

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

**PROJETO DE UM CONTROLADOR DMC  
PARA O PROCESSO CARE**

AUTOR: ALESSANDRO MATTEDI

ORIENTADOR: PROF. DR. RUBENS MACIEL FILHO

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - SP

ABRIL / 1999

UNICAMP  
BIBLIOTECA CENTRAL  
SEÇÃO CIRCULANTE



130702563

UNIVERSIDADE B C  
CHAMADA: T/UNICAMP  
M429p  
CNPQ Nº 41549  
278/00  
PROJ 05 11,00  
DAT 13-07-00  
Nº OPD

CM-00143144-5

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

M429p Mattedi, Alessandro  
Projeto de um controlador DMC para o processo  
CARE. / Alessandro Mattedi.--Campinas, SP: [s.n.],  
1999.

Orientador: Rubens Maciel Filho.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de  
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

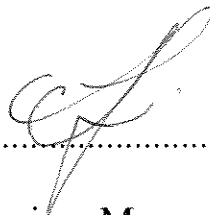
1. Controle de processos químicos. 2. Controle  
preditivo. 3. Purificação. 4. Adsorção. 5.  
Controladores PID. I. Maciel Filho, Rubens. II.  
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de  
Engenharia Química. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida e aprovada em 5 de abril de 1999 pela banca  
examinadora constituída pelo(a):



Prof Dr Rubens Maciel Filho

(Orientador)



Prof Dr Francisco Maugeri Filho (Titular)



Dra Aline Carvalho da Costa (Titular)

UNICAMP  
BIBLIOTECA CENTRAL  
SEÇÃO CIRCULANTE

Esta versão corresponde a redação final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida pelo Engenheiro Alessandro Mattedi e aprovada pela comissão julgadora em 5 de abril de 1999.

A handwritten signature in black ink, reading "Rubens Maciel Filho", is written above a horizontal dotted line. The signature is fluid and cursive.

Prof Dr Rubens Maciel Filho

Orientador

A small, simple handwritten mark consisting of a single diagonal stroke, located in the lower right quadrant of the page.

“SEJA O QUE FOR POR IMPOSSÍVEL QUE PAREÇA. SEJA QUAL FOR O OBSTÁCULO QUE SE INTERPONHA ENTRE VOCÊ E ELE, SE FOR NOBRE, SE FOR COERENTE COM O REINO DE DEUS, VOCÊ DEVE DESEJÁ-LO ARDENTEMENTE E ESFORÇAR-SE POR ALCANÇÁ-LO”

**(Autor desconhecido)**

“SE UM HOMEM NÃO TEM NADA POR QUE LUTAR ATÉ A MORTE, ENTÃO ELE NÃO ESTÁ PREPARADO PARA A VIDA. A QUESTÃO NÃO É QUANTO TEMPO SE VIVE, MAS DE QUE FORMA SE VIVE”

**(Martin Luther King)**

## **Dedicatória**

A minha querida noiva, Rosana

Aos meus pais, Tarcisio e Vera Lúcia

Aos meus irmãos Tatiana, Taciana, Thaiza e Tarcisio Jr; e aos  
meus melhores amigos

## **Agradecimentos**

Sou muito grato:

- a orientação atenciosa, segura e amigável do professor Rubens Maciel Filho;
- a todos os amigos e professores que contribuíram para minha formação pessoal e acadêmica;
- a todos os colegas de trabalho do LOPCA, especialmente, Eduardo Dechechi e Alessandro M. Ribas;
- a banca examinadora por todas as correções e observações, que contribuíram significativamente para a versão final;
- a **FAPESP** pelo suporte financeiro e pelas direções para o desenvolvimento desta dissertação;

## RESUMO

O processo "CARE" (*"Continuous Adsorption Recycle Extraction"*) é um sistema inovador de purificação de enzimas com grande potencial de aplicação industrial, proposto inicialmente por PUNGOR et al. (1987); é formado por dois estágios, adsorção e dessorção, sendo cada estágio aproximado por um reator perfeitamente misturado. A adsorção é por afinidade e a dessorção ocorre devido às mudanças do meio do estágio de dessorção. O mesmo opera de modo contínuo com o reciclo do adsorvente. A inclusão de um estágio intermediário de lavagem no processo "CARE" original foi proposta para melhorar as características de purificação, através da eliminação de contaminantes. Este processo é o caso de estudo deste projeto, para o qual desenvolveu-se um modelo matemático representativo através das leis da cinética e de balanços de massa nos estágios do sistema para cada componente. Os parâmetros cinéticos de adsorção e dessorção, para a enzima *lisosima*, foram obtidos da literatura e se adequam bem ao processo. O modelo apresentado é genérico, podendo ser aplicado para qualquer sistema que disponha dos dados cinéticos necessários. Para o desenvolvimento das estratégias de controle, uma série de simulações são efetuadas visando a familiarização com o comportamento dinâmico e estacionário do mesmo. Dessa forma é implementado um sistema de controle preditivo DMC no processo. Paralelamente, um controlador tradicional PID é aplicado para o controle da purificação do sistema. O desempenho do sistema de controle foi muito bom o que mostra o potencial de se operar o processo "CARE" sob a ação de controle.

**Palavras chaves:** 1. Controle de processos químicos. 2. Controle preditivo. 3. Purificação. 4. Adsorção. 5. Controladores PID



## ABSTRACT

The “CARE” process is an innovator system of enzyme purification with large potential of industrial application, firstly proposed by Pungor et al. (1987).

The “CARE” is originally constituted by two stages, adsorption and desorption, each one being approximated by a perfectly mixed reactor. The adsorption stage is by affinity and the desorption stage takes place due to changes in some properties of the system, as pH for instance.

The process works in a continue operation mode with an adsorbent recycle. In this work the inclusion of one washing intermediate stage in the original “CARE” process was analysed. The objective this modification is to improve the purification characteristics, through the elimination of contaminants.

In order to achieve the goal of this work, a representative mathematical model was developed using the kinetic laws and the mass balance for each component in the system stages. The adsorption and desorption kinetic parameters for the lisosyme enzyme were obtained in the literature. The model presented in this work is generic, and can be applied for other systems, since the kinetics data for these systems are available.

The development of the control strategy for the “CARE” system was carried out based on a detailed study of the static and dynamic behaviour of the process. A predictive control approach based the DMC concept was designed, together with a traditional controller (PID), responsible for the control of the process purification. Very good results were obtained, which shows the potential to the operation of the CARE system under control.

**Key words:** 1. Control of chemical process. 2. Predictive Control. 3. Purification. 4. Adsorption. 5. PID controllers

## **SUMÁRIO**

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Nomenclatura

<b>I – INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
II.1 – Motivações para o projeto	1
II.2 – Objetivos	2
II.3 – Organização da tese	2
<b>II - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>4</b>
II.1 – Sistema de controle de processos químicos	4
II.2 – Técnicas de purificação	8
<b>III - A MODELAGEM DO PROCESSO “CARE”</b>	<b>11</b>
III.1 – Modelagem do processo “CARE” original	14
III.2 – Modelagem do processo “CARE” modificado	18
III.3 – Algumas observações relevantes sobre as constantes cinéticas	26
III.4 – Os parâmetros do processo CARE	26
<b>IV - TEORIA DE CONTROLE</b>	<b>28</b>
IV.1 – Controlador DMC para malha simples	28
IV.2 – Controlador DMC multivariável	35

IV.3 – Controlador PID (Algoritmo de velocidade)	41
IV.4 – Tratamento de restrições do DMC convencional	42
<b>V - PROJETO E ESTRATÉGIAS DE CONTROLE DESENVOLVIDAS</b>	<b>44</b>
V.1 – A escolha das variáveis controladas	44
V.2 – A determinação do tempo de intervenção do controlador	45
V.3 – A escolha da configuração de controle	47
V.4 – Desenvolvimento da estratégia de controle	55
V.5 – A sintonia dos parâmetros do controlador	60
V.6 – Uma descrição geral do capítulo com algumas conclusões	64
<b>VI - RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DO SISTEMA</b>	<b>67</b>
VI.1 – Introdução	67
VI.2 – Possíveis mudanças do sistema	67
VI.3 – Índices de desempenho	72
VI.4 - Controlador DMC – Configuração <u>S3</u>	72
VI.5 – Controlador DMC multivariável para as configurações <u>M13</u> e <u>Mr3</u>	75
VI.6 – Análise dinâmica de produtividade e rendimento do sistema	93
VI.7 – Resultados do controle do fator de purificação	95
<b>VII – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</b>	<b>99</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>101</b>
<b>APÊNDICE</b>	<b>106</b>
A. 1 – Determinação das constantes iniciais	106
A .2 – Algoritmo de integração numérica	109

## LISTA DE FIGURAS

- Figura 3.1 – Esquema do “CARE” original (dois estágios)
- Figura 3.2 – Estágio de adsorção em destaque (CARE original)
- Figura 3.3 – Estágio de dessorção em destaque (CARE original)
- Figura 3.4 – Processo “CARE” modificado (três estágios)
- Figura 3.5 – Estágio de adsorção em destaque (CARE modificado)
- Figura 3.6 – Estágio de lavagem em destaque (CARE modificado)
- Figura 3.7 – Estágio de adsorção em destaque (CARE modificado)
- Figura 4.1 – Saída  $E_3$  frente ao degrau incremental na manipulada  $F_3$
- Figura 5.1 - Comportamento dinâmico da saída  $E_1$
- Figura 5.2 – Comportamento dinâmico da saída  $E_3$
- Figura 5.3 – Teste do princípio da superposição de  $E_1$  para as entradas  $F_1$  e  $F_3$
- Figura 5.4 – Teste do princípio da superposição de  $E_3$  para as entradas  $F_1$  e  $F_3$
- Figura 5.5 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_1$  com relação a  $F_1$
- Figura 5.6 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_3$  com relação a  $F_1$
- Figura 5.7 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_1$  com relação a  $F_3$
- Figura 5.8 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_3$  com relação a  $F_3$
- Figura 5.9 – Teste do princípio da superposição de  $E_1$  para as entradas  $F_r$  e  $F_3$
- Figura 5.10 – Teste do princípio da superposição de  $E_3$  para as entradas  $F_r$  e  $F_3$
- Figura 5.11 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_1$  com relação a  $F_r$
- Figura 5.12 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_3$  com relação a  $F_r$
- Figura 5.13 – Comportamento dinâmico da saída FP
- Figura 5.14 – Ajuste dos fatores de ponderação – saída  $E_1$
- Figura 5.15 – Ajuste dos fatores de ponderação – saída  $E_3$
- Figura 5.16 – Processo “CARE” com os controladores DMC e PID
- Figura 6.1 – Tipos de mudança de valores desejados das variáveis de saída
- Figura 6.2 – Tipos de perturbações sobre a concentração de enzima inicial  $E_0$
- Figura 6.3 – Perturbações sobre as constantes cinéticas do modelo do processo “CARE” em um período de 300 horas
- Figura 6.4 – Perturbação degrau de 10 % em  $E_0$  no instante 10 h
- Figura 6.5 – Ruído branco de amplitude de 2% na variável de leitura

Figura 6.6 – Mudança do valor desejado de 10% no instante 10 h

Figura 6.7 – Sistema submetido ao TEST1

Figura 6.8 – Sistema submetido ao TEST2

Figura 6.9 – Comportamento dinâmico da vazão  $F_1$

Figura 6.10 – Comportamento dinâmico da vazão  $F_r$

Figura 6.11 – Comportamento dinâmico da vazão  $F_3$

Figura 6.12 – Comportamento dinâmico das ações da vazão  $F_1$  ou  $F_r$

Figura 6.13 – Comportamento dinâmico das ações da vazão  $F_3$

Figura 6.14 – Atuação do sistema de controle com relação aos limites das ações

Figura 6.15 – Sistema submetido ao TEST3

Figura 6.16 – Sistema submetido ao TEST4

Figura 6.17 – Comportamento dinâmico da saída  $E_1$  para o sistema submetido ao TEST5

Figura 6.18 – Comportamento dinâmico da saída  $E_3$  para o sistema submetido ao TEST5

Figura 6.19 – Comportamento dinâmico da vazão  $F_1$

Figura 6.20 – Comportamento dinâmico da produtividade para o sistema submetido ao TEST5

Figura 6.21 – Comportamento dinâmico do rendimento para o sistema submetido ao TEST5

Figura 6.22 – Comportamento dinâmico da saída  $E_1$  para o sistema submetido ao TEST6

Figura 6.23 – Comportamento dinâmico da saída  $E_3$  para o sistema submetido ao TEST6

Figura 6.24 – Análise do comportamento dinâmico para um incremento de 10% na vazão  $F_1$

Figura 6.25 – Análise do comportamento dinâmico para um incremento de 10% na vazão  $F_3$

Figura 6.26 – Análise do comportamento dinâmico para um incremento de 10% na vazão  $F_r$

Figura 6.27 – Controle do fator de purificação pelo PID sem atuação do controlador DMC

Figura 6.28 - Controle de purificação paralelamente à atuação do controlador DMCM3 quando o sistema está submetido ao TEST3

Figura A.1 – Aparato para os experimentos a fim de ser obter as constantes cinéticas de adsorção

Figura A.2 – Curva de Langmuir nos experimentos de CHASE

## **LISTA DE TABELAS**

Tabela 2.1 – Tipos de cromatografia

Tabela 3.1 – Condições de estado estacionário do processo CARE modificado

Tabela 5.1 – Análise de sensibilidade das variáveis na parte estacionária

Tabela 5.2 – Denominação das configurações de controle utilizadas

Tabela 5.3 – Sintonia do controlador PID do fator de purificação

Tabela 5.4 – Sintonia do controlador PID da malha S3

Tabela 6.2 – Sintonia do controlador DMC para a configuração S3

Tabela 6.1 – Sintonia do controlador PID para a configuração S3

Tabela 6.3 – Apresentação dos controladores DMC para as suas respectivas características

Tabela 6.4 – Sintonia dos controladores DMC para as configurações M13 e Mr3

Tabela 6.5 – Uma parte dos dados da simulação relativa ao TEST1 do DMCM3

Tabela 6.6 – Uma parte dos dados da simulação relativa ao TEST3 do DMCM3

Tabela 6.7 - Índices de desempenho para o TEST3 em 300 horas

Tabela 6.8 - Índices de desempenho para o TEST4 em 200 horas

Tabela 6.9- Índices de desempenho para o TEST5 em 500 horas

Tabela 6.10 – Índices de desempenho para o sistema submetido ao TEST6

Tabela 6.11 – Um parte dos dados da simulação do sistema para o TEST6 para o controlador DMCM1

Tabela 6.12 – Sintonia do controlador PID do fator de purificação

Tabela 6.13 – Uma parte da simulação do controlador PID do fator de purificação sem ação do DMC

Tabela A.1 – Condições de estado estacionário do processo CARE modificado

## **NOMENCLATURA**

CARE - "Continuous Adsorption Recycle Extraction"

DMC - "Dynamic Matrix Control"

PID - Controlador Proporcional, Integrativo e Derivativo

CPU - Central Processing Unit

DM - Desvio máximo

### **Variáveis relacionadas ao "CARE" de dois estágios**

$F_1$  - vazão de alimentação do estágio de adsorção (l/h)

$F_2$  - vazão do estágio de dessorção (l/h)

$F_r$  - vazão de reciclo (l/h)

$E_1$  - concentração de enzima na fase líquida do estágio de adsorção (mmol/l)

$E_2$  - concentração de enzima na fase líquida do estágio de dessorção (mmol/l)

$q_1$  - concentração de enzima na fase sólida do estágio de dessorção (mmol/l)

$q_2$  - concentração de enzima na fase sólida do estágio de dessorção (mmol/l)

### **Variáveis relacionadas ao "CARE" de três estágios**

$F_1$  - vazão de alimentação do estágio de adsorção (l/h)

$F_2$  - vazão do estágio de lavagem (l/h)

$F_3$  - vazão do estágio de dessorção (l/h)

$F_r$  - vazão de reciclo (l/h)

$E_1$  - concentração de enzima na fase líquida do estágio de adsorção (mmol/l)

$E_2$  - concentração de enzima na fase líquida do estágio de lavagem (mmol/l)

$E_3$  - concentração de enzima na fase líquida do estágio de dessorção (mmol/l)

$q_1$  - concentração de enzima na fase sólida do estágio de adsorção (mmol/l)

$q_2$  - concentração de enzima na fase sólida do estágio de lavagem (mmol/l)

$q_3$  - concentração de enzima na fase sólida do estágio de dessorção (mmol/l)

$C_1$  - concentração de contaminantes na fase líquida do estágio de adsorção (mmol/l)

$C_2$  - concentração de contaminantes na fase líquida do estágio de lavagem (mmol/l)

$C_3$  - concentração de contaminantes na fase líquida do estágio de dessorção (mmol/l)

### **Variáveis relacionadas ao CARE de dois e três estágios**

A - enzima na fase líquida

B - adsorvente

AB – enzima adsorvida

$k_1$  – constante cinética relacionada a etapa de adsorção

$k_2$  – constante cinética relacionada a etapa de adsorção

$k_3$  – constante cinética relacionada a etapa de dessorção

$q_m$  – concentração da capacidade de adsorção máxima (mmol/l)

E – concentração de enzima na fase líquida (mmol/l)

$E_0$  – concentração de enzima na fase líquida na vazão de alimentação (mmol/l)

q – concentração de enzima na fase sólida (mmol/l)

$V_1$  – volume líquido de cada estágio (l)

$V_s$  – volume sólido de cada estágio (l)

$r_{E1}$  – taxa de geração de enzima na fase líquida do estágio de adsorção por unidade de volume (mmol.l<sup>-1</sup>.h<sup>-1</sup>)

$r_{q1}$  – taxa de geração de enzima na fase sólida do estágio de adsorção por unidade de volume (mmol.l<sup>-1</sup>.h<sup>-1</sup>)

$r_{E2}$  – taxa de geração de enzima na fase líquida do estágio de lavagem por unidade de volume (mmol.l<sup>-1</sup>.h<sup>-1</sup>)

$r_{q2}$  – taxa de geração de enzima na fase sólida do estágio de lavagem por unidade de volume (mmol.l<sup>-1</sup>.h<sup>-1</sup>)

$r_{E3}$  – taxa de geração de enzima na fase líquida do estágio de dessorção por unidade de volume (mmol.l<sup>-1</sup>.h<sup>-1</sup>)

$r_{q3}$  – taxa de geração de enzima na fase sólida do estágio de dessorção por unidade de volume (mmol.l<sup>-1</sup>.h<sup>-1</sup>)

$\gamma, \psi, \delta$  – constantes de razões entre as vazões

$\tau_1$  – razão do volume líquido pela vazão do estágio de adsorção (h)

$\tau_2$  – razão do volume líquido pela vazão do estágio de lavagem (h)

$\varepsilon$  – porosidade (razão do volume líquido pelo total)

P : produtividade (mmol. l<sup>-1</sup>.h<sup>-1</sup>)

R : rendimento (%)

$F_P$  : fator de purificação

### **Parâmetros e constantes do algoritmo de controle DMC**

$n_s$  – horizonte de modelo



nr – horizonte de predição

nl – horizonte de controle

nm – número de variáveis manipuladas

nc – número de variáveis controladas

P1 - fator de ponderação relativo a variável de saída  $E_1$

P3 - fator de ponderação relativo a variável de saída  $E_3$

n e i - índices utilizados

k – instante de amostragem presente

### **Variáveis relacionados ao controlador DMC SISO**

$y_{k+n}^p$  – valor previsto da variável controlada no instante k+n futuro

$a_k$  –  $k^{\text{th}}$  coeficiente da resposta degrau unitário da variável controlada à variável manipulada

$\Delta m_k$  – ação sobre a variável manipulada no instante presente

$y_{k+n}^{pa}$  – valor previsto da variável controlada no instante k+n devido às ações passadas

$\underline{Y}^p$  – vetor das ações previstas da variável controlada

$\underline{\underline{A}}$  – matriz dinâmica

$\underline{Y}^{pa}$  – matriz devido às ações passadas

J – Índice de desempenho

$\underline{E}$  – vetor erro

$\underline{E}^T$  – transposta do vetor erro

$\underline{\underline{\Lambda}}$  – matriz de fator de supressão

$\underline{\underline{\Lambda}}^T$  – transposta da matriz de fator de supressão

$\underline{\Delta m}$  – vetor das ações da variável manipulada

$\underline{Y}^{sp}$  – vetor do valor desejado da variável controlada

$\underline{Y}^p$  – vetor dos valores previstos da variável controlada

$\underline{Mg}$  – matriz ganho

$\underline{E}l$  – diferença entre os vetores  $\underline{Y}^{sp}$  e  $\underline{Y}^{pa}$

$y^{sp}$  – valor lido da variável controlada

$d_{k+n}$  – diferença entre os valores  $y^{sp}$  e  $y_{k+n}^p$

$\underline{M}$  – matriz de translação do vetor da variável controlada

$\underline{AS}$  – matriz dinâmica para o cálculo do vetor devido às ações passadas

$\underline{d}$  – vetor desvio formada pelo valor  $d_{k+n}$

### **Variáveis relacionadas ao controlador DMC MIMO**

$y_{i,k+n}^p$  – vetor predito da variável controlada  $i$  no tempo discreto  $k+n$

$y_{i,k+n}^{pa}$  – vetor predito da variável controlada  $i$  devido às ações passadas no tempo discreto  $k+n$

$a_{i,j}^k$  –  $k^{th}$  coeficiente da resposta degrau da  $j^{th}$  variável controlada a  $i^{th}$  variável manipulada

$\underline{\Gamma}$  – matriz de ponderação

$\underline{\Gamma}^T$  – transposta da matriz de ponderação

$\Gamma_i$  - elemento da coluna diagonal principal da matriz de ponderação

$\underline{A}^k$  – matriz 2x2 dos  $k^{th}$ s coeficientes das respostas degrau da variáveis controladas às variáveis manipuladas

$\underline{\Delta m}_k$  – vetor das ações sobre as variáveis manipulada no instante presente

$\underline{d}_{k+j}$  – vetor dos erros dos valores lidos do processo em relação a última predição

$\underline{y}_{k+1}$  – vetor medido das saídas do processo

$\underline{I}_{=nc}$  – matriz identidade  $nc$  por  $nc$

$dU1$  - ação calculada da variável manipulada  $F_1$  ou  $F_r$  (ml/h)

$dU3$  - ação calculada da variável manipulada  $F_3$  (ml/h)

### **Variáveis relacionadas ao controlador PID**

$e_n$  – erro entre o valor desejado e lido da variável controlada

$K_c$  – constante proporcional

$p_n$  – variável manipulada

$\Delta p_n$  - ação calculada da variável manipulada

$\Delta t$  - tempo de intervenção

$\tau_I$  - constante de integração

$\tau_D$  - constante de derivação

### **Configurações e controladores DMC**

S3, MI3 e Mr3 - Configurações descritas na tabela 5.2

DMCM1, DMCM2 e DMCM3 - controladores DMC multivariáveis descritos na tabela 6.3

### **Sobrescritos**

th - sufixo (*ésimo*) de número ordinal no singular

ths - sufixo (*ésimo*) de número ordinal no plural

### **Subscritos**

$\infty$  - aproximação ao infinito

**Observações de unidades:** m = mili =  $10^{-3}$ , mol = gmol e mmol =  $10^{-3}$ .gmol

$$1.0E-X = 10^{-X}$$

---

# CAPÍTULO I

## INTRODUÇÃO

### I.1 - Motivações para o projeto

Os estudos e pesquisas relacionados ao desenvolvimento de processos de purificação de enzimas se devem, em grande parte, à aplicação industrial e ao valor agregado de tais substâncias. As enzimas têm a função de transformar alguns produtos orgânicos em outros mais nobres de aplicações tecnológicas. Dentre alguns exemplos de indústrias em que as mesmas são muito aplicadas, pode-se citar: detergente, amido, laticínios, têxtil, álcool, vinho e suco, cervejaria e panificação (FALCHI, 1991).

A produção de enzimas pode ser dividida em duas partes:

- i) Fermentação;
- ii) Processos de separação, recuperação e purificação;

Apesar dos benefícios da engenharia genética e progressos na tecnologia de processos estar contribuindo para melhorar na primeira parte, há necessidade de sistemas de controle e automação mais avançados à segunda parte (RODRIGUES et al., 1993), que geralmente é a que envolve mais da metade da planta em termos de espaço, capital e custos de operação (BJURSTROM, 1985). Assim o maior desafio para o futuro está em encontrar sistemas de separação, recuperação e purificação melhores de um dado produto e não somente selecionar as melhores condições de substrato, enzima ou microorganismo e processo de fermentação (BAILEY e OLLIS, 1986).

---

Sendo o sistema “CARE” um tipo de processo de purificação de enzimas que opera de modo contínuo, a aplicação de um sistema de controle torna-se propícia para uma produção relativamente em larga escala.

## **I.2 – Objetivos**

Assim sendo, esta dissertação aborda a implementação de um sistema de controle no processo “CARE” de purificação de enzima.

Por meio de um modelo matemático do processo “CARE”, que opera de modo contínuo, é possível a realização de diversas simulações computacionais para o conhecimento do comportamento do processo. Por meio de uma análise detalhada do comportamento tanto no estado estacionário como no dinâmico são obtidas informações fundamentais para o desenvolvimento das estratégias de controle do sistema.

O sistema de controle utiliza o algoritmo de controle preditivo DMC (*Dynamic Matrix Control*) para o controle das concentrações de enzima a ser purificada em dois estágios do processo. Um controlador de maior simplicidade de implementação (PID) é aplicado para o controle de um fator que mede a purificação da enzima.

Além disso, o sistema de controle deve assegurar o cumprimento das restrições existentes em algumas variáveis do processo.

## **I.3 – Organização da tese**

O capítulo I apresenta, de maneira geral, as motivações e os objetivos desta dissertação. No capítulo II, procura-se mostrar as principais referências bibliográficas relacionadas ao controle em processos químicos e algumas das técnicas

---

de purificação, sendo a maior intenção desta fornecer as informações que levaram ao desenvolvimento de um processo de purificação que opera continuamente. No capítulo III, são apresentadas as etapas do desenvolvimento da modelagem do processo “CARE” original e modificado, alguns comentários com relação a alguns cuidados para uma implementação prática industrial e os parâmetros do processo. No capítulo IV, é abordada a teoria de controle utilizada nesta dissertação. No capítulo V, todas as etapas para o desenvolvimento das estratégia de controle são descritas. Há no fim do capítulo um desenho do processo “CARE” com o sistema de controle acoplado ao mesmo. No capítulo VI são apresentados os resultados dos testes de mudança a que se submete o sistema e a avaliação de desempenho do sistema de controle. Uma análise do rendimento e produtividade também é realizada. Por fim, no último capítulo apresentam-se as conclusões finais e sugestões para os trabalhos futuros.

---

## CAPÍTULO II

### REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### II.1 – Sistema de controle de processos químicos

A partir da década de 70, houve um notável desenvolvimento das técnicas de controle avançado aplicadas aos processos químicos devido, em grande parte, ao encarecimento dos custos no tocante à energia (LUYBEN, 1990). Muitos processos químicos funcionam a um custo de energia muito elevado; dessa forma, por menor que seja a melhora da qualidade do desempenho do sistema sob controle, os custos são fortemente reduzidos.

Associado a esse fato, o crescimento dos sistemas digitais a partir da década de 80 permitiram que estratégias e algoritmos de controle mais complexos, que requerem maior capacidade de processamento e armazenamento, pudessem ser desenvolvidos.

Diversos outros motivos motivaram a busca de sistemas de controle mais complexos, entre os quais os requisitos de mercado. Devido à competitividade crescente, houve uma busca por sistemas de controle que propiciassem eficiência a um custo reduzido e a qualidade desejada dos produtos.

Na década de 60, conceitos de sistemas de controle ótimo foram estudados por KALMAN que desenvolveu o controlador LQR (“Controlador linear quadrático”).

Na década de 70, algumas inovações de técnicas de controle preditivo desenvolveram-se através de métodos heurísticos. RICHALET et al. (1978) implementaram o MAC (*Model Algorithmic Control*) na França. CUTLER &

RAMAKER (1979) implementaram o *DMC (Dynamic Matrix Control)* na Shel Oil Company nos EUA. Esses algoritmos utilizam modelos internos representados por respostas impulso e degrau respectivamente, diferindo completamente dos métodos de representação de sistema por equações de estado e funções de transferência. Como estes métodos de controle foram desenvolvidos independentemente na Europa e nos EUA, MARTIN (1981) fez um estudo comparativo dos dois métodos para o caso de malha SISO, ressaltando as principais semelhanças com o conhecido controlador “*dead-beat*” (CADZOW & MARTENS, 1970). Os algoritmos de controle MAC e DMC, por utilizarem um modelo identificado interno, pertencem a classe MPC (*Model Predictive Control*) (PRETT et al., 1987).

