



Estudo da modelagem e do controle de um
processo de biolixiviação de pirita

André Gomes Cruz

Projeto Final de Curso

Orientadores:

Prof. Bruno Didier Olivier Capron, D.Sc.

Prof. Marcellus Guedes Fernandes De Moraes, M.Sc.

Novembro 2020

Estudo da modelagem e do controle de um processo de
biolixiviação de pirita

André Gomes Cruz

Projeto Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química,
como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

Maurício Bezerra de Souza Jr, D.Sc.

Ricardo Schmitz Ongaratto, D.Sc.

Orientado por:

Bruno Didier Olivier Capron, D.Sc.

Marcellus Guedes Fernandes De Moraes, M.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Novembro de 2020

Cruz, André Gomes.

Estudo da modelagem e do controle de um processo de biolixiviação de pirita.
André Gomes Cruz. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2020.

(Projeto Final) – Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, Escola de
Química, 2020.

Orientadores: Bruno Didier Olivier Capron e Marcellus Guedes Fernandes De
Moraes

1. Biolixiviação. 2. Pirita. 3. Modelagem. 4. Controle 5. Projeto Final.
(Graduação – UFRJ/EQ). 6. Bruno Didier Olivier Capron e Marcellus Guedes
Fernandes De Moraes. I. Estudo da modelagem e controle de um processo de
biolixiviação de pirita.

Agradecimentos

Primeiramente gostaria de demonstrar minha eterna gratidão à minha família por contribuir na minha construção de valores e formação de caráter, sem os quais não considero possível o real progresso para a sociedade. Em especial, por terem proporcionado essa grande oportunidade de me graduar em uma universidade respeitada e admirada nacionalmente.

Agradeço também a todas as pessoas que de alguma forma contribuíram para a concretização deste trabalho, em especial ao meu grupo do trabalho de modelagem (Thays, Felipe e Rhuan) e aos meus sempre solícitos orientadores Bruno e Marcellus.

Resumo

Resumo do Projeto de Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Estudo da modelagem e controle de um processo de biolixiviação de pirita

André Gomes Cruz

Novembro de 2020

Orientadores: Prof. Bruno Didier Olivier Capron, D.Sc.

Prof. Marcellus Guedes Fernandes De Moraes, M.Sc.

Diante do cenário de esgotamento das reservas contendo elevados conteúdo de metais, a biolixiviação é um processo biotecnológico que pode ser aplicado a minérios de baixos teores e aponta como alternativa mais sustentável e de menor custo em relação aos processos tradicionais. Inspirado em trabalhos propostos em sala de aula, esse projeto final usou a ferramenta computacional do *MATLAB* para fazer a simulação do processo de biolixiviação de pirita em um reator contínuo. Na modelagem foram desenvolvidos os balanços de massa e de energia para o reator e através da abordagem de espaço de estados foram obtidas as funções de transferência que regem o processo. Essa abordagem mostrou-se válida pois as respostas alcançadas foram muito similares com aquelas do modelo não linear e podem ser fisicamente explicadas. Já para o controle do processo, definiu-se a concentração de produto e a temperatura no reator como variáveis controladas e a concentração de entrada de substrato e a vazão da corrente de entrada como variáveis manipuladas. Os três métodos de controle utilizados, Ziegler e Nichols, Síntese Direta e Regulação Quadrática Linear, foram bem-sucedidos e conseguiu-se respostas que chegaram ao patamar desejado. Portanto esse estudo mostrou que técnicas de modelagem e controle tradicionais podem ser aplicadas em um processo industrial complexo como a biolixiviação da pirita.

Índice

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Índice.....	vi
Índice de Figuras.....	ix
Índice de Tabelas	x
Símbolos	xi
1 Introdução	13
1.1 Contextualização	13
1.2 Motivação.....	14
1.3 Objetivos	15
1.4 Estrutura do texto	15
2 Revisão Bibliográfica.....	17
2.1 Biolixiviação em tanques agitados.....	17
2.2 Constituintes do processo.....	18
2.2.1 Mineral estudado – Pirita	18
2.2.2 Micro-organismo utilizado – Acidithiobacillus ferrooxidans	18
2.3 Modelagem do processo de biolixiviação	19
2.3.1 Transferência de gás entre a fase gasosa e a fase líquida.....	20
2.3.2 Bio-oxidação do íon ferroso	21
2.3.3 Dissolução mineral	24
2.4 Definição de um problema de controle	25
3 Metodologia	26
3.1 Modelagem.....	26
3.1.1 O processo	26
3.1.2 Balanço de massa por componente (BMC)	27
3.1.3 Balanço Energético.....	29

3.1.4	Obtenção do estado estacionário inicial	31
3.1.5	Espaço de estados	32
3.1.6	Comparação do modelo linearizado com o modelo não linear	35
3.2	Controle.....	35
3.2.1	Matriz de ganho relativo (RGA)	36
3.2.2	Projeto do controlador usando o pareamento do RGA.....	36
3.2.3	Controle ótimo – Regulação quadrática linear (LQR)	41
4	Resultados e Discussões	46
4.1	Estado estacionário inicial.....	46
4.2	Espaço de estados.....	46
4.2.1	Comparação entre o modelo linearizado e o modelo não linear	47
4.2.2	Funções de transferência	54
4.3	Pareamento obtido pela matriz de ganho relativo	61
4.4	Controlador obtido usando as correlações de Ziegler e Nichols.....	61
4.4.1	Obtenção de K_{cu} através da Matriz de Routh	61
4.4.2	Obtenção da frequência crítica através do diagrama de Bode.....	64
4.4.3	Parametrização do controlador	65
4.4.4	Aplicação dos controladores no sistema	68
4.5	Controlador obtido usando a síntese direta	73
4.5.1	Mudança na referência	73
4.5.2	Rejeição de distúrbio	75
4.6	Controle ótimo – Regulação quadrática linear (LQR)	77
4.6.1	Rejeição de distúrbio	79
4.6.2	Mudança na referência	81
4.7	Comparação entre o Ziegler e Nichols e Síntese Direta	82
5	Conclusão e Sugestões	84
5.1	Modelagem.....	84

5.2 Controle.....	84
5.3 Sugestões.....	85
6 Referências.....	86
7 Apêndice A	89

Índice de Figuras

Figura 1: Etapas da biolixiviação	19
Figura 2: Ilustração do reator	27
Figura 3: Malha de controle do processo	37
Figura 4: Malha de controle do processo - <i>SIMULINK</i>	37
Figura 5: Matriz de Routh	38
Figura 6: Malha usada para obter o diagrama de Bode.....	39
Figura 7: Representação do sistema em espaço de estados.....	42
Figura 8: Representação do sistema com a adição da matriz de ganhos.....	42
Figura 9: Representação do sistema com a adição do ganho K_{ff}	44
Figura 10: Degrau aplicado na variável S_0	48
Figura 11: Degrau aplicado na variável F	50
Figura 12: Degrau aplicado na variável T_0	52
Figura 13: Diagrama de Bode – Malha 1	64
Figura 14: Diagrama de Bode – Malha 2	65
Figura 15: Relações de Ziegler e Nichols	65
Figura 16: Respostas da malha 1 as diferentes configurações de controlador	66
Figura 17: Respostas da malha 2 às diferentes configurações de controlador	67
Figura 18: Ampliação das respostas da malha 2 às diferentes configurações de controlador	68
Figura 19: Resposta de P ao degrau de 0,01 g/L em S_0 – Ziegler e Nichols.....	69
Figura 20: Resposta de T ao degrau de 0,01 g/L em S_0 – Ziegler e Nichols.....	69
Figura 21: Resposta de P ao degrau em de 0,01 em S_0 – Novos parâmetros	71
Figura 22: Resposta de T ao degrau de 0,01 em S_0 – Novos parâmetros.....	71
Figura 23: Resposta de P ao distúrbio – Ziegler e Nichols	72
Figura 24: Resposta de T ao distúrbio – Ziegler e Nichols.....	73
Figura 25: Resposta de P ao degrau de 0,01 em S_0 – Síntese Direta.....	74
Figura 26: Resposta de T ao degrau de 0,01 em S_0 – Síntese Direta	75
Figura 27: Resposta de P ao distúrbio – Síntese Direta	76
Figura 28: Resposta de T ao distúrbio – Síntese Direta.....	76
Figura 29: Resposta de P ao distúrbio - LQR	79
Figura 30: Resposta de T ao distúrbio - LQR	80
Figura 31: Resposta de P ao degrau em de 0,01 em S_0 – LQR	81

Índice de Tabelas

Tabela 1: Parâmetros utilizados na modelagem do processo.....	30
Tabela 2: Comportamento do sistema ao degrau de +1% em S0.....	49
Tabela 3: Comportamento do sistema ao degrau de +1% em F.....	51
Tabela 4: Comportamento do sistema ao degrau de +1% em T0	53
Tabela 5: Comportamento de X diante a um degrau de 1 g/L na variável S0	55
Tabela 6: Comportamento de S diante a um degrau de 1 g/L na variável S0	57
Tabela 7: Comportamento de P diante a um degrau de 1 g/L na variável S0	59
Tabela 8: Comportamento de T diante a um degrau de 1 L/s na variável F	60
Tabela 9: Parâmetros obtidos para os controladores da malha 1	66
Tabela 10: Parâmetros obtidos para os controladores da malha 2	67
Tabela 11: Parâmetros obtidos para os controladores.....	70
Tabela 12: Parâmetros obtidos para os controladores.....	74
Tabela 13: Matrizes de peso para regulação quadrática linear e as matrizes de ganho	78
Tabela 14: Comportamento de X diante a um degrau de 1 L/s na variável F.....	89
Tabela 15: Comportamento de X diante a um degrau de 1 K na variável T0.....	90
Tabela 16: Comportamento de S diante a um degrau de 1 L/s na variável F	91
Tabela 17: Comportamento de S diante a um degrau de 1 K na variável T0	92
Tabela 18: Comportamento de P diante a um degrau de 1 L/s na variável F	93
Tabela 19: Comportamento de P diante a um degrau de 1 K na variável T0	94
Tabela 20: Comportamento de T diante a um degrau de 1 g/L na variável S0.....	95
Tabela 21: Comportamento de T diante a um degrau de 1 K na variável T0	96

Símbolos

a_i - Taxa de adsorção da substância i

A_r - Área superficial do reator

c' - Concentração da substância na solução hipoteticamente em equilíbrio com o seio do gás

c_i - Concentração verdadeira da substância i no seio da solução

C_p - Capacidade calorífica molar

e.e – Estado estacionário

E_a - Energia de ativação

F – Vazão

FT – Função de transferência

G_{ij} – Função de transferência que relaciona a saída i com a entrada j

H – Constante de Henry

I - Concentração de cada espécie I na solução

I_0 - Concentração de cada espécie I na corrente de entrada do reator

J – Função de performance do sistema

K_c – Ganho proporcional do controlador

K_{La} - Coeficiente de transferência de massa

K_s - Parâmetro do modelo de Monod

k - Velocidade específica da reação

K_w - Coeficiente de transferência de calor entre a parede do reator e a camisa de resfriamento

