotérmico, operado nas proximidades de sua condição de referência térmica, reproduz os resultados do modelo isotérmico correspondente.

Figura 4. Modelo não isotérmico, dois sítios: partida a frio (25 °C) convergindo para aproximadamente 69,3–69,4 °C, com conversão, massas molares e PDI praticamente coincidentes com o caso isotérmico equivalente.



Com os dois reatores convergindo para 69,3 °C e 69,4 °C, respectivamente, os valores de conversão, massa molar e PDI ficaram dentro de uma faixa de poucos pontos percentuais dos valores obtidos no modelo isotérmico equivalente — teste de sanidade importante para a consistência do acoplamento entre o balanço de energia e a dependência de Arrhenius das constantes cinéticas. Após essa validação, o modelo completo (copolimerização C3/C2 com dois sítios e balanço de energia não isotérmico) serviu de base — em sua versão simplificada de sítio único, conforme a hipótese H1 e a necessidade de manter o foco analítico nas malhas de controle — para os estudos comparativos apresentados a seguir.

4.5. Rejeição de Perturbação do Lado da Camisa (o Cenário Favorável à Cascata)

O primeiro cenário de controle testado reproduz exatamente a condição clássica sob a qual a literatura recomenda o uso de controle em cascata (Seção 2.3): uma perturbação que entra pela

variável intermediária monitorada pela malha interna. Simulou-se um degrau de +6 °C na temperatura de entrada da água de resfriamento ($T_{cw,in}$), representando um cenário operacional plausível de perda parcial de capacidade da torre de resfriamento da planta.

Figura 5. Rejeição de perturbação na água de resfriamento: a malha única (azul) leva mais tempo para retornar ao setpoint do que a cascata (laranja).