Os processos químicos são normalmente multivariáveis, com restrições de variáveis e fortemente não lineares; por isso foram desenvolvidos trabalhos para buscar soluções que viabilizassem a implementação do controle MPC em tais processos. Outros trabalhos foram desenvolvidos aplicados aos processos químicos com o objetivo de torná-los mais robustos e ótimos. O tratamento das restrições nas variáveis manipuladas é apresentado por PRETT et al. (1979) através de equações que minimizam o afastamento dessas variáveis em relação às restrições. GARCIA & MORARI (1982) “enquadraram” os dois métodos heurísticos (MAC e DMC) numa classe à qual denominaram controladores de modelo interno (IMC) e, através dessa matemática rigorosa, diversos aspectos podem ser observados, entre os quais estabilidade, qualidade de controle, robustez e extensões para o caso não linear. GARCIA & MORARI (1985) analisam o caso multivariável e a escolha dos parâmetros do controlador. GATTU et al. (1992) fez uma extensão do QDMC não linear de GARCIA et al. (1985) usando ganho de regime permanente do filtro de Kalman; os estados do modelo são compensados por dinâmicas não modeladas, a



cada intervalo de amostragem, baseando-se nas medidas das variáveis e no ganho de regime permanente do filtro. LEE et al. (1994) propuseram uma estrutura de controle preditiva não linear que usa o filtro de Kalman estendido. ECONOMOU et al. (1986) analisam o caso multimalha e a extensão do IMC para sistemas não lineares. MORSHEDI et al. (1985) fazem uma extensão do DMC, desenvolvendo o LDMC, usando programação linear para a solução do algoritmo DMC com restrições. RICKER (1985) usa a programação quadrática para tratar o problema de restrições. LI et al. (1988) apresentam uma estrutura de controle baseada no IMC não linear que abrange o tratamento de restrições. Fazem uma generalização do algoritmo de controle tipo Newton. Utilizam uma técnica de programação quadrática sucessiva (SQP) que implementa restrições nas variáveis manipuladas e nas de estado. LI et al. (1988) fazem uma extensão para o caso “*multistep*”; consideram a hipótese de modelo perfeito e não tratam ruídos na medição. RICKER (1990) formulou a função objetivo usando modelos de espaço de estados lineares discretos invariantes no tempo, de modo a se valer das vantagens do teorema de estimação de estados. MCDONALD et al. (1987) estuda os processos altamente não lineares e sugere modificações simples sobre o algoritmo DMC, entre as quais uma atualização do ganho do processo (“*gain scheduling*”). GEORGIUS et al. (1988) afirmam que o desempenho usando modelos lineares pode ser pior que a do tradicional controle PI. Sugerem que se usem transformações não lineares nas saídas. PETERSON et al. (1992) sugerem uma extensão ao tradicional controlador DMC para a inclusão de não linearidades, o que resulta num algoritmo não linear. Neste, as não linearidades são estimadas por um modelo não linear e entram como perturbações no algoritmo DMC e as ações de controle são calculadas para compensar estas. PRETT et al. (1987) e SEBORG (1987) fazem o estudo da robustez em MPC e a incorporação de incertezas (no modelo e nas perturbações). MORARI et al. (1989) estudam a robustez para

---

sistemas lineares, apresentando uma abordagem para o projeto de controladores robustos, onde as incertezas da planta podem ser representadas como uma família de modelos lineares.

Surgem também alguns trabalhos com algoritmos com modelos paramétricos: CLARKE et al. (1987), DE KEYSER et al. (1985), YDSTIE et al. (1985). Esses trabalhos viabilizaram as técnicas de projeto de sistema de controle no âmbito adaptativo.

Podem-se citar como outros trabalhos de aplicações de controle preditivo: MEHRA et al. (1982), ROUHANI et al. (1982) aplicam o MAC em diversos processos. Apresentam a análise teórica do caso monovariável, possibilitando o estudo das propriedades de estabilidade e robustez do algoritmo. PRETT et al. (1979) aplicam o DMC na otimização em linha de uma unidade de craqueamento catalítico. O DMC é aplicado ao controle de um reator de hidrocraqueamento de correntes intermediárias de refinaria por CUTLER et al. (1987), a um reator de hidrocraqueamento por CUTLER et al. (1988), a uma torre de pré-flash de uma unidade de hidrocraqueamento por CUTLER et al. (1988b) e a uma separadora C3/C4 de uma refinaria da Sunoco no Canadá por CUTLER et al. (1988 c) . Muitas outras aplicações equivalentes são apresentadas por esse grupo em várias plantas. PINTO (1990) aplica o controle DMC em colunas fracionadoras.

---

## II.2 – Técnicas de purificação

A partir do caldo de fermentação e utilizando-se de técnicas de separação, é possível obter um determinado bioproduto desejado. Esse bioproduto pode ser uma determinada enzima. O caldo de fermentação é uma mistura aquosa bastante complexa, contendo células, produtos extracelulares solúveis, produtos intracelulares, substratos não convertidos e outros subprodutos (RODRIGUES et al. (1993)). As técnicas de separação dependem das características iniciais do caldo de fermentação (viscosidade, concentração do produto, impurezas, etc.), localização do produto (intracelular ou extracelular), tamanho, cargas, solubilidade, concentração do produto final e condições de embalagem (produto cristalizado, líquido concentrado, solução bruta ou em pó), como também da escala do processo e do valor do produto (BAYLEY e OLLYS, 1986). Todo produto obtido por fermentação requer uma etapa de pré-purificação. Alguns produtos biológicos exigem uma purificação mais rigorosa, enquanto outros não tão rigorosas.

As técnicas de separação da etapa de pré-purificação podem ser por ruptura celular, centrifugação, filtração rotativa à vácuo, ultrafiltração e precipitação. As de purificação são por precipitação e cromatografia, sendo que esta é a mais utilizada. (BJURSTROM, 1985)

Na etapa de pré-purificação, ocorre a remoção dos insolúveis (normalmente, por operações unitárias de filtração e centrifugação) e concentração do produto desejado (através da eliminação do máximo possível de água da solução).

Entre as técnicas relacionadas na etapa de purificação, destaca-se a cromatografia. Os tipos de cromatografia mais utilizados, com as suas respectivas características, estão apresentados na tabela 2.1.

Tabela 2.1 – Tipos de cromatografia

<b>TIPO</b>	<b>CARACTERÍSTICAS</b>
<b>Troca-iônica</b>	Alta resolução, alta velocidade, alta capacidade
<b>Cromatografia por afinidade</b>	Excelente resolução, alta velocidade e alta capacidade
<b>Filtração em gel</b>	Resolução moderada, baixa capacidade e excelente para desalinização
<b>Interações hidrofóbicas e hidrofílicas</b>	Excelente resolução, capacidade intermediária

Essas técnicas de cromatografia têm sido empregadas de diversas formas, como na purificação de água, na separação de moléculas de diferentes tamanhos e na extração de um determinado produto a partir de uma mistura complexa, que é típica dos processos bioquímicos. No entanto, algumas desvantagens, como a dificuldade de operação contínua em larga escala (JANSON, 1984), têm levado muitos pesquisadores na última década a desenvolverem novas tecnologias. Uma dessas técnicas com grandes perspectivas de aplicação industrial é a extração contínua com reciclo do adsorvente, utilizando-se o princípio de adsorção por afinidade (PUNGOR et al., 1987). Trata-se do processo “CARE” (“*Continuous Adsorption Recycle Extraction*”).

Este processo é constituído de dois reatores interligados, sendo que no primeiro estágio ocorre a etapa de adsorção da enzima a ser purificada e no

---

segundo estágio a dessorção. O processo é contínuo e possui grande potencial de aplicação industrial.

A etapa de adsorção foi modelada por CHASE et al. (1984) como uma reação reversível de 2ª ordem. Estes autores também determinaram, através de uma série de experimentos, as constantes cinéticas relacionadas à “reação de adsorção”. O trabalho de COWAN et al. (1986) complementou o anterior nesta mesma linha de pesquisa. A etapa de dessorção é modelada como uma reação irreversível de 1ª ordem utilizando-se uma constante cinética de dessorção relacionada.

No trabalho de DECHECHI et al. (1997), foi proposta a inclusão de um estágio de lavagem intermediário aos estágios de adsorção e dessorção, com o intuito de aumentar a purificação do processo, através da maior eliminação dos contaminantes. Este processo “CARE” de três estágios é o caso de estudo desta dissertação.

## CAPÍTULO III

### A MODELAGEM DO PROCESSO “CARE”

O processo de purificação de enzimas “CARE” foi proposto originalmente por PUNGOR et al. (1987). Como esquematizado na figura 3.1, é formado por dois estágios: adsorção e dessorção.

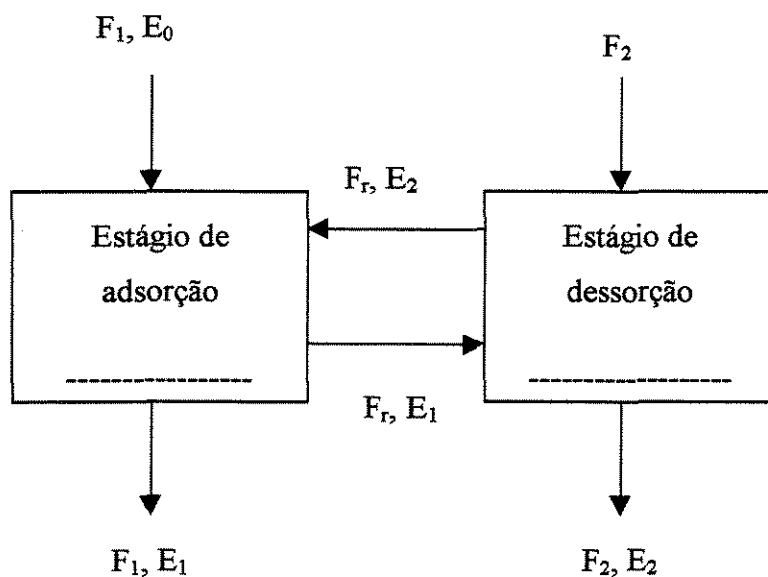
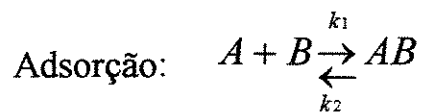


Figura 3.1 – Esquema do “CARE” original (dois estágios)

O processo opera de modo contínuo com o reciclo do adsorvente. Este é retido no sistema devido a presença de uma membrana macroporosa contida em cada um dos estágios. A etapa de adsorção é baseada no princípio de adsorção por afinidade com alta capacidade seletiva e é admitida como uma “reação” reversível de segunda ordem:



onde A, B e AB são a enzima na fase líquida, o adsorvente e a enzima adsorvida, respectivamente.

A etapa de dessorção é admitida como uma “reação” irreversível de 1ª ordem:



A taxa de adsorção pode ser expressa pela equação 3.1, onde  $q$  é a concentração de enzima na fase sólida,  $q_m$  é a concentração da capacidade máxima de adsorção e  $E$  é a concentração de enzima na fase líquida.

$$\frac{dq}{dt} = k_1 \cdot E \cdot (q_m - q) - k_2 \cdot q \quad (3.1)$$

No equilíbrio,  $dq/dt$  torna-se nulo, a equação 3.1 pode ser rescrita resultando a equação 3.2 (modelo isotérmico do tipo Langmuir não linear).

$$q^* = \frac{q_m \cdot E^*}{(k_d + E^*)} \quad (3.2)$$

onde  $k_d$  é a constante de dissociação da “reação” no equilíbrio, sendo dada por:

$$k_d = \frac{k_2}{k_1} \quad (3.3)$$

As constantes cinéticas  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$  e  $q_m$ , que foram obtidas nos trabalhos de CHASE et al. (1984) e COWAN (1986), não apenas representam a adsorção intrínseca e dessorção cinética, mas também incluem contribuições tanto da resistência a transferência de massa interna quanto externa. O mecanismo pode ser

---

agregado em um coeficiente de transferência de massa o qual pode ser determinado experimentalmente, como mostrado por CHASE (1984). Esta aproximação faz a formulação matemática mais tratável a custa de uma descrição física menos rigorosa. Por outro lado, resultados experimentais apresentados por PUNGOR (1987) indicaram que em tal sistema é razoável ter limitações da transferência de massa interna sem uma significativa perda da exatidão. De fato, isto pode ser justificado, pelo menos nos casos de proteínas com alto peso molecular, porque estas são mais adsorvidas nos sítios ativos localizados próximos a superfície da partícula tanto que elas bloqueiam a difusão no gel.

Cada um dos estágios do processo “CARE” são admitidos como perfeitamente misturados e isotérmicos.

Através do balanço de massa para cada componente (enzima na fase líquida e no adsorvente) e das leis de taxa das “reações” de adsorção e dessorção para cada estágio, realiza-se a modelagem determinística do processo “CARE”. Cada estágio é considerado como um reator perfeitamente misturado, o que simplifica consideravelmente os cálculos, admitindo-se as concentrações como propriedades agregadas (RODRIGUES et al., 1992). A porosidade também é considerada constante.



### III.1 – Modelagem do processo “CARE” original

Inicialmente definindo-se:

$$\gamma = \frac{F_1}{F_2}$$

$$\psi = \frac{F_r}{F_1}$$

$$\delta = \frac{F_1}{F_3}$$

$$\tau_1 = \frac{V_l}{F_1}$$

$$\tau_2 = \frac{V_l}{F_2}$$

$$\varepsilon = \frac{V_l}{V_l + V_s}$$

Para o “CARE” original, define-se:

$F_1$ : vazão do estágio de adsorção

$F_2$ : vazão do estágio de dessorção

$F_r$ : vazão de refluxo do processo

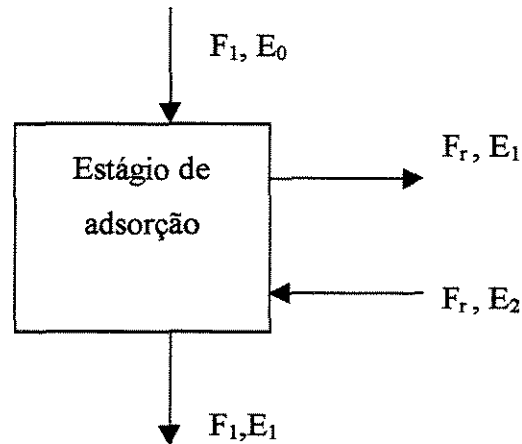
$V_l$ : volume líquido de cada estágio

$V_s$ : volume sólido de cada estágio

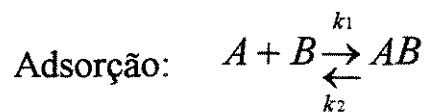
$E_1$ : concentração de enzima na fase líquida do estágio de adsorção

$E_2$ : concentração de enzima na fase líquida do estágio de dessorção

A figura 3.2 propicia uma melhor visualização das vazões no estágio de adsorção para a determinação da equação do balanço de massa.



**Figura 3.2** – Estágio de adsorção em destaque (“CARE” original)



$$r_{E1} = -r_{q1} = k_2 \cdot q_1 - k_1 \cdot E_1 \cdot (q_m - q_1) \quad (3.4)$$

A equação 3.5 representa o balanço de massa da enzima na fase líquida no estágio de adsorção:

$$V_l \frac{dE_1}{dt} = (F_1 \cdot E_0 + F_r \cdot \varepsilon \cdot E_2) - (F_1 \cdot E_1 + F_r \cdot \varepsilon \cdot E_1) + r_{E1} \cdot V_l \quad (3.5)$$

Associando-se as equações 3.4 e 3.5 e realizando-se as devidas transformações dimensionais, obtém-se a equação 3.6, que modela a dinâmica da variável  $E_1$  no tempo.

$$\frac{dE_1}{dt} = \frac{E_0 - E_1}{\tau_1} + \frac{\psi \cdot \varepsilon}{\tau_1} (E_2 - E_1) + (k_2 \cdot q_1 - k_1 \cdot E_1 \cdot (q_m - q_1)) \cdot \left( \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \right) \quad (3.6)$$

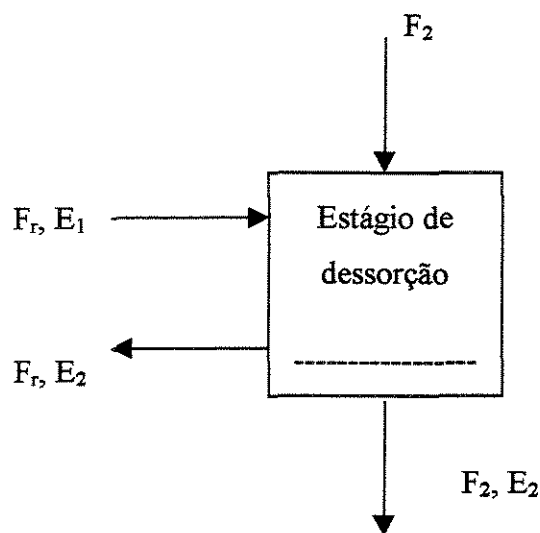
A equação 3.7 representa o balanço de massa da enzima na fase sólida no estágio de adsorção.

$$V_s \cdot \frac{dq_1}{dt} = (F_r \cdot q_2) - (F_r \cdot q_1) + r_{q_1} \cdot V_s \quad (3.7)$$

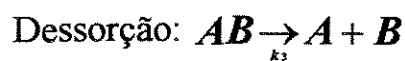
Realizando-se o procedimento análogo na obtenção da equação 3.6, obtém-se a equação 3.8 que mostra a dinâmica de  $q_1$  no tempo.

$$\frac{dq_1}{dt} = \frac{\psi \cdot \varepsilon}{\tau_1} (q_2 - q_1) + [k_1 \cdot E_1 \cdot (q_m - q_1) - k_2 \cdot q_1] \quad (3.8)$$

A figura 3.3 facilita a visualização das vazões no estágio de dessorção para a determinação da equação do balanço de massa.



**Figura 3.3** – Estágio de dessorção em destaque (“CARE” original)



$$r_{E_2} = -r_{q_2} = k_3 \cdot q_2 \quad (3.9)$$

A equação 3.10 representa o balanço de massa da enzima na fase líquida no estágio de dessorção:

$$V_l \frac{dE_2}{dt} = (F_r \cdot \varepsilon \cdot E_1) - (F_2 \cdot E_2 + F_r \cdot \varepsilon \cdot E_2) + r_{E_2} \cdot V_l \quad (3.10)$$

Associando-se as equações 3.9 e 3.10 e realizando-se as devidas transformações dimensionais, obtém-se a equação 3.11, que modela a dinâmica da variável  $E_2$  no tempo.

$$\frac{dE_2}{dt} = \frac{\psi \cdot \varepsilon}{\tau_1} (E_1 - E_2) - \frac{E_2}{\gamma \cdot \tau_1} + k_3 \cdot q_2 \left( \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \right) \quad (3.11)$$

A equação 3.12 representa o balanço de massa da enzima na fase sólida no estágio de dessorção.

$$V_s \cdot \frac{dq_2}{dt} = (F_r \cdot q_1) - (F_r \cdot q_2) + r_{q_2} \cdot V_s \quad (3.12)$$

Realizando-se o procedimento análogo na obtenção da equação 3.6, obtém-se a equação 3.13 que mostra a dinâmica de  $q_2$  no tempo.

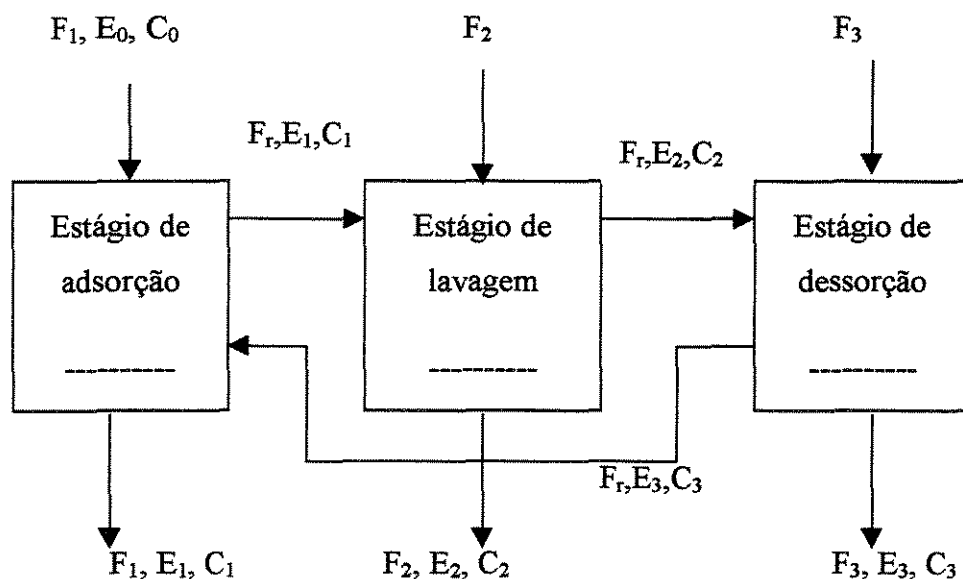
$$\frac{dq_2}{dt} = \frac{\psi \cdot \varepsilon}{\tau_1} (q_1 - q_2) - k_3 \cdot q_2 \quad (3.13)$$

Fazendo-se um balanço global do sistema considerando-se pseudo estado estacionário, obtém-se a equação 3.14.

$$F_1 \cdot E_0 = F_1 \cdot E_1 + F_2 \cdot E_2 \quad (3.14)$$

Ao processo “CARE” original adicionou-se um estágio intermediário de lavagem (DECHECHI et al. 1997) a fim de melhorar o fator de purificação do sistema, que está definido pela equação 3.38. Os fundamentos físico-químicos do processo “CARE” modificado são semelhantes ao “CARE” original. A figura 3.4 representa o processo “CARE” modificado.

### III.2 – Modelagem do processo “CARE” modificado



**Figura 3.4** – Processo “CARE” modificado (três estágios)

O desenvolvimento do modelo determinístico do processo “CARE” modificado segue o mesmo procedimento na modelagem do “CARE” original, porém considerando o estágio de lavagem e a presença de contaminantes.

Para o “CARE” modificado, define-se:

$F_1$ : vazão do estágio de adsorção

$F_2$ : vazão do estágio de lavagem

$F_3$ : vazão do estágio de dessorção

$F_r$ : vazão de refluxo do processo

$V_l$ : volume líquido de cada estágio

$V_s$ : volume sólido de cada estágio

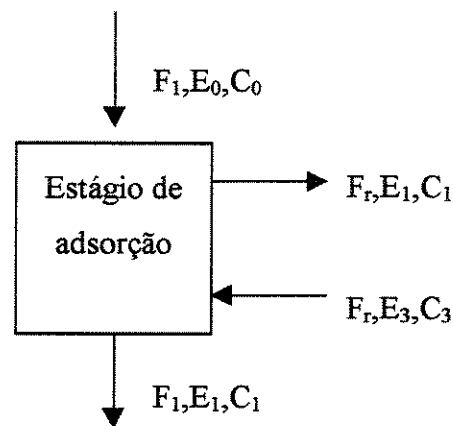
$E_1$ : concentração de enzima na fase líquida do estágio de adsorção

$E_2$ : concentração de enzima na fase líquida do estágio de lavagem

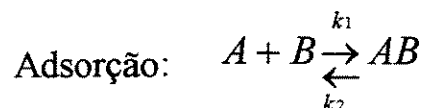
$E_3$ : concentração de enzima na fase líquida do estágio de dessorção

A inclusão do estágio de lavagem possibilita meios de eliminar os contaminantes do sistema, aumentando-se assim o fator de purificação.

A figura 3.5 representa o estágio de adsorção e as vazões envolvidas para o balanço de massa dos componentes (enzima na fase líquida, adsorvida e contaminantes).



**Figura 3.5** – Estágio de adsorção em destaque (“CARE” modificado)



$$r_{E1} = -r_{q1} = k_2 q_1 - k_1 E_1 (q_m - q_1) \quad (3.15)$$

A equação 3.16 representa o balanço de massa para a enzima na fase líquida no estágio de adsorção.

$$V_l \frac{dE_1}{dt} = (F_1 E_0 + \varepsilon F_r E_3) - (F_1 E_1 + \varepsilon F_r E_1) + r_{E1} V_l \quad (3.16)$$

Associando-se as equações 3.15 e 3.16, obtém-se a equação 3.17 que representa a dinâmica de  $E_1$  no tempo.

$$\frac{dE_1}{dt} = \frac{E_0 - E_1}{\tau_1} + \frac{\psi \varepsilon}{\tau_1} (E_3 - E_1) + [k_2 q_1 - k_1 E_1 (q_m - q_1)] \left( \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \right) \quad (3.17)$$

A equação 3.18 representa o balanço de massa para a enzima na fase sólida no estágio de adsorção.

$$V_s \frac{dq_1}{dt} = \varepsilon (F_r q_3 - F_r q_1) + r_{q1} V_s \quad (3.18)$$

Associando-se as equações 3.15 e 3.18, obtém-se a equação 3.19 que representa a dinâmica de  $q_1$  no tempo.

$$\frac{dq_1}{dt} = \frac{\psi \varepsilon}{\tau_1} (q_3 - q_1) + [k_1 E_1 (q_m - q_1) - k_2 q_1] \quad (3.19)$$

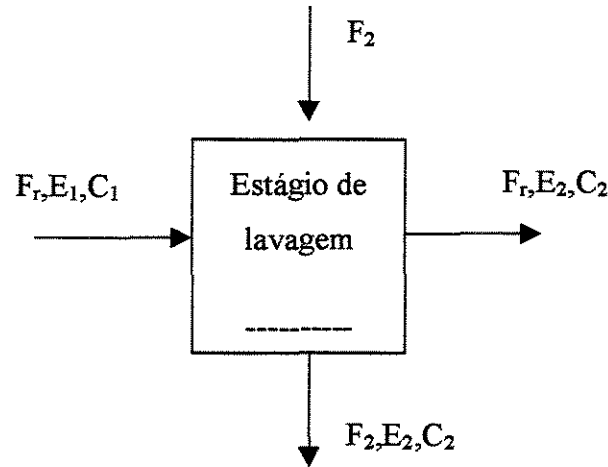
A equação 3.20 representa o balanço de massa para os contaminantes na fase líquida no estágio de adsorção.

$$V_l \frac{dC_1}{dt} = (F_1 C_0 + F_r C_3) - (F_1 C_1 + F_r C_1) \quad (3.20)$$

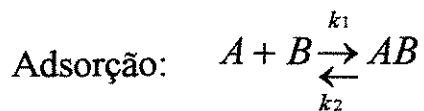
A equação 3.20 pode ser melhor apresentada através da inclusão dos parâmetros obtendo-se a equação (3.21).

$$\frac{dC_1}{dt} = \frac{C_0 - C_1}{\tau_1} + \frac{\psi}{\tau_1} \varepsilon (C_3 - C_1) \quad (3.21)$$

A figura 3.6 representa o estágio de lavagem e as vazões envolvidas para o balanço de massa dos componentes (enzima na fase líquida e adsorvida e contaminantes).



**Figura 3.6** – Estágio de lavagem em destaque (“CARE” modificado)



$$r_{E2} = -r_{q2} = k_2 q_2 - k_1 E_2 (q_m - q_2) \quad (3.22)$$

A equação 3.23 representa o balanço de massa para a enzima na fase líquida no estágio de lavagem.

$$V_l \frac{dE_2}{dt} = F_r E_1 - (F_r E_2 + F_2 E_2) + r_{E2} V_l \quad (3.23)$$

Associando-se as equações 3.22 e 3.23, obtém-se a equação 3.24 que representa a dinâmica de  $E_2$  no tempo.



$$\frac{dE_2}{dt} = \frac{\psi\epsilon}{\tau_1} (E_1 - E_2) - \frac{E_2}{\gamma\tau_1} + [k_2q_2 - k_1E_2(q_m - q_2)] \left( \frac{1-\epsilon}{\epsilon} \right) \quad (3.24)$$

A equação 3.25 representa o balanço de massa para a enzima na fase sólida no estágio de lavagem.

$$V_s \frac{dq_2}{dt} = (F_r q_1 - F_r q_2) + r_{q_2} V_s \quad (3.25)$$

Associando-se as equações 3.22 e 3.25, obtém-se a equação 3.26 que representa a dinâmica de  $q_2$  no tempo.

$$\frac{dq_2}{dt} = \frac{\psi\epsilon}{\tau_1} (q_1 - q_2) + [k_1E_2(q_m - q_2) - k_2q_2] \quad (3.26)$$

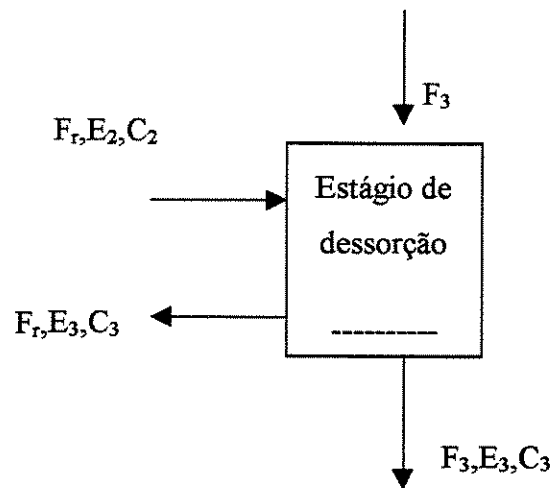
A equação 3.27 representa o balanço de massa para os contaminantes na fase líquida no estágio de lavagem.

$$V_l \frac{dC_2}{dt} = (F_r C_1) - (F_2 C_2 + F_r C_2) \quad (3.27)$$

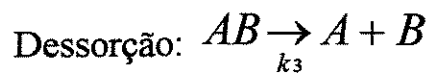
A equação 3.27 pode ser melhor apresentada através da inclusão dos parâmetros obtendo-se a equação 3.28.

$$\frac{dC_2}{dt} = \frac{\psi\epsilon}{\tau_1} (C_1 - C_2) - \frac{C_2}{\gamma\tau_1} \quad (3.28)$$

A figura 3.7 representa o estágio de dessorção e as vazões envolvidas para o balanço de massa dos componentes (enzima na fase líquida e adsorvida e contaminantes).



**Figura 3.7** – Estágio de adsorção em destaque (“CARE” modificado)



$$r_{E3} = -r_{q3} = k_3 q_3 \quad (3.29)$$

A equação 3.30 representa o balanço de massa para a enzima na fase líquida no estágio de dessorção.

$$V_l \frac{dE_3}{dt} = (F_r E_2) - (F_3 E_3 + F_r E_3) + r_{E3} \cdot V_l \quad (3.30)$$

Associando-se as equações 3.29 e 3.30, obtém-se a equação 3.31 que representa a dinâmica de  $E_3$  no tempo.

$$\frac{dE_3}{dt} = \frac{\psi \epsilon}{\tau_1} (E_2 - E_3) - \frac{E_3}{\delta \tau_1} + k_3 q_3 \left( \frac{1 - \epsilon}{\epsilon} \right) \quad (3.31)$$

A equação 3.32 representa o balanço de massa para a enzima na fase sólida no estágio de dessorção.

$$V_s \frac{dq_3}{dt} = F_r q_2 - F_r q_3 + r_{q3} V_s \quad (3.32)$$

Associando-se as equações 3.29 e 3.32, obtém-se a equação 3.33 que representa a dinâmica de  $q_3$  no tempo.

$$\frac{dq_3}{dt} = \frac{V_s}{\tau_1} (q_2 - q_3) - k_3 q_3 \quad (3.33)$$

A equação 3.34 representa o balanço de massa para os contaminantes na fase líquida no estágio de dessorção.

$$V_l \frac{dC_3}{dt} = F_r C_2 - (F_r C_3 + F_3 C_3) \quad (3.34)$$

A equação 3.34 pode ser melhor apresentada através da inclusão dos parâmetros obtendo-se a equação 3.35.

$$\frac{dC_3}{dt} = \frac{V_s}{\tau_1} (C_2 - C_3) - \frac{C_3}{\delta \tau_1} \quad (3.35)$$

O “CARE” modificado é o caso de estudo deste trabalho para implementação do controlador DMC. Como apresentado, o modelo do processo é formado por nove equações diferenciais não lineares que fornecem informações dinâmicas das saídas no tempo. A resolução deste sistema de equações é realizada através do método de integração de Runge-Kutta de 4ª ordem. A partir dos coeficientes cinéticos obtidos da literatura, determinou-se as condições operacionais estacionárias.