LQR – Regulação Quadrática Linear

MeS - Minerais sulfetados

m_j – variável manipulada j

p_i - Pressão parcial de i no seio da solução

P – Concentração de produto no reator

T_0 - Temperatura da corrente de entrada

T_k - Temperatura da camisa de resfriamento

T - Temperatura no interior do reator

R - Constante dos gases ideais

RGA – Matriz de ganhos relativos

r_i - Taxa de consumo/crescimento da substância i

S_0 – Concentração de substrato na corrente de entrada do reator

S - Concentração de substrato no reator

X - Concentração de células no reator

y_i – Variável controlada i

ω - Fração convertida do mineral

ω_c - frequência de oscilação sustentada

α - Parâmetro da partícula

φ - Fator semiempírico

μ - Velocidade específica de crescimento

$\vartheta_{i,j}$ - Número de moles de cada espécie i consumido ou produzido na reação j

ρ – Densidade

ΔH_r - Energia liberada na oxidação

Λ_{ij} – Ganho relativo entre a variável i e a j

1 Introdução

1.1 Contextualização

Segundo classificação internacional adotada pela Organização das Nações Unidas, mineração é a extração, elaboração e beneficiamento de minerais que se encontram em estado natural (CARVALHO, CARVALHO, *et al.*, 2009). De acordo com o relatório de 2018 do Programa das Nações Unidas para o Desenvolvimento Sustentável e do Programa das Nações Unidas para o Meio Ambiente, a extração de minerais da terra apresenta oportunidades, desafios e riscos para o desenvolvimento sustentável. Atualmente, os minerais são essenciais para o bem-estar do ser humano e virtualmente fundamentais para todos os setores da economia (UNDP E UN ENVIRONMENT, 2018). Logo, devido a essa grande importância, melhorar continuamente o desempenho dos processos de extração é uma questão essencial, e isso quer dizer tornar esses processos mais eficazes (com melhores rendimentos) e mais sustentáveis.

Um processo com essas características é a bio-hidrometalurgia, mais especificamente a biolixiviação. Esta técnica é oriunda das seguintes questões: se por um lado a demanda por metais é crescente, por outro, a indústria de mineração está diante do esgotamento das reservas contendo teores elevados – superiores a 1% - de determinados metais (OLIVEIRA, SÉRVULO, *et al.*, 2010), ou ainda que as reservas encontradas possuem elevada complexidade de mineração, como o caso dos minérios refratários (BRIERLEY e BRIERLEY, 2013). Esses fatos impõem a necessidade de extrair metal a partir de minérios de baixos teores e de rejeitos com baixo custo operacional. (OLIVEIRA, SÉRVULO, *et al.*, 2010).

A lixiviação bacteriana, ou biolixiviação, é um processo biotecnológico que se fundamenta na utilização de micro-organismos capazes de solubilizar metais, e posteriormente recuperá-los, através da oxidação de sulfetos metálicos (FRANCISCO JÚNIOR, BEVILAQUA e GÁRCIA JÚNIOR, 2007). É uma tecnologia com significativo potencial de agregar valor à indústria de mineração assim como pode ser capaz de levar benefícios ambientais e sociais a todos os seus associados (PRADHAN, NATHSARMA, *et al.*, 2008).

Para Brierley e Brierley (2013), o aumento dos custos de energia, o crescente movimento em direção à mineração sustentável e a pressão para melhor administração dos recursos, contribuíram significativamente para o apelo da bio-hidrometalurgia uma vez que, como já mencionado, essa tecnologia tem custos mais baixos e é aplicável a materiais que normalmente são considerados rejeitos.

Segundo Watling (2006), os custos associados com a manutenção dos microrganismos que fazem o bioprocessamento dos sulfetos são mínimos, porque esses ganham energia com as reações redox e utilizam o gás carbônico do ar como fonte de carbono, além de obter fósforo, nitrogênio, potássio e micronutrientes do meio em que ocorre a biolixiviação. Esse fato facilita a aplicação desse método de extração de metais em regiões remotas. Esse estudo também menciona que normalmente o tempo de partida dessas plantas é baixo.

Além disso, o processo biotecnológico não emite os gases poluentes e impactantes do processo pirometalúrgico, que podem conter metais pesados como cádmio, arsênio, mercúrio, bismuto, chumbo etc. E ainda, a biolixiviação, quando comparada ao processo convencional, apresenta uma redução de custos de operação e de investimento superiores a 50% (OLIVEIRA, SÉRVULO, *et al.*, 2010).

1.2 Motivação

Na disciplina EQE400 – Modelagem e Dinâmica de Processos no segundo período de 2018 com o Prof. Marcellus Guedes, a avaliação final era a elaboração de um trabalho em grupo apresentando a modelagem de um processo utilizando a abordagem de espaço de estados. Diante do cenário exposto na contextualização, encontrou-se na biolixiviação da pirita um processo adequado para a elaboração do trabalho, já que possui custos menores (devido à maior eficiência) e é mais sustentável que outras alternativas existentes, além da literatura ter poucas referências sobre a modelagem através de espaço de estados desse processo criando um desafio adicional. O trabalho foi elaborado e apresentado conforme pedido na disciplina.

Já a disciplina EQE487 – Controle e Instrumentação de Processos no primeiro período de 2019 com o Prof. Bruno Capron propôs um projeto que consistia na modelagem, construção da malha de controle e escolha da melhor sintonia por simulação computacional de um processo (nesse caso não foi utilizado o processo de biolixiviação).

Inspirado nesses dois trabalhos, buscou-se juntar essas duas propostas para através dos conceitos abordados em sala de aula e estudar a modelagem e o controle de um processo industrial, nesse caso a biolixiviação da pirita.

Ademais, escolheu-se continuar com o tema da biolixiviação da pirita por esse ser um processo altamente complexo e dependente de variados fatores, além de seus dados técnicos não estarem facilmente acessíveis. E como abordado na contextualização, a biolixiviação tem potencial de agregar valor à indústria de mineração e levar benefícios sociais e ambientais a seus associados.

1.3 Objetivos

O objetivo desse projeto é utilizar dados e informações da literatura para criação de um modelo simplificado para o processo de biolixiviação da pirita e estudar as alternativas para um problema de controle que será apresentado. Abaixo estão elencados os objetivos específicos desse projeto:

- Obter um modelo para o processo de biolixiviação da pirita em reator contínuo;
- Resolver os balanços de massa e de energia quando os termos de acúmulo são nulos para obtenção do estado estacionário inicial;
- Linearizar o modelo para a obtenção das matrizes da abordagem de espaço de estados;
- Validar o modelo linear através da comparação com o modelo não linear;
- Analisar o comportamento dinâmico do sistema através da análise das funções de transferência obtidas;
- Definir o problema de controle e o tipo de abordagem para o sistema obtido;
- Obter os parâmetros dos controladores;
- Analisar as respostas do sistema em malha fechada.

1.4 Estrutura do texto

Esse projeto final foi dividido em 5 Capítulos. O primeiro deles é a Introdução que apresenta uma contextualização, a motivação para o trabalho e seus objetivos. Em seguida, é feita a Revisão Bibliográfica, nela são discutidos os princípios da biolixiviação em tanques agitados e são definidos os constituintes do processo: o mineral estudado e o micro-organismo utilizado. É também na Revisão Bibliográfica que é apresentado como normalmente é feita a modelagem de um processo de biolixiviação e como é definido um problema de controle.

O terceiro Capítulo é o da Metodologia, este é dividido em modelagem e controle. Na modelagem é descrito como foi tratado o processo, os balanços de massa e energia feitos e como foi aplicada a abordagem de espaço de estados. Já na parte de controle, inicialmente o processo é dividido em duas malhas através da matriz de ganho relativo, com essa divisão é explicado como será feito o projeto dos controladores usando os métodos de Ziegler e Nichols e o da Síntese Direta. Por último é disposto como será feito o controle ótimo através da Regulação Quadrática Linear.

Já no Capítulo referente aos Resultados e Discussões, primeiro é apresentado o estado estacionário inicial obtido, depois é exposta a comparação entre os modelos linearizado e não linear e em seguida as funções de transferência do processo. Na parte de resultados de controle, são exibidas e analisadas as repostas para cada método de projeto dos controladores.

Por fim, no Capítulo 5, são apresentadas as conclusões para a modelagem e para o controle do processo e são dispostas sugestões para possíveis próximos passos.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Biolixiviação em tanques agitados

A biolixiviação é atualmente empregada em duas aplicações de engenharia diferentes: pilhas e tanques agitados. Ambas vem sendo usadas por pelo menos cem anos para o processamento de metais pela indústria da mineração, porém só por meados dos anos 80, os processos começaram a ser modificados e melhorados (BRIERLEY e BRIERLEY, 2013). No presente trabalho, o processo de biolixiviação em tanques agitados foi escolhido para ser estudado.

Nesse sistema é utilizado um grande reator que pode ser agitado mecanicamente ou por meio de injeção de ar, que, além da agitação, pode suprir a demanda de oxigênio e dióxido de carbono dos micro-organismos (OLIVEIRA, SÉRVULO, *et al.*, 2010). Com isso, a biolixiviação em tanques agitados pode promover uma maior homogeneização da massa reacional, o que permite um melhor controle das principais variáveis de processo (ACEVEDO, 2000).

A biolixiviação em tanques agitados é tipicamente utilizada no processamento de concentrados de minerais. Concentrados são minérios que foram aprimorados por variados métodos, tal como flotação e separação gravitacional, que separam os minerais não metálicos (minerais de ganga) dos sulfetos minerais que contêm os metais de valor. O aprimoramento do minério reduz substancialmente o volume de material a ser processado nos tanques agitados (BRIERLEY e BRIERLEY, 2013).

Uma das principais vantagens desse sistema é que a interação da solução com o mineral é muito superior quando comparada aos sistemas estáticos (pilhas e montes) visto que ocorre maior contato entre os agentes oxidantes e a superfície do mineral. Além disso, segundo Godoy (2007), o processo em pilha vem tendo uma taxa de produção menor do que a esperada e tempos de partidas maiores do que a expectativa, o que torna o processo em tanques agitados uma possível solução para esses problemas.

O processo nesses tanques é mais comumente reservado para metais mais valorados, como ouro, e urânio e, metais de base como cobre, níquel, zinco e cobalto (MINTEK). Isso porque o investimento e custo operacional desse sistema de engenharia é substancialmente maior que o do processo em pilha. Por sua vez, a recuperação de metais também é muito maior do que no processo em pilha (BRIERLEY e BRIERLEY, 2013).

No presente trabalho, foi escolhido o sistema de tanques agitados para estudo, haja vista, que é um sistema que possibilita um maior controle das variáveis operacionais e com isso facilita a aplicação dos conceitos de modelagem e controle de processo. Ademais, é uma tecnologia com uso crescente mundialmente que pode diminuir a poluição causada pelos processos tradicionais de processamento de minérios e que já é usada comercialmente em escala mundial.

2.2 Constituintes do processo

2.2.1 Mineral estudado – Pirita

O mineral escolhido para modelagem do processo foi a pirita por ser uma das formas mais comuns de sulfetos minerais, e sua oxidação ser um processo muito importante na natureza (FENG, TIAN, *et al.*, 2019).