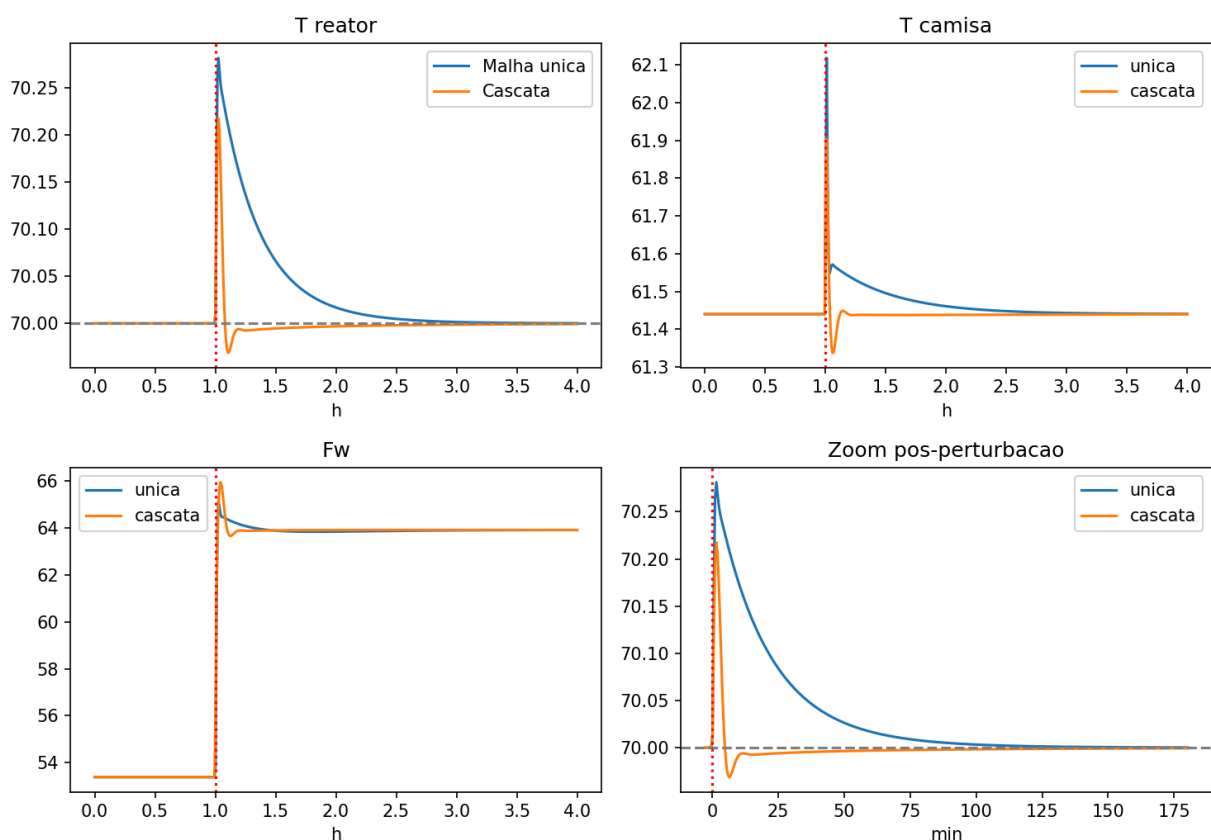


Tabela 5. Desempenho na rejeição da perturbação na água de resfriamento.

Malha	Desvio máximo (K)	IAE (K·s)
Única	0,281	350,2
Cascata	0,217	66,7 (5,3× melhor)

A cascata reduziu o IAE em um fator de aproximadamente 5,3 em relação à malha única, resultado consistente com o mecanismo teórico da Seção 2.3: a malha interna ($T_j \rightarrow F_w$), consideravelmente mais rápida, detecta e corrige a elevação da temperatura da camisa antes que ela se propague de forma significativa à temperatura do reator. A malha única, por não possuir visibilidade direta sobre a camisa, apenas reage quando o efeito da perturbação já alcançou o próprio reator, resultando em uma resposta consideravelmente mais lenta.

4.6. Seguimento de Setpoint: Troca de Grade (o Cenário Desfavorável à Cascata, I)

O segundo cenário testou a capacidade de cada malha de seguir uma mudança de referência (setpoint tracking), simulando uma troca de grade de produto por meio de um degrau de $+3\text{ }^{\circ}\text{C}$ no setpoint de temperatura do reator, aplicado a partir do mesmo regime permanente estabelecido de cada malha.

Tabela 6. Desempenho no seguimento de mudança de setpoint ($+3\text{ }^{\circ}\text{C}$).

Malha	Desvio máx. em relação ao novo setpoint (K)	IAE (K·s)
Única	2,935	303,0 (14,8× melhor)
Cascata	2,951	4492,0

Neste cenário o resultado se inverte de forma acentuada: a malha única atinge o novo setpoint quase 15 vezes mais rápido (em termos de IAE) que a cascata. A explicação é consequência direta da própria

arquitetura em cascata: uma mudança de setpoint na malha externa precisa ser primeiro traduzida em uma nova referência para a malha interna ($T_{j,sp}$), que por sua vez precisa conduzir a temperatura real da camisa até esse novo valor, para só então a camisa transferir esse efeito ao reator — dois estágios dinâmicos em série, com a malha externa deliberadamente sintonizada de forma conservadora (Tabela 4) para preservar a separação de escalas de tempo exigida pela estabilidade da cascata. A malha única, por manipular F_w diretamente a partir do erro de temperatura do reator, não incorre nesse atraso adicional.