As constantes obtidas nos trabalhos de CHASE et al. (1984) e COWAN (1986) (apêndice A1) foram:

\* concentração da capacidade máxima de adsorção  $q_m = 1.0 \text{ mmol/l}$

\* constantes cinéticas:  $k_1 = 10^3 \text{ l} \cdot (\text{mmol})^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ;  $k_2 = 1.8 \text{ h}^{-1}$ ;  $k_3 = 10^3 \text{ h}^{-1}$

A partir dessas constantes e tomando-se a fração da fase líquida ou porosidade ( $\epsilon$ ) igual 0.7, determinou-se as condições de operação estacionárias, mostradas na tabela 3.1 através das devidas simulações.

**Tabela 3.1** – Condições de estado estacionário do processo “CARE” modificado

	<b>F[l/h]</b>	<b>E[mmol/l]</b>	<b>C[mmol/l]</b>	<b>q[mmol/l]</b>	<b>Vol (l)</b>
<b>Alimentação</b>	0.3825	$7.100 \cdot 10^{-3}$	$5.680 \cdot 10^{-2}$	0	-
<b>Estágio 1</b>	0.3825	$1.045 \cdot 10^{-3}$	$5.434 \cdot 10^{-2}$	$3.460 \cdot 10^{-1}$	0.100
<b>Estágio 2</b>	0.2325	$8.422 \cdot 10^{-4}$	$3.803 \cdot 10^{-2}$	$3.205 \cdot 10^{-1}$	0.100
<b>Estágio 3</b>	0.1254	$1.692 \cdot 10^{-2}$	$4.659 \cdot 10^{-4}$	$5.607 \cdot 10^{-5}$	0.100
<b>Reciclo</b>	0.0250	$1.692 \cdot 10^{-2}$	$4.659 \cdot 10^{-4}$	$5.607 \cdot 10^{-5}$	-

O rendimento, a produtividade e o fator de purificação são as variáveis de avaliação do processo e são definidas pelas equações 3.36, 3.37 e 3.38 respectivamente.

$$\text{Produtividade(P)} = \frac{F_3 \cdot E_3}{3 \cdot V_1} \quad (3.36)$$

$$\text{Rendimento(R)} = 100 \cdot \frac{F_3 \cdot E_3}{F_1 \cdot E_0} \quad (3.37)$$

$$\text{Fator de purificação (F}_p\text{)} = \frac{\frac{E_3}{C_3}}{\frac{E_0}{C_0}} \quad (3.38)$$

### III.3 – Algumas observações relevantes sobre as constantes cinéticas

- 1) As condições físico-químicas do 3º estágio são consideravelmente diferentes das do 1º estágio. Sendo assim, a vazão de refluxo do 3º para o 1º estágio produzirá mudanças das constantes cinéticas do 1º estágio. Uma solução para esta realidade seria a inclusão de mais um estágio capaz de retornar a vazão de refluxo de saída do 3º estágio às condições físico-químicas semelhantes ao do 1º estágio.
- 2) Após a etapa de dessorção, o adsorvente deve passar por um processo de regeneração para levá-lo às condições físico-químicas iniciais para um novo ciclo de utilização no processo. Dessa forma, a constância dos parâmetros cinéticos também pode ser tratada.
- 3) Deve haver algumas diferenças entre as constantes cinéticas dos estágios de adsorção e lavagem devido a algumas diferenças físico-químicas do tampão da vazão do estágio de lavagem e meio. Porém considerou-se nesta dissertação que as constantes cinéticas desses estágios são iguais.
- 4) A “reação” de dessorção pode ser consideravelmente reversível. Porém nesta dissertação a mesma é considerada como uma reação irreversível.

### III.4 – Os parâmetros do processo “CARE”

O modelo matemático do processo “CARE” é genérico, podendo ser ajustado a um determinado tipo de enzima através do ajuste das constantes cinéticas e das novas condições operacionais estacionárias iniciais. O modelo do processo pode também ser simulado através de mudanças das variáveis de entrada (vazões, concentração de enzima de entrada, porosidade e constantes cinéticas), observando-se o comportamento dinâmico e estacionário das saídas de interesse. Assim é

---

possível o conhecimento da dinâmica do processo e das outras condições operacionais. Isso torna viáveis as etapas de projeto de controle e otimização.

A seguir, estão algumas variáveis interessantes de serem alteradas ao longo das simulações:

- Variáveis a serem manipuladas

- Vazão de alimentação ( $F_1$ )

- Vazão de lavagem ( $F_2$ )

- Vazão do eluente ( $F_3$ )

- Vazão de reciclo ( $F_r$ )

2) Variáveis sujeitas a mudanças

- Concentração de enzima vazão de alimentação ( $E_0$ )

3) Parâmetros cinéticas de adsorção e dessorção

- Constantes cinéticas ( $k_1$ ,  $k_2$  e  $k_3$ )

- Concentração da capacidade de adsorção máxima ( $q_m$ )

## CAPÍTULO IV

### TEORIA DE CONTROLE

#### IV.1 – Controlador DMC para malha simples

Apresenta-se, nesta seção, o algoritmo de controle preditivo DMC convencional que é adequado a sistemas lineares e sem restrições.

Trata-se, inicialmente, a formulação matemática do controlador para o caso de malha simples a fim de tornar a apresentação menos exaustiva. A formulação do algoritmo DMC convencional, descrita por CUTLER (1983), pode ser separada em dois fundamentos:

- utiliza internamente um modelo dinâmico do processo, na forma de uma matriz dinâmica, para calcular o efeito das ações futuras da variável manipulada sobre a controlada. Este modelo é formado por um conjunto de coeficientes da resposta degrau unitário. A matriz dinâmica permite computar o efeito das ações futuras da variável manipulada sobre a trajetória da variável controlada.
- armazena a trajetória da variável controlada passada na memória.

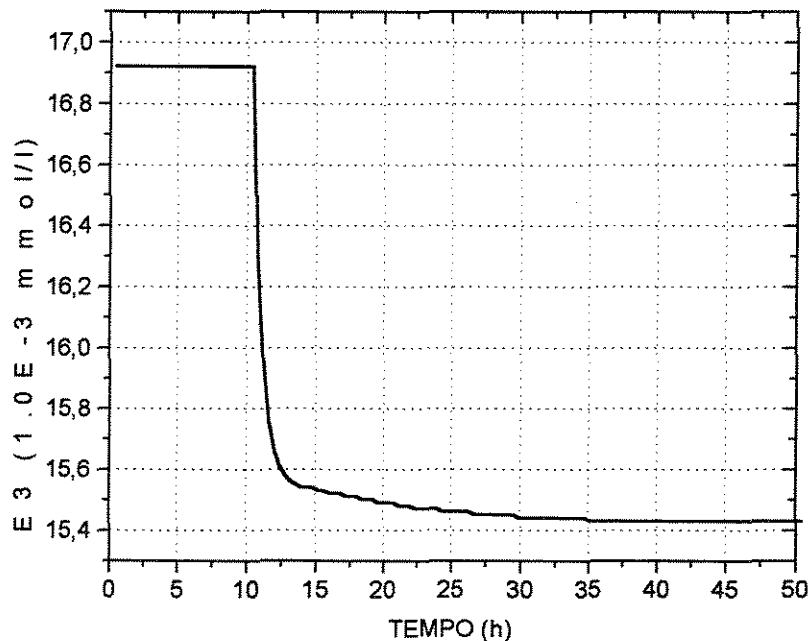
Dessa forma, a trajetória do sistema real é obtida somando-se os efeitos desses dois fundamentos, formulando-se a equação 4.1:

$$\begin{bmatrix} y_{k+1}^p \\ \vdots \\ y_{k+nr}^p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{nr} & a_{nr-1} & \dots & a_{nr-nl+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta m_k \\ \vdots \\ \Delta m_{k+nl-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_{k+1}^{pa} \\ \vdots \\ y_{k+n}^{pa} \end{bmatrix}$$

(4.1)

Nesta equação,  $y_{k+n}^p$  é o valor predito da variável controlada no tempo discreto  $k+n$ , onde  $k$  é o instante de amostragem presente e  $n$  varia de 1 ao horizonte de predição ( $nr$ ). A variável  $y_{k+n}^{pa}$  corresponde ao valor da variável controlada referente às ações passadas. O elemento da matriz  $a_k$  corresponde ao  $k^{\text{th}}$  coeficiente da resposta degrau unitário da variável controlada à variável manipulada.  $\Delta m_{k+n}$  é a mudança da variável manipulada no instante de amostragem  $k+n$ . Os parâmetros  $nr$  e  $nl$  são os horizontes de predição e controle respectivamente.

Para o desenvolvimento do controlador DMC de malha simples, em uma parte deste projeto, que controla a variável  $E_3$  e manipula  $F_3$ , formou-se a matriz dinâmica aplicando-se um degrau incremental de 10% no instante 10 horas sobre o valor estacionário de  $F_3$ , obtendo-se a curva de resposta de  $E_3$  da figura 4.1.



**Figura 4.1** – Saída  $E_3$  frente ao degrau incremental na manipulada  $F_3$



A partir do instante 10 horas, os coeficientes são obtidos através da equação 4.2.

$$a_k = \frac{(E_3 - E_{3\infty})}{(10\% \cdot F_3)} \quad (4.2)$$

Sendo que  $E_3$  é amostrado a cada 0.4 horas e  $E_{3\infty}$  e  $F_3$  são os valores estacionários antes da aplicação do degrau, iguais a  $16.92 \cdot 10^{-3}$  mmol/l e 125.4 ml/h respectivamente. O número de coeficientes obtidos é igual ao horizonte de modelo, que é um parâmetro do controlador (ns).

A equação 4.3 descreve a equação 4.1 de forma matricial.

$$\underline{Y}^p = \underline{A} \cdot \underline{\Delta m} + \underline{Y}^{pa} \quad (4.3)$$

A objetivo do algoritmo de controle DMC é determinar a trajetória da variável manipulada num horizonte de tempo futuro (horizonte de controle), que minimize um índice de desempenho  $J$  dado pela equação 4.4. Este índice é a soma de dois termos:

- 1) Erro quadrático entre a trajetória da variável controlada desejada e a prevista num horizonte de predição;
- 2) Soma do quadrado da variação da variável manipulada multiplicada pelo quadrado do fator de supressão num horizonte de controle (nc). Através desse fator é possível ajustar o valor da ação de controle;

$$J = \left( \underline{E}^T \underline{E} \right) + \left( \underline{\Lambda} \underline{\Delta m} \right)^T \left( \underline{\Lambda} \underline{\Delta m} \right) \quad (4.4)$$

sendo que

$$\underline{E} = \underline{Y}^{sp} - \underline{Y}^p \quad (4.5)$$

A formulação matemática dos mínimos quadrados, através da minimização do índice de desempenho (J), determina as ações futuras que compõem a trajetória da variável manipulada ( $\underline{\Delta m}$ ), dada pela equação 4.6.

$$\underline{\Delta m} = \underline{Mg} \cdot \underline{E1} \quad (4.6)$$

onde  $\underline{Mg}$  é a matriz ganho calculada pela equação 4.7.

$$\underline{Mg} = \left( \underline{A}^T \underline{A} + \underline{\Lambda}^T \underline{\Lambda} \right)^{-1} \cdot \underline{A}^T \quad (4.7)$$

$$\text{sendo que } \underline{E1} = \underline{Y}^{sp} - \underline{Y}^{Pa} \quad (4.8)$$

Os vetores  $\underline{Y}^p$  e  $\underline{Y}^{Pa}$  contêm nr linhas. O vetor  $\underline{\Delta m}$  contém nl linhas.

A matriz diagonal  $\underline{\Lambda}$  é a que contém os fatores de supressão.  $\underline{E1}$  é o vetor de erro predito dado por:

$$\underline{E1} = \left[ y^{sp} - y_{k+1}^{pa}, \dots, y^{sp} - y_{k+nr}^{pa} \right] \quad (4.9)$$

A equação 4.9 é descrita de forma vetorial pela equação 4.10.

$$\underline{E1} = \underline{Y}^{sp} - \underline{Y}^{pa} \quad (4.10)$$

Para o cálculo do vetor  $\underline{E1}$ , é preciso determinar o vetor das variáveis controladas passadas ( $\underline{Y}^{pa}$ ) a cada intervalo de amostragem. Um método eficiente

para a determinação deste vetor é a utilização do conceito de horizonte móvel, no qual o DMC atualiza o vetor  $\underline{Y}^{pa}$  quando se passa do instante de amostragem  $k$  para o instante  $k+1$  para os seguintes três efeitos:

i) o efeito da última ação de controle aplicada na planta é considerado. Isto corresponde a adicionar o termo:

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{ns} \end{bmatrix} \cdot \Delta m_k$$

à predição disponível.

ii) acrescenta-se uma correção para o erro da última predição em relação ao valor lido na planta:

$$\begin{bmatrix} d_{k+1} \\ d_{k+2} \\ \dots \\ d_{k+ns} \end{bmatrix}$$

No caso do DMC essa correção é a mesma para todos os instantes.

$$d_{k+j} = [y_{k+1}] - [y_{k+1}^p] \quad (4.11)$$

onde  $y_{k+1}$  é o valor da medida da saída do sistema.

iii) uma translação de um período de amostragem é então aplicada a todos os elementos do vetor de predições. Admite-se aqui que o horizonte de modelo  $ns$  é suficientemente grande para o sistema atingir o estado estacionário ou

$$\left[ \mathbf{y}_{ns+1}^p \right]_k = \left[ \mathbf{y}_{ns}^p \right]_k \quad (4.12)$$

Essas operações podem ser sintetizadas na equação matricial:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}_{k+1}^p \\ \mathbf{y}_{k+2}^p \\ \dots \\ \mathbf{y}_{k+n}^p \end{bmatrix} = \underline{\underline{\mathbf{M}}} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_{ns} \end{bmatrix} \left[ \Delta \mathbf{m}_k \right] + \begin{bmatrix} \mathbf{y}_{k+1}^p \\ \mathbf{y}_{k+2}^p \\ \dots \\ \mathbf{y}_{k+n}^p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{d}_{k+1} \\ \mathbf{d}_{k+2} \\ \dots \\ \mathbf{d}_{k+n} \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

onde

$$\underline{\underline{\mathbf{M}}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{ns \times ns} \quad (4.14)$$

A atualização do vetor  $\left( \underline{\mathbf{Y}}^{pa} \right)$  é feita pelas equações 4.15 e 4.16:

$$\left[ \underline{\mathbf{Y}}^{pa} \right]_{k+1} = \underline{\underline{\mathbf{M}}} \left[ \underline{\mathbf{Y}}^{pa} \right]_k + \begin{bmatrix} \mathbf{a}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_{ns} \\ \mathbf{a}_{ns} \end{bmatrix} \Delta \mathbf{m}_k + \begin{bmatrix} \mathbf{d}_{k+1} \\ \mathbf{d}_{k+2} \\ \dots \\ \mathbf{d}_{k+n} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

$$\left[ \underline{\mathbf{Y}}^{pa} \right]_{k+1} = \underline{\underline{\mathbf{M}}} \left[ \underline{\mathbf{Y}}^{pa} \right]_k + \underline{\underline{\mathbf{AS}}} \Delta \mathbf{m}_k + \underline{\mathbf{d}} \quad (4.16)$$

O desenvolvimento do algoritmo de controle DMC (SISO) no processo “CARE” segue os seguintes passos:

- Inicializar ou montar as matrizes:
  - Matriz dinâmica ( $\underline{A}$ )
  - Matriz de fatores de supressão ( $\underline{\Lambda}$ )
  - Matriz de ações passadas ( $\underline{Y}^{pa}$ )
  - Matriz do *Set-point* ( $\underline{Y}^{sp}$ )
  - Matriz para a atualização do vetor  $\underline{Y}^{pa}$  ( $\underline{M}$ )
  - Matriz dinâmica deslocada ( $\underline{AS}$ )
- 1) Calcular da matriz ganho pela equação 4.7;
  - 2) Resolver numericamente o modelo em um passo de integração;
  - 3) Tomar o valor da variável controlada calculado;
  - 4) Calcular a variável controlada prevista pela equação 4.17 (da equação 4.1);
- $$y_{k+1}^p = a_1 \cdot \Delta m_k + y_{k+1}^{pa} \quad (4.17)$$
- 5) Calcular o vetor de correção dado pela equação 4.11;
  - 6) Atualizar  $\underline{Y}^{pa}$  pela equação 4.16;
  - 7) Calcular  $E1$  pela equação 4.9;

OBS. No cálculo de  $\underline{E}_1$ , a matriz  $(\underline{Y}^{pa})$ , que é calculada na dimensão ns linhas, deve conter nr linhas, para tanto a mesma é tomada para esta dimensão.

8) Calcular as ações futuras da variável manipulada pela equação 4.6;

9) Aplicar o primeiro valor do vetor  $\underline{\Delta m}$ , que é o  $\Delta m_k$ ;

10) Se não for fim do tempo de execução, voltar ao passo 2;

11) Finalizar a simulação;

#### IV.2 – Controlador DMC multivariável

O algoritmo de controle DMC multivariável é uma extensão do DMC de malha simples. Por isso, a sua formulação, em várias etapas, segue uma analogia do algoritmo DMC de malha simples, inclusive na formação da matriz dinâmica. As trajetórias das variáveis controladas do sistema são obtidas pela soma dos efeitos dos dois fundamentos descritos na seção do DMC (SISO), formulando-se a equação matricial 4.18:

$$\begin{bmatrix} y_{1,k+1}^p \\ \vdots \\ y_{nc,k+1}^p \\ \vdots \\ y_{1,k+nr}^p \\ \vdots \\ y_{nc,k+nr}^p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1,1}^1 & \dots & a_{nm,1}^1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots \\ a_{1,nc}^1 & \dots & a_{nm,nc}^1 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots \\ a_{1,1}^{nr} & \dots & a_{nm,1}^{nr} & a_{1,1}^{nr-1} & \dots & a_{nm,1}^{nr-1} & \dots & a_{1,1}^{nr-nl+1} & \dots & a_{nm,1}^{nr-nl+1} \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots \\ a_{1,nc}^{nr} & \dots & a_{nm,nc}^{nr} & a_{1,nc}^{nr-1} & \dots & a_{nm,nc}^{nr-1} & \dots & a_{1,nc}^{nr-nl+1} & \dots & a_{nm,nc}^{nr-nl+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta m_{1,k} \\ \vdots \\ \Delta m_{nm,k} \\ \vdots \\ \Delta m_{1,k+nl-1} \\ \vdots \\ \Delta m_{nm,k+nl-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_{1,k+1}^{pa} \\ \vdots \\ y_{nc,k+1}^{pa} \\ \vdots \\ y_{1,k+nr}^{pa} \\ \vdots \\ y_{nc,k+nr}^{pa} \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

Nesta equação,  $y_{i,k+n}^p$  é o valor predito da variável controlada  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, nc$ ) no tempo discreto  $k+n$ , onde  $k$  é o instante de amostragem presente e  $n$  varia de

1 até o horizonte de predição (nr). O elemento da matriz  $\mathbf{a}_{i,j}^k$  corresponde ao  $k^{\text{th}}$  coeficiente da resposta degrau da  $j^{\text{th}}$  variável controlada a  $i^{\text{th}}$  variável manipulada.  $\Delta m_{i,k+n}$  é a mudança da  $i^{\text{th}}$  variável manipulada no instante de amostragem  $k+n$ . As constantes  $nc$  e  $nm$  correspondem ao número de variáveis controladas e manipuladas respectivamente. Os parâmetros  $nr$  e  $nl$  são os horizontes de predição e controle respectivamente.

A equação 4.19 descreve a equação 4.18 de forma matricial.

$$\underline{Y}^p = \underline{A} \cdot \underline{\Delta m} + \underline{Y}^{pa} \quad (4.19)$$

Os vetores  $\underline{Y}^p$  e  $\underline{Y}^{pa}$  contêm  $nc \cdot nr$  linhas. O vetor  $\underline{\Delta m}$  contém  $nm \cdot nl$  linhas.

Através da equação 4.20 determina-se as ações das variáveis manipuladas futuras ( $\underline{\Delta m}$ ):

$$\underline{\Delta m} = \underline{Mg} \cdot \underline{E1} \quad (4.20)$$

onde  $\underline{Mg}$  é a matriz ganho calculada pela equação 4.21.

$$\underline{Mg} = \left( \underline{A}^T \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} \underline{A} + \underline{\Lambda}^T \underline{\Lambda} \right)^{-1} \cdot \underline{A}^T \cdot \underline{\Gamma}^T \underline{\Gamma} \quad (4.21)$$

onde as matrizes  $\Gamma$  e  $\Lambda$  são as matrizes de ponderação e de supressão. Normalmente são matrizes diagonais.  $E1$  é o vetor de erro predito dado por:

$$\underline{E1} = \left[ y_1^{sp} - y_{1,k+1}^{pa} \cdots y_{nc}^{sp} - y_{nc,k+1}^{pa} \cdots y_1^{sp} - y_{1,k+nr}^{pa} \cdots y_{nc}^{sp} - y_{nc,k+nr}^{pa} \right]$$

(4.22)

A equação 4.22 é descrita de forma vetorial pela equação 4.23.

$$\underline{E1} = \underline{Y}^{sp} - \underline{Y}^{pa} \quad (4.23)$$

Analogamente ao caso SISO, para o cálculo do vetor  $\underline{E1}$ , é necessária a determinação do vetor das variáveis controladas passadas ( $\underline{Y}^{pa}$ ) a cada intervalo de amostragem, seguindo o método análogo do caso de malha simples.

i) o efeito da última ação de controle aplicada na planta é considerado. Isto corresponde a adicionar o termo:

$$\begin{bmatrix} \underline{A}^1 \\ \underline{A}^2 \\ \dots \\ \underline{A}^n \end{bmatrix} \Delta m_k$$

à predição disponível.

ii) acrescenta-se uma correção para o erro da última predição em relação aos valores lidos na planta:

$$\begin{bmatrix} \underline{d}_{k+1} \\ \underline{d}_{k+2} \\ \dots \\ \underline{d}_{k+n} \end{bmatrix}$$

No caso do DMC essa correção é a mesma para todos os instantes.



$$\underline{d}_{k+j} = \underline{y}_{k+1} - \underline{y}_{k+1}^p \quad (4.24)$$

onde  $\underline{y}_{k+1}$  é o vetor de medidas das saídas do sistema.

iii) uma translação de um período de amostragem é então aplicada a todos os elementos do vetor de previsões. Admite-se aqui que o horizonte de modelo (ns) é suficientemente grande para o sistema atingir o estado estacionário, ou seja:

$$\underline{y}_{ns+1}^p = \underline{y}_{ns}^p \quad (4.25)$$

Essas operações podem ser sintetizadas na equação 4.26.

$$\begin{bmatrix} \underline{y}_{k+1}^p \\ \underline{y}_{k+2}^p \\ \dots \\ \underline{y}_{k+n}^p \end{bmatrix} = \underline{M} \begin{bmatrix} \underline{A}^1 \\ \underline{A}^2 \\ \dots \\ \underline{A}^n \end{bmatrix} [\underline{\Delta m}_k] + \begin{bmatrix} \underline{y}_{k+1}^p \\ \underline{y}_{k+2}^p \\ \dots \\ \underline{y}_{k+n}^p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \underline{d}_{k+1} \\ \underline{d}_{k+2} \\ \dots \\ \underline{d}_{k+n} \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

onde

$$\underline{M} = \begin{bmatrix} 0 & \underline{I}_{nc} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \underline{I}_{nc} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \underline{I}_{nc} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \underline{I}_{nc} \end{bmatrix}_{nc, ns \times nc, ns} \quad (4.27)$$

A atualização do vetor  $(\underline{Y}^{pa})$  é feita pela equação 4.28 ou 4.29:

$$\underline{Y}^{pa}_{k+1} = \underline{M}_k \underline{Y}^p_k + \begin{bmatrix} \underline{A}^2 \\ \dots \\ \underline{A}^n \\ \underline{A}^k \end{bmatrix} \Delta \underline{m}_k + \begin{bmatrix} \underline{d}_{k+1} \\ \underline{d}_{k+2} \\ \dots \\ \underline{d}_{k+n} \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

$$\underline{Y}^{pa}_{k+1} = \underline{M}_k \underline{Y}^p_k + \underline{AS} \Delta \underline{m}_k + \underline{d} \quad (4.29)$$

O desenvolvimento do algoritmo de controle DMC MIMO no processo “CARE” segue os seguintes passos:

1) Inicializar ou montar as matrizes:

- Matriz dinâmica (A)
- Matriz de fatores de supressão (Λ)
- Matriz de ponderação (Γ)
- Matriz de ações passadas (Y<sup>pa</sup>)
- Matriz dos *Set-points* (Y<sup>sp</sup>)
- Matriz para a atualização do vetor Y<sup>pa</sup> (M)
- Matriz dinâmica deslocada (AS)

2) Calcular a matriz ganho pela equação 4.21;

3) Resolver numericamente o modelo em um passo de integração;

4) Tomar os valores das variáveis controladas calculados;

5) Calcular variáveis controladas previstas para o próximo intervalo:

$$\begin{aligned} y_{1,k+1}^p &= a_{1,1}^1 \cdot \Delta m_{1,k} + a_{2,1}^1 \cdot \Delta m_{2,k} + y_{1,k+1}^{pa} \\ y_{2,k+1}^p &= a_{1,2}^1 \cdot \Delta m_{1,k} + a_{2,2}^1 \cdot \Delta m_{2,k} + y_{2,k+1}^{pa} \end{aligned} \quad (4.30)$$

6) Calcular o vetor de correção dado pela equação 4.24;

7) Atualizar o vetor  $\underline{Y}^{pa}$  pela equação 4.29;

8) Calcular E1 pela equação 4.22;

OBS. No cálculo de E1, a matriz  $(\underline{Y}^{pa})$ , que é calculada na dimensão ns.nc linhas, deve conter nr.nc linhas, para tanto a mesma é tomada para esta dimensão.

9) Calcular as ações futuras da variável manipulada pela equação 4.20;

10) Aplicar os primeiros valores do vetor  $\underline{\Delta m}$ , que são  $\Delta m_{1,k}$  e  $\Delta m_{2,k}$ ;

11) Se não for fim do tempo de execução, voltar ao passo 3;

12) Finalizar a simulação;

### IV.3 – Controlador PID (Algoritmo de velocidade)

Implementa-se o controlador PID para a malha “SISO”, controlando  $E_3$  e manipulando  $F_3$ , com o intuito de realizar uma comparação com o controlador DMC para esta mesma estrutura. A importância do controlador PID está na sua simplicidade de implementação e desempenho muitas vezes aceitável, de forma que este controlador é ainda muito aplicado na indústria.

O algoritmo PID de velocidade, dado pela equação 4.31, computa a ação que deve ser adicionada à variável manipulada (equação 4.32) a cada intervalo de tempo amostrado.

$$\Delta p_n = K_c \left[ (e_n - e_{n-1}) + \frac{\Delta t}{\tau_I} e_n + \frac{\tau_D}{\Delta t} (e_n - 2e_{n-1} + e_{n-2}) \right] \quad (4.31)$$

$$p_n = p_{n-1} + \Delta p_n \quad (4.32)$$

Quanto ao ajuste dos parâmetros do controlador PID, destacam-se os métodos heurísticos, através da observação do comportamento das variáveis do sistema, que serão os adotados neste projeto (subseção V.5.2). Podem-se citar também os seguintes métodos de ajuste: Ziegler-Nichols, Cohen-Coon e ITAE – Integral Absoluta dos Erros Quadráticos. Estes métodos são descritos em detalhes em SEBORG et al. (1991) e STHEPHANOPOULOS et al. (1984).

## IV.4 – Tratamento de restrições do DMC convencional

### IV.4.1 - Nas variáveis controladas

A possibilidade de se adaptar, no decorrer da execução do sistema, os fatores de ponderação do controlador DMC convencional, torna possível o ajuste da variável controlada para dentro de uma faixa de operação desejada ( $Y_{i,\min} \leq Y_i \leq Y_{i,\max}$ ).

Um exemplo simples de heurística para o tratamento de restrições utilizando o fator de ponderação seria:

- \* previsões de  $y_i$  dentro da faixa, toma-se  $\Gamma_i = 1$ ;
- \* previsões fora da faixa, toma-se  $\Gamma_i = 10$ ;

O aumento da importância de uma variável tende a:

- \* a causar erros estacionários (*off-set*) nas demais variáveis controladas;
- \* reduz a margem de estabilidade da malha, podendo levar o sistema à instabilidade;

### IV.4.2 - Nas ações das variáveis manipuladas

Ao longo da execução do sistema com o algoritmo DMC, reajustes podem ser feitos nos fatores de supressão para ajustar as variações das variáveis manipuladas dentro de uma faixa de valores desejados.

A heurística deste método é apresentada pela seguinte lógica:

- Aumentando-se o valor do fator de supressão, a respectiva variável manipulada apresentará uma ação mais suave, ou seja, um menor valor das ações; e vice-versa.

Este método será adotado, neste projeto, para tratamento das restrições da ações de controle (subseção V.4.6).

## CAPÍTULO V

### PROJETO E ESTRATÉGIAS DE CONTROLE DESENVOLVIDAS

Ao projetista de controle, é interessante o estudo do comportamento dinâmico das variáveis de saída frente às mudanças das entradas sem controle, isto é, em malha aberta. Por meio disso, é possível investigar as malhas de controle para posterior desenvolvimento adequado das estratégias de controle para o sistema.