A oxidação da pirita é a principal causa da drenagem ácida de minas que é o maior problema ambiental na indústria de mineração, pois este pode aumentar a dissolução de rochas, a acidificação de aquíferos e a mobilização de metais pesados (FENG, TIAN, *et al.*, 2019). Grande parte do esforço de pesquisa é direcionada para a compreensão do seu mecanismo ao nível molecular, porém, mesmo com um número considerável de artigos e trabalhos de revisão, o mecanismo que envolve a formação de sulfato e ácido a partir da pirita ainda permanece pouco entendido (DOS SANTOS, 2015).

O processo de oxidação da pirita está descrito nos tópicos abaixo.

2.2.2 Micro-organismo utilizado – Acidithiobacillus ferrooxidans

Acidithiobacillus ferrooxidans, inicialmente denominada *Thiobacillus ferrooxidans* até sua reclassificação em 2000, é do domínio das bactérias e do filo das proteobactérias. Esta é usualmente escolhida para ser usada em processos biolixiviação pela sua capacidade de regenerar Fe (III) a partir de Fe (II) e oxidar S e politionatos a sulfato. A energia obtida pela oxidação dos substratos inorgânicos é utilizada pela espécie para a fixação do CO₂ atmosférico (via Ciclo de Calvin), sua fonte de carbono. Além disso, a *A. ferrooxidans* é uma espécie mesofílica e acidofílica, sendo 30 °C a temperatura ótima de crescimento e o seu pH ótimo de crescimento situa-se em torno de 2,03 (FRANCISCO JÚNIOR, BEVILAQUA e GÁRCIA JÚNIOR, 2007).

Outra característica fisiológica marcante dessa espécie é sua generalizada resistência a elevadas concentrações de íons metálicos. Esse aspecto é de grande interesse prático no processo bio-hidrometalúrgico, visto que a concentração de metais aumenta, gradativamente, no decorrer do processo de biolixiviação (FRANCISCO JÚNIOR, BEVILAQUA e GÁRCIA JÚNIOR, 2007).

2.3 Modelagem do processo de biolixiviação

A biolixiviação ou bio-oxidação de minerais sulfetados (MeS) pode ser considerada como composta por múltiplos subprocessos, cada um desses pode ser descrito em termos de mecanismo e de uma expressão de taxa (BOON, 1996). Suas etapas fundamentais são a adsorção de CO_2 e O_2 da fase gás para a fase líquida, a oxidação microbiana de íon ferroso e/ou de espécies de enxofre e a dissolução oxidativa do mineral (PETERSEN, 2010).

A adsorção do gás (e sua difusão nos poros, se ocorrer) é um processo de transferência de massa, a oxidação microbiana segue caminhos de reações bioquímicas, e a oxidação mineral pode ser descrita como um processo eletroquímico de corrosão. Mesmo eles sendo governados por diferentes tipos de mecanismos, todos são processos de taxa, o que significa que eles prosseguem a uma certa velocidade e podem ser descritos por expressões cinéticas apropriadas. Logo, construir um modelo quantitativo de qualquer processo de biolixiviação requer uma descrição matemática de seus vários processos cinéticos. (PETERSEN, 2010). A Figura 1 ilustra cada uma dessas etapas.

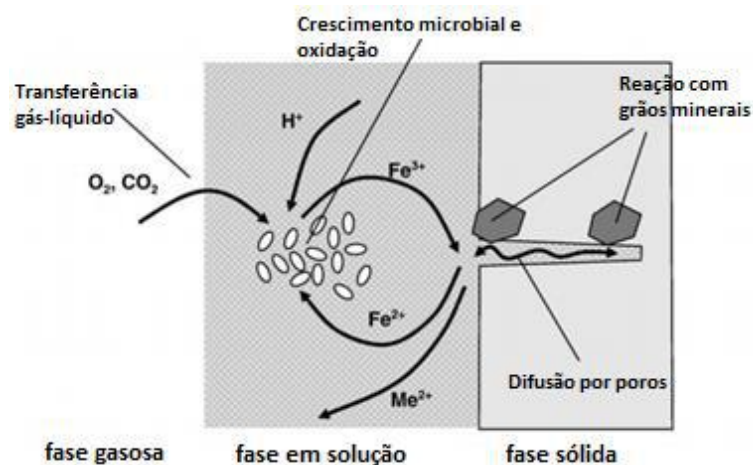


Figura 1: Etapas da biolixiviação

Fonte: Adaptado de Petersen (2010)

Essas expressões cinéticas descrevem a taxa de cada subprocesso como função de variáveis do processo como: concentração de biomassa, diâmetro de partícula, concentração de íon ferroso e férrico, pH e temperatura (BOON, 1996).

Nos itens abaixo foram examinadas independentemente as taxas dos subprocessos envolvidos na biolixiviação de sulfetos metálicos para que se consiga entender através da modelagem matemática como variações nas condições de processo influenciam o processo como um todo.

2.3.1 Transferência de gás entre a fase gasosa e a fase líquida

A taxa de adsorção dos gases (oxigênio e gás carbônico) da fase gasosa para a fase líquida onde ocorreram as posteriores etapas é modelada usando uma correlação de transferência de massa do tipo lei de resfriamento de Newton (PETERSEN, 2010), representada pela Eq. 1:

$$a_{gas} = K_L a * (c' - c_s) \quad \text{Eq. 1}$$

Em que:

- $K_L a$ é o Coeficiente de transferência de massa: parâmetro concentrado (não tem variação espacial) que é influenciado pela interface gás-líquido disponível, pelas propriedades da solução e do reator e pela temperatura. A não ser nos casos mais simples, só pode ser determinado empiricamente;
- c' é a Concentração de oxigênio ou gás carbônico na solução que hipoteticamente estaria em equilíbrio com o seio do gás;
- c_s é a Concentração de oxigênio ou gás carbônico verdadeira no seio da solução.

Foi demonstrado que a disponibilidade de CO_2 no biorreator é um parâmetro crítico para o crescimento bacteriano. Para se obter um melhor gerenciamento da disponibilidade de CO_2 , é importante descobrir se a limitação de CO_2 afeta somente a densidade bacteriana da mistura, ou se também afeta a composição do consórcio bacteriano ao favorecer o crescimento de organismos com o sistema de fixação de CO_2 mais efetivo (D'HUGUES, JOULIAN, *et al.*, 2008). Para Boon e Heijnen (1998), a limitação de gás carbônico é mais comum de ocorrer do que a limitação de oxigênio.

Entretanto, os micro-organismos oxidantes de ferro e enxofre são aeróbios; portanto, para que a biolixiviação se estabeleça, é fundamental a disponibilidade de oxigênio dissolvido na superfície do mineral, sendo a concentração de oxigênio dependente do substrato energético utilizado e da sua concentração. Por exemplo, no caso da pirita são necessários quatro átomos de oxigênio para cada átomo de enxofre. (OLIVEIRA, SÉRVULO, *et al.*, 2010).

A importância do oxigênio no meio reacional foi alvo de diversos estudos, Moses e Herman (1991) avaliaram a oxidação da pirita apenas com a adição de Fe³⁺ no meio, sem a presença de oxigênio dissolvido. A reação de oxidação da pirita não foi sustentada, contudo, foi observada a formação de sulfatos após a adição de oxigênio no meio. Esse resultado indica que o oxigênio é indispensável para que ocorra a oxidação da pirita.

Segundo Petersen (2010), a transferência de massa gás-líquido é normalmente a taxa limitante de processo em grandes tanques e extremamente complexa pois depende de um grande número de fatores. Para esse estudo foi seguida a consideração feita por Boon (1996) que sugere que é atingido um estado estacionário em que a taxa de consumo de O₂ devido a oxidação bacteriana (r_{O_2}) é igual a taxa de transferência de oxigênio da fase gás para a fase líquida:

$$a_{gas} = r_{O_2} \quad \text{Eq. 2}$$

2.3.2 Bio-oxidação do íon ferroso

A pirita (FeS₂) que é um sulfeto, é frequentemente encontrada associada a outros sulfetos minerais, pode ser oxidada com geração de sulfato férrico em presença de água e oxigênio, de acordo com as Reações abaixo (OLIVEIRA, SÉRVULO, *et al.*, 2010).



O sulfato férrico, gerado a partir da Reação 2, é um eficiente agente lixiviante/oxidante, capaz de promover a dissolução de sulfetos em geral, incluindo a calcopirita (CuFeS₂) e a pirita (FeS₂), retornando ao estado ferroso, como mostra a Reação 3 (YAHYA A. e B, 2002):



Entretanto, as Reações 1 e 2 ocorrem lentamente na ausência de um catalisador, pois o íon ferroso é estável em meio ácido e conseqüentemente a oxidação intermediada pelo íon férrico também é lenta (HELBERT, 1999). Portanto, para acelerar esse processo, micro-organismos são utilizados para catalisar essas reações, nesse caso será a bactéria *Acidithiobacillus ferrooxidans*.

Esse mecanismo é chamado de bio-oxidação indireta completa, em que segundo Boon (1996), o sulfeto metálico é quimicamente oxidado pelo íon férrico levando à dissolução do cátion metálico, o papel da bactéria é a regeneração do íon férrico a partir da Reação 2.

Para Boon (1998), a alta taxa de oxidação da pirita em experimentos de bio-oxidação é devida ao alto potencial redox da solução, esse potencial é mantido alto justamente pela regeneração do íon férrico, já que ele é constantemente consumido na oxidação da pirita.

Segundo Pradhan (2008), a taxa de oxidação microbiana tanto do íon ferroso quanto do enxofre contidos nos sulfetos minerais depende, entre outros fatores, da concentração de micro-organismos presentes no sistema reacional, logo precisa-se conhecer o modelo de crescimento celular dos micro-organismos que catalisam esse processo. Diversas expressões são conhecidas e utilizadas como modelo para o crescimento microbiano, porém segundo Petersen (2010), a maioria das abordagens centram-se no modelo Monod, sua expressão está apresentada na Eq. 3:

$$\mu = \frac{\mu_{MAX} * S}{K_s + S} \quad \text{Eq. 3}$$

- μ é a Velocidade específica de crescimento;
- μ_{MAX} é a Velocidade máxima específica de crescimento;
- K_s é o Parâmetro do modelo: corresponde a concentração de substrato S^* , na qual a velocidade específica de crescimento é metade da máxima;
- S é a Concentração do substrato limitante.

Este é um modelo não estruturado, ou seja, considera-se que a célula é uma entidade internamente homogênea e se aplica quando apenas um substrato limita o crescimento. Por esse motivo, no esquema de biorreator a ser modelado, serão utilizadas taxas de aeração e agitação em que CO_2 e O_2 não sejam limitantes.

Devido à natureza auto catalítica do crescimento celular em que as células consomem substrato para produzir mais células, pode se considerar que as taxas cinéticas são proporcionais à concentração de células no meio. Logo, para se obter a taxa de crescimento celular (r_x), multiplica-se a concentração de biomassa no reator (X) pela constante de proporcionalidade que nesse caso é a própria velocidade de crescimento específica da bactéria.

$$r_x = \mu * X \quad \text{Eq.4}$$

Como foi descrito acima, a reação lenta da biolixiviação da pirita é a Reação 2, e é nela que a bactéria *Acidithiobacillus ferrooxidans* tem ação catalítica. Segundo Hansford (1997), a oxidação bacteriana do íon ferroso é o subprocesso que controla a taxa de biolixiviação de todos os sulfetos minerais, por isso considerou-se que essa reação pode representar o comportamento do processo global de biolixiviação e a partir dela que o processo será modelado.