4.7. Perturbação do Lado do Reator (o Cenário Desfavorável à Cascata, II)

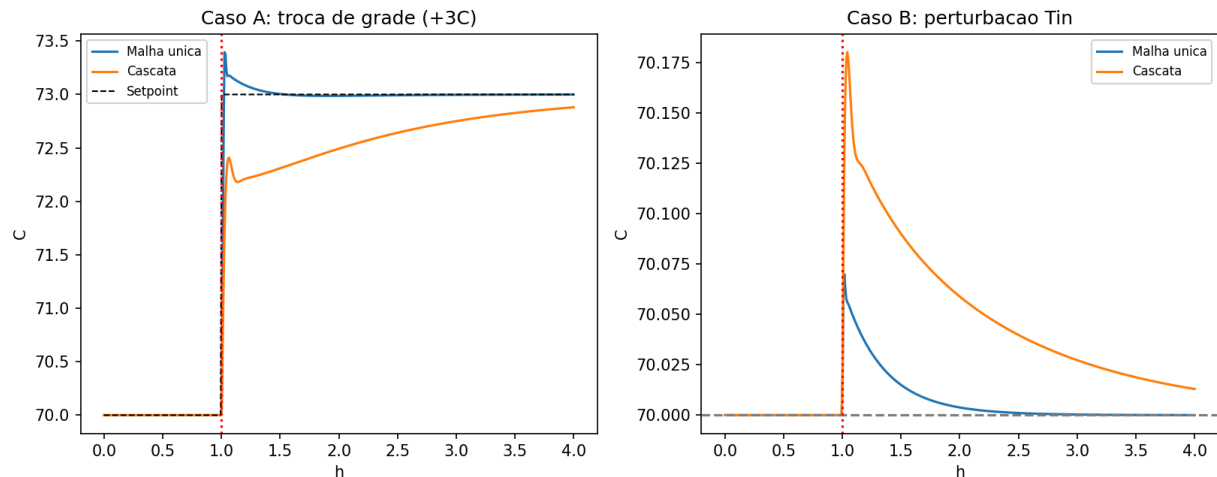
O terceiro cenário foi desenhado especificamente para testar o limite conceitual da vantagem da cascata: uma perturbação que entra diretamente no reator, e não na variável intermediária monitorada pela malha interna. Simulou-se um degrau de $+10\text{ }^{\circ}\text{C}$ na temperatura de alimentação do monômero (T_{in}), representando uma falha hipotética no sistema de pré-resfriamento da carga de propeno líquido.

Tabela 7. Desempenho na rejeição de perturbação em T_{in} (lado do reator).

Malha	Desvio máximo (K)	IAE (K·s)
Única	0,070	80,0 (7,0× melhor)
Cascata	0,180	557,1

Figura 6. Painel esquerdo: resposta a uma mudança de setpoint ($+3\text{ }^{\circ}\text{C}$); a malha única acompanha a nova referência mais rápido que a

cascata. Painel direito: perturbação em T_{in} , lado do reator.



Como hipotetizado, a vantagem da cascata desaparece — e se inverte — quando a perturbação não atua sobre a variável intermediária: a malha única apresentou desempenho 7,0 vezes melhor (menor IAE) que a cascata neste cenário. A razão é direta: como a perturbação em T_{in} afeta o reator diretamente, sem passar pelo caminho $F_w \rightarrow T_j$ monitorado pela malha interna, esta última não oferece nenhuma vantagem de antecipação — pelo contrário, o atraso adicional introduzido pelos dois estágios da cascata (a mesma limitação da Seção 4.6) penaliza a resposta, ainda que a magnitude absoluta dos desvios observados (inferior a 0,2 K em ambas as malhas) seja pequena em relação aos demais cenários, refletindo a maior capacitância térmica do reator frente à da camisa.

4.8. Síntese Comparativa

A Tabela 8 consolida os resultados das Seções 4.5 a 4.7, permitindo uma leitura direta do argumento central deste trabalho.

Tabela 8. Síntese comparativa dos três cenários de controle avaliados.

Cenário	Malha única (IAE)	Cascata (IAE)	Vencedor
Perturbação na água de resfriamento (camisa)	350,2	66,7	Cascata (5,3×)
Troca de grade (setpoint +3 °C)	303,0	4492,0	Única (14,8×)
Perturbação em Tin (reator)	80,0	557,1	Única (7,0×)

O padrão que emerge dos três cenários é consistente e fisicamente interpretável: o controle em cascata só supera a malha única quando a perturbação entra exatamente no caminho monitorado pela malha interna ($F_w \rightarrow T_j$). Em qualquer outra situação — seja uma mudança de referência que precisa atravessar as duas malhas em série, seja uma perturbação que entra diretamente na variável controlada primária —, o atraso estrutural introduzido pela arquitetura em cascata transforma o que seria uma vantagem em uma desvantagem mensurável. Esse resultado fornece evidência quantitativa, gerada sobre um processo industrial realista, para a diretriz qualitativa já estabelecida na literatura clássica de controle de processos (Seborg et al., 2016; Marlin, 2000): a decisão de empregar controle em cascata deve ser precedida da identificação de qual é a perturbação dominante do processo real e de onde, fisicamente, ela entra no sistema.

5. CONCLUSÃO/CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho desenvolveu um modelo dinâmico dos reatores de polimerização em fase líquida do processo Spheripol, partindo de um esquema cinético de polimerização Ziegler-Natta multissítio (Reginato, 2001) e estendendo-o progressivamente — de um reator isotérmico com sítio único até um modelo completo de dois reatores

em série, dois sítios catalíticos, copolimerização propeno-eteno e balanço de energia não isotérmico acoplado a uma camisa de resfriamento com dinâmica térmica própria. Sobre esse modelo, foram projetadas e comparadas duas arquiteturas de controle de temperatura — PID de malha única e controle em cascata — em três cenários operacionais distintos.