O projeto de controle do processo “CARE”, por não se dispor de uma planta piloto para aplicação, utiliza um modelo matemático dinâmico de simulação, o qual será a planta “real” do sistema, já descrito no capítulo III.

Este projeto de controle visa desenvolver um controlador DMC para o processo “CARE”. As etapas envolvidas são:

- 1) A escolha das variáveis controladas;
- 2) A determinação do tempo de intervenção do controlador;
- 3) A escolha da configuração de controle;
- 4) O desenvolvimento da estratégia de controle;
- 5) A sintonia dos parâmetros do controlador;

#### V.1 – A escolha das variáveis controladas

As variáveis controladas do controlador DMC são as concentrações de enzima na fase líquida do primeiro ( $E_1$ ) e terceiro ( $E_3$ ) estágios. Através do controle de  $E_1$ , é possível reduzir a quantidade de enzima eliminada do estágio de adsorção, diminuindo assim as perdas de enzima do sistema e, por conseguinte, maximizar o

---

rendimento do sistema. O controle de  $E_3$  permite a determinação da quantidade de enzima no sistema.

Uma outra variável de interesse para o controle é o fator de purificação, que quantifica a purificação do sistema. O controle do mesmo é realizado, paralelamente ao DMC, utilizando-se o tradicional controlador PID algoritmo de velocidade.

## **V.2 – A determinação do tempo de intervenção do controlador**

O tempo de intervenção do controlador na prática é usualmente escolhido igual a um décimo da constante de tempo da resposta de uma saída em malha aberta. O tempo de intervenção final deve ser um valor razoável às malhas de controle consideradas e às restrições provenientes das limitações dos dispositivos de medida e do processamento de CPU do algoritmo de controle implementado.

O tempo de intervenção neste projeto está limitado ao tempo de leitura do cromatógrafo, que é 24 minutos. Observando-se as curvas de resposta das saídas relacionadas ao DMC frente às mudanças das variáveis manipuladas em malha aberta (figuras 5.1, 5.2), o tempo de intervenção igual a 24 minutos, isto é, 0.4 horas é aceitável. Antes da aplicação da perturbação degrau nas vazões, foram ajustados os valores iniciais do sistema para o estado estacionário. Pormenorizando-se o degrau aplicado nas entradas, trata-se de um deslocamento instantâneo do valor nominal da vazão de 10% no instante 10 horas. O sinal de cada um dos degraus foi realizado de forma a incrementar as variáveis de saída analisadas ( $E_1$  e  $E_3$ ).



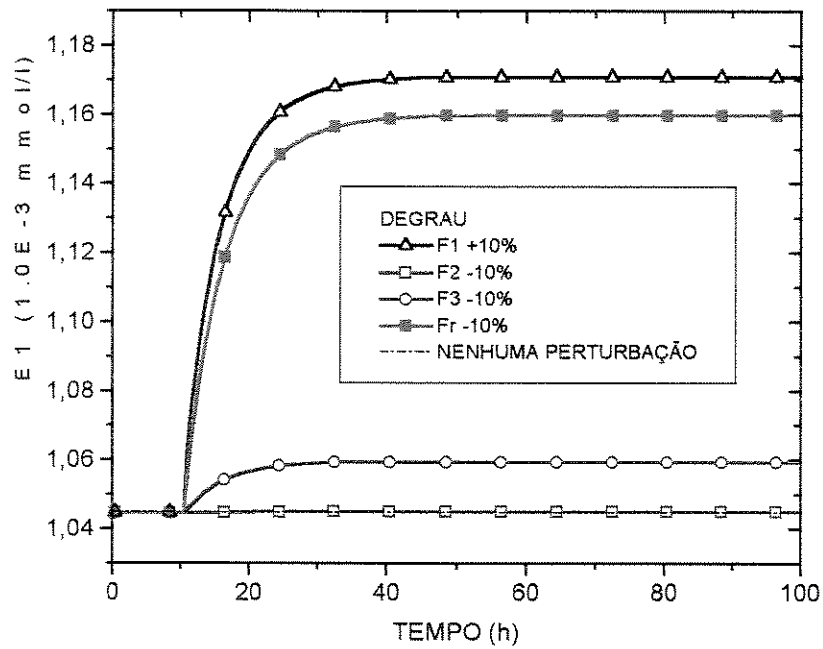


Figura 5.1 - Comportamento dinâmico da saída  $E_1$

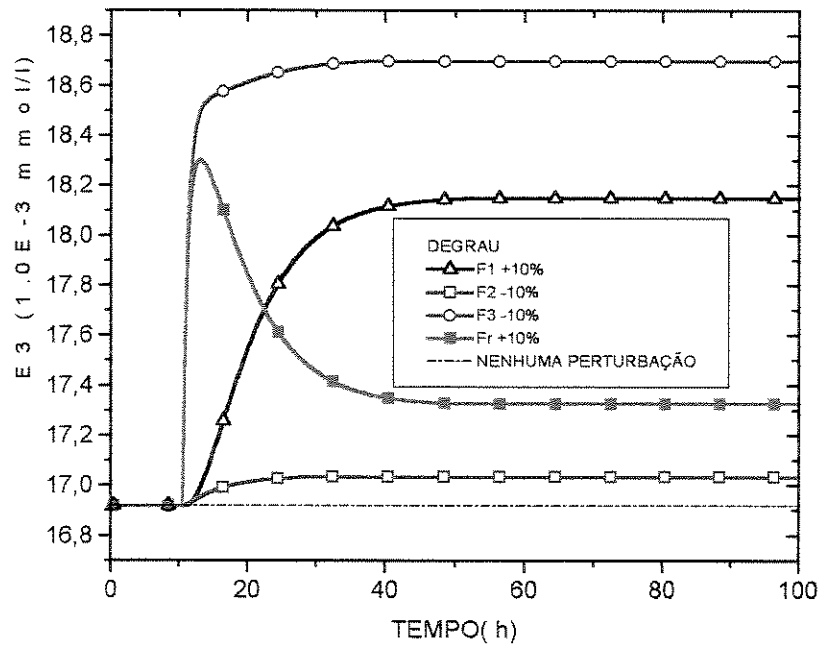


Figura 5.2 – Comportamento dinâmico da saída  $E_3$

### V.3 – A escolha da configuração de controle

Para a escolha da configuração de controle, é interessante observar alguns aspectos, entre os quais:

#### *V.3.1 – Os tempos de respostas das saídas frente às mudanças das entradas*

O tempo de resposta de cada uma das saídas frente às mudanças das entradas podem ser determinados pela observação dos comportamentos das saídas nas figuras 5.1 e 5.2. Cabe comentar duas características interessantes para o desenvolvimento do sistema de controle:

- i) curto tempo de resposta da saída  $E_3$  frente ao degrau em  $F_3$ ;
- ii) o processo apresenta uma dinâmica lenta;

#### *V.3.2 – A sensibilidade das saídas frente às mudanças das entradas em regime estacionário*

Aplicando-se uma perturbação degrau de 10% no instante 10 horas em uma dada entrada, define-se a sensibilidade de uma saída referente a essa entrada, como a porcentagem da variação do valor estacionário da saída em relação ao valor inicial da mesma. Desta forma, pode-se escrever:

$$\text{Sensibilidade de } E = S_E = 100 \cdot (E_{\text{DEPOIS}} - E_{\text{ANTES}}) / E_{\text{ANTES}}$$

$E_{\text{ANTES}}$  – valor estacionário da saída antes da aplicação da perturbação degrau

$E_{\text{DEPOIS}}$  – valor estacionário da saída após à aplicação da perturbação degrau

Neste estudo de análise dos valores na parte estacionária, interessa ao projetista quantificar a variação de cada saída proveniente da alteração do valor de cada uma das entradas. Alguns fatos são interessantes de serem observados da tabela 5.1:

- os valores de sensibilidade das saídas para perturbação em  $F_3$ . A variável de saída  $E_3$ , que é a variável controlada, é a mais sensibilizada frente a perturbação de  $F_3$ , enquanto as outras saídas são relativamente pouco modificadas. Por isso, esta malha de controle “SISO” pode ser admitida como desacoplada do sistema. Assim, foram implementados e comparados, nessa malha “SISO”, os controladores DMC e PID. Os resultados de simulação dessas implementações são apresentados na seção VI.4;
- A concentração de enzima da vazão de alimentação ( $E_0$ ) sensibiliza significativamente as saídas do processo. No processo, a mesma está sujeita a constantes mudanças provenientes do processo que antecede o “CARE”, assim sendo, a mesma apresenta-se como um significativo distúrbio;
- A vazão  $F_2$  sensibiliza significativamente somente o fator de purificação.;
- Não há diferenças significativas quanto ao sentido do degrau aplicado em torno do valor estacionário;

**Tabela 5.1** – Análise de sensibilidade das variáveis na parte estacionária

	$S_{E1}$ (%)	$S_{E2}$ (%)	$S_{E3}$ (%)	$S_{Q1}$ (%)	$S_{Q2}$ (%)	$S_{Q3}$ (%)	$S_{FP}$ (%)	$S_{Rend}$ (%)	$S_{Prod}$ (%)
F1+	12.1	11.0	7.3	7.6	7.3	7.3	6.8	-2.4	7.0
F1-	-11.9	-11.1	-7.9	-8.1	-7.9	-7.9	-7.5	2.4	8.5
F2+	-0.1	-1.2	-0.8	-0.1	-0.8	-0.8	8.2	-0.8	1.4
F2-	0.0	1.1	0.7	0.0	0.7	0.7	-8.9	0.8	0.0
F3+	-1.2	-1.1	-8.8	-0.8	-0.8	-0.8	1.0	0.4	0.0
F3-	1.4	1.3	10.5	0.9	0.8	0.8	0.7	-0.4	-1.4
FR+	-8.9	-8.2	2.4	-6.5	-5.7	3.7	-13.4	2.4	1.4
FR-	11.0	9.6	-3.1	7.5	6.3	-4.3	16.5	-2.4	-2.8
E0+	14.6	13.3	8.7	9.1	8.7	8.7	-1.4	-1.2	8.5
E0-	-13.6	-12.7	-9.1	-9.3	-9.0	-9.0	1.0	1.0	9.9

### V.3.3 - A Linearidade entre as variáveis de saída e entrada

O algoritmo DMC convencional é adequado a sistemas aproximadamente lineares. Para o caso de uma configuração multivariável, que é o caso do processo “CARE”, é importante que permaneça, pelo menos de forma aproximada, uma relação linear entre as variáveis, para que os princípios de fator de escala e superposição possam ser válidos na estrutura matemática do algoritmo. Procurando certificar-se desta condição, a seguir são apresentados os testes de linearidade das variáveis envolvidas no controle.

Em um dado sistema, a linearidade de uma variável de saída  $E$ , considerando as entradas  $F_1$  e  $F_2$ , é assegurada através da validação dos seguintes princípios:

- i) Princípio da superposição: quaisquer que sejam as entradas  $F_1$  e  $F_2$

$$E(F_1 + F_2) = E(F_1) + E(F_2)$$

- ii) Princípio do fator de escala: quaisquer que sejam  $k \in \mathbf{R}$  e a variável de entrada  $F_1$

$$E(k F_1) = k.E(F_1)$$

Os testes, para os princípios de superposição e fator de escala, das variáveis de saída  $E_1$  e  $E_3$  e entrada  $F_1$ ,  $F_3$  e  $F_r$  foram realizados de forma incremental sobre o valor estacionário.

- a) Validação da linearidade do sistema para as entradas  $F_1$  e  $F_3$

OBS:  $E^*$ : valor estacionário

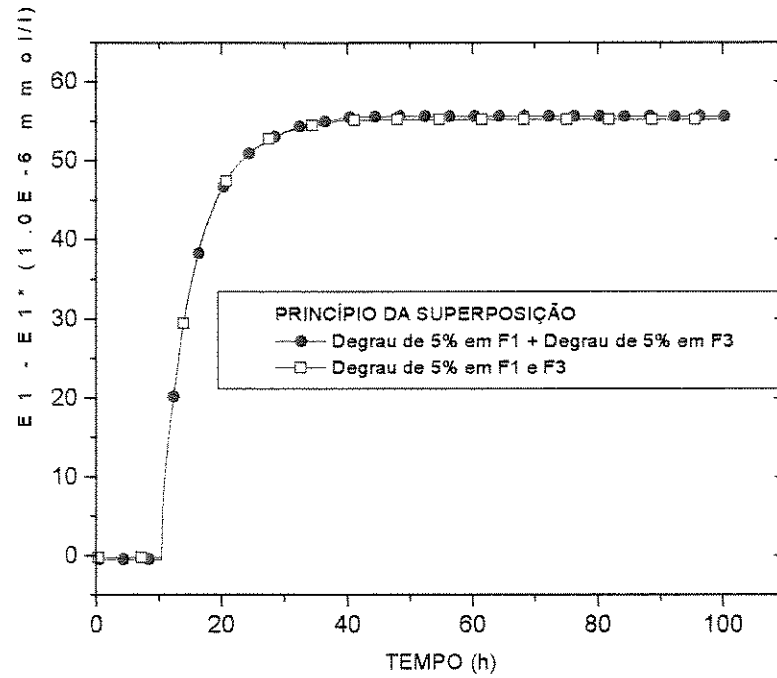


Figura 5.3 – Teste do princípio da superposição de  $E_1$  para as entradas  $F_1$  e  $F_3$

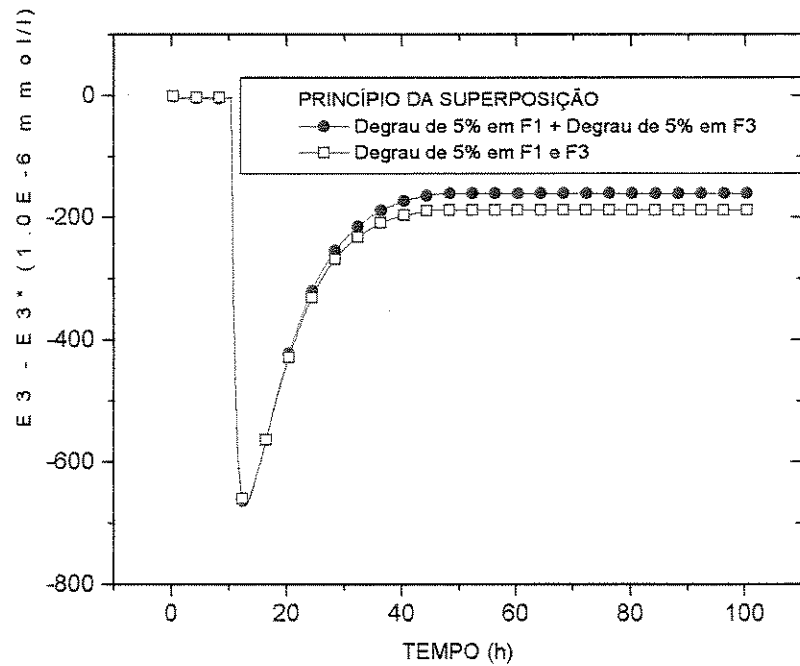


Figura 5.4 – Teste do princípio da superposição de  $E_3$  para as entradas  $F_1$  e  $F_3$

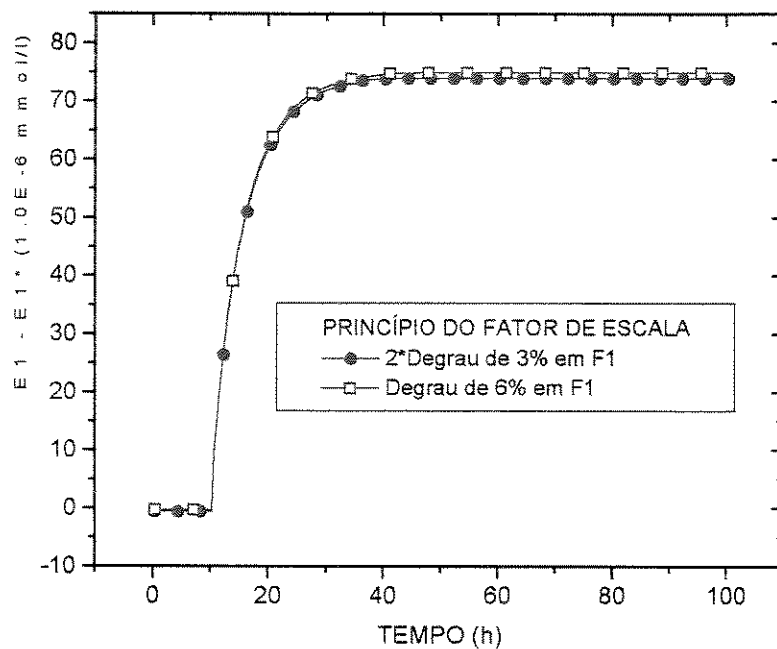


Figura 5.5 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_1$  com relação a  $F_1$

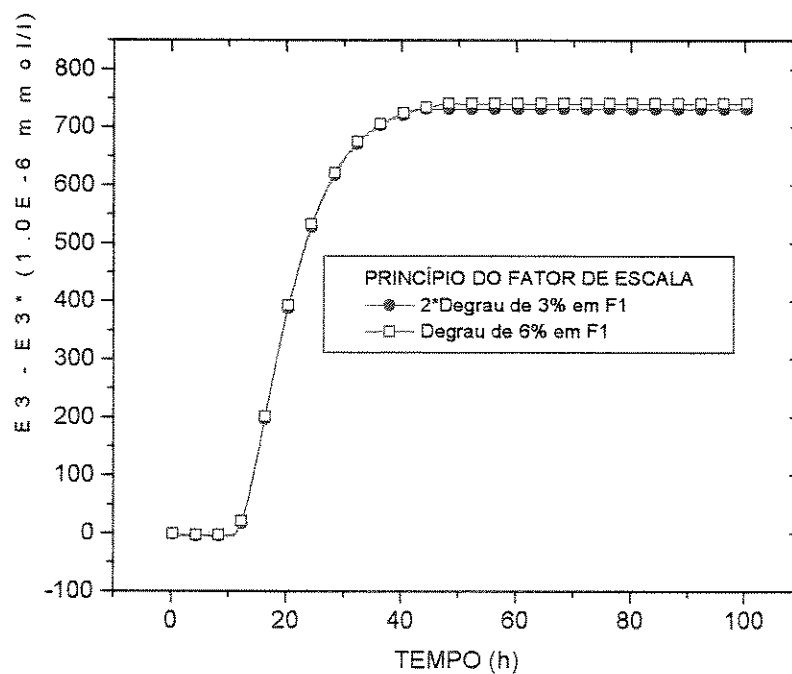


Figura 5.6 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_3$  com relação a  $F_1$

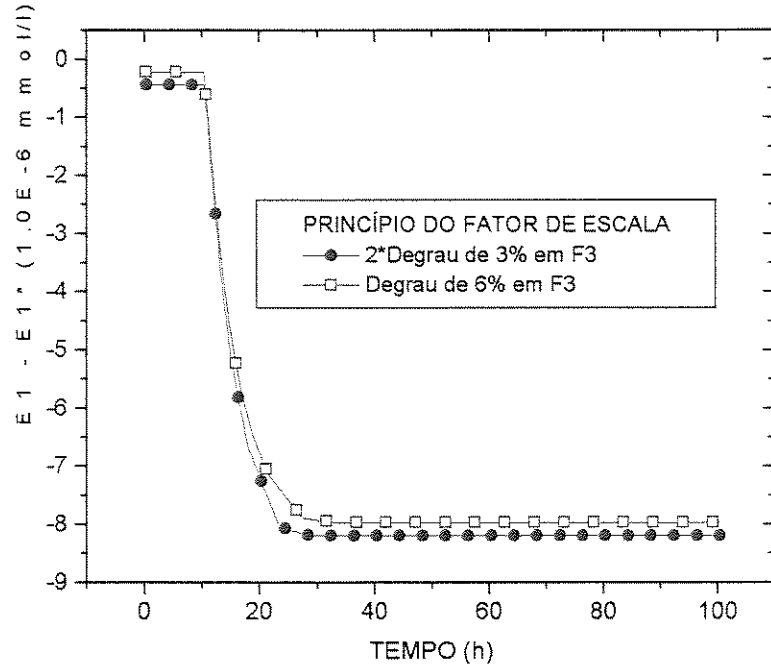


Figura 5.7 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_1$  com relação a  $F_3$

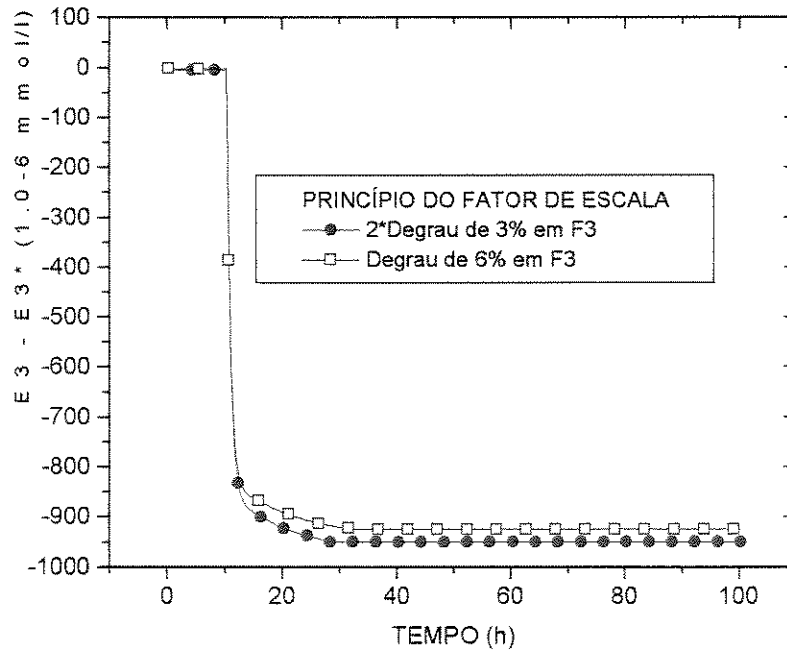


Figura 5.8 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_3$  com relação a  $F_3$

b) Validação da linearidade do sistema para as entradas  $F_r$  e  $F_3$

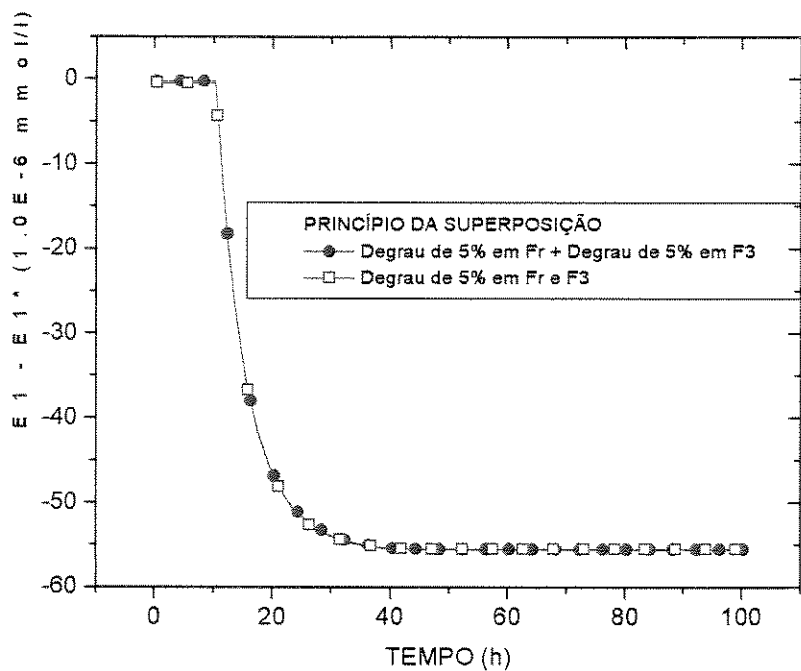


Figura 5.9 – Teste do princípio da superposição de  $E_1$  para as entradas  $F_r$  e  $F_3$

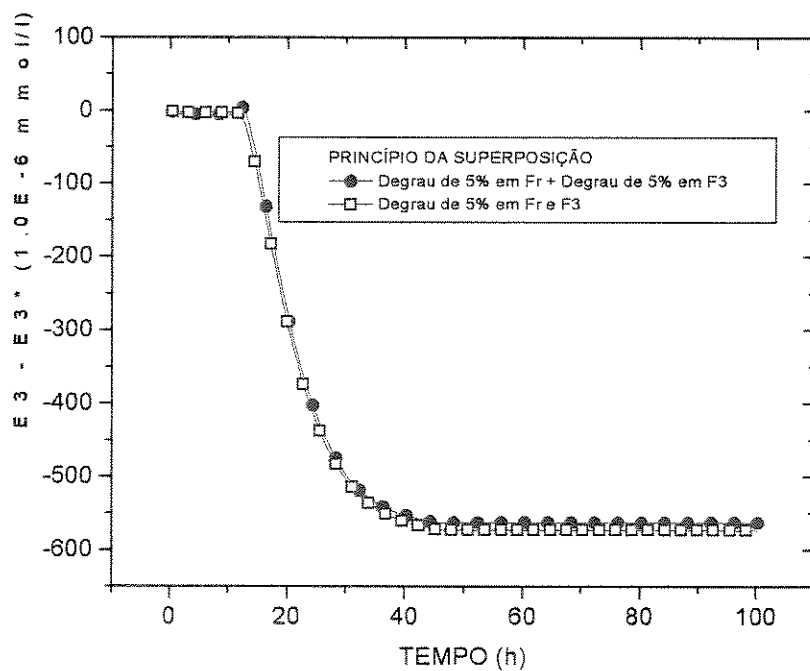


Figura 5.10 – Teste do princípio da superposição de  $E_3$  para as entradas  $F_r$  e  $F_3$



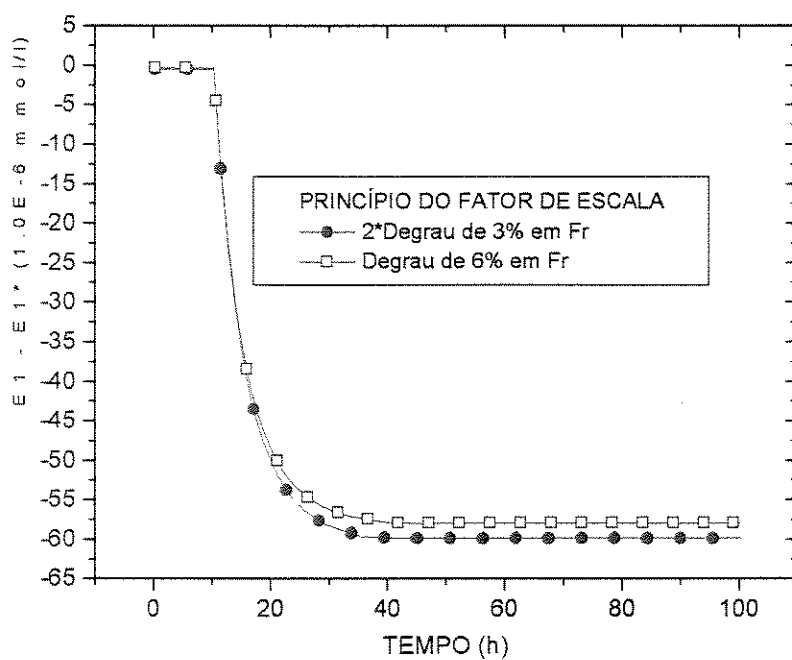


Figura 5.11 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_1$  com relação a  $F_r$

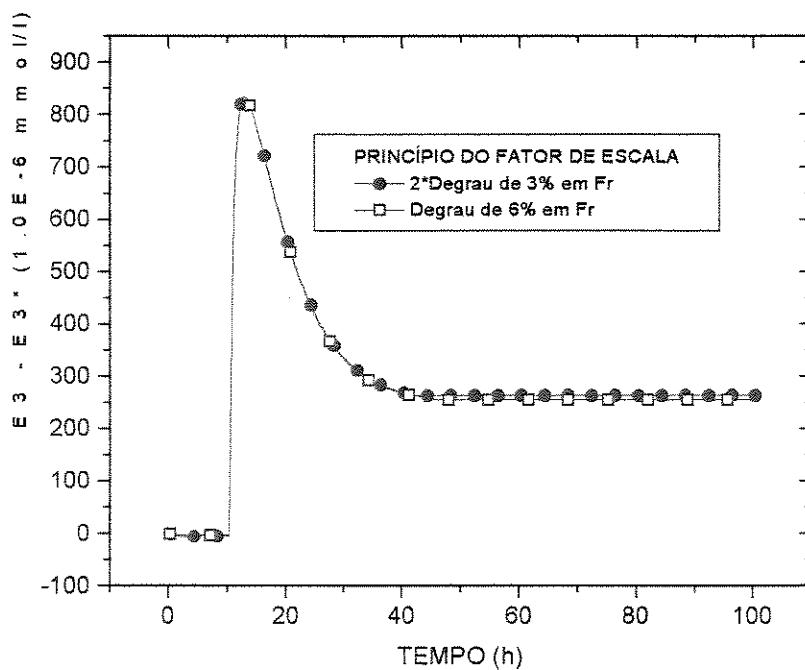


Figura 5.12 – Teste do princípio do fator de escala de  $E_3$  com relação a  $F_r$

Através da observação das figuras dos testes de linearidade (5.3 ... 5.12), para as variações consideradas, nota-se que o sistema é aproximadamente linear para as variáveis de saída  $E_1$  e  $E_3$  e entrada  $F_1$ ,  $F_3$  e  $F_r$ , possibilitando assim, de maneira mais adequada, a implementação do algoritmo de controle DMC multivariável.