Portanto, precisa-se conhecer também a taxa de oxidação de Fe (II) a Fe (III). Em um experimento com a bactéria *Thiobacillus Ferroxidans* (renomeada para *Acidithiobacillus ferrooxidans* futuramente), Pesic e Oliver (1989) concluíram que a taxa de consumo de substrato ou taxa de oxidação de Fe (II) para Fe (III) (r_s), é dada pela Eq. 5 em pH abaixo de 2,2:

$$-r_s = k * X * S * p_{O_2} * \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad \text{Eq.5}$$

- r_s é a Taxa de oxidação de Fe (II) / Taxa de consumo de substrato;
- k é a Velocidade específica da reação;
- p_{O_2} é a Pressão parcial do oxigênio no seio da solução;
- E_a é a Energia de ativação;
- R é a Constante dos gases ideais;
- T é a Temperatura no interior do reator.

Considerando que o consumo de oxigênio decorre apenas da oxidação bacteriana, pode-se concluir a partir da relação estequiométrica da Reação 2 e das equações 2 e 5 que:

$$\frac{r_s}{4} = r_{O_2} = a_{gás} \quad \text{Eq. 6}$$

2.3.3 Dissolução mineral

A última expressão de a ser estudada é a taxa de dissolução mineral propriamente dita (Reação 3). Ela pode ser entendida como um processo de superfície, é uma função direta da superfície mineral disponível por unidade de volume da solução reagente. É importante reconhecer que essa superfície não é constante, mas muda com o progresso da lixiviação – partículas minerais em suspensão diminuem à medida que se dissolvem por lixiviação. Com a depleção de massa, invariavelmente ocorre uma redução de superfície disponível e assim uma diminuição na taxa de lixiviação (PETERSEN, 2010).

Nos modelos, a área superficial não aparece explicitamente, mas está incluída implicitamente nos modelos cinéticos ao se usar os adequados termos de reação que expressem a taxa de lixiviação (r_{MeS}) como uma função da conversão. Na sua forma mais universal pode ser descrita pela Eq. 7 (PETERSEN, 2010):

$$r_{MeS} \propto \alpha(d) * (1 - \omega)^\varphi \quad \text{Eq. 7}$$

- ω é a Fração convertida do mineral;
- $\alpha(d)$ é o Parâmetro da partícula: Incorpora o seu tamanho (d) e a natureza do grão mineral;
- φ é o Fator semiempírico: Descreve o progresso da lixiviação.

No caso específico desse trabalho, como será visto mais adiante, o reator estudado tem entrada contínua de pirita e, portanto, não há diminuição da taxa de dissolução devido a menor disponibilidade de superfície mineral. Entretanto como o mineral é quimicamente oxidado pelo íon Fe^{3+} , a taxa de oxidação química depende do potencial redox da solução ($[Fe^{3+}]/[Fe^{2+}]$). No decorrer do processo, Fe^{2+} é produzido e Fe^{3+} é consumido pela dissolução mineral, porém com a regeneração bacteriana, o potencial redox da solução é mantido alto e assim é mantida (alta) a taxa de dissolução da pirita. Por isso, segundo Boon e Heijnen (1996), na bio-oxidação bacteriana a taxa de oxidação química (dissolução mineral) é mantida em seu valor máximo e essa não será considerada a etapa lenta do processo.

2.4 Definição de um problema de controle

Para definição de um problema de controle para o processo é preciso identificar três tipos de variáveis, segundo Seborg, Edgar, et al. (2011):

- Variáveis controladas (CVs): As variáveis do processo que são controladas. O valor desejado da variável controlada é chamado de referência.

- Variáveis manipuladas (MVs): São variáveis que podem ser ajustadas para manter as variáveis controladas próximas das suas referências, tipicamente são vazões.

- Variáveis de distúrbio (DVs): Variáveis do processo que afetam as variáveis controladas, mas não podem ser manipuladas. Distúrbios geralmente estão relacionados com mudanças no ambiente operacional do processo.

O próximo passo é classificar as estratégias de controle a serem utilizadas:

- **Controle em malha aberta - *Feedforward***

No controle em malha aberta, as informações sobre as variáveis de saída não são utilizadas para ajustar qualquer entrada do sistema, ou seja, não há realimentação. O objetivo desse tipo de controle é que o processo atinja um determinado comportamento desejado quando há uma perturbação em alguma das entradas do sistema.

- **Controle em malha fechada - *Feedback***

No controle em malha fechada, utiliza-se uma informação do processo para efetuar o controle do mesmo. Ou seja, o sinal de saída $y(t)$ da variável controlada é usado como base para calcular o sinal de controle mandado ao atuador para ajustar a variáveis manipulada $u(t)$ em cada instante de tempo. O sinal de saída é medido através de um sensor e de um transmissor (dispositivos que permitem medir e fazer a transdução da grandeza física a ser controlada em um sinal elétrico padrão), e consecutivamente é comparado com um sinal de referência. A diferença entre os dois sinais, que é o sinal de erro, é o fator utilizado para a definição do sinal de controle que deve ser aplicado para corrigir o desvio entre os sinais de referência e de saída.

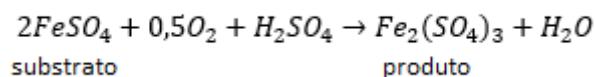
3 Metodologia

3.1 Modelagem

3.1.1 O processo

Foi utilizado como referência o processo descrito por d'Hugues et al. (2008). Para a modelagem do presente estudo, considerou-se apenas o reator R1 do artigo citado, o mesmo é um reator contínuo de tanque agitado de 50 litros de volume e com proporção entre altura e diâmetro igual a 1. A concentração de células de *A. ferrooxidans* é inicialmente 1 gcélulas.L⁻¹. No reator, há entrada contínua de pirita (FeS₂) suspensa no meio de cultivo, formando-se uma polpa. O tempo de residência no reator é de 3 dias, logo a vazão de entrada e de saída (F) é mantida constante em 0,69 L/h. Além disso, a temperatura do reator é mantida através de uma camisa de resfriamento. A lama de biolixiviação é agitada mecanicamente por um sistema misto (axial/radial) montado em um eixo rotativo, as condições de aeração e agitação são respectivamente 2000 L/h e 350 rpm.

Como visto na revisão bibliográfica, a dissolução da pirita pelo íon férrico é um evento rápido (instantâneo), por isso, considerou-se que a concentração de pirita entrando no reator pode ser aproximada como a concentração de entrada de FeSO₄. E assim a base para a modelagem do processo será a Reação 2 (novamente apresentada abaixo):



Segundo d'Hugues et al. (2008), a concentração de minério na corrente de alimentação (S0) possui valor de 40 g.L⁻¹ (também é a concentração de substrato) e o processo tem pH controlado entre 1,2-1,5 com adição de CaCO₃. A concentração do substrato (FeSO₄) no reator (e também na corrente de saída) é indicada por S. Todo substrato consumido vai a produto, porém, a parte não reagida sai na corrente de saída. Sulfato de ferro (III) (Fe₂(SO₄)₃) é o produto de interesse, sendo P a sua concentração mássica. A Figura 2 apresenta o esquema do reator.

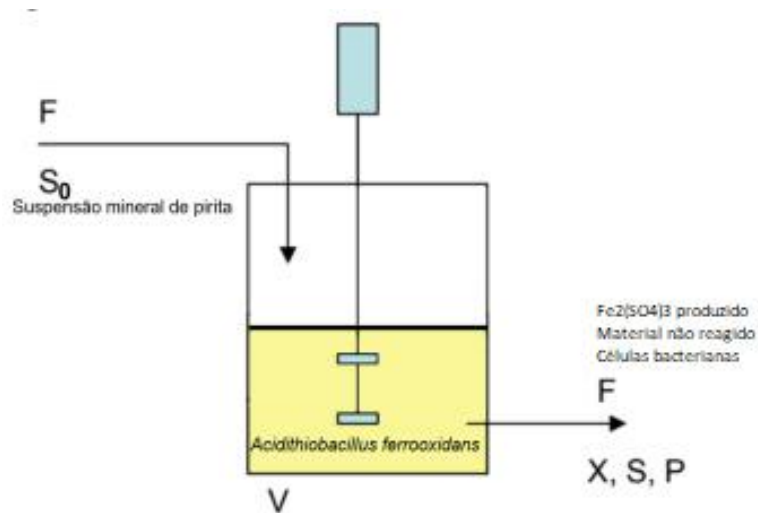


Figura 2: Ilustração do reator

Fonte: Elaboração própria

3.1.2 Balanço de massa por componente (BMC)

As expressões de taxa descrevendo os diferentes subprocessos do processo de biolixiviação precisam ser combinadas para permitir a descrição da taxa de formação e consumo de todas as espécies participantes no processo e integradamente formar o balanço de massa dinâmico do reator contínuo (PETERSEN, 2010). De forma simplificada, o balanço para cada espécie pode ser escrito conforme a Eq.8:

$$\frac{dI}{dt} = \frac{F}{V} (I_0 - I) + \sum_j \vartheta_{i,j} r_j \quad \text{Eq. 8}$$

- I é a Concentração de cada espécie i na solução;
- I_0 é a Concentração de cada espécie i na corrente de entrada do reator;
- F é a Vazão volumétrica de entrada do reator;
- V é o Volume do reator;
- $\vartheta_{i,j}$ é o Número de moles de cada espécie i consumido ou produzido na reação j ;
- r_j é a Taxa específica de cada reação j .

A equação 8 deve ser reescrita para cada variável considerada no problema e o sistema de equações precisa ser resolvido simultaneamente juntamente com as condições iniciais

apropriadas para se obter uma descrição apropriada das concentrações das variáveis no tempo (PETERSEN, 2010).