O modelo cinético reproduziu corretamente os comportamentos qualitativos esperados da teoria clássica de polimerização: índice de polidispersão igual a 2 para sítio único em CSTR ideal, elevação do PDI na presença de múltiplos sítios catalíticos, e enriquecimento do copolímero no monômero mais reativo, consistente com as razões de reatividade calculadas a partir das próprias constantes cinéticas do modelo. O acoplamento entre cinética e balanço de energia mostrou-se consistente, com o modelo não isotérmico convergindo para os resultados do modelo isotérmico quando operado próximo à sua temperatura de referência, e evidenciou, na prática, o risco real de disparo térmico simulado quando a malha de controle é implementada sem tratamento adequado de anti-windup.

O controle em cascata reduziu em 5,3 vezes o índice de erro absoluto integral na rejeição de uma perturbação que entra pela variável intermediária monitorada pela malha interna, confirmando quantitativamente a vantagem teórica dessa arquitetura sob as condições clássicas de sua indicação. Contudo, essa vantagem não é universal: a mesma arquitetura em cascata apresentou desempenho entre 7,0 e 14,8 vezes pior que a malha única tanto no seguimento de uma mudança de setpoint quanto na rejeição de uma perturbação que entra diretamente no reator — resultado que fornece evidência quantitativa, sobre um processo industrial realista, para a diretriz clássica segundo a qual a escolha da arquitetura de

controle deve ser precedida da identificação de onde, fisicamente, a perturbação dominante do processo real entra no sistema.

Do ponto de vista prático, esses resultados sugerem que a decisão de investir em uma malha de controle em cascata para os reatores loop do processo Spheripol — ou de qualquer reator de polimerização com arquitetura térmica semelhante — deveria ser precedida de um diagnóstico da planta real, identificando se a fonte dominante de variabilidade operacional está de fato do lado da utilidade de resfriamento (favorecendo a cascata) ou se está associada a trocas de grade frequentes ou a perturbações na carga de monômero (favorecendo a malha única, mais simples de projetar, sintonizar e manter em operação).

Os resultados aqui apresentados devem ser interpretados à luz de limitações metodológicas explícitas. Em primeiro lugar, um conjunto de parâmetros físicos (Tabela 3) não estava disponível na fonte cinética consultada. A massa específica e o calor específico do propeno líquido foram obtidos de fonte confiável (biblioteca CoolProp, com base em equações de estado de referência do NIST/REFPROP), o que eliminou uma fragilidade importante de versões preliminares deste trabalho — nas quais esses dois parâmetros haviam sido apenas estimados por ordem de grandeza e se revelaram, a posteriori, entre 30% e 45% distantes dos valores termodinâmicos reais nas condições de operação do reator, correção que se propagou para o volume dos reatores e para os parâmetros de troca térmica (Seção 3.5). A entalpia de polimerização assumida também se mostrou próxima (dentro de 7%) do valor determinado experimentalmente por Kettner, Valaei e Bartke (2020), e a lógica de dimensionamento do volume dos reatores e do coeficiente de troca térmica seguiu o mesmo procedimento de projeto descrito por

Abedini, Shahrokhi e Emami (2009) para reatores loop de propeno. Ainda assim, a massa térmica da camisa e as temperaturas de alimentação permanecem sem validação externa direta, e mesmo os parâmetros agora obtidos por fonte confiável (ρ , C_p) dependem da pressão de operação assumida (40 bar), que também não foi extraída diretamente de uma fonte específica para o processo Spheripol. A validação quantitativa completa deste modelo frente a dados reais de planta continua sendo, portanto, um passo indispensável antes de qualquer uso deste modelo para fins de projeto de controle industrial. Em segundo lugar, a sintonia dos controladores foi realizada de forma manual, e não por um método formal, o que pode ter penalizado desproporcionalmente o desempenho da malha externa da cascata nos cenários desfavoráveis a ela. Em terceiro lugar, os estudos de controle empregaram a versão simplificada de sítio único do modelo cinético, e não o modelo completo de copolimerização com dois sítios. Por fim, o modelo não incorpora dinâmica de sensores e atuadores (atraso de medição, ruído, dinâmica de válvula), elementos presentes em qualquer malha de controle industrial real.