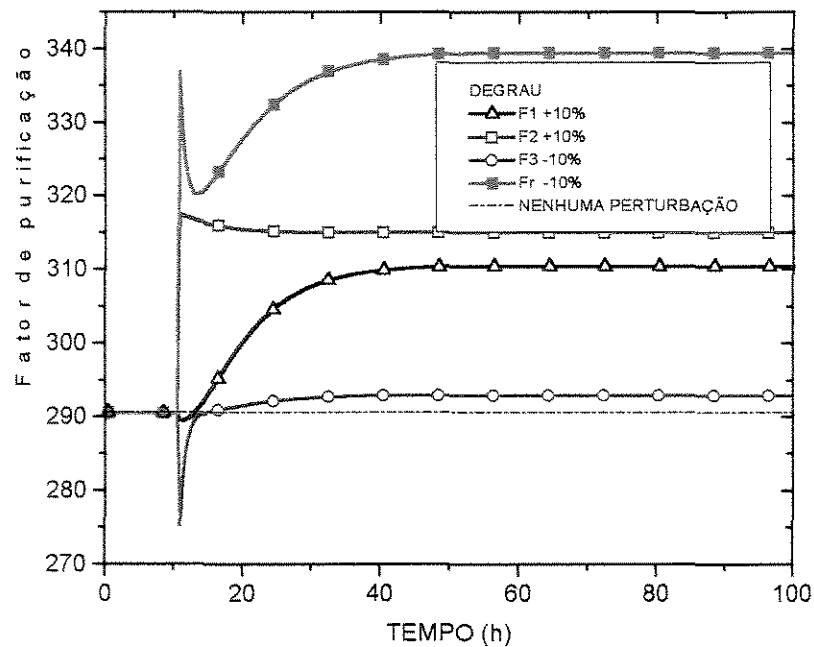
#### *V.3.4 - As variáveis manipuladas*

As variáveis possíveis de manipulação são as vazões de cada estágio e de reciclo ( $F_1$ ,  $F_2$ ,  $F_3$  e  $F_r$ ).

### **V.4 – Desenvolvimento da estratégia de controle**

#### *V.4.1 - O controle do fator de purificação*

O controle do fator de purificação (definido pela equação 3.38) se realiza através da manipulação da vazão do estágio de lavagem  $F_2$ , pela eliminação, em grande parte, dos contaminantes do processo. Nota-se na figura 5.13 que uma mudança na vazão  $F_2$  sensibiliza significativamente e instantaneamente o fator de purificação; porém numa relação fortemente não linear. Por isso aplica-se o controlador PID algoritmo de velocidade, em paralelo ao DMC multivariável. Já que  $F_2$  não produz efeito significativo nas saídas  $E_1$  e  $E_3$ , as mudanças de  $F_2$ , para o controle do fator de purificação, são admitidas como pequenos distúrbios para o controlador DMC multivariável.



**Figura 5.13** – Comportamento dinâmico da saída FP

#### *V.4.2 – As restrições das variáveis do sistema*

As restrições de algumas variáveis do sistema foram decisivas para escolha da estratégia de controle deste projeto. A vazão de fermentado ( $F_1$ ) está limitada à produção do processo de fermentação, assumido neste trabalho como sendo 420 ml/h. Outros limites estão relacionados às ações das variáveis manipuladas, que não devem ser bruscas, de difícil aplicação prática (ações de  $F_1$ ,  $F_r$  e  $F_3$  devem ser menores que 20, 2 e 5 ml/h respectivamente). Outro fato associado às limitações das ações de controle é a prevenção da linearidade do sistema. Vale lembrar que os testes de linearidade foram realizados para pequenas variações das entradas, que são as variáveis a manipular.

### V.4.3 – As configurações de controle utilizadas

São apresentadas, na tabela 5.2, as configurações de controle utilizadas no projeto de controle desta dissertação. A configuração S3 é do tipo SISO, ou seja, uma variável controlada está associada a uma manipulada. Ao passo que as outras configurações (M13 e Mr3) são do tipo MIMO, sendo duas variáveis controladas e duas manipuladas.

**Tabela 5.2** – Denominação das configurações de controle utilizadas

CONFIGURAÇÃO	TIPO	VARIÁVEIS CONTROLADAS	VARIÁVEIS MANIPULADAS
<u>S3</u>	SISO	$E_3$	$F_3$
<u>M13</u>	MIMO	$E_1$ e $E_3$	$F_1$ e $F_3$
<u>Mr3</u>	MIMO	$E_1$ e $E_3$	$F_r$ e $F_3$

#### V.4.4 - A estratégia empregada para o tratamento da restrição de $F_1$

Para tratar a restrição em  $F_1$ , o controlador DMC multivariável desenvolvido utiliza as configurações M13 e Mr3. O sistema de controle inicia com a configuração M13, manipulando as vazões  $F_1$  e  $F_3$ . Quando  $F_1$  atinge o limite máximo (420 ml/h), o sistema passa a operar na configuração Mr3, manipulando  $F_2$  e  $F_3$  e fixando a vazão  $F_1$  no limite máximo. A manipulação de  $F_2$  é indispensável, pois caso contrário haveria o problema da falta de graus de liberdade para o controle. O número de variáveis de entrada precisa ser igual ao de variáveis de saída, ou surgem nas saídas do sistema erros estacionários (*off-sets*); além do que, a fraca influência da vazão  $F_3$  sobre a saída  $E_1$  torna praticamente impossível o controle de  $E_1$  utilizando somente a vazão  $F_3$ .

#### V.4.5 – O mecanismo de retorno da configuração Mr3 para M13

Assim que o sistema, na configuração Mr3, estabiliza-se, ocorre o retorno para a configuração M13. Esta condição de retorno é equacionada por meio do balanço de massa da enzima na fase líquida para o processo em regime estacionário:

**Quantidade de enzima na entrada = Soma das quantidades de enzima nas saídas**

$$F_1 E_0 = F_1 E_1 + F_2 E_2 + F_3 E_3$$

Dessa forma, assim que  $F_1$  se torna aproximadamente (neste projeto, considera-se um erro de  $10^{-1}$  ml) igual a:

$$\frac{F_1 E_1 + F_2 E_2 + F_3 E_3}{E_0}$$

o sistema retorna à configuração  $M13$  e a vazão  $F_r$  é fixada no valor que levou o sistema à nova condição de operação estacionária.

#### *V.4.6 - O tratamento das restrições das ações*

Os fatores de supressão foram ajustados inicialmente em valores mínimos, a fim de propiciar maior liberdade de ação das variáveis manipuladas, ocorrendo um reajuste em linha para limitar os valores das ações das variáveis manipuladas. Esse reajuste é implementado através do seguinte algoritmo:

- i) Cálculo das ações das variáveis manipuladas;
- ii) Se alguma ação é maior que o respectivo limite máximo, o fator de supressão referente é incrementado de 20% e retorna para o passo i;
- iii) As ações são aplicadas nas respectivas variáveis manipuladas;
- iv) Reinicializa o(s) fator(es) de supressão alterado(s);

#### *V.4.7 – A metodologia empregada para o projeto presente*

Etapa A: Implementação do controlador DMC para a malha  $S3$ , utilizando-se da teoria de controle descrita na seção IV.1;

Etapa B: Extensão do controlador DMC da malha  $S3$  (DMC SISO) para as configurações  $M13$  e  $Mr3$  (DMC MIMO), utilizando-se da teoria de controle apresentada na seção IV.2;

Etapa C: Desenvolvimento do controlador DMC, que trata a restrição do limite máximo da vazão  $F_1$  através do chaveamento de configurações;

Etapa D: Reajuste dos fatores de supressão em linha para o tratamento das restrições das ações de controle;

Etapa E: Desenvolvimento e implementação do mecanismo de retorno do controlador DMC da configuração *Mr3* para a *M13*;

## **V.5 – A sintonia dos parâmetros do controlador**

A sintonia dos parâmetros de qualquer controlador visa fornecer um desempenho eficiente a todas as possíveis mudanças do sistema. Por exemplo: um sistema de controle, para uma sintonia, pode apresentar um desempenho excelente para manter a variável de saída no valor desejado quando submetido a distúrbios e ao mesmo tempo apresentar comportamento inaceitável para mudança de valor desejado. Assim sendo, a sintonia dos controladores deste projeto foi feita pelo método de tentativa e erro, procurando considerar todas as possibilidades de mudança.

### *V.5.1 – O controlador DMC multivariável*

Nesta parte, apresentam-se os parâmetros do controlador DMC e comentários com relação à sintonia dos mesmos.

#### 1) Horizonte de modelo (ns)

Está associado ao tempo de estabilização e ao período de amostragem considerado. No algoritmo do DMC MIMO, o período de amostragem é o mesmo para todas as variáveis. Normalmente, o valor do horizonte de modelo está entre 30 e 100;

#### 2) Horizonte de predição (nr)

Quanto maior o valor do mesmo, mais estáveis são as respostas do sistema. Normalmente, ajusta-se como a metade de ns.

### 3) Horizonte de controle (nl)

Deve ser ajustado para que o sistema seja estável e robusto; normalmente, utiliza-se nl pequeno para reduzir o esforço computacional.

A sintonia destes três parâmetros (ns, nr e nl) foi realizada pelos seguintes passos:

- i) inicialmente, ajustou-se cada um dos parâmetros ao maior valor possível;
- ii) gradativamente, os parâmetros foram reduzidos até valores mínimos que propiciassem um desempenho desejado do controlador, para assim, reduzir o esforço computacional do sistema;

Seguindo essa metodologia, os horizontes de modelo (ns), predição (nr) e controle (nl), para as configurações M13 e Mr3, foram ajustados em 40, 20 e 4 respectivamente. E para a malha S3, os respectivos parâmetros foram ajustados para 30, 20 e 2.

### 4) Fatores de supressão

Através deste parâmetro é possível ajustar as ações das variáveis manipuladas do controlador. Sabe-se que à medida que se aumenta o valor do mesmo, as ações se tornam menores, ou seja, mais amortecidas. Dessa forma, consegue-se evitar ações bruscas que são indesejáveis e, muitas vezes, impossíveis de serem realizadas fisicamente. O ajuste deve fornecer uma resposta desejada por meio de requisições de ações coerentes em termos práticos. Os fatores de supressão



referentes às variáveis manipuladas  $F_1$ ,  $F_3$  e  $F_r$ , para as duas configurações, MI3 e Mr3, foram ajustados nos seguintes valores respectivamente:  $1.0 \cdot 10^{-5}$ ,  $1.0 \cdot 10^{-4}$  e  $1.0 \cdot 10^{-5}$ . Esses ajustes iniciais foram efetuados em valores mínimos que propiciassem maior liberdade de ação às variáveis manipuladas;

### 5) Fatores de ponderação

Através dos fatores de ponderação, é possível priorizar uma saída em relação à outra. Nas figuras 5.14 e 5.15, observa-se que à medida que se prioriza a saída  $E_1$  em relação à  $E_3$ , o desvio do valor desejado da saída  $E_1$  é menor, para o controlador DMC operando na configuração MI3; sendo que a saída  $E_3$ , neste caso, não é prejudicada. Observa-se que a mudança do fator P1 de 2 para 4 não melhorou significativamente o desempenho da saída  $E_1$ . Assim sendo, ajustam-se os fatores de ponderação P1 e P3 iguais a 2 e 1, respectivamente. O ajustes P1 e P3 do controlador DMC para a configuração Mr3 são os mesmos, pois comportamentos semelhantes são observados.

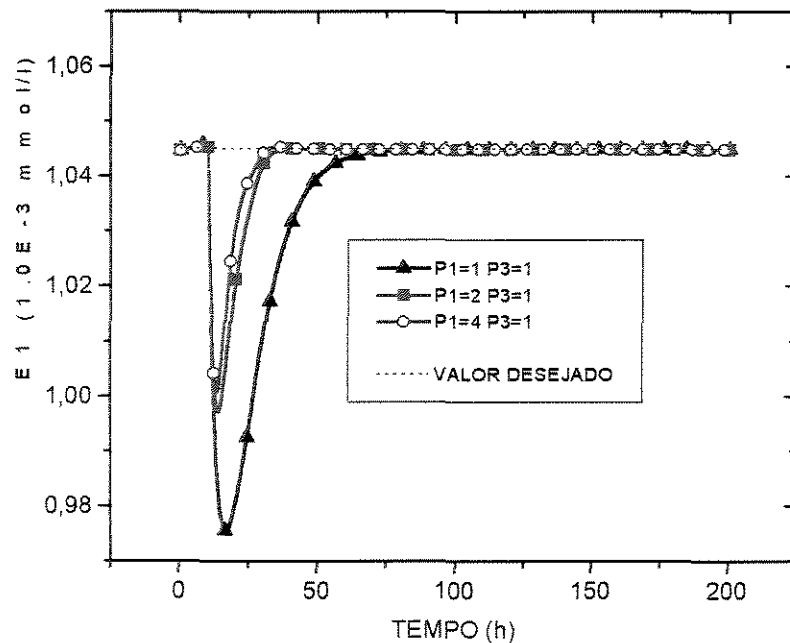
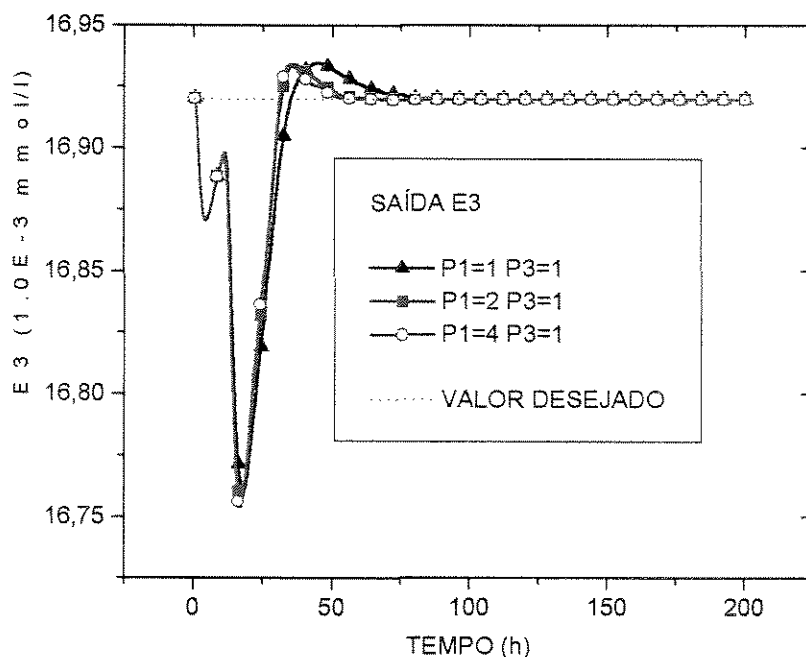


Figura 5.14 – Ajuste dos fatores de ponderação – saída  $E_1$



**Figura 5.15** – Ajuste dos fatores de ponderação – saída  $E_3$

### *V.5.2 – O controlador PID – algoritmo de velocidade*

O controlador PID é aplicado para o controle da malha  $S_3$  e do fator de purificação. Os parâmetros relacionados ao mesmo são:

- a) constante de proporcionalidade ( $K_c$ )
- b) constante de integração ( $\tau_I$ ):
- c) constante de derivação ( $\tau_D$ ):

A constante de proporcionalidade está associada ao ganho da malha de controle. As constantes de integração e derivação tratam a resposta no estado estacionário e dinâmico respectivamente.

O método de tentativa e erro foi utilizado para a sintonia dos parâmetros do controlador PID. É interessante relatar que ao se fixar os parâmetros do PID a partir de certos valores, ocorrem problemas de cálculo computacional (*overflow*). Assim sendo, a sintonia deve evitar isso, bem como fornecer uma resposta aceitável para o controle regulatório do fator de purificação. Diversas simulações foram realizadas para a sintonia do controlador para as respectivas malhas de controle:

**Tabela 5.3 – Sintonia do controlador PID do fator de purificação**

PID	$K_c$	$\tau_I$	$\tau_D$
Controle do fator de purificação	0.1	0.05	0.02

**Tabela 5.4 – Sintonia do controlador PID da malha S3**

PID	$K_c$	$\tau_I$	$\tau_D$
<b>Malha S3</b>	-1000	0.1	2

## V.6 – Conclusões

Foram apresentados, neste capítulo, os passos e as metodologias utilizadas para a implementação do sistema de controle DMC para o processo “CARE”. Inicialmente são escolhidas as variáveis controladas ( $E_1$ ,  $E_3$  e fator de purificação) e as possíveis manipuladas (vazões  $F_1$ ,  $F_2$ ,  $F_3$  e  $F_r$ ). Sendo o sistema multivariável, a aplicação do controlador DMC torna-se motivante. Para a implementação do sistema de controle são realizadas uma série de simulações, procurando conhecer o comportamento dinâmico das saídas frente às mudanças das entradas. As características de comportamento observadas são os tempos de resposta, as sensibilidades das saídas frente às mudanças das entradas e a linearidade entre as variáveis relacionadas ao controlador DMC multivariável. O controle do fator de purificação é realizado, de forma independente do DMC, através do controlador PID, pela manipulação da vazão do estágio de lavagem ( $F_2$ ). As outras variáveis,

---

controladas ( $E_1$  e  $E_3$ ) e manipuladas ( $F_1$ ,  $F_3$  e  $F_r$ ), são tratadas pelo controlador DMC multivariável. As restrições relacionadas às ações de controle são tratadas pelo reajuste em linha do fator de supressão. O limite da vazão  $F_1$  é determinante para o emprego da estratégia de mudança da configuração MI3 para Mr3. O mecanismo de retorno para a configuração MI3 é baseado na condição de estabilização do sistema. Os controladores são sintonizados utilizando-se da técnica de tentativa e erro. A figura 5.16 apresenta de forma esquemática a estratégia de controle proposta neste trabalho.

Baseando-se em todos os estudos realizados em cada etapa de projeto, pode-se concluir que controlador DMCM3 desenvolvido apresenta os requisitos necessários para o controle das variáveis do processo “CARE” e tratamento das restrições. Juntamente ao DMC, de forma independente, ocorre o controle do fator de purificação pelo controlador PID. As estratégias empregadas garantem o controle do sistema continuamente.

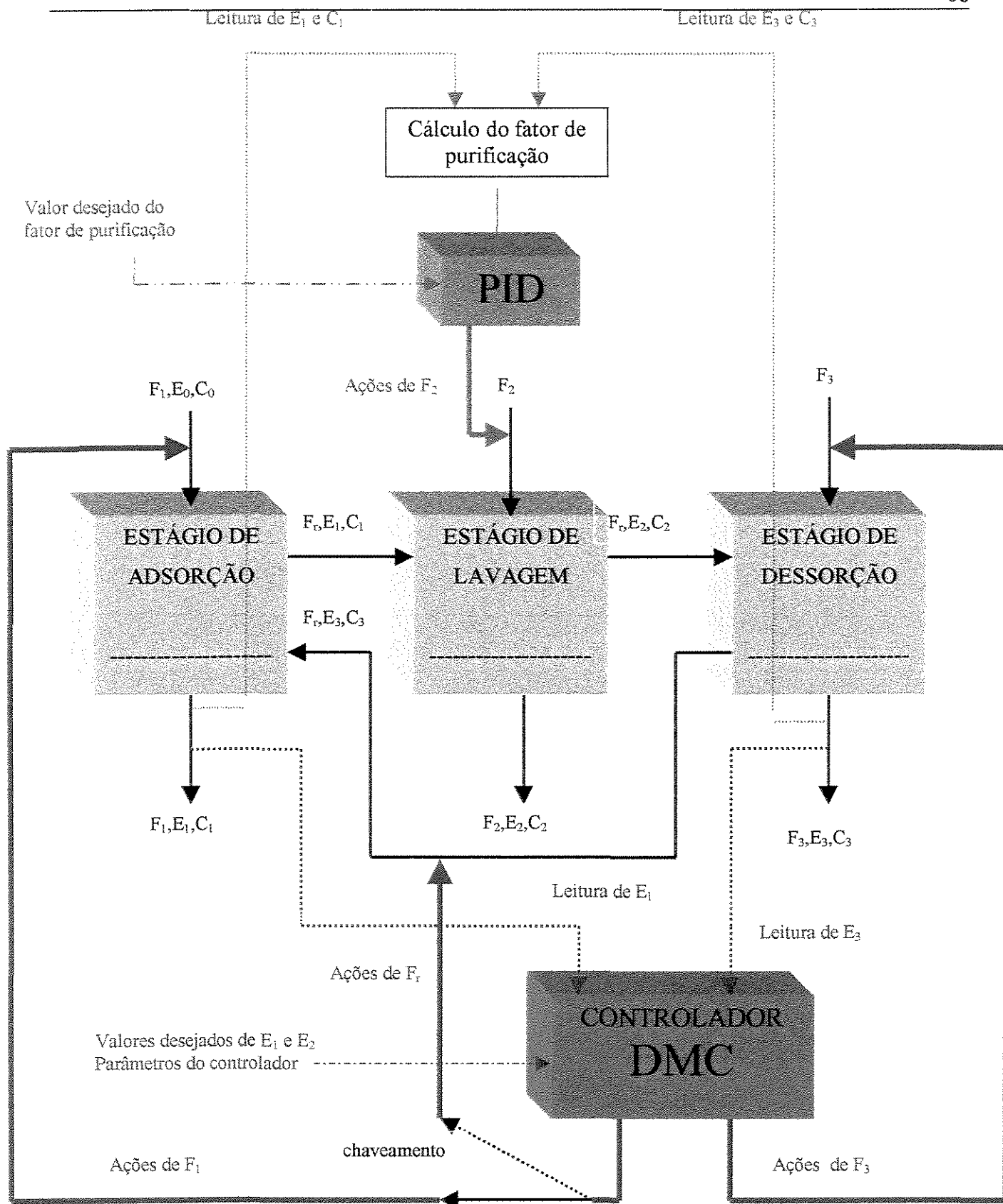


Figura 5.16 – Processo “CARE” com os controladores DMC e PID

## CAPÍTULO VI

### RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DO SISTEMA

#### VI.1 - Introdução

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos em cada uma das etapas de desenvolvimento do sistema de controle no processo “CARE”, em forma de tabelas e gráficos, e comentários procurando interpretar os principais significados físicos relacionados. No item VI.2 são apresentadas as possíveis mudanças a que o sistema possa estar submetido para avaliar o desempenho do sistema de controle no processo. No item VI.3 são apresentados os índices de desempenho utilizados. No item VI.4 são mostrados os resultados obtidos na etapa de implementação do sistema de controle para configuração  $S_3$ . No item VI.5 estão os resultados do desempenho do controlador DMC multivariável, para as diferentes configurações, quando o mesmo é submetido às possíveis mudanças. No item VI.6 são feitas algumas análises do comportamento da produtividade e do rendimento, para o sistema em malha aberta, frente às mudanças das vazões  $F_1$ ,  $F_3$  e  $F_r$ . Por fim, estão os resultados da implementação do controlador PID para o fator de purificação.

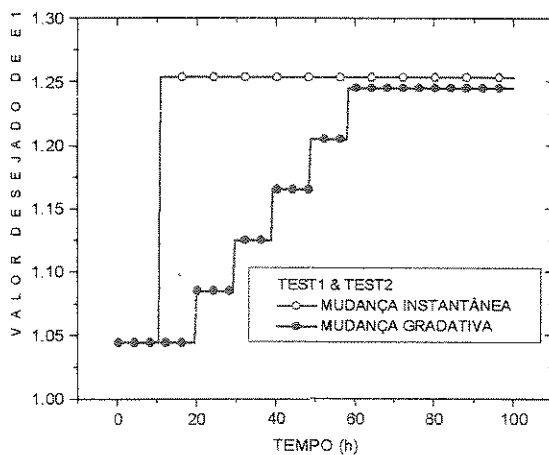
#### VI.2 – Possíveis mudanças do sistema

Neste item são apresentadas as possíveis mudanças a que o sistema normalmente deve estar submetido para a avaliação do desempenho do sistema de controle. Primeiramente, com relação às mudanças de valores desejados, e depois para uma série de distúrbios. É desejável que o sistema em malha fechada seja insensível a essas mudanças e mantenha as variáveis controladas em seus valores desejados. Neste trabalho, consideram-se quatro tipos de mudanças:

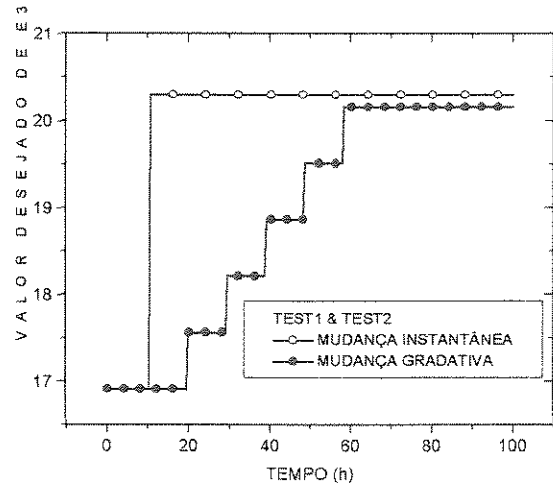
- 1) Mudanças dos valores desejados
  - 2) Distúrbios na concentração de enzima da vazão de alimentação  $F_1$
  - 3) Variações dos parâmetros cinéticos do modelo
  - 4) Presença de ruído branco nas variáveis de leitura na execução do controle
- Apresentam-se a seguir os testes que procuram representar estas mudanças:

TEST1 – Os valores desejados são incrementados de 20% no instante 10 horas (figura 6.1)

TEST2 – Os valores desejados são incrementados gradativamente a cada 10 horas partindo-se do valor inicial estacionário até atingir aproximadamente 20% a mais ao valor inicial em um período de 50 horas (figura 6.1)



**A** – Saída  $E_1$  – TEST1 & TEST2



**B** – Saída  $E_3$  – TEST1 & TEST2

**Figura 6.1** – Tipos de mudança de valores desejados das variáveis de saída

---

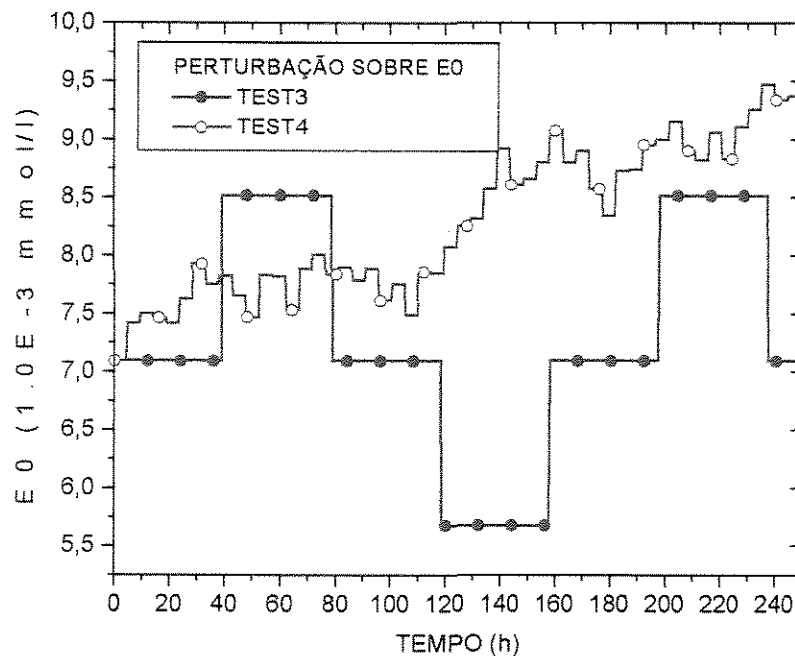
Normalmente, as mudanças de valores desejados são requisitadas quando há um nível hierárquico superior de otimização, que tem o objetivo de conduzir o sistema a uma condição de operação ótima.

Os dois testes a seguir tratam o desempenho do sistema de controle quando a concentração de enzima da alimentação ( $E_0$ ) está submetida a variações. Esse fato pode ser uma realidade industrial devido às possíveis falhas de desempenho dos controladores do processo que antecede o “CARE”.

TEST3 - A variável  $E_0$  é submetida a uma perturbação ondulatória, conforme representado na figura 6.2, de período igual a 160 horas e variação de 20%. O intervalo de tempo entre as mudanças é igual a 40 horas, tempo suficiente para o sistema retornar a uma nova condição de operação estacionária;

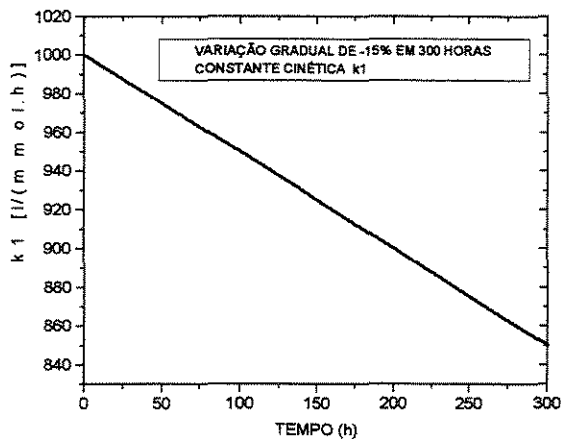
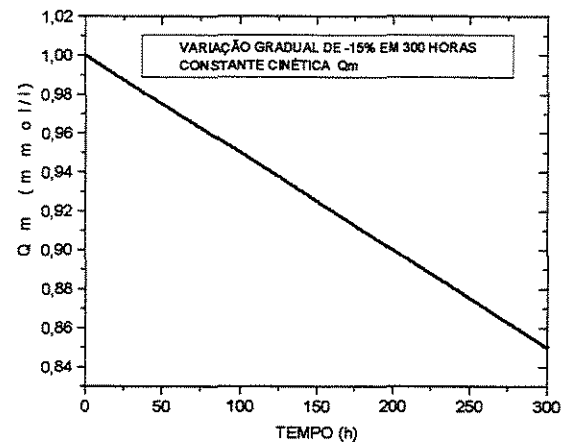
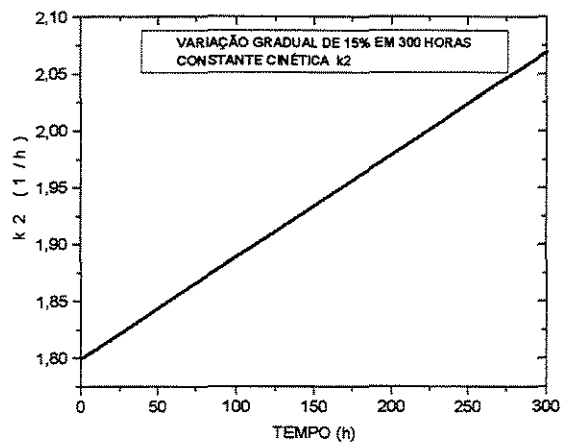
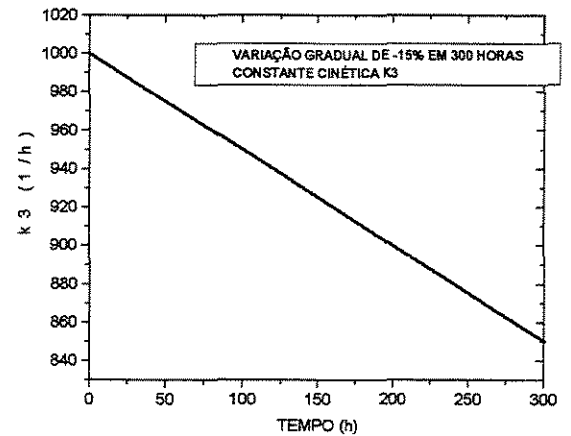
TEST4) A cada 5 horas ocorre um degrau de sentido e módulo aleatório, sendo a amplitude máxima igual a 5%, conforme na figura 6.2. Este teste avalia o comportamento do sistema de controle quando há constantes variações na concentração de enzima da vazão de alimentação.