3.1.2.1 Balanço material do crescimento celular no reator

No modelo proposto, as células da bactéria *Acidithiobacillus ferrooxidans* são inoculadas no reator antes do início da operação e não há entrada de células no sistema durante o processo. Além disso, substituindo a expressão de crescimento celular (Equações 3 e 4) no balanço de massa para a variável X obtemos a seguinte expressão:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{F}{V} * (-X) + \left(\frac{\mu_{MAX} * S}{K_s + S} \right) X \quad \text{Eq.9}$$

3.1.2.2 Balanço material do substrato no reator

Nesta abordagem, o FeSO₄ foi considerado substrato, e sua oxidação é catalisada pela *Acidithiobacillus ferrooxidans*. Nesse caso, a equação 8 pode ser reescrita como adiante:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{F}{V} (S_0 - S) - (-r_s) \quad \text{Eq.10}$$

E como já apresentado na equação 5, segundo Pesic et al. (1989), a taxa de consumo de substrato é:

$$-r_s = k * X * S * p_{O_2} * \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad \text{Eq.5}$$

A taxa acima é uma função da pressão parcial de O₂ e usando a lei de Henry pode-se relacioná-la aos parâmetros de aeração e agitação do reator através das Equações 1 e 6:

$$p_{O_2} = p'_{O_2} - \frac{K_L a}{H} * \left(-\frac{r_s}{4}\right) \quad \text{Eq.11}$$

- H é a Constante de proporcionalidade da lei de Henry;

- p'_{O_2} é a Pressão parcial de oxigênio que hipoteticamente estaria em equilíbrio com a concentração de saturação de oxigênio da solução. p'_{O_2} também é o valor máximo que p_{O_2} pode atingir;

3.1.2.3 Balanço de massa do produto no reator

Por último é apresentado o balanço material do produto ($Fe_2(SO_4)_3$):

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{F}{V} * P + r_P \quad \text{Eq.12}$$

Como visto no item anterior ($-r_s$) é a taxa de consumo de substrato, porém como pode ser visto na Reação 2, o produto é formado em uma taxa com metade desse valor, portanto:

$$r_P = -\frac{r_s}{2} = 0,5 * k * X * S * p_{O_2} * \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad \text{Eq. 13}$$

3.1.3 Balanço Energético

Por último, como a bactéria que catalisa o processo de biolixiviação possui uma temperatura ótima de atuação, geralmente os reatores possuem algum sistema térmico para manter a temperatura próxima da ótima. Portanto, foi aplicado um balanço energético em que o volume de controle foi o reator. Seguindo a metodologia de Trierweiler (1997) e Petersen (2010), a temperatura do conteúdo do reator pode ser alterada devido as trocas térmicas entre o reator e a camisa de resfriamento e entre o reator e a corrente de entrada, além disso a reação de oxidação do ferro é exotérmica e libera energia.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\rho C_p} * [(-r_s) * (-\Delta H_r)] + \frac{F}{V} * (T_0 - T) + \frac{K_w A_r}{\rho C_p V} * (T_k - T) \quad \text{Eq.14}$$

- T é a Temperatura dentro do reator;
- ρ é a Densidade do conteúdo no interior do reator: Como o volume é fixo, foi aproximada para X+S+P;
- C_p é a Capacidade calorífica molar do conteúdo do reator;
- ΔH_r é a Energia liberada na oxidação da pirita
- T_0 é a Temperatura da corrente de entrada;

- K_w é o Coeficiente de transferência de calor entre a parede do reator e a camisa de resfriamento;
- A_r é a Área superficial de troca térmica entre a camisa e o reator;
- T_k é a Temperatura da camisa de resfriamento: Mantida constante em 305 K.

Na determinação dos parâmetros nas condições do processo e outras constantes envolvidas nas equações, foram utilizados dados disponíveis na literatura, contidos na Tabela abaixo.

Tabela 1: Parâmetros utilizados na modelagem do processo

Parâmetros do processo	Nome	Valor	Unidade	Referência
k	Velocidade específica de reação 2	$4,50 \times 10^7$	$L.g^{-1}s^{-1} atm^{-1}$	(PESIC <i>et al.</i> , 1989)
E_a	Energia de Ativação	$58,77 \times 10^3$	$J.mol^{-1}$	(PESIC <i>et al.</i> , 1989)
$\mu_{máx}$	Taxa máxima de crescimento bacteriano	$2,77 \times 10^{-5}$	s^{-1}	(BOON, RAS e HEIJNEN, 1999)
k_s	Constante de saturação	0,24	$g.L^{-1}$	(BOON, RAS e HEIJNEN, 1999)
K_{La}	Coeficiente de transferência de massa gás-líquido	0,0014	s^{-1}	(BOON, 1996)

Tabela 1: Parâmetros utilizados na modelagem do processo

Parâmetros do processo	Nome	Valor	Unidade	Referência
H^1	Constante de Henry	59,20	atm.L.g ⁻¹	(PERRY, GREEN e MALONEY, 1997)
C_p^2	Capacidade calorífica molar	62,38	J.mol ⁻¹ K ⁻¹	(NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY - U.S, 2018)
ΔH_r	Energia liberada na oxidação da pirita	1546	kJ.mol ⁻¹	(ROHWERDER, SHIPPERS e SAND, 1997)
K_w	Coeficiente de transferência de calor para a camisa de resfriamento	1,12	KJ.s ⁻¹ m ⁻² K ⁻¹	(TRIERWEILER, 1997)
A_r	Área de troca térmica entre a camisa e o reator	0,50	m ²	(D'HUGUES, JOULIAN, <i>et al.</i> , 2008)

3.1.4 Obtenção do estado estacionário inicial

O próximo passo no trabalho é a obtenção do estado estacionário inicial, esse também será o ponto de operação estudado. Isso é feito resolvendo o sistema algébrico formado pelas equações de balanço de massa e de energia do reator (Equações 9 a 14) quando os termos de acúmulo são nulos. Busca-se uma solução diferente da trivial ($X=0$) que representaria um *washout* de células no reator.

¹ Para simplificação foi considerada constante na faixa de temperatura estudada.

² O valor do C_p foi aproximado para um valor constante na faixa de temperatura estudada. Como o valor do C_p entre os componentes é próximo, conservativamente, foi utilizado o menor valor (pirita).

3.1.5 Espaço de estados

A descrição de um sistema em espaço de estados fornece a dinâmica de um sistema como um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem acopladas em um conjunto de variáveis internas chamadas de variáveis de estado, juntamente com equações algébricas que combinam as variáveis de estado em variáveis de saída física (ROWELL, 2002).

Sua principal vantagem é usar variáveis de estado para descrever um sistema por um conjunto de equações diferenciais de primeira ordem, em vez de uma ou mais equações diferenciais de ordem n.

- **Variáveis de Estado** são o menor conjunto de variáveis, $x_1(t)$, $x_2(t)$... $x_n(t)$ que determina o estado do sistema dinâmico. Nos processos, as variáveis de estado podem ser medidas ou não, nesse caso adotou-se que as variáveis de estado serão os dados de saída medidos, são eles: as concentrações de células, substrato e produto no reator, além da temperatura no interior do mesmo.
- **Vetor de estado** é um vetor que determina unicamente o estado de um sistema $x(t)$ para qualquer $t > 0$ ou $t = 0$, quando o vetor $u(t)$ está especificado. Cada linha do vetor de estado é uma equação diferencial ordinária conhecida como equação de estado, em que a derivada temporal de cada estado é expressa em termos das variáveis de estado ($x_1(t)$, $x_2(t)$... $x_n(t)$) e das entradas ($u_1(t)$, $u_2(t)$... $u_r(t)$) (ROWELL, 2002). No caso da modelagem desse trabalho as equações de estado podem ser representadas como:

$$\dot{X} = f_1(X, S, P, T, S_0, F, T_0, t) \quad \text{Eq. 15}$$

$$\dot{S} = f_2(X, S, P, T, S_0, F, T_0, t) \quad \text{Eq. 16}$$

$$\dot{P} = f_3(X, S, P, T, S_0, F, T_0, t) \quad \text{Eq. 17}$$

$$\dot{T} = f_4(X, S, P, T, S_0, F, T_0, t) \quad \text{Eq. 18}$$

Em que as Equações 15 a 18 correspondem aos balanços materiais por componentes e balanço energético; e $\dot{x} = dx/dt$. O sistema foi considerado invariante no tempo, ou seja, os coeficientes das equações diferenciais são constantes. Sendo assim o vetor de estados pode ser expresso como:

$$\dot{\underline{x}} = \begin{bmatrix} \dot{X} \\ \dot{S} \\ \dot{P} \\ \dot{T} \end{bmatrix}$$

Já as variáveis de entradas serão a concentração de substrato na corrente de entrada do reator, a vazão e a temperatura desta corrente. Logo, o vetor de entrada será:

$$\underline{u} = \begin{bmatrix} S_0 \\ F \\ T_0 \end{bmatrix}$$

A representação matricial do modelo dinâmico é a seguinte:

$$\dot{\underline{x}} = (\bar{A}\underline{x} + \bar{B}\underline{u})$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} X \\ S \\ P \\ T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ S \\ P \\ T \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_0 \\ F \\ T_0 \end{bmatrix} \quad \text{Eq.19}$$

Uma saída do sistema é qualquer variável de interesse do sistema, como já mencionado, as variáveis de estado foram escolhidas como variáveis de saída nesse trabalho. Logo, a saída do sistema modelado pode ser representada pela equação e matrizes abaixo:

$$\underline{y} = (\bar{C}\underline{x} + \bar{D}\underline{u})$$

$$\begin{bmatrix} X \\ S \\ P \\ T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ S \\ P \\ T \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_0 \\ F \\ T_0 \end{bmatrix} \quad \text{Eq. 20}$$

A obtenção das matrizes da abordagem em espaço de estados é feita através da linearização dos balanços de material e de energia, essa linearização será feita em torno do ponto de operação, que nesse caso é o estado estacionário inicial. As matrizes \bar{A} e \bar{B} são matrizes jacobianas, formadas pelas derivadas parciais dos balanços em relação às variáveis de estado e às variáveis de entrada, respectivamente, avaliadas no estado estacionário inicial (e.e).

Nessa representação f_1 , f_2 , f_3 e f_4 são o balanço do crescimento celular, balanço do substrato, balanço do produto e balanço energético no reator respectivamente. Essas matrizes estão apresentadas abaixo:

$$A = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial f_1}{\partial X}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_1}{\partial S}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_1}{\partial P}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_1}{\partial T}\right)_{e,e} \\ \left(\frac{\partial f_2}{\partial X}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_2}{\partial S}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_2}{\partial P}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_2}{\partial T}\right)_{e,e} \\ \left(\frac{\partial f_3}{\partial X}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_3}{\partial S}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_3}{\partial P}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_3}{\partial T}\right)_{e,e} \\ \left(\frac{\partial f_4}{\partial X}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_4}{\partial S}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_4}{\partial P}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_4}{\partial T}\right)_{e,e} \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial f_1}{\partial S_0}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_1}{\partial F}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_1}{\partial T_0}\right)_{e,e} \\ \left(\frac{\partial f_2}{\partial S_0}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_2}{\partial F}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_2}{\partial T_0}\right)_{e,e} \\ \left(\frac{\partial f_3}{\partial S_0}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_3}{\partial F}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_3}{\partial T_0}\right)_{e,e} \\ \left(\frac{\partial f_4}{\partial S_0}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_4}{\partial F}\right)_{e,e} & \left(\frac{\partial f_4}{\partial T_0}\right)_{e,e} \end{bmatrix}$$

Com as matrizes definidas, pode-se resolver o sistema linear no *MATLAB*. Inicialmente são tomadas as transformadas de Laplace das Eq. 19 e 20, lembrando que as matrizes A, B e C são constantes, obtém-se as Eq. 21 e 22 (OGUNNAIKE e RAY, 1994):

$$s\mathbf{x}(s) = A\mathbf{x}(s) + B\mathbf{u}(s) \quad \text{Eq. 21}$$

$$\mathbf{y}(s) = C\mathbf{x}(s) \quad \text{Eq. 22}$$

Rearranjando as Eq. 21 e 22 de acordo com as leis da álgebra, chega-se na conversão do modelo de espaço de estados para a representação em função de transferência que é apresentada na Eq. 23 (OGUNNAIKE e RAY, 1994):

$$\mathbf{y}(s) = [C (sI - A)^{-1} B] \mathbf{u}(s) \quad \text{Eq. 23}$$

$$\mathbf{y}(s) = G(s) \mathbf{u}(s) \quad \text{Eq. 24}$$

Assim é obtida uma matriz $\bar{G}(s)$ que contém as funções de transferência (FT) do sistema e com elas pode-se estudar a dinâmica do processo frente a variações nas variáveis de entrada e de estado. No item 4.2.2 será usada a função *step* do *MATLAB* para fazer os gráficos das respostas degrau de cada par de variável de entrada/saída, essa resposta será utilizada para verificar que o comportamento do sistema pode ser previsto pelo conhecimento de seus polos e zeros.