Como direções de trabalhos futuros, sugere-se: a validação dos parâmetros físicos assumidos frente a dados de planta real ou a fontes bibliográficas que os reportem explicitamente; a aplicação de métodos formais de sintonia a ambas as arquiteturas de controle; a extensão do estudo comparativo de controle ao modelo cinético completo de copolimerização multissítio; uma análise de robustez frente a incertezas paramétricas, em particular no coeficiente de troca térmica UA ; e a avaliação comparativa de controle preditivo baseado em modelo (MPC) como terceira estratégia, especialmente nos cenários em que a cascata se mostrou desfavorável neste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABEDINI, H.; SHAHROKHI, M.; EMAMI, M. Effective parameters in the design of a loop reactor for bulk propylene polymerization with Z-N catalyst. **Iranian Journal of Polymer Science and Technology**, v. 22, n. 4, p. 309-321, 2009.

ÅSTRÖM, K. J.; RUNDQWIST, L. Integrator windup and how to avoid it. In: AMERICAN CONTROL CONFERENCE, 1989, Pittsburgh. **Proceedings [...]**. Pittsburgh: IEEE, 1989. p. 1693-1698.

BELL, Ian H.; WRONSKI, Jorrit; QUOILIN, Sylvain; LEMORT, Vincent. Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library CoolProp. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 53, n. 6, p. 2498-2508, 2014.

FONTOURA, Tahyná B. *et al.* Two-phase multi-scale modeling of a tubular loop propylene polymerization reactor. **Chemical Engineering Journal Advances**, v. 5, p. 100072, 2021.

KETTNER, J.; VALAEI, S.; BARTKE, M. Reaction calorimetry for studying kinetics in bulk phase polymerization of propene. **Macromolecular Reaction Engineering**, v. 14, n. 6, p. 2000031, 2020.

KRISTANTO, Dedy; HERMAWAN, Yulius Deddy. Comparative analysis between PI conventional and cascade control in Heater-PFR-series. **Reaktor**, v. 20, n. 3, p. 129-137, 2020.

MANUYKO, Galiya *et al.* Modelling of propylene polymerization in a loop reactor on the titanium–magnesium catalyst taking into

account the transformation of active centers. **Processes**, v. 10, n. 12, p. 2705, 2022.

MARLIN, Thomas E. **Process control: designing processes and control systems for dynamic performance**. 2. ed. Boston: McGraw-Hill, 2000.

REDDY, P. Swapna; RANI, K. Yamuna. Comparative study of different cascade control configurations for a multiproduct semibatch polymerization reactor. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 53, n. 38, p. 14735-14754, 2014.

REGINATO, Alex Sandro. **Modelagem e simulação dos reatores de polimerização em fase líquida do processo Spheripol**. 2001. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2001.

SEBORG, Dale E. *et al.* **Process dynamics and control**. 4. ed. Hoboken: Wiley, 2016.

STEPHANOPOULOS, George. **Chemical process control: an introduction to theory and practice**. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1984.

WANG, Xiong *et al.* Versatile polypropylene copolymers from a pilot-scale Spheripol II process. **Polymers**, v. 12, n. 4, p. 751, 2020.

¹ Discente do Curso Superior de Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, Campus Sede, Campina Grande, Paraíba. E-mail: [acesse o artigo original para visualizar o e-mail](#)

² Discente do Curso Superior de Engenharia Química da
Universidade Federal da Paraíba, Campus Sede, João Pessoa,
Paraíba.

³ Discente do Curso Superior de Engenharia Química da
Universidade Federal de Campina Grande, Campus Sede, Campina
Grande, Paraíba.

⁴ Discente do Curso Superior de Engenharia Química da
Universidade Federal de Campina Grande, Campus Sede, Campina
Grande, Paraíba.

⁵ Discente do Curso Superior de Engenharia Química da
Universidade Federal de Campina Grande, Campus Sede, Campina
Grande, Paraíba.

⁶ Discente do Curso Superior de Engenharia Química da
Universidade Federal de Campina Grande, Campus Sede, Campina
Grande, Paraíba.