**Figura 6.2** – Tipos de perturbações sobre a concentração de enzima inicial  $E_0$

TEST5) Este teste permite o estudo de análise do desempenho do sistema de controle quando os parâmetros do processo estão submetidos a uma mudança constante ao longo do tempo. É desejável que, apesar dessas mudanças, o controlador continue desempenhando a sua função de forma eficiente. Admite-se, neste estudo que as constantes  $k_1$ ,  $q_m$  e  $k_3$  tendem a diminuir 15% e  $k_2$  a aumentar 15% ao longo de um período de 300 horas de funcionamento do processo. Estas suposições de variações estão feitas de forma que ao longo da utilização do mesmo. Mais explicações estão na seção III.3. Por isso a perturbação nas mesmas é realizada conforme às figuras 6.3a, 6.3b, 6.3c e 6.3d.

A – Variação de -15% sobre  $k_1$ B – Variação de -15% sobre  $Q_m$ C – Variação de +15% sobre  $k_2$ D – Variação de -15% sobre  $k_3$ 

**Figura 6.3** – Perturbações sobre as constantes cinéticas do modelo do processo “CARE” em um período de 300 horas

TEST6) Ruído branco de amplitude máxima de 2% sobre as variáveis de leitura. Este teste procurar tratar uma realidade industrial, em que os dispositivos de leitura estão sujeitos a interferências de origem elétricas e eletromagnéticas que ocasionam ruídos adicionados ao valor medido. Por isso, é interessante comprovar

e observar o comportamento das variáveis do sistema de controle para este aspecto físico.

### VI.3 – Índices de desempenho

A seguir são apresentados alguns índices de desempenho utilizados para auxiliar na avaliação de desempenho dos controladores quando submetidos às possíveis mudanças.

ITAE (*Integral of the time-weighted absolute error*)

$$ITAE = \int_0^t Erro(t) \cdot t \cdot dt$$

O ITAE é um índice de desempenho que integra o produto do erro pelo instante de tempo, penalizando, dessa forma, os erros que persistem no tempo.

#### 1) Desvio máximo

$$DM = 100 * \frac{Desvio}{ValorEstacionário}$$

Informa qual porcentagem do valor extrapolado em relação ao valor desejado da saída. É interessante para garantir que o valor de uma saída esteja dentro de uma faixa desejada.

### VI.4 - Controlador DMC – Configuração S3

O sistema de controle DMC multivariável, que é implementado no caso de estudo deste trabalho, é uma extensão do DMC de malha simples. Por isso, inicialmente, foi implementado o controlador DMC para a malha simples S3. Os resultados do mesmo foram comparados com uma aplicação do tradicional

controlador PID. As sintonias dos mesmos foram feitas conforme as metodologias apresentadas na seção V.5. Nas tabelas 6.1 e 6.2, são apresentadas as sintonias efetuadas nos mesmos:

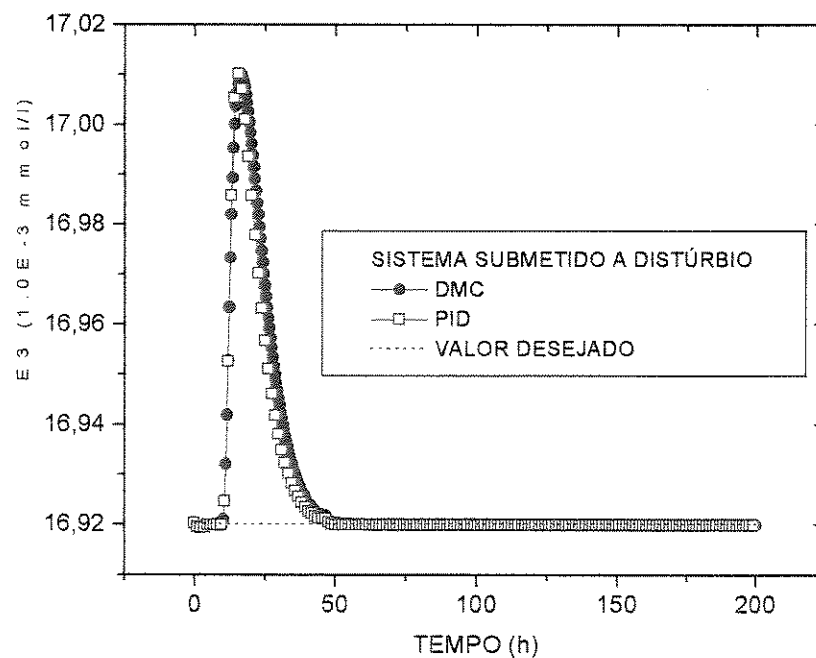
**Tabela 6.1** – Sintonia do controlador PID para a configuração S3

PID	$K_c$	$\tau_I$	$\tau_D$
Configuração <u>S3</u>	-1000	0.1	2

**Tabela 6.2** – Sintonia do controlador DMC para a configuração S3

DMC	$N_s$	$N_r$	NI	Fator
Configuração <u>S3</u>	40	20	4	1.0E-4

As figuras 6.4, 6.5 e 6.6 mostram os resultados obtidos na avaliação do desempenho do controlador DMC para a configuração S3. Para efeito de estudo comparativo, estão traçados os resultados da aplicação do controlador PID para a mesma configuração.



**Figura 6.4** – Perturbação degrau de 10 % em  $E_0$  no instante 10 h

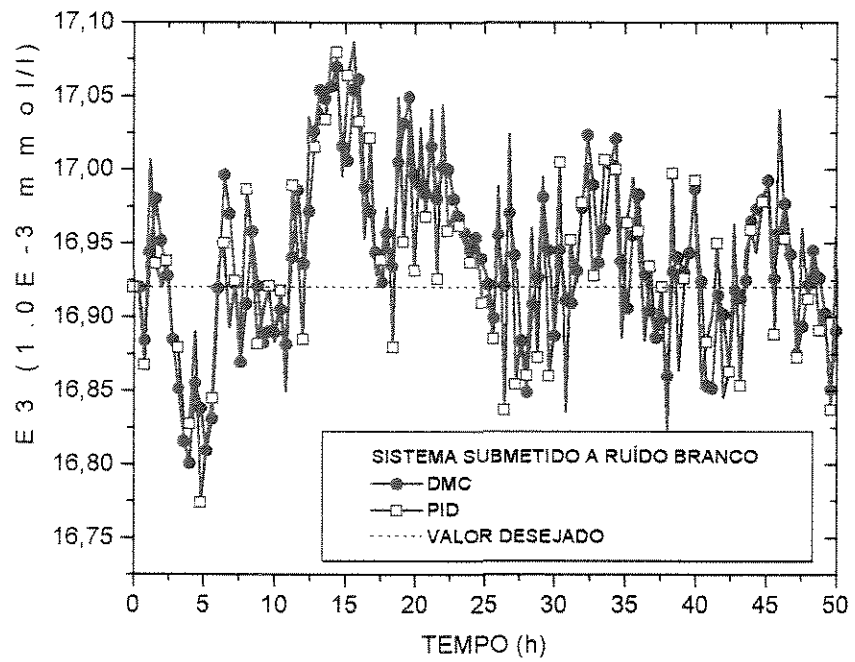


Figura 6.5 – Ruído branco de amplitude de 2% na variável de leitura

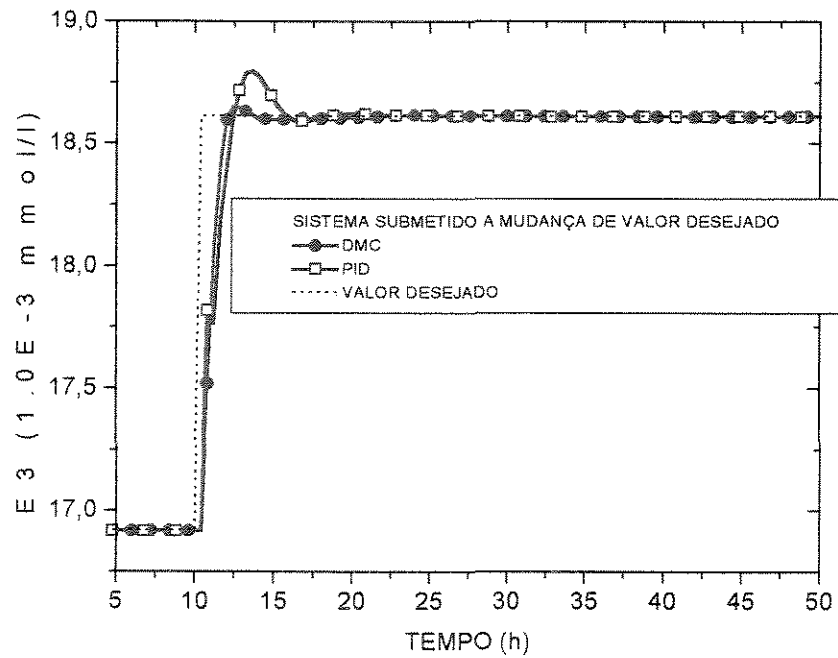


Figura 6.6 – Mudança do valor desejado de 10% no instante 10 h

Na figura 6.4, mostra-se o desempenho dos controladores quando a concentração de enzima da vazão de alimentação ( $E_0$ ) é perturbada de +10% no instante 10 horas. Na figura 6.5, observa-se o comportamento quando a variável controlada ( $E_3$ ) é submetida a um ruído branco de amplitude máxima de 2%, e por fim, na figura 6.6, quando se requisita mudança do valor desejado da variável controlada de 10% no instante 10 horas. O controlador DMC, assim como o PID, apresentaram desempenho satisfatório para estas considerações de mudanças.

### **VI.5 – Controlador DMC multivariável para as configurações M13 e Mr3**

O sistema de controle DMC multivariável acoplado ao processo “CARE” visa atender aos seguintes objetivos:

- 1) Ajustar as variáveis de saída para novos valores desejados requisitados de um nível hierárquico superior de otimização;
- 2) Manter as variáveis de saída em seus respectivos valores desejados independentemente dos possíveis distúrbios, das variações de parâmetros e dos ruídos provenientes dos aparelhos de leitura;
- 3) Assegurar o cumprimento dos limites físicos das variáveis do sistema, que são, neste projeto, os limites dos valores das ações e da vazão de alimentação ( $F_1$ );

Para isso, foram implementados e testados três controladores preditivos DMC, para as diferentes configurações (tabela 6.3). Os controladores DMCM1 e DMCM2 operam nas configurações M13 e Mr3 respectivamente e apresentam restrições nas ações das variáveis manipuladas. Cabe ressaltar que no controlador DMCM1, não há nenhuma restrição quanto ao valor da vazão  $F_1$ . O controlador DMCM3 apresenta a estratégia de mudança (chaveamento) da configuração M13 para Mr3 e mecanismo de retorno, como descrito na seção V.4, para o tratamento

da restrição da vazão  $F_1$ . A sintonia dos mesmos foi realizada utilizando a metodologia apresentada na seção V.5 e seus parâmetros foram ajustados conforme a tabela 6.4.

**Tabela 6.3** – Apresentação dos controladores DMC para as suas respectivas características

CONTROLADOR	CONFIGURAÇÃO	RESTRICÇÕES	CHAVEAMENTO
DMCM1	<u>M13</u>	Ações	NÃO
DMCM2	<u>Mr3</u>	Ações	NÃO
DMCM3	<u>M13 e Mr3</u>	Ações e $F_1$	SIM

**Tabela 6.4** – Sintonia dos controladores DMC para as configurações M13 e Mr3

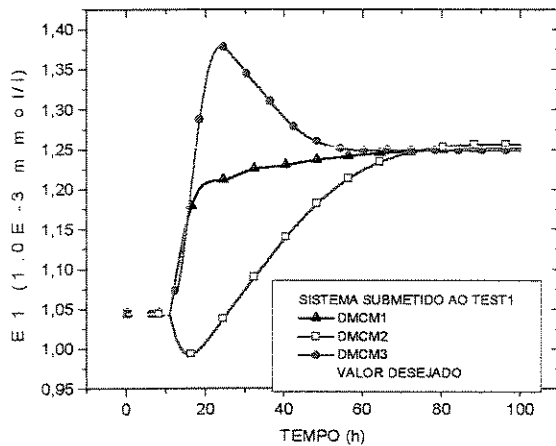
DMC	Ns	Nr	NI	FATOR( $F_1$ ou $F_r$ )	FATOR( $F_3$ )	P1	P3
<u>M13</u>	40	20	4	1.0E-5	1.0E-4	2	1
<u>Mr3</u>	40	20	4	1.0E-5	1.0E-4	2	1

#### *VI.5.1 – Restrições do sistema*

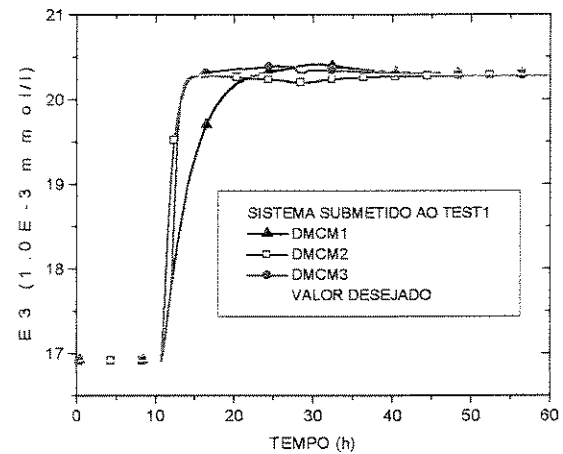
Como descrito no capítulo V, o processo “CARE” apresenta alguns limites que devem ser respeitados pelo sistema de controle. O primeiro desses limites é com relação a **vazão de alimentação ( $F_1$ )** que **não pode ser superior 420 ml/h**. As outras restrições estão relacionadas às ações das variáveis manipuladas, que previnem as vazões do processo de mudanças bruscas. Outro motivo dessas ações serem limitadas está associado em garantir a linearidade do sistema, pois os testes de linearidade foram feitos para pequenas variações (subseção V.3.3). Os **limites das ações das manipuladas  $F_1$ ,  $F_r$  e  $F_3$  são 20, 2 e 5 ml/h** respectivamente.

#### *VI.5.2 – Testes de mudança de valores desejados (TEST1 e TEST2)*

Nesta parte, procura-se mostrar o comportamento dinâmico de algumas variáveis quando se requisita mudanças dos valores desejados do sistema. Para aumentar o escopo do estudo de análise, as mudanças dos valores desejados são realizadas de duas formas, conforme os testes TEST1 e TEST2.

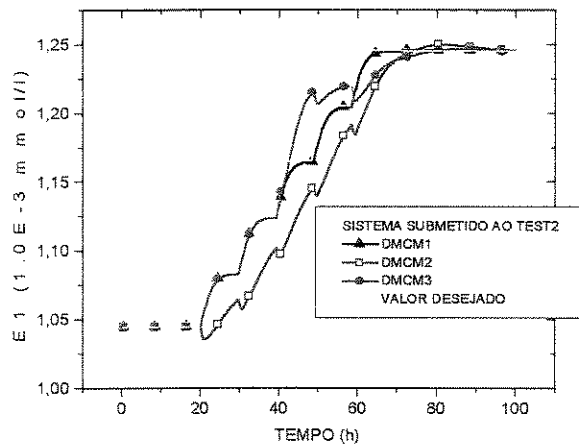


A – Comportamento dinâmico de  $E_1$

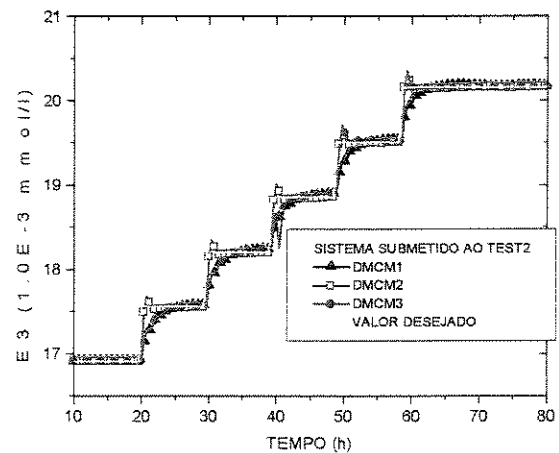


B – Comportamento dinâmico de  $E_3$

Figura 6.7 – Sistema submetido ao TEST1



A – Comportamento dinâmico de  $E_1$

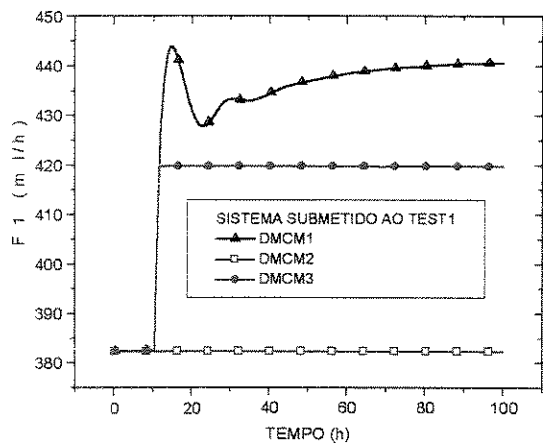


B – Comportamento dinâmico de  $E_3$

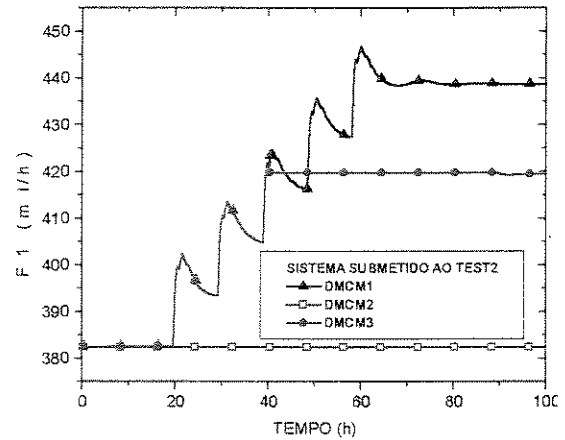
Figura 6.8 – Sistema submetido ao TEST2



Nota-se, nas figuras 6.7 e 6.8, que as variáveis controladas ( $E_1$  e  $E_3$ ) se modificam de maneira a seguir seus respectivos valores desejados para os dois tipos de mudanças. Devido à dinâmica lenta do sistema, existe um tempo de resposta razoável para cada mudança, principalmente com relação à saída  $E_1$ . É notável que, quando o controlador DMC opera na configuração *Mr3*, apresenta desempenho inferior para saída  $E_1$  e melhor para a saída  $E_3$ .

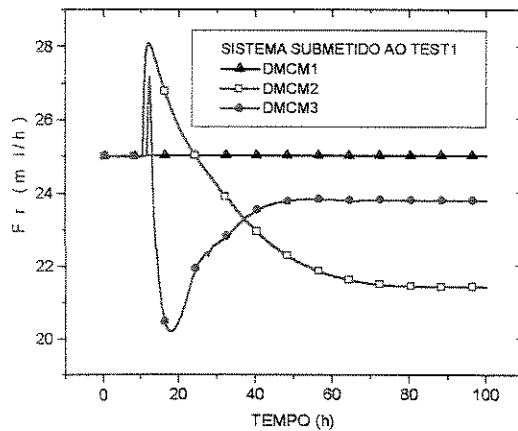


A – Sistema submetido ao TEST1

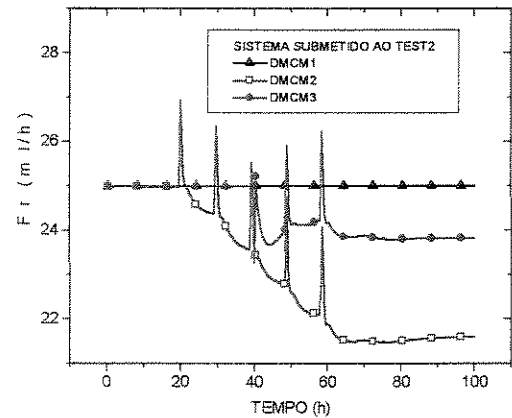


B – Sistema submetido ao TEST2

Figura 6.9 – Comportamento dinâmico da vazão  $F_1$



A – Sistema submetido ao TEST1



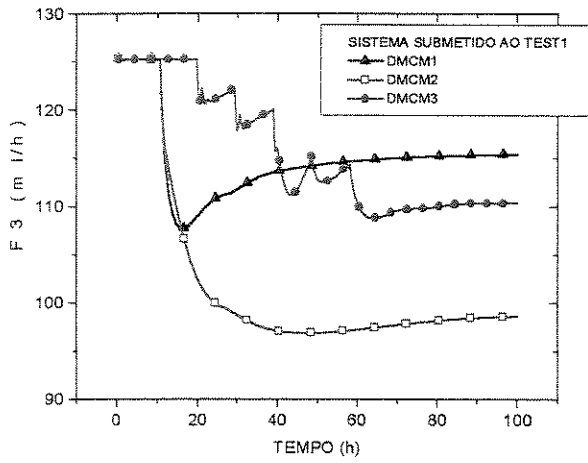
B – Sistema submetido ao TEST2

Figura 6.10 – Comportamento dinâmico da vazão  $F_r$

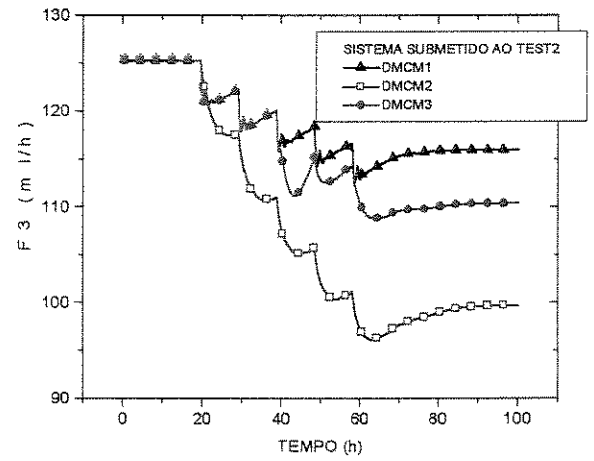
Tabela 6.5 – Uma parte dos dados da simulação relativa ao TEST1 do DMCM3

TEMPO (h)	$F_3$ (ml/h)	$F_r$ (ml/h)
8,8	382,7	25
9,2	382,7	25
9,6	382,7	25
10	382,7	25
10,4	382,7	25
10,8	397,9	25
11,2	412,6	25
11,6	420	25
12	420	27,0
12,4	420	27,2
12,8	420	25,7
13,2	420	24,4
13,6	420	23,4
14	420	22,7
14,4	420	22,1
14,8	420	21,6
15,2	420	21,2
15,6	420	20,9
16	420	20,7

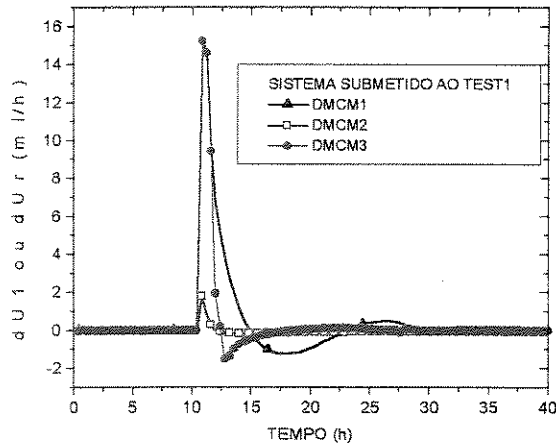
Pelas figuras 6.9 e 6.10 referentes às vazões  $F_1$  e  $F_r$ , percebe-se o chaveamento da configuração M13 para Mr3 no sistema. Para a determinação do exato instante em que ocorre essa mudança, são apresentados, em parte, os dados da simulação relativa ao TEST1 (para o DMCM3) na tabela 6.5, para as vazões  $F_1$  e  $F_r$  no tempo. O instante da mudança é 11.6 horas. Essa estratégia é interessante pois o valor necessário da vazão  $F_1$  para levar o sistema à nova condição de operação (aproximadamente 440 ml/h) é superior ao disponível (420 ml/h); e através da manipulação de  $F_r$  torna-se possível a levar o processo para a nova condição estacionária requisitada.



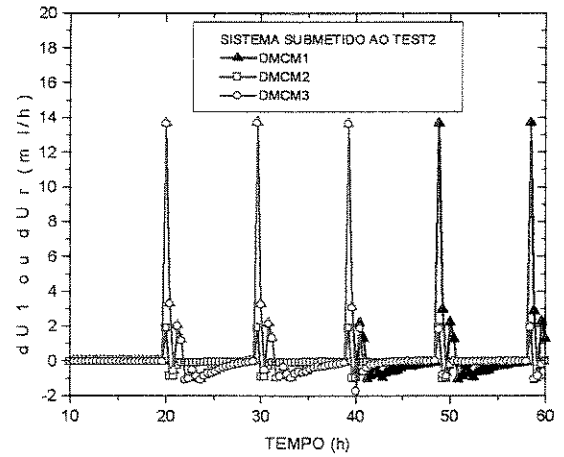
A – Sistema submetido ao TEST1



B – Sistema submetido ao TEST2

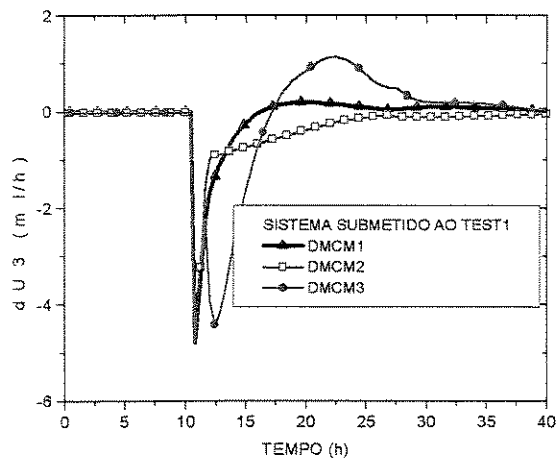
Figura 6.11 – Comportamento dinâmico da vazão  $F_3$ 

A – Sistema submetido ao TEST1

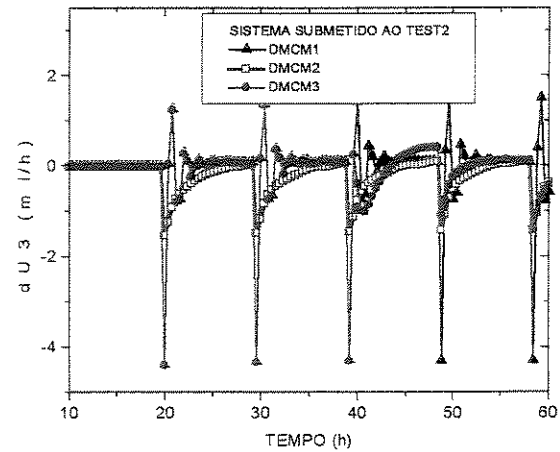


B – Sistema submetido ao TEST2

Figura 6.12 – Comportamento dinâmico das ações da vazão  $F_1$  ou  $F_r$



A – Sistema submetido ao TEST1



B – Sistema submetido ao TEST2

**Figura 6.13** –Comportamento dinâmico das ações da vazão  $F_3$ 

Na figura 6.12, antes do instante 11,6 horas, as ações são referentes à vazão  $F_1$  e, após o instante 11,6 horas, à vazão  $F_r$ . Nos gráficos (ver figuras 6.12 e 6.13) relativos às ações, é interessante notar que os limites de cada uma das ações são respeitados. Para melhor visualização de como o sistema de controle limita as ações das variáveis manipuladas, são apresentados a seguir gráficos (ver figura 6.14) das ações das variáveis manipuladas  $F_1$  e  $F_3$  do controlador DMCM1, quando submetido ao TEST1, com e sem restrição.

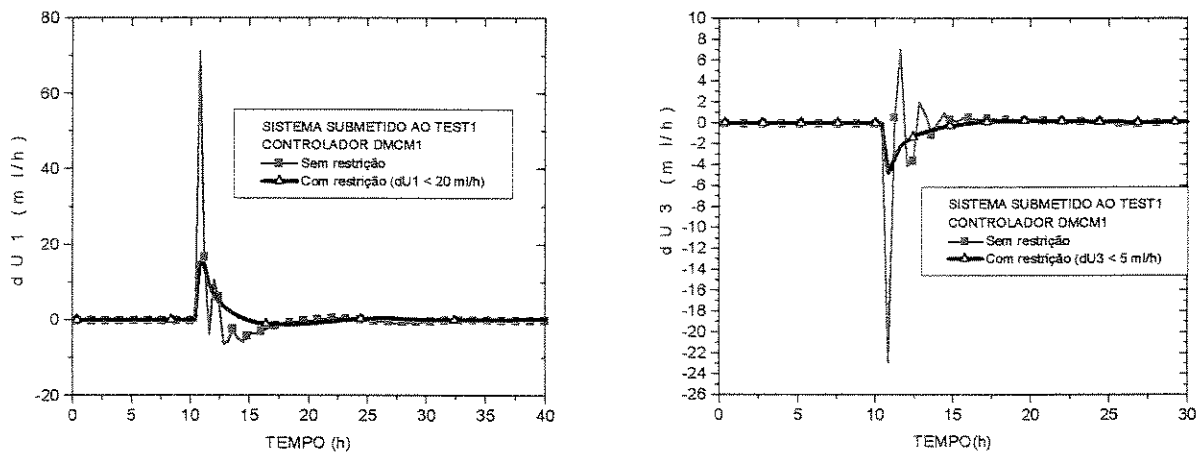
A – Ações da vazão  $F_1$ B – Ações da vazão  $F_3$ 

Figura 6.14 – Atuação do sistema de controle com relação aos limites das ações

Para o sistema sem restrições nas ações, nota-se, como se esperava, que os valores das mesmas ultrapassam os limites existentes.