3.1.6 Comparação do modelo linearizado com o modelo não linear

Para efeito de comprovação da validade do modelo estimado pelo método de espaço de estados, foi também realizada uma rotina implementada no *MATLAB* para resolução das equações diferenciais não lineares obtidas dos balanços materiais e de energia do sistema. Foram comparadas as respostas dos sistemas linear e não linear quando há uma variação em uma variável de entrada em relação ao seu valor inicial.

Para solução do sistema não linear foi usado o solver *ode15s* do *MATLAB*, em que como condição inicial foram usadas as variáveis de estado no estado estacionário inicial, e em cada item uma variável de entrada (S_0 , F ou T_0) teve seu valor aumentado em 1% no instante $t=0$.

3.2 Controle

Para o processo estudado, as variáveis controladas são a concentração de produto (P) e a temperatura no interior do reator (T), já as variáveis de entrada são a concentração da corrente de entrada (S_0) e a vazão (F), o distúrbio é a temperatura da corrente de entrada (T_0).

Além das variáveis do problema de controle, é importante definir a abordagem a ser utilizada. A primeira foi a parametrização utilizando as relações de Ziegler e Nichols (1942) a partir de diretrizes especificadas. Em seguida, foi usado o método da síntese direta baseado no comportamento dinâmico que se deseja obter para o sistema. Por último, novamente, o comportamento desejado da saída foi usado para derivar o controlador, dessa vez a partir de especificações para uma função objetivo usando a regulação quadrática linear.

Para analisar o comportamento do sistema quando as ações de controle são aplicadas, as respostas do sistema foram geradas em dois casos: o valor de referência da variável de entrada S_0 foi aumentado e a variável P deveria seguir essa trajetória de referência enquanto a variável T deveria rejeitar esse distúrbio. Já no segundo caso, P e T tiveram seus valores iniciais alterados e o sistema deveria retomar para seu valor inicial.

3.2.1 Matriz de ganho relativo (RGA)

Para projetar controladores para sistemas multivariáveis, um típico ponto de partida é usar múltiplos controladores de malha única, cada controlador usando uma variável manipulada para controlar uma variável de saída (OGUNNAIKE e RAY, 1994). Entretanto, como há interação entre variáveis de malhas diferentes e, portanto, alteração em uma malha pode impactar em todas as outras malhas, é necessário estudar a melhor forma de fazer o pareamento entrada/saída.

Para encontrar o melhor pareamento é definido o ganho relativo, medido entre a variável manipulada m_j e a variável controlada y_i :

$$\lambda_{ij} = \frac{\left(\frac{dy_i}{dm_j}\right)_{\text{todas as malhas abertas}}}{\left(\frac{dy_i}{dm_j}\right)_{\text{todas as malhas fechadas, exceto a malha } j}} \quad \text{Eq. 25}$$

Essa medida compara o efeito direto de m_j sobre y_i (todas as malhas estão abertas), com o efeito indireto de m_j em y_i provocado por outros controladores, chamado efeito retaliatório. Portanto, quanto mais próximo de 1 for esse valor, menor será a ação de controle retaliatória oriunda de outras malhas e mais adequada será a escolha desse par de variáveis.

3.2.2 Projeto do controlador usando o pareamento do RGA

A malha de controle obtida a partir da matriz de ganho relativo está apresentada abaixo. Na malha 1, C1 está associado à variável manipulada S0 e vai fazer o controle de P e na malha 2, C2 está associado à variável manipulada F e vai fazer o controle de T.

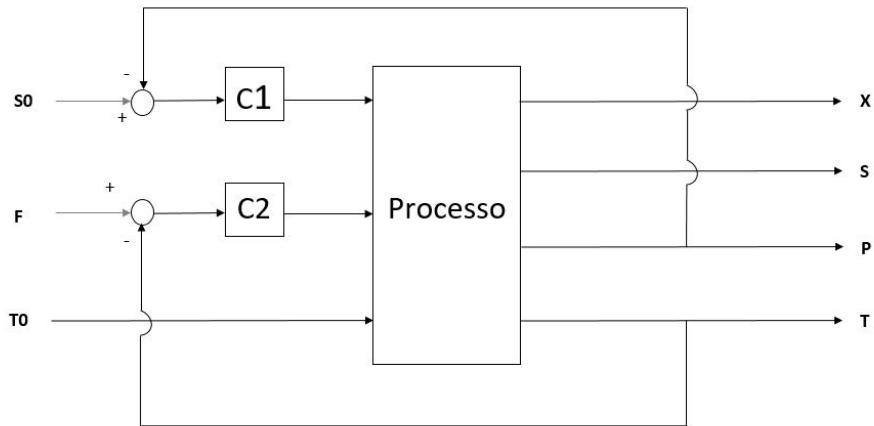


Figura 3: Malha de controle do processo

Fonte: Elaboração própria

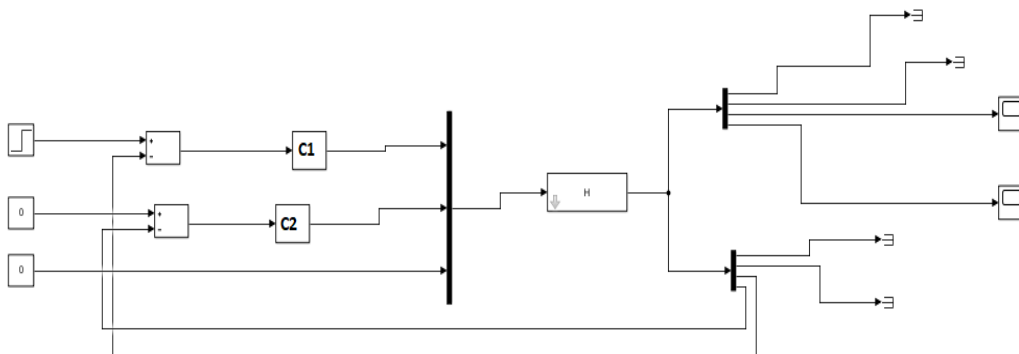


Figura 4: Malha de controle do processo - SIMULINK

Fonte: Elaboração própria

Após a escolha apropriada do pareamento das variáveis, uma estratégia é projetar cada *loop* de controle individualmente, ou seja, fecha-se apenas a malha do controlador a ser ajustado. Posteriormente fecha-se toda a malha de controle e se fazem os ajustes necessários (OGUNNAIKE e RAY, 1994).

3.2.2.1 Parametrização do controlador por Ziegler Nichols

Para o projeto dos controladores será usada a metodologia proposta por Ziegler e Nichols (1942) reproduzida por Ogunnaike e Ray (1994) e Seborg, Edgar, et al. (2011), nela o modelo do processo é usado para determinar os parâmetros do controlador que levam o

processo em malha fechada para a beira da instabilidade. Baseado no conhecimento do limite da estabilidade, regras empíricas são usadas para que a resposta em malha fechada tenha taxa de decaimento de um quarto.

O primeiro passo é encontrar o “ganho final” (Kcu) do controlador proporcional, aquele em que o sistema mantém oscilação sustentada, o período correspondente a essa oscilação é chamado de Pu.

Para encontrar Kcu foi utilizado o critério de estabilidade de Routh que é baseado na equação característica que tem a seguinte forma (SEBORG, EDGAR, *et al.*, 2011):

$$a_n s^n + a_{n-1} s^{n-1} + \dots + a_1 s + a_0 = 0 \quad \text{Eq. 26}$$

Segundo Seborg, Edgar et al (2011), o primeiro passo para a estabilidade é que todos os coeficientes (a_0, a_1, \dots, a_n) sejam positivos. Se todos os coeficientes são positivos, o próximo passo é a construção da matriz de Routh:

LINHA					
1	a_n	a_{n-2}	a_{n-4}	\dots	$b_1 = \frac{a_{n-1}a_{n-2} - a_n a_{n-3}}{a_{n-1}}$
2	a_{n-1}	a_{n-3}	a_{n-5}	\dots	$b_2 = \frac{a_{n-1}a_{n-4} - a_n a_{n-5}}{a_{n-1}}$
3	b_1	b_2	b_3	\dots	\vdots
4	c_1	c_2	\dots		$c_1 = \frac{b_1 a_{n-3} - a_{n-1} b_2}{b_1}$
\vdots	\vdots				$c_2 = \frac{b_1 a_{n-5} - a_{n-1} b_3}{b_1}$
$n + 1$	z_1				

Figura 5: Matriz de Routh

Fonte: Adaptado de Seborg, Edgar, et al., 2011

Essa matriz tem $n + 1$ linhas, em que n é a ordem da equação característica. O critério de estabilidade Routh diz que a condição necessária e suficiente para que todas as raízes da equação característica sejam negativas é que todos os elementos da coluna da esquerda da matriz de Routh sejam positivos (SEBORG, EDGAR, *et al.*, 2011), e o par de raízes vai se encontrar sobre o eixo imaginário quando o n -ésimo elemento da primeira coluna desaparecer

e nenhum dos elementos da linha precedente desaparecer. Por isso, o limite da estabilidade (K_{cu}) ocorrerá quando o n-ésimo elemento da primeira coluna for zero.

O período, P_u , correspondente a oscilação sustentada observada quando o sistema está no limite da estabilidade será encontrado analisando o diagrama de Bode de cada malha obtida no RGA. O diagrama de bode é o método mais comum de resumir as informações da resposta em frequência (OGUNNAIKE e RAY, 1994).

Como o atraso de fase de um controlador proporcional é zero (quando $K_c > 0$) (SEBORG, EDGAR, *et al.*, 2011), pode-se determinar a frequência de oscilação sustentada diretamente através do diagrama Bode da função de transferência do processo (G) com qualquer K_c . No *MATLAB* produziu-se o diagrama de Bode da malha da Figura 6 com $K_c = 1$. Então a frequência de oscilação sustentada (ω_c) é o valor de ω em que o ângulo de fase é -180° nesse diagrama. O período (P_u) correspondente é $\frac{2\pi}{\omega_c}$.

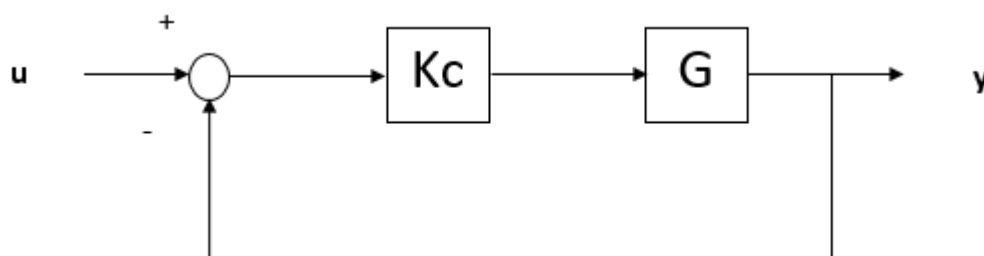


Figura 6: Malha usada para obter o diagrama de Bode

Fonte: Elaboração própria

3.2.2.2 Parametrização do controlador pelo método da Síntese Direta

No método da síntese direta, o projeto do controlador é baseado no modelo do processo e na função de transferência que se deseja obter em malha fechada. Essa função é normalmente especificada para mudanças na referência (SEBORG, EDGAR, *et al.*, 2011).

Nesse item, ainda será usada a disposição de malhas encontradas no RGA, a variável manipulada S_0 será usada para controlar P (malha 1) e a variável manipulada F será usada para controlar T (malha 2). Avaliando cada malha separadamente, tem-se que cada função de transferência em malha fechada pode ser representada como abaixo, em que $y(s)$ é o valor medido da variável e $y_d(s)$ é a referência (OGUNNAIKE e RAY, 1994):

$$\frac{y(s)}{y_d(s)} = \frac{G \times G_c}{1 + G \times G_c} \quad \text{Eq. 27}$$

Se a relação acima for denominada “q(s)” se obtém a fórmula do controlador (G_c) com base na função de transferência em malha fechada desejada (q(s)) e da função de transferência do modelo (G):

$$G_c(s) = \frac{1}{G} \times \left(\frac{q}{1-q} \right) \quad \text{Eq. 28}$$

Assim sendo, conhecendo a função de transferência do modelo (G) e de acordo com a trajetória em malha fechada requerida (q(s)), consegue-se parametrizar o controlador.

$$G_{31} = \frac{7,6165 \times 10^{-9} \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s + 0,008871)}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Acima está apresentada a função de transferência da malha 1, após o cancelamento do zero/polo -3,303E-6, esta é uma FT de grau 3. Como seria muito complexo fazer o método da síntese direta em uma função dessa ordem e depois passar para a forma do tradicional do controlador PID, notou-se – como será apresentado nos resultados - que a resposta a um degrau em S0 tem característica de uma resposta de primeira ordem. Com isso, observa-se que o polo -3,833E-6 é o polo dominante, e é ele que será usado na parametrização.

$$G_{31} = \frac{7,6165 \times 10^{-9}}{(s + 3,833 \times 10^{-6})} \quad \text{Eq. 29}$$

Para que a resposta da malha fechada tenha comportamento de primeira ordem tem-se:

$$q(s) = \frac{1}{\tau_c \times s + 1} \quad \text{Eq. 30}$$

$$G_c(s) = \frac{1}{G} \left(\frac{1}{\tau_c \times s} \right) \quad \text{Eq. 31}$$

- τ_c é a constante de tempo que se deseja para o sistema em malha fechada. Sabe-se que a recomendação de Seborg, Edgar, et al. (2011) é para um valor de τ_c de aproximadamente 25%

do valor de τ , porém, observando as respostas obtidas notou-se que um controle mais agressivo, menor valor de τ_c (maior Kc), é adequado para o sistema em questão. Por isso, para se obter uma resposta mais rápida do que a malha aberta, essa constante de tempo será 1/20 da constante de tempo de G_{31} (2,60E5).

Então os parâmetros para o controlador dessa malha serão os seguintes (controlador PID em paralelo)

$$Kc = \frac{\tau}{\tau_c \times K} \quad \text{Eq. 32}$$

$$\tau_i = \tau \quad \text{Eq. 33}$$

$$G_{42} = \frac{-0,32275 \times (s - 12,03)}{(s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Acima está a função de transferência da malha 2, para parametrização do controlador dessa malha, também será buscada uma trajetória de primeira ordem, a FT “q” desejada está apresentada abaixo:

$$\text{Formato de G: } \frac{K(-\beta s + 1)}{\tau^2 s^2 + 2\gamma\tau + 1}$$

$$q(s) = \frac{-\beta s + 1}{\tau_c \times s + 1} \quad \text{Eq. 34}$$

Parâmetros do controlador no formato da Eq. 23 (novamente τ_c vai ser 1/20 de τ):

$$Kc = \frac{2\tau\gamma}{(\tau_c + \beta) \times K} \quad \text{Eq. 35}$$

$$\tau_i = 2\gamma\tau \quad \text{Eq. 36}$$

$$\tau_d = \frac{\tau}{2\gamma} \quad \text{Eq. 37}$$

3.2.3 Controle ótimo – Regulação quadrática linear (LQR)

Abaixo está apresentado o sistema em espaço de estados obtido no item 3.15.

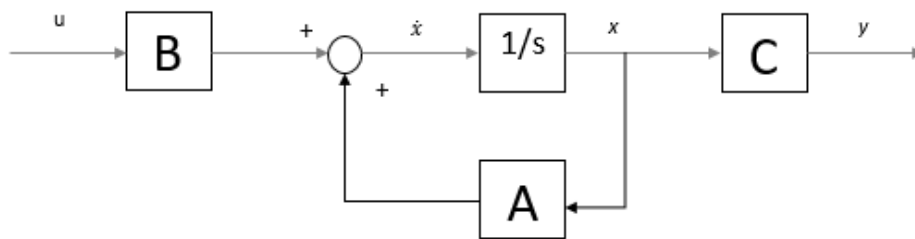


Figura 7: Representação do sistema em espaço de estados

Fonte: Elaboração própria

No controle ótimo, o comportamento desejado da saída é especificado na forma de uma função objetivo, e o modelo do processo é usado para derivar o controlador requerido para minimizar (ou maximizar) esse objetivo (OGUNNAIKE e RAY, 1994).

Segundo Albertos e Mareels (2010), o objetivo de controle local mais comum é a regulação de uma variável de controle para um valor prescrito ou uma pequena faixa de valores, independentemente de perturbações ou alterações na dinâmica da planta. O primeiro objetivo aqui é que as variáveis controladas (P e T) retornem para o estado estacionário inicial depois de uma mudança em seus valores iniciais.

Para que a planta rejeite esse distúrbio será usado o controle chamado *Full state feedback*. Nesse controle utiliza-se o vetor de estado para calcular a ação de controle para a dinâmica do sistema (FADALI, 2009). É adicionado ao sistema uma matriz de ganhos de controle “K”, e “r” é o sinal de referência a ser seguido, que nesse caso é zero.

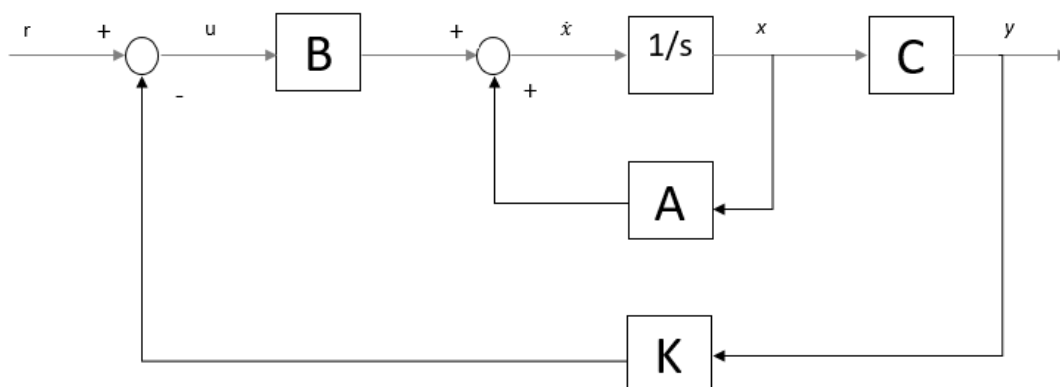


Figura 8: Representação do sistema com a adição da matriz de ganhos

Fonte: Elaboração própria

Seguindo a metodologia apresentada por Williams e Lawrence (2007), a lei de controle pode ser escrita como adiante:

$$u(t) = -k * x(t) \quad \text{Eq. 38} \quad \begin{bmatrix} S_0(t) \\ F(t) \\ T_0(t) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} & k_{14} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} & k_{24} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} & k_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X(t) \\ S(t) \\ P(t) \\ T(t) \end{bmatrix}$$

Assumindo que todas as variáveis de saída podem ser medidas será usada a regulação quadrática linear (LQR) para projetar o controlador de acordo com os requerimentos.

Esse é um problema de otimização que consiste em minimizar o valor de uma função de performance para sistema (J), que nesse caso é quadrática (WILIAMNS II e LAWRENCE, 2007):

$$J = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} [x^T(t) Q x(t) + u^T(t) R u(t)] dt + \frac{1}{2} x^T(t_f) S x(t_f) \quad \text{Eq. 39}$$

Q, R, S são matrizes de peso simétricas. Como o método LQR visa minimizar essa função J, pode-se escolher priorizar uma regulação da performance ou priorizar ter o menor esforço de controle, a partir da escolha das matrizes Q e R.

Em particular, quando os termos quadráticos envolvendo os estados são “grandes” comparados com o termo quadrático envolvendo as entradas, então a trajetória ótima apresentará boa regulação de performance e alcançará rapidamente o estado desejável, porém a energia de controle gasta também será grande. Ao contrário, se as entradas tiverem mais peso que os estados, o sinal de controle ótimo não vai requerer muita energia, porém a regulação da performance pode não ser aceitável. Portanto, a questão por trás do problema de otimização é traduzir as especificações de performance do projeto nas escolhas das matrizes de peso (WILIAMNS II e LAWRENCE, 2007). Ressalta-se que o mais importante aqui é o valor relativo entre Q e R, não seus valores absolutos.

Ao contrário dos sistemas anteriores, o *Full state feedback* não compara o sinal de saída com a referência, ao invés disso, este modelo compara todos os estados multiplicados pela matriz de controle (Kx) com a referência (como apresentado na Figura 8). Por isso, não é

aguardado que a saída seja igual a referência, assim para se obter a saída desejada, pode-se escalar o sinal de entrada através de um ganho para que a saída seja igual a referência no estado estacionário (MESSNER e TILBURY). A figura 9 apresenta o sistema com a adição do ganho K_{ff} que escala o sinal de referência:

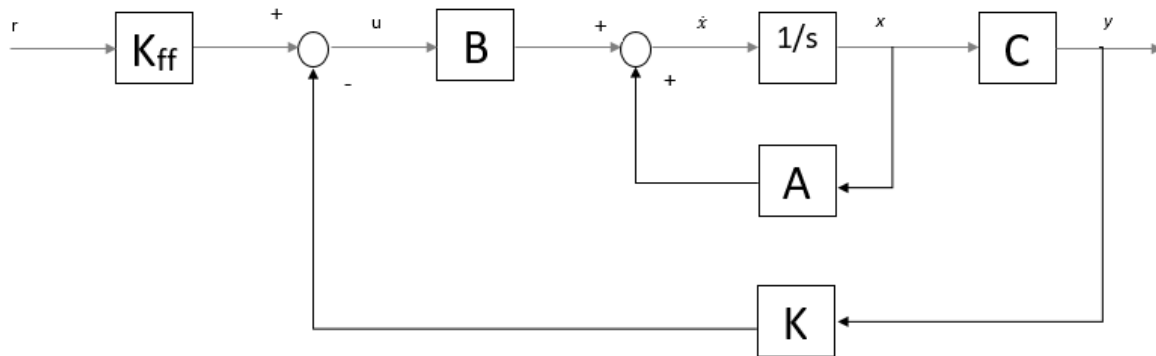


Figura 9: Representação do sistema com a adição do ganho K_{ff}

Fonte: Elaboração própria

Agora a representação do sistema passa ser a seguinte:

$$\mathbf{u}(t) = K_{ff}r(t) - K\mathbf{x}(t) \quad \text{Eq. 40}$$

$$\dot{\mathbf{x}} = (\mathbf{A} - \mathbf{BK})\mathbf{x}(t) + \mathbf{BK}_{ff}r(t) \quad \text{Eq. 41}$$

$$y = \mathbf{C}\mathbf{x}(t) \quad \text{Eq. 42}$$

Fazendo o mesmo procedimento do item 3.1.5, para obter K_{ff} é feita a transformada de Laplace da Eq. 41 e \mathbf{x} é substituído na Eq. 42:

$$\mathbf{y}(s) = \mathbf{C} (\mathbf{sI} - (\mathbf{A} - \mathbf{BK}))^{-1} \mathbf{BK}_{ff}r(s) \quad \text{Eq. 43}$$