### VI.5.3 – Testes de distúrbios na concentração de enzima da vazão de alimentação $F_1$ (TEST3 e TEST4)

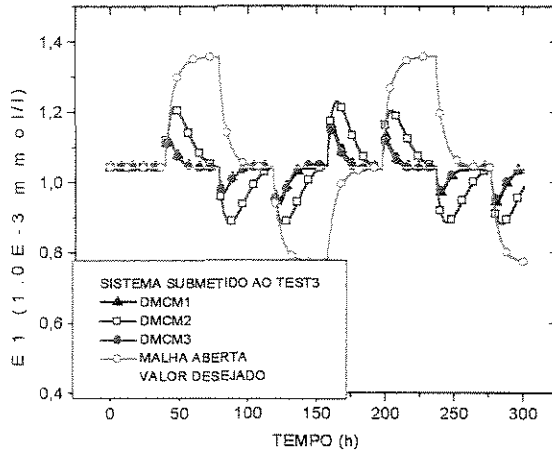
Estes testes estão relacionados a forma como o sistema responde aos distúrbios normalmente presentes na concentração de enzima da alimentação.

Na tabela 6.6 são apresentados, em parte, os dados da simulação quando o sistema está submetido ao TEST3. No instante 120.4 horas ocorre a mudança da configuração  $M13$  para  $Mr3$ . O sistema passa então a operar as variáveis manipuladas  $F_r$  e  $F_3$  até o instante 155.6 horas, quando o sistema, através do mecanismo retorno, volta a utilizar a configuração  $M13$ . Devido a outras perturbações, o sistema no instante 292.8 horas, novamente, muda para a configuração  $Mr3$ .

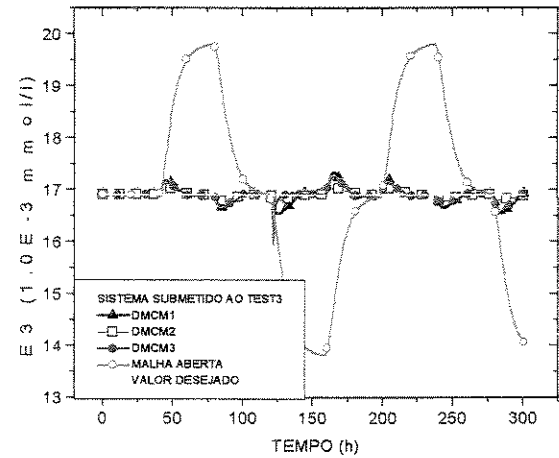
Tabela 6.6 – Uma parte dos dados da simulação relativa ao TEST3 do DMCM3

TEMPO (h)	F <sub>1</sub> (ml/h)	F <sub>r</sub> (ml/h)
118,0	382,6	25
118,4	382,6	25
118,8	388,9	25
119,2	396,5	25
119,6	404,8	25
120,0	413,1	25
120,4	420	25
120,8	420	23,1
121,2	420	23,2
121,6	420	23,8
122,0	420	23,8
:	:	:
:	:	:
153,2	420	20,6
153,6	420	20,6
154,0	420	20,6
154,4	420	20,7
154,8	420	20,7
155,2	420	20,7
155,6	419,0	20,7
156,0	418,3	20,7
156,4	417,7	20,7
156,8	417,4	20,7
157,2	417,2	20,7
:	:	:
:	:	:
290,4	418,0	20,7
290,8	418,4	20,7
291,2	418,3	20,7
291,6	419,1	20,7
292,0	419,4	20,7
292,4	419,7	20,7
292,8	420	20,7
293,2	420	20,7
293,6	420	20,8
294,0	420	20,8

As figuras 6.15 e 6.16 apresentam o comportamento dinâmico das variáveis de saída frente às perturbações provenientes dos testes TEST3 e TEST4.

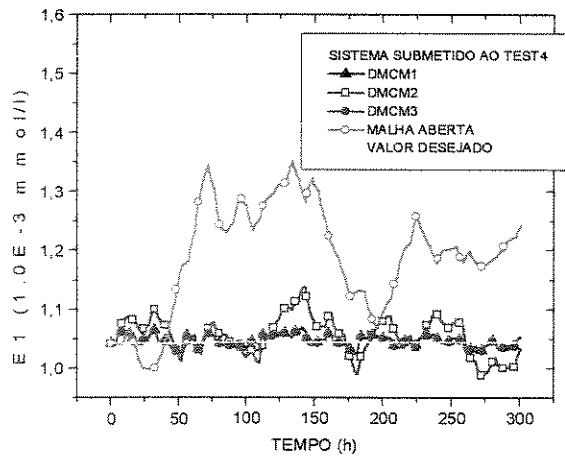


A – Comportamento dinâmico da saída  $E_1$

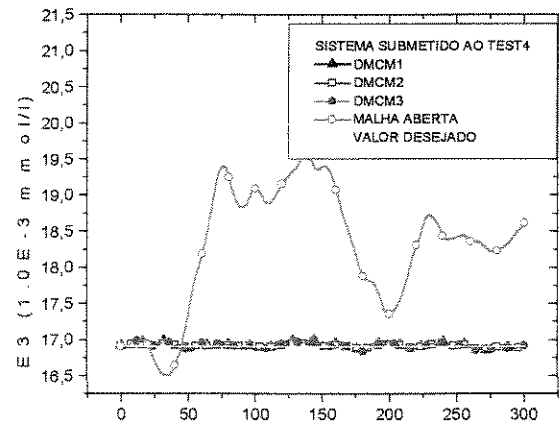


B – Comportamento dinâmico da saída  $E_3$

**Figura 6.15** – Sistema submetido ao TEST3



A – Comportamento dinâmico da saída  $E_1$



B – Comportamento dinâmico da saída  $E_3$

**Figura 6.16** – Sistema submetido ao TEST4

Primeiramente, é interessante observar a sensível diferença do sistema com controle e em malha aberta. O processo está satisfatoriamente controlado, sendo

que os desvios das variáveis controladas dos respectivos valores desejados são aceitáveis para as ordens de grandeza trabalhadas. No entanto, devido à dinâmica lenta do processo, observa-se que o tempo de resposta para o sistema de controle corrigir as variáveis de saídas são elevados. Na figura 6.15b, no instante 120.4 (instante da mudança de configuração), nota-se que ocorre um sensível desvio da variável controlada  $E_3$ . Ou seja, o sistema passa por um curto período por uma certa “turbulência”, mas que não acarreta danos para o controle do sistema. Nas figuras 6.15 e 6.16, pode-se observar que, para o controle da saída  $E_1$ , o DMCM1 apresenta melhor desempenho que o DMCM2. Quanto ao controle da variável  $E_3$ , pelas figuras 6.15 e 6.16 não é possível visualizar as diferenças entre os controladores DMCM1 e DMCM2. Por isso são apresentados os índices de desempenho nas tabelas 6.7 e 6.8, das quais se observa que o DMCM2 apresenta um desempenho levemente superior ao DMCM1.

**Tabela 6.7 - Índices de desempenho para o TEST3 em 300 horas**

<b>CONTROLADOR</b>	<b>DM de <math>E_1</math> (%)</b>	<b>DM de <math>E_3</math> (%)</b>	<b>ITAE de <math>E_1</math></b>	<b>ITAE de <math>E_3</math></b>
<b>DMCM1</b>	11.6	2.5	1.037	4.599
<b>DMCM2</b>	17.9	0.8	3.582	1.961
<b>DMCM3</b>	10.3	5.6	0.939	3.725
<b>MALHA ABERTA</b>	30.3	18.2	6.604	64.390



**Tabela 6.8** - Índices de desempenho para o TEST4 em 200 horas

CONTROLADOR	DM de $E_1$ (%)	DM de $E_3$ (%)	ITAE de $E_1$	ITAE de $E_3$
DMCM1	2.4	0.5	0.364	1.340
DMCM2	9.0	0.4	1.354	0.871
DMCM3	2.4	0.5	0.364	1.340
MALHA ABERTA	29.6	15.8	7.241	68.92

#### *VI.5.4 – Testes das variações dos parâmetros cinéticos do modelo*

Os parâmetros cinéticos do modelo do processo são submetidos às variações de acordo com o TEST5. As conseqüências diretas dessas mudanças são:

- i) Perda de capacidade e velocidade da etapa de adsorção do estágio de adsorção;
- ii) Redução da velocidade da etapa de dessorção do estágio de dessorção

As figuras 6.17 e 6.18 permitem visualizar a sensível diferença entre o sistema com e sem controle. Os índices de desempenho da tabela 6.9 auxiliam a comparação do sistema em malha fechada e aberta de maneira quantitativa. Os desvios máximos de  $E_1$  e  $E_3$  para o sistema controlado (0.5 e 0.1% respectivamente) são praticamente desprezíveis para as ordens de grandeza utilizadas, enquanto que, para o sistema em malha aberta, os desvios máximos são inaceitáveis.

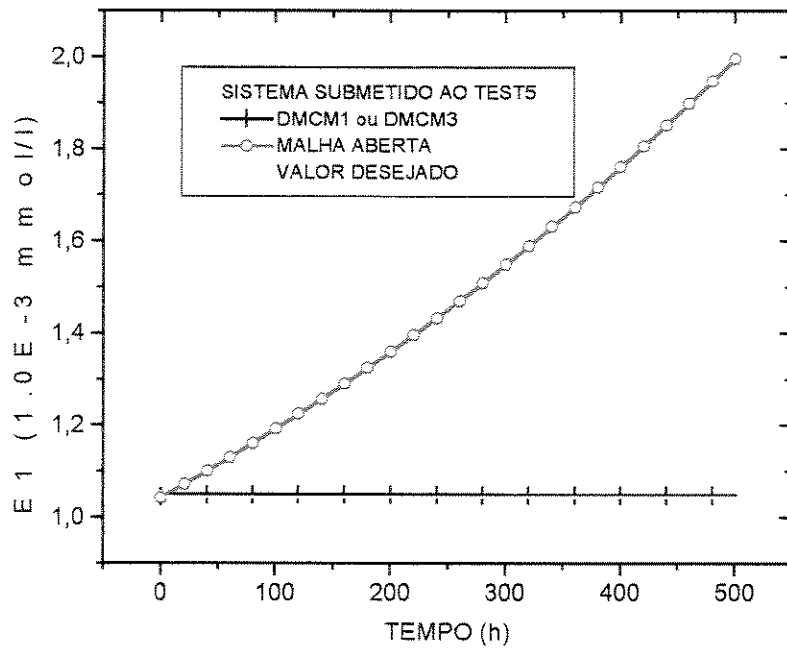


Figura 6.17 – Comportamento dinâmico da saída  $E_1$  para o sistema submetido ao TEST5

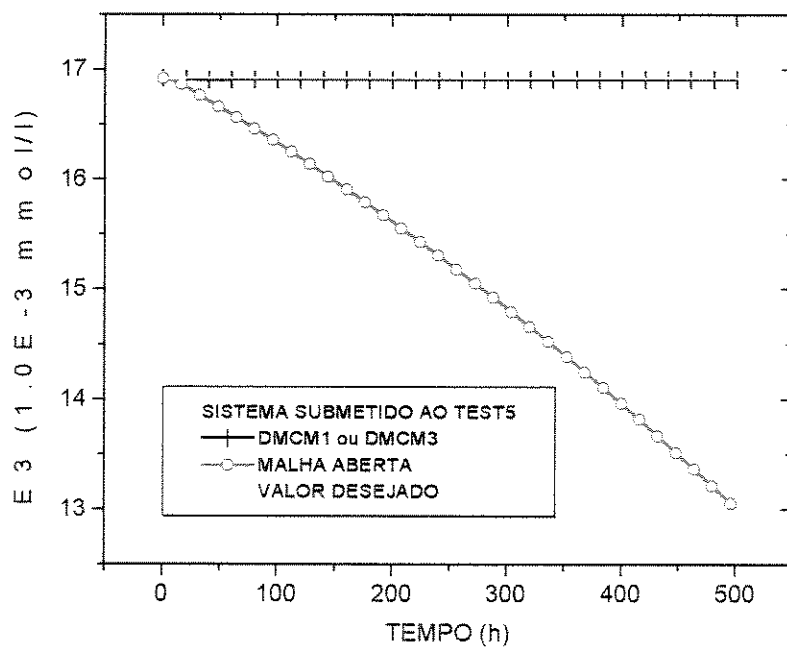


Figura 6.18 – Comportamento dinâmico da saída  $E_3$  para o sistema submetido ao TEST5

Tabela 6.9- Índices de desempenho para o TEST5 em 500 horas

CONTROLADOR	DM de $E_1$ (%)	DM de $E_3$ (%)	ITAE de $E_1$	ITAE de $E_3$
DMCM1 ou DMCM3	0.5	0.1	0.488	1.656
MALHA ABERTA	91.3	23.0	73.920	303.2

Para a execução do controle das variáveis  $E_1$  e  $E_3$ , a vazão  $F_1$  diminui ao longo do tempo (ver figura 6.19). As causas desse decremento estão associadas aos efeitos descritos anteriormente das mudanças constantes dos parâmetros cinéticos ao longo do tempo. Para o caso do TEST5, o controlador DMC tende a sempre diminuir a vazão  $F_1$ , por isso a vazão  $F_1$  não precisa operar em valores elevados e, por conseguinte, o sistema de controle não utiliza a configuração Mr3.

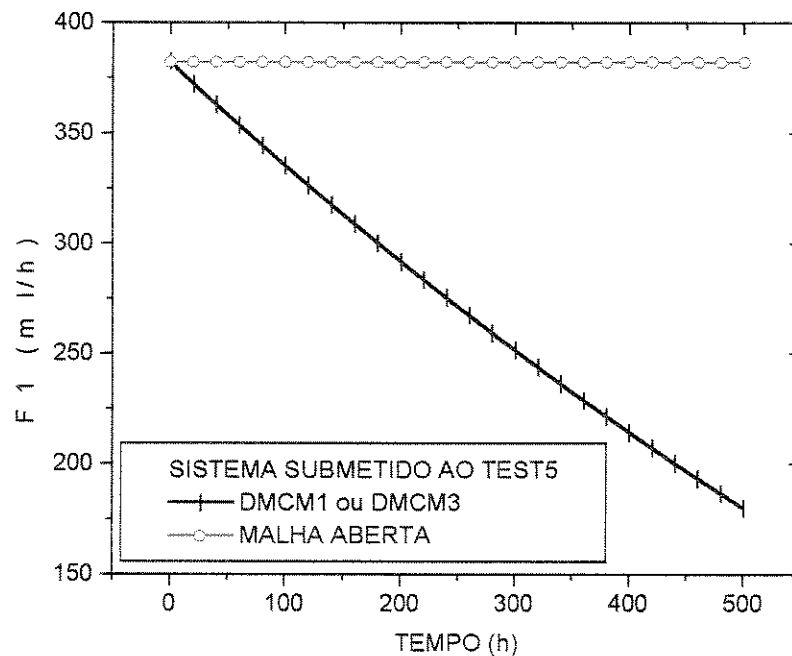


Figura 6.19 – Comportamento dinâmico da vazão  $F_1$

A redução da vazão  $F_1$  causa a diminuição da produtividade, para o sistema em malha fechada, como está na figura 6.20. Por isso o sistema em malha aberta apresenta maior produtividade, porém em concentrações indesejáveis. Quanto ao rendimento, ocorre a queda devido à menor eficiência da etapa de adsorção que existe no sistema. O sistema em malha fechada apresenta melhor rendimento do que em malha aberta. Esse fato se deve às maiores perdas de enzimas que ocorrem no estágio de adsorção quando o sistema não está controlado.

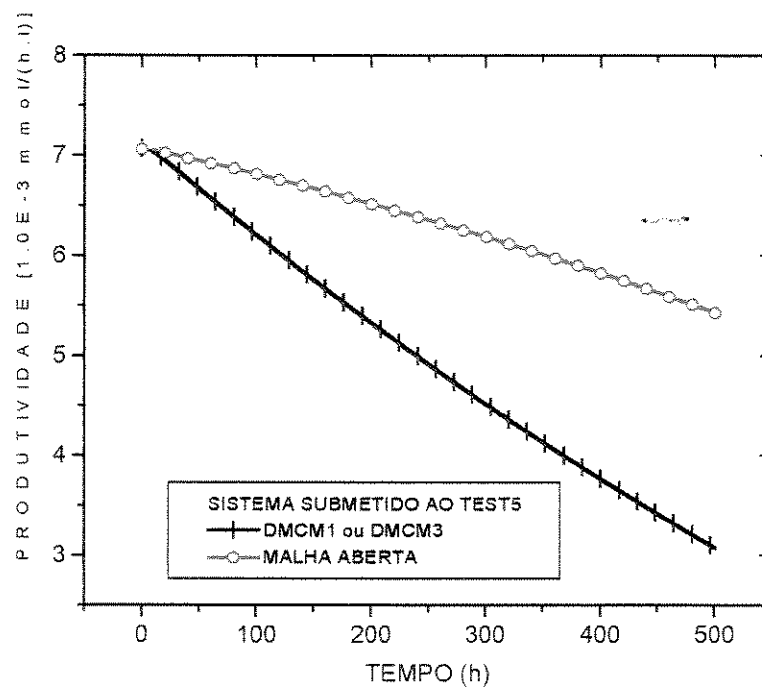
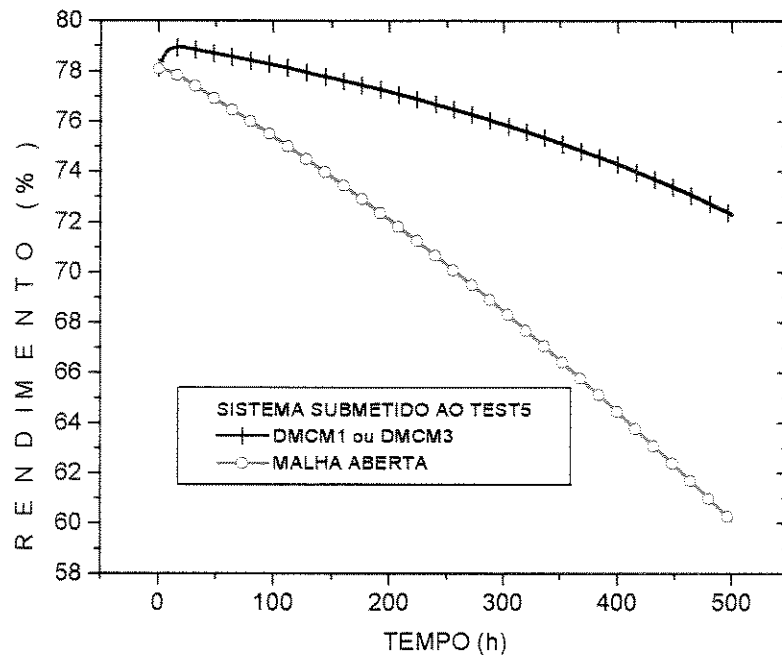


Figura 6.20 – Comportamento dinâmico da produtividade para o sistema submetido ao TEST5



**Figura 6.21** – Comportamento dinâmico do rendimento para o sistema submetido ao TEST5

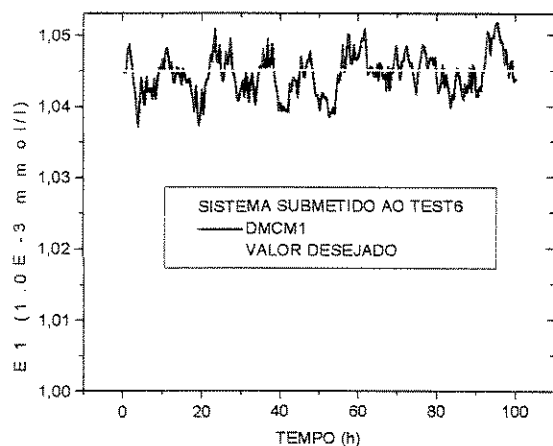
#### *VI.5.5 – Testes de presença de ruído branco nas variáveis de leitura na execução do controle*

Por meio das figuras 6.22 e 6.23, podem-se observar o efeito que o ruído branco produz nas saídas do processo. Os desvios máximos das saídas do processo (ver tabela 6.10) são desprezíveis, ou seja, os efeitos do ruído branco nas saídas podem ser desconsiderados.

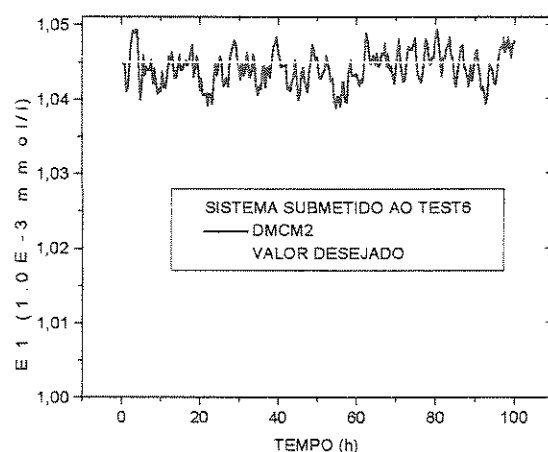
**Tabela 6.10** – Índices de desempenho para o sistema submetido ao TEST6

CONTROLADOR	DM de $E_1$ (%)	DM de $E_3$ (%)	ITAE ( $E_1$ )	ITAE ( $E_3$ )
*DMCM1 ou DMCM3	0.8	1.2	0.012	0.313
DMCM2	0.6	2.6	0.010	0.686

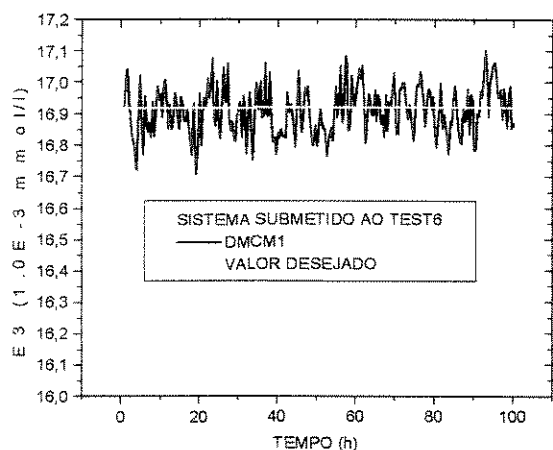
\* são iguais porque não ocorre o chaveamento



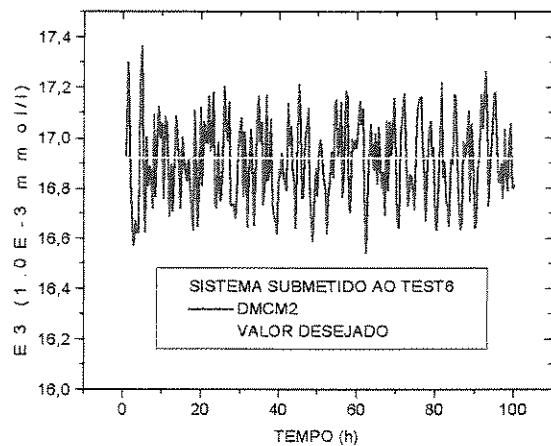
A – Sistema controlado pelo DMCM1



B – Sistema controlado pelo DMCM2

Figura 6.22 – Comportamento dinâmico da saída  $E_1$  para o sistema submetido ao TEST6

A – Sistema controlado pelo DMCM1



B – Sistema controlado pelo DMCM2

Figura 6.23 – Comportamento dinâmico da saída  $E_3$  para o sistema submetido ao TEST6

Na tabela 6.11, são apresentados, em parte, os valores das ações e das saídas na simulação do sistema submetido ao TEST6. Quanto aos valores das saídas,

percebe-se que as variações das mesmas em torno de seus valores desejados são pequenas. É interessante observar as colunas referentes às ações de controle, que são devidas aos ruídos brancos inseridos nas variáveis controladas. Apesar dos limites das ações serem obedecidos, essas ações sucessivas são indesejáveis na aplicação das mesmas às respectivas variáveis manipuladas.

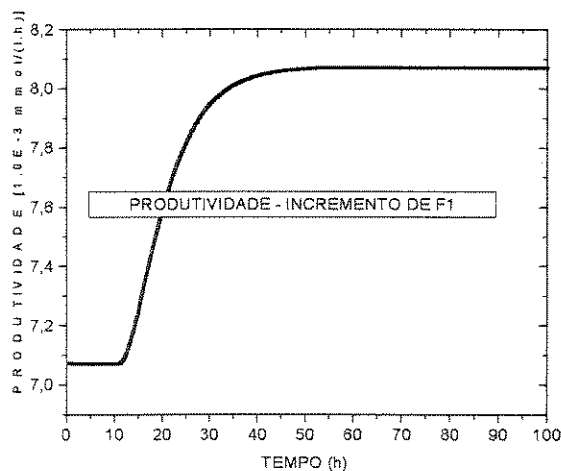
**Tabela 6.11** – Um parte dos dados da simulação do sistema para o TEST6 para o controlador DMCM1

Tempo (h)	dU1 ml/h	dU3 ml/h	E <sub>1</sub> (mmol/h)	E <sub>3</sub> (mmol/h)
0,4	0,0	0,0	.1045E-02	.1692E-01
0,8	6,9	-2,2	.1045E-02	.1692E-01
1,2	-1,5	1,0	.1048E-02	.1703E-01
1,6	-5,4	2,0	.1049E-02	.1705E-01
2	-3,4	0,4	.1047E-02	.1695E-01
2,4	-2,6	0,1	.1046E-02	.1687E-01
2,8	-0,8	-0,1	.1044E-02	.1683E-01
3,2	-2,1	0,6	.1042E-02	.1681E-01
3,6	-0,7	0,2	.1039E-02	.1676E-01
4	13,1	-4,2	.1037E-02	.1673E-01
4,4	3,6	0,0	.1041E-02	.1692E-01
4,8	-9,7	4,3	.1044E-02	.1703E-01
5,2	-2,0	-0,1	.1042E-02	.1686E-01
5,6	10,8	-4,5	.1040E-02	.1678E-01
6	-8,2	3,4	.1044E-02	.1696E-01
6,4	0,7	-0,0	.1042E-02	.1689E-01
6,8	1,2	-1,0	.1042E-02	.1685E-01
7,2	-3,6	1,1	.1043E-02	.1687E-01
7,6	8,0	-2,7	.1041E-02	.1683E-01
8	-9,1	3,4	.1044E-02	.1694E-01
8,4	7,1	-2,5	.1041E-02	.1683E-01
8,8	3,1	-1,1	.1043E-02	.1690E-01
9,2	-3,7	1,8	.1045E-02	.1699E-01
9,6	2,3	-0,8	.1045E-02	.1695E-01
10	-5,8	1,6	.1047E-02	.1697E-01

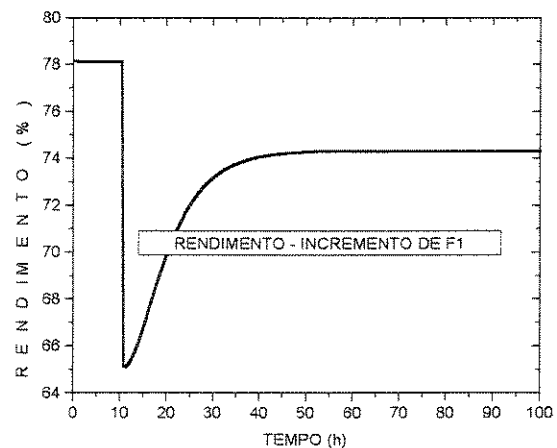
## VI.6 – Análise dinâmica de produtividade e rendimento do sistema

A produtividade e o rendimento, definidos pelas equações 3.36 e 3.37, são variáveis que fornecem uma medida da eficiência do sistema. Por isso é interessante estudar como as mesmas variam de acordo com as mudanças das variáveis de entrada. Dessa forma, são apresentados a seguir os gráficos (ver figuras 6.24, 6.25 e 6.26) do comportamento dinâmico da produtividade e do rendimento quando se incrementam as vazões  $F_1$ ,  $F_3$  e  $F_r$  de 20%, para o sistema em malha aberta.

Na figura 6.24a, observa-se que o incremento de  $F_1$  leva o sistema a uma condição de maior produtividade. Entretanto, para isso, ocorre o aumento de perdas de enzima na fase líquida nos estágios de adsorção e lavagem, acarretando numa queda do rendimento, como pode ser observado na figura 6.24b.



**A** - Produtividade



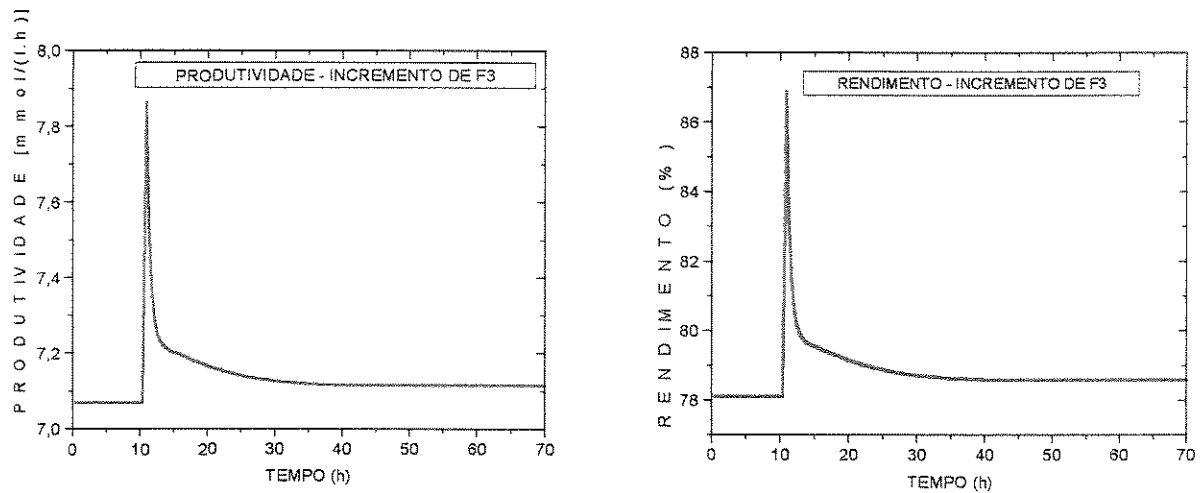
**B** – Rendimento

**Figura 6.24** – Análise do comportamento dinâmico para um incremento de 10% na vazão  $F_1$



Na figura 6.25, observa-se que incremento de  $F_3$  produz um efeito de curto tempo tendendo a aumentar a produtividade

ade e o rendimento. Porém, devido à dinâmica lenta do processo, esse “curto” tempo é considerável e deve influenciar a eficiência do processo.