O Teorema do valor final estabelece o seguinte (SEBORG, EDGAR, *et al.*, 2011):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = \lim_{s \rightarrow 0} sy(s) \quad \text{Eq. 44}$$

Então pode-se determinar o valor de K_{ff} para um sinal de referência do tipo degrau, substituindo a Eq.45 na Eq. 43 e aplicando o limite da Eq. 44 tem-se:

$$r(s) = \frac{1}{s} \quad \text{Eq. 45}$$

$$\lim_{s \rightarrow 0} sy(s) = -C(A - BK)^{-1} BK_{ff} \quad \text{Eq. 46}$$

E no caso de um degrau unitário, esse limite deve se aproximar de 1 para se conseguir uma resposta satisfatória, portanto:

$$K_{ff} = -(C(A - BK)^{-1} B)^{-1} \quad \text{Eq. 47}$$

Entretanto, nesse trabalho, o sistema estudado tem múltiplas entradas e múltiplas saídas (MIMO), e não se consegue obter K_{ff} pela Eq. 47, porque a matriz $(C(A-BK)^{-1}B)$ não é quadrada e portanto não invertível.

Como se deseja controlar apenas a variável de saída P, consegue-se através de simulação chegar a um valor aproximado para K_{ff} . Primeiro seu valor foi fixado em 1 e esperou-se P alcançar um novo patamar estacionário (P_n), então o valor estimado de K_{ff} é $1/P_n$. Esse é apenas um resultado aproximado para que se possa comparar esse tipo de controle com os outros desse trabalho quando há uma mudança no valor da referência.

4 Resultados e Discussões

4.1 Estado estacionário inicial

Utilizando os dados contidos na Tabela 1 e a descrição do reator foram encontrados os seguintes valores para o estado estacionário inicial:

$$X \text{ (e.e)} = 0,2286 \text{ g/L}$$

$$S \text{ (e.e)} = 0,0385 \text{ g/L}$$

$$P \text{ (e.e)} = 19,9807 \text{ g/L}$$

$$T \text{ (e.e)} = 326,1374 \text{ K}$$

Observa-se que nesse estado estacionário obtido, a temperatura no interior do reator é de 326 K, aproximadamente 53°C. Essa temperatura está acima daquela dita como adequada no experimento base (37°C) o que pode levar a inatividade da bactéria, desta forma, uma das estratégias de controle deve ser não deixar que ela suba ainda mais pois pode haver perda de atividade bacteriana e morte de células. Para contornar esse problema, a temperatura da camisa do reator poderia ter sido usada como variável manipulada, essa observação ficará como sugestão para trabalhos futuros.

4.2 Espaço de estados

As matrizes A e B da representação em espaços de estado obtidas foram as seguintes:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0,00002 & 0 & 0 \\ -0,00067 & -0,00398 & 0 & -0,00001 \\ 0,00033 & 0,00199 & 0 & 0,00001 \\ 0,82024 & 4,86417 & 0 & 0,00358 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & -0,004571631297243 & 0 \\ 0,000003833200000 & 0,799229081401780 & 0 \\ 0 & -0,399614540700890 & 0 \\ 0 & -0,322747374606366 & 0,000003833200000 \end{bmatrix}$$

4.2.1 Comparação entre o modelo linearizado e o modelo não linear

Abaixo estão apresentadas as mudanças nas variáveis de entrada e respectivas respostas dos modelos:

- Degrau de +1% em relação a variável S0 no instante $t=0$ (o valor de S0 antes do degrau era 40 g/L):

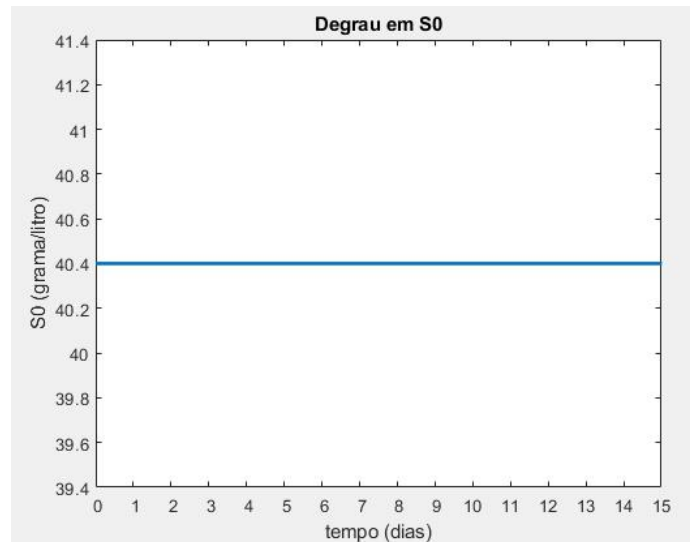
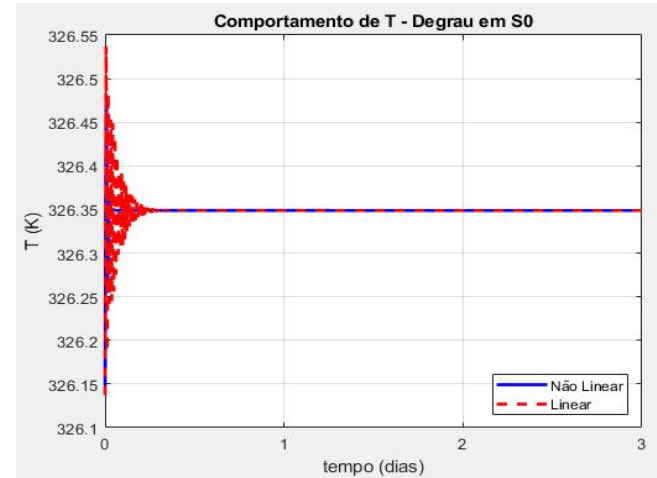
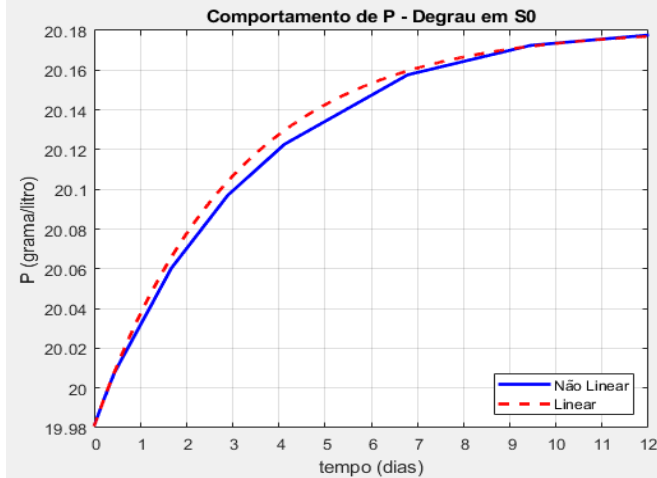
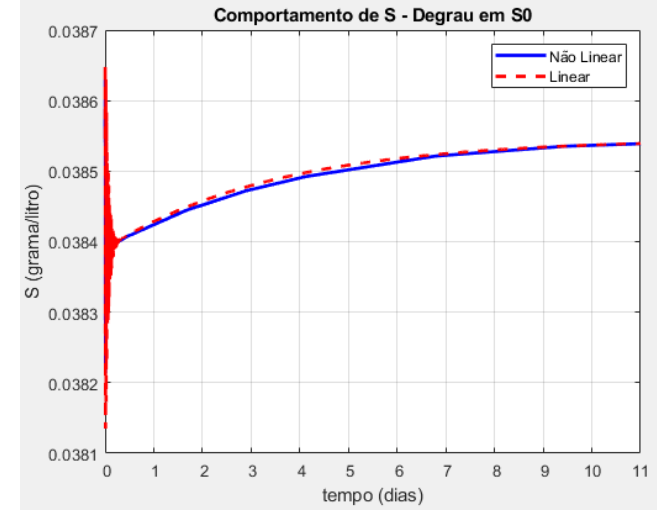
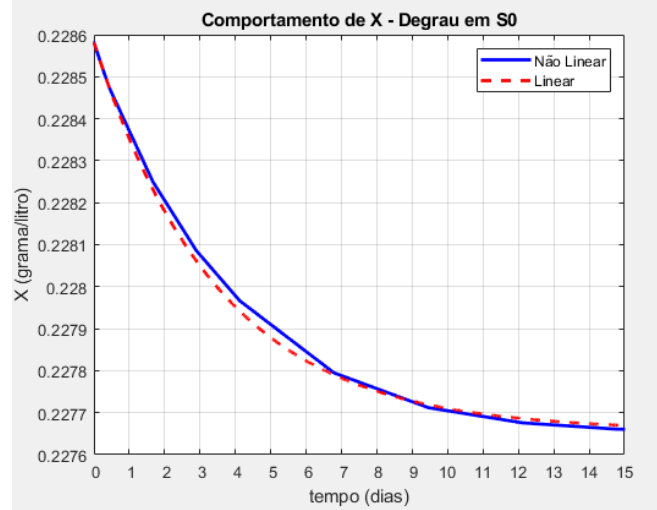


Figura 10: Degrau aplicado na variável S0

Fonte: *MATLAB*

Tabela 2: Comportamento do sistema ao degrau de +1% em S0



- Degrau de +1% em relação a variável F no instante $t=0$ (o valor de F antes do degraú era $1,9166E-4$ L/s):

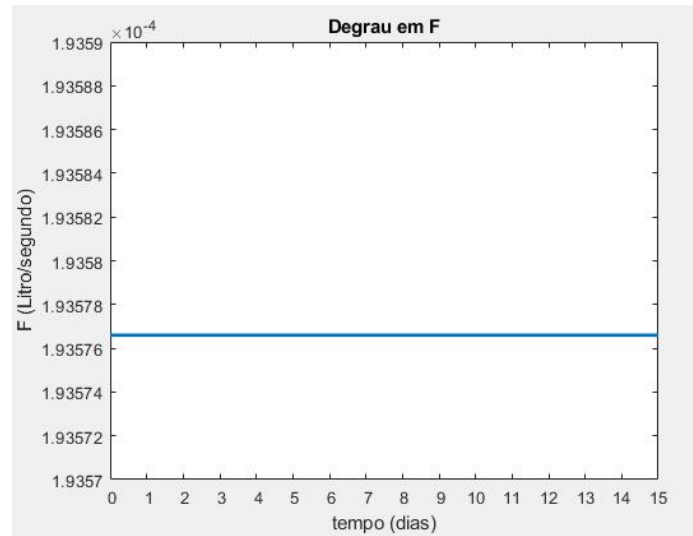