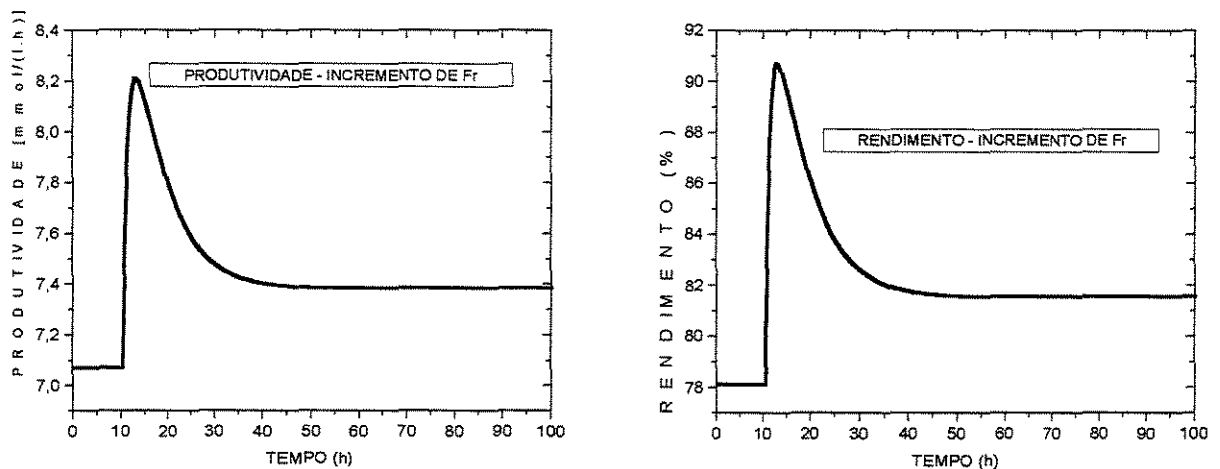


**A - Produtividade**

**B – Rendimento**

**Figura 6.25** – Análise do comportamento dinâmico para um incremento de 10% na vazão  $F_3$

Na figura 6.26, observa-se que o aumento da vazão de reciclo aumenta, em todo o tempo, a produtividade e o rendimento do sistema. Isso se deve ao aumento da velocidade de circulação do adsorvente no processo, acarretando num aumento da capacidade de adsorção do sistema.



A – Produtividade

B - Rendimento

**Figura 6.26** – Análise do comportamento dinâmico para um incremento de 10% na vazão  $F_T$

Neste presente trabalho, não ocorre o controle da produtividade e rendimento de maneira direta, porém existem alguns mecanismos possíveis de serem considerados pelo sistema de controle projetado para aumentar:

- 1) a produtividade, através do aumento da concentração de enzima na fase líquida do estágio de dessorção ( $E_3$ );
- 2) o rendimento, através do ajuste da concentração de enzima na fase líquida do estágio de adsorção ( $E_1$ ) no menor valor possível;

## VI.7 – Resultados do controle do fator de purificação

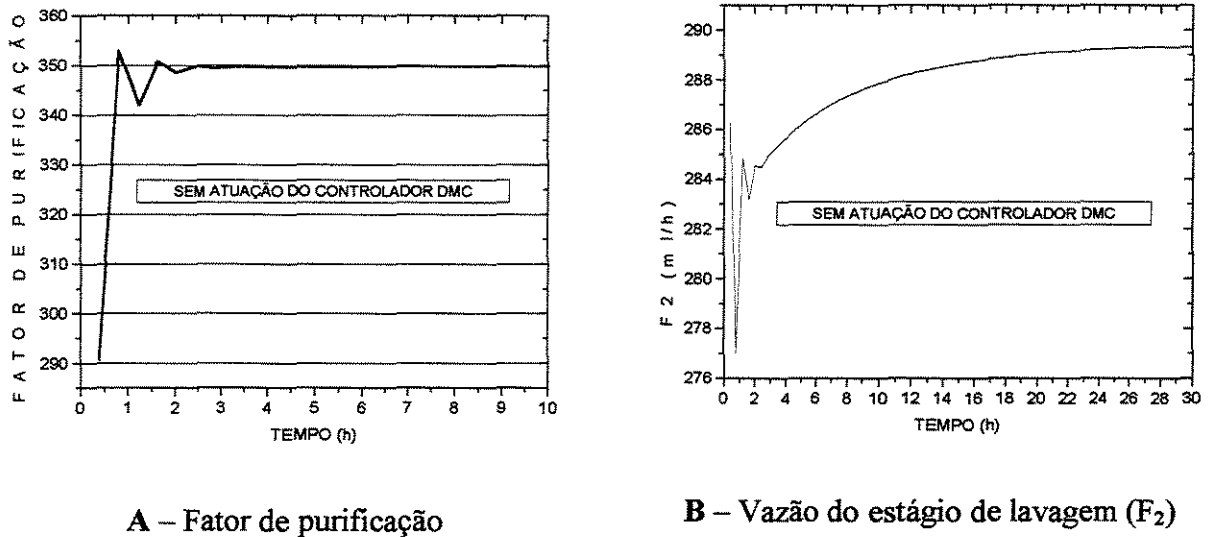
A sintonia do controlador PID aplicado para o controle do fator de purificação foi feita conforme a metodologia apresentada na seção V.5. Na tabela 6.12, é apresentada a sintonia efetuada no mesmo:

Tabela 6.12 – Sintonia do controlador PID do fator de purificação

PID	$K_c$	$\tau_I$	$\tau_D$
Controle do fator de purificação	0.1	0.05	0.02

Primeiramente, avalia-se o controle do fator de purificação sem a atuação do controle DMC. O valor desejado do fator de purificação é igual a 350. Na figura 6.27a, nota-se um tempo de resposta significativamente reduzido (aproximadamente 5 horas) para o sistema atingir o novo valor desejado (350). Na figura 6.27b, observa-se o comportamento da vazão  $F_2$ , que inicialmente apresenta uma série de ações e estabiliza-se ao longo do tempo. Na tabela 6.12, são apresentados os valores da vazão  $F_2$  e do fator de purificação ao longo do tempo. É interessante notar que maiores de ações são requisitadas no início:

Tempo (h)	Ação de $F_2$ (ml/h)
0.8	-9.3
1.2	7.8
1.6	-1.7
2.0	1.4



**Figura 6.27 – Controle do fator de purificação pelo PID sem atuação do controlador DMC**

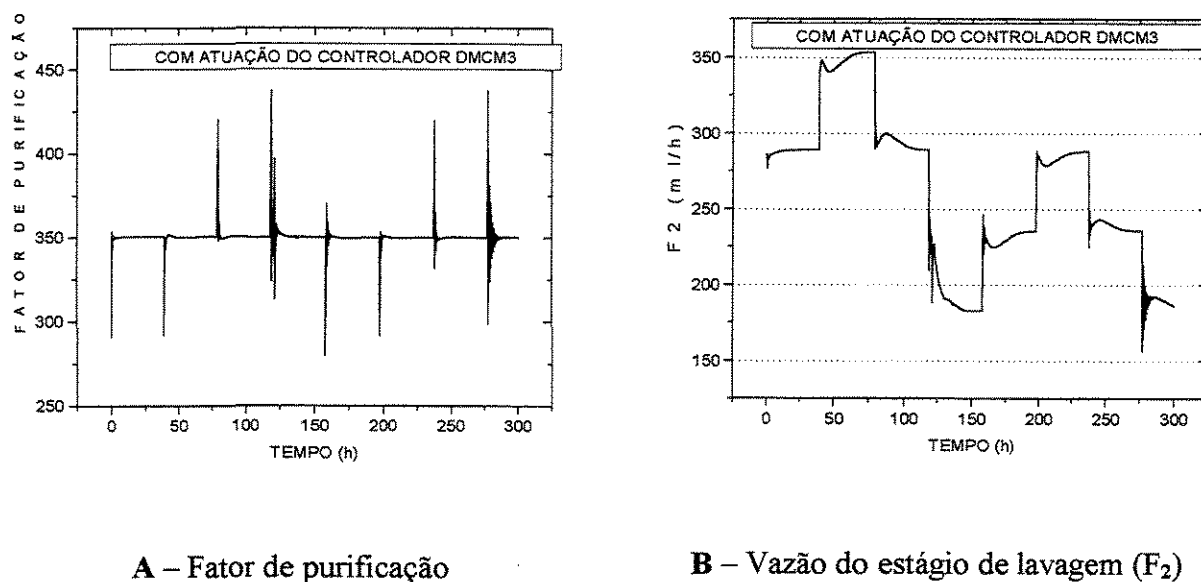
**Tabela 6.13 – Uma parte da simulação do controlador PID do fator de purificação sem ação do DMC**

Tempo (h)	$F_2$	FP	Tempo (h)	$F_2$	FP
0,4	286,2	290,6	3,2	285,1	349,7
0,8	277,0	353,0	3,6	285,4	349,7
1,2	284,8	342,0	4	285,6	349,7
1,6	283,2	350,9	4,4	285,9	349,7
2	284,6	348,6	4,8	286,1	349,7
2,4	284,5	349,9	5,2	286,2	349,8
2,8	284,9	349,5	5,6	286,5	349,8

As ações de  $F_2$  para o controle do fator de purificação não produzem efeitos significativos nas saídas do controlador DMC. Entretanto as ações provenientes do controlador DMC (exceto da vazão  $F_3$ ) causam um significativo efeito no fator de purificação, que pode ser observado na tabela 5.1 do estudo de sensibilidade apresentando na seção V.3. Portanto, são apresentados a seguir resultados do controle do fator de purificação quando o controlador DMCM3 está reagindo às perturbações provenientes do TEST3. O valor desejado do fator de purificação é

novamente igual a 350. Cabe colocar que na análise realizada na subseção VI.5.3 não foi requisitada nenhuma mudança do fator de purificação.

Na figura 6.28 a, observa-se que em cada instante em que ocorre a perturbação (40, 80, 120, 160, 200, 240, 280 horas) sobre  $E_0$ , o fator de purificação é sensivelmente modificado e em curto tempo retorna ao valor desejado (350) pela ação do controlador PID sobre a vazão  $F_2$  (ver figura 6.28b).



**Figura 6.28** - Controle de purificação paralelamente à atuação do controlador DMCM3 quando o sistema está submetido ao TEST3

## CAPÍTULO 7

### CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Baseando-se nos resultados de desempenho obtidos do sistema de controle para as possíveis perturbações e mudanças, pode-se concluir que:

- o controlador DMC ajusta as variáveis controladas nos respectivos valores desejados num tempo proporcional à dinâmica do processo;
- o controlador DMC mantém as saídas do processo em seus respectivos valores desejados quando o sistema é submetido à mudança da concentração de enzima da vazão de alimentação;
- o controlador DMC apresenta um excelente desempenho quando os parâmetros do modelo estão em constante mudança;
- os ruídos, oriundos dos aparelhos de medida, produzem efeitos indesejáveis sobre as variáveis manipuladas do processo;
- o rendimento pode ser incrementado pela minimização das perdas de enzima do estágio de adsorção, ou seja, através de um ajuste mínimo possível da variável controlada  $E_1$ ;
- a produtividade pode ser incrementada pelo aumento da concentração de enzima do terceiro estágio;
- o controlador PID do fator de purificação mantém satisfatoriamente o valor do mesmo no valor respectivo desejado;

Como sugestões para trabalhos futuros, baseado nas experiências obtidas do trabalho desta tese, podem-se citar:

- desenvolvimento de rotinas de otimização, num nível hierárquico superior ao de controle, para a maximização do rendimento e da produtividade;
- consideração de alguns cuidados, para uma possível implementação prática citados na seção III.3, na modelagem do processo;
- levar em conta as restrições no desenvolvimento do DMC;

---

**REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

ÄSTRÖN, K.J. & B. WITTENMARK (1984) Computer Controlled Systems, Prentice-Hall, USA

BAYLEY, J.E. & OLLIS, D.F. Biochemical engineering fundamentals.  
2ª edição. New York, McGraw-Hill, 1986 cap.11, p.729-796

BJURSTROM, E. Biotechnology. Chem. Eng., 92:126-158, 1985.

CADZOW, J.A . & MARTENS, H. R. Discrete-Time and Computer Control Systems, Prentice-Hall, Inc, Englewood Cliffs, NJ (1970)

CHASE, H.A. Prediction of the performance of preparative affinity chromatography. J. Chromat., 297:179-202, 1984 a.

CLARKE, D.W.,MOHTADI, C, TUFFS,P.S., Generalized predictive control Part I. The Basic Algorithm, Automatica, vol. 23, nº2, 147-148

COWAN, G.H.; GOSLING, I.S.; LAWS,J.F.; SWEETHENHAM, W.P. Physical and mathematical modelling to aid scale-up of liquid chromatography. J. Chromat., 363:37-56, 1986.

CUTLER, C.R. AND B.L.RAMAKER (1979) 'DMC – A COMPUTER CONTROL ALGORITHM' AIChE Annual Meeting, Houston.

CUTLER, C.R., and RAWKINS, R.B., Constrained Multivariable Control of Hydrocracker Reactor, Proceedings of the ACC, pp 1014-1020, Mineapolis, 1987

CUTLER, C.R. and HAWKINS, R.B., Application of a Large Multivariable Controller to a Hydrocracker Second Stage Reactor, Proceedings of the ACC, Atlanta, pp. 284-291, 1988



- CUTLER, C.R. and FINLAYSON, S.G., Multivariable Control of a C3/C4 Splitter Column, AICHE National Meeting, New Orleans, 1988b
- CUTLER, C.R. and FINLAYSON, S.G., Design Considerations for a Hydrocracker Preflash Column Multivariable Constraint Controller, IFAC Conference, Atlanta, 1988 c
- DECHECHI, E.C. Aplicação do controle DMC “Dynamic Matrix Control” a um processo fermentativo contínuo (Escala Industrial), Tese de Mestrado DPQ/FEQ/UNICAMP, Campinas SP, outubro (1996)
- DECHECHI, E.C. Controle Avançado Preditivo Adaptativo “DMC” Multivariável Adaptativo, Tese de doutorado, DPQ/FEQ/UNICAMP, Campinas SP, novembro (1998)
- DECHECHI, E.C., MARTINS, M.I., MACIEL FILHO, R., MAUGERI, F. Dynamic modelling and advanced predictive control of a continuous process of enzyme purification Brazilian Journal of Chemical Eng., 1997.
- DE KEYSER, R.M.C.; VAN CAUWENBERGHE, R. Extended prediction self-adaptive control. In: IFAC/IFORS SYMPOSIUM ON IDENTIFICATION AND SYSTEM PARAMETER ESTIMATION, 7., York (UK), 1985. *Proceedings Oxford; Pergamon*, 1985 p. 1255-1259
- ECONOMOU C.E., MORARI, M. Internal model control. 5. Extension to nonlinear systems. Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., v.25, n.2, p.403-411, 1986
- FALCH, E.A. Industrial enzymes – developments in production and application, Biotech. Adv. 9:643-658, 1991.
- GARCIA C.E. and MORARI, M., Internal Model Control, A unifying review and some new results, Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., 21, 308-323, 1982
- GARCIA C.E., MORARI, M. Internal model control. 3. Multivariable control law computation and tuning guidelines. Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev. V.24, n.2, p.484,494, 1985
- GATTU, G., ZAFIRIOU, E. Nonlinear Quadratic Dynamic Matrix Control with State Estimation. Ind. Eng. Chem. Res., v.31, n.4, pp.1096-104, 1992

- GEORGIU A, GEORGAKIS C, LUYBEN WL; Nonlinear dynamic matrix control for high-purity distillation columns. AICHE Journal, v.34,n.8,p.1287-99, agosto, 1988
- JANSON, J.C. Large scale affinity purification-state of the art and future prospects. Trends Bio tech., 2:31-38, 1984.
- LI, W.C.; BIEGLER, L.T. Process Control Strategies for Constrained Nonlinear Systems. Ind. Eng. Chem. Res. , v.27,p.1421, 1988
- LEE J.H., RICKER, LAWRENCE N., Extended Kalman Based Nonlinear Model Predictive Control, Ind. Eng. Res., v.33, n.6, pp.1530-41, 1994
- LUYBEN, W.L. (1989) Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers, 2ª edição, McGraw Hill.
- MARTIN G.D., Long-range predictive control, AICHE JOURNAL, v.27, n.5, p. 748-753 Setembro, 1981
- MCDONALD, K.A. , MCAVOY, T.J. , Application of DMC to Moderate and High Purity distillation Towers, Ind. Eng. Chem. Res. 26, pp. 1011-1018
- MEHRA, R.K., ROUHANI, R., ETERNO, J.; RICHALET, J., RAULT, Model Algorithmic control: review and recent development, Eng. Foundation Conf. On Chemical process control II, Sea Island, Georgia, pp. 199-208
- MORARI, M.; ZAFIRIOU, E., Robust Process Control, Prentice-Hall,m Englewood Cliffs, NJ, 1989
- MORSHEDI, A M. ; CUTLER, C.R.; SKROVANEK. T.A , Optimal solution of dynamic matrix control with linear programming techniques (LDMC). In: AMERICAN CONTROL CONFERENCE, Junho, 1985. *Proceedings* v.19-21,p.199-208
- PETERSON T.; HERNÁNDEZ. E.; ARKUN, Y.; SCHORK, F.J. A noNLINER dmc algorithm and its application to a semibatch

- polymerization reactor. Chem. Eng. Science, v.47,n.4,p.737-753,1992
- PINTO J.M., Controle por matriz dinâmica em coluna de destilação, Rio de Janeiro, 1990. Dissertação (Mestrado) – COPPE/UFRJ
- PRETT, D.M., GARCIA, C.E. Design of robust process controllers. In: IFAC TRIENAL WORLD CONGRERSS, 10., Munique, 1987, *Proceedings*. P.275-280
- PRETT, D.M.; GILLETTE. R.D. Optimization and constrained multivariable control of a catalytic cracking unit. In. AICHE NATIONAL MEETING, Houston, TX., 1979
- PUNGOR, E.; AFEYAN, N.B.; GORDON, N.F., COONEY, C.L., Biotechnology, 5, 604- 608 (1987)
- PUNGOR, E.; AFEYAN, N.B.; GORDON, N.F; COONEY , C.L. Continuous affinity – recycle extration: a novel protein separation technique. Biotech. Bioeng., 38:805-812, 1991.
- RHOUANI, R., MEHRA. R.K. , Model Algorithmic control (MAC): basic theoretical propeties, Automatica, 18(4), pp.401-414
- RICHALET J., RAULT, <sup>a</sup>, TESTUD, J.L., PAPON, J. Model predictive heuristic control: applications to industrial processes. Automatica, v.14,n.5,p.413-428,1978
- RICKER N.L., Use of quadratic programming for constrained internal model control. Ind.Eng. Chem. Proc. Des. Dev., v. 24, n4, p.925.936, 1985
- RICKER, N.LAWRENCE. Model Predictive Control with State Estimation., Ind. Eng. Chem. Res. V.29,pp.374-82- 1990
- RODRIGUES, M.I. (1993) 'Modelagem, Simulação e Controle de um processo de purificação de enzimas', Tese de doutorado, FEA/UNICAMP Practice, Prentice-Hall, Inc., New Jersey.

- 
- RODRIGUES, M.I.; ZAROR, C.A.; MAUGERI, F.; ASENJO, J.A. Dynamic modelling, simulation and control of continuous adsorption recycle extraction. Chemical Eng. Science, 47(1):263-269, 1992 a .
- SEBORG, D.E., EDGAR T.F. AND MELLICHAMP, D.A. (1989) Process Dynamics and Control, John Willey.
- SEBORG, D.E. The prospects for advanced process control. In: IFAC TRIENAL WORLD CONGRESS, 10., Munique, 1987, Proceedings, p.281-289
- STEPHANOPOULOS, G. (1984) 'Chemical Process Control, An Introduction to Theory and Practice Prentice-Hall, Inc, New Jersey
- YDSTIE, B.E.; KERSHENBAUM, L.S.; SARGENT, R.W.H. Theory and application of na extended horizon self-tuning controller. AICHE Journal, v.31, n.11, p.1771-1779, 1985

## APÊNDICE

### A. 1 – Determinação das constantes iniciais

As constantes cinéticas e a capacidade de adsorção máxima para a *lisosima* foram obtidas nos trabalhos de CHASE et al. (1984) e COWAN et al. (1986)..

As etapas de adsorção e dessorção são consideradas como reação de segunda ordem reversível e primeira ordem irreversível respectivamente.



onde A, B e AB são a enzima alvo, o adsorvente e a enzima adsorvida, respectivamente. A taxa de adsorção pode ser expressa pela equação A.3, onde q é a concentração de enzima na fase sólida e E é a concentração de enzima na fase líquida.

$$\frac{dq}{dt} = k_1 \cdot E \cdot (q_m - q) - k_2 \cdot q \quad (\text{A.3})$$

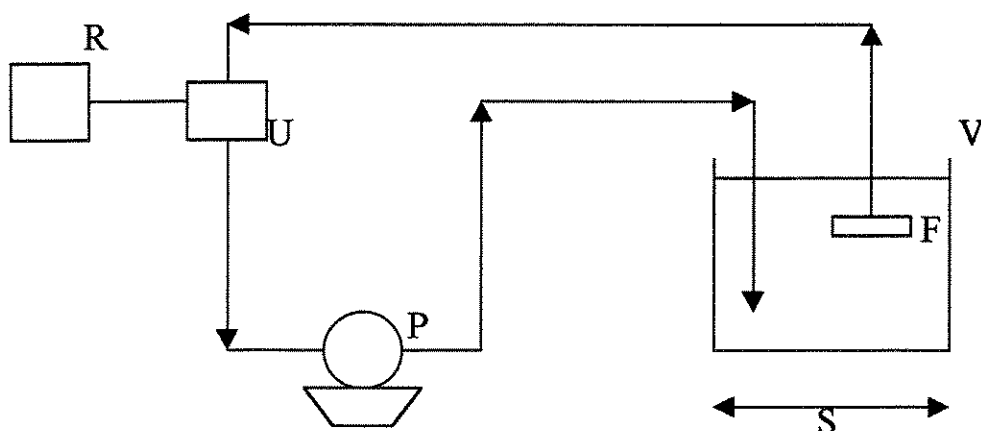
No equilíbrio,  $dq/dt = 0$ , a equação A.3 pode ser reescrita resultando a equação A.4, um modelo isotérmico do tipo Langmuir, que é não linear.

$$q^* = \frac{q_m \cdot E^*}{(k_d + E^*)} \quad (\text{A.4})$$

onde  $k_d$ , denominado constante de dissociação da “reação” no equilíbrio, sendo dada por:

$$k_d = \frac{k_2}{k_1} \quad (\text{A.5})$$

Nos experimentos realizados por CHASE et al. (1984), utilizou-se o aparato mostrado na figura A.1.

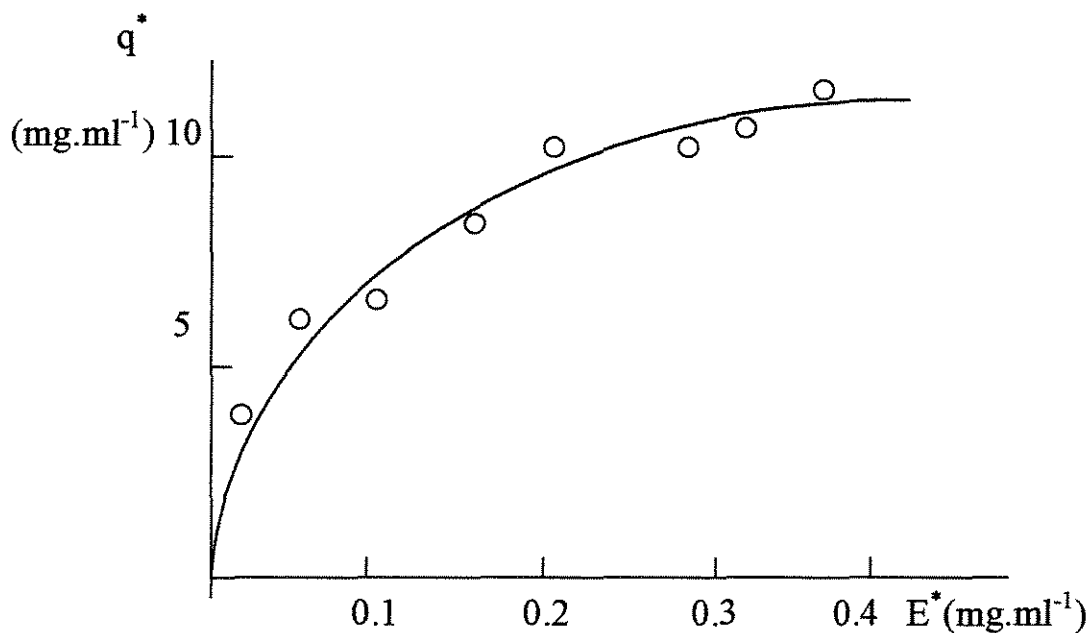


**Figura A.1** – Aparato para os experimentos a fim de ser obter as constantes cinéticas de adsorção – Sistema usado para o Cibacron Blue-Sepharose CL-6B (F – filtro de porosidade igual a 20 micrômetros, P – bomba peristáltica com vazão igual a 10ml min<sup>-1</sup>, R – registrador de dados, S – sistema regulatório para manter o sistema isotérmico, U – espectrofotômetro (280 nm), V – reator da adsorção em batelada).

A fase solúvel do sistema em batelada é continuamente monitorada para a medição da concentração de enzima usando o aparato descrito na figura A.1. A fase solúvel é continuamente removida do reator batelada pela passagem de um filtro (F) e levado ao espectrofotômetro (U) para medir a concentração de enzima. A saída de U foi conectada a um registrador de dados R. A vazão de líquido é continuamente removida do reator de tal forma que o volume global do mesmo permaneça constante. O volume do fluido circulante externo é mantido o menor possível e bombeado de tal forma que se tenha uma resposta rápida no sistema. No experimento realizado, foi adicionado o adsorvente em uma solução (50 mM Tris-HCl, pH 7.2) em 20°C e ocorre a recirculação da solução até que o

sistema atinja o equilíbrio, evidentemente com a diminuição da concentração da enzima estudada.

Estes dados experimentais obtidos juntamente com a equação A.4, possibilitam a obtenção das constantes cinéticas. Utiliza-se os recursos computacionais, determinando-se os parâmetros envolvidos de tal forma a traçar as curvas relacionadas coincidindo com os dados experimentais. Exemplifica-se isso na figura A.2:



**Figura A.2** – Curva de Langmuir nos experimentos de CHASE

A linha contínua representa a curva predita pela equação A.4, ao passo que “bolinhas” representam os dados experimentais obtidos. Dessa forma, os valores de  $q_m$  e  $k_d$  são tomados de maneira a traçar a melhor curva.

As constantes obtidas nos trabalhos de CHASE et al. (1984) e COWAN (1986) foram:

\* concentração da capacidade máxima de adsorção ( $q_m$ ) = 1.0 mmol/l

\* constantes cinéticas:  $k_1 = 10^3 l.(mmol)^{-1} h^{-1}$ ;  $k_2 = 1.8 h^{-1}$ ;  $k_3 = 10^3 h^{-1}$

A partir dessas constantes e tomando-se a fração da fase líquida (porosidade ( $\epsilon$ )) igual a 0.7, determinou-se as condições de operação estacionárias, mostradas na tabela A.1, por meio de simulações.

**Tabela A.1** – Condições de estado estacionário do processo CARE modificado

	F[l/h]	E[mol/l]	C[mol/l]	q[mol/l]	Volu me(l)
Alimentação	0.3825	$7.100 \cdot 10^{-6}$	$5.680 \cdot 10^{-5}$	0	-
Estágio 1	0.3825	$1.045 \cdot 10^{-6}$	$5.434 \cdot 10^{-5}$	$0.3460 \cdot 10^{-3}$	0.100
Estágio 2	0.2325	$8.422 \cdot 10^{-7}$	$3.803 \cdot 10^{-6}$	$0.3205 \cdot 10^{-3}$	0.100
Estágio 3	0.1254	$1.692 \cdot 10^{-5}$	$4.659 \cdot 10^{-7}$	$5.607 \cdot 10^{-8}$	0.100
Reciclo	0.0250	$1.692 \cdot 10^{-5}$	$4.659 \cdot 10^{-7}$	$5.607 \cdot 10^{-8}$	-

## A .2 – Algoritmo de integração numérica

Utiliza-se neste trabalho o método integração numérica de Runge-Kutta de 4ª ordem. O desenvolvimento destas fórmulas teve início com o trabalho de Carl Runge, em 1895, e foi continuado por M.W.Kutta, em 1901. A fórmula de Runge-Kutta envolve uma média ponderada de valores de  $f(x,y)$  tomados em pontos diferentes do intervalo  $x_n \leq x \leq x_{n+1}$ . Considerando o problema descrito assim:

$$y' = f(x,y)$$

$$y(x_0) = y_0$$

O método de Runge-Kutta de 4ª ordem pode ser descrito pelas equações abaixo, calculadas a cada passo de integração:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_{n1} + 2k_{n2} + 2k_{n3} + k_{n4})$$

$$k_{n1} = f(x_n, y_n)$$



$$k_{n2} = f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_{n1}\right)$$

$$k_{n3} = f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_{n2}\right)$$

$$k_{n4} = f(x_n + h, y_n + hk_{n3})$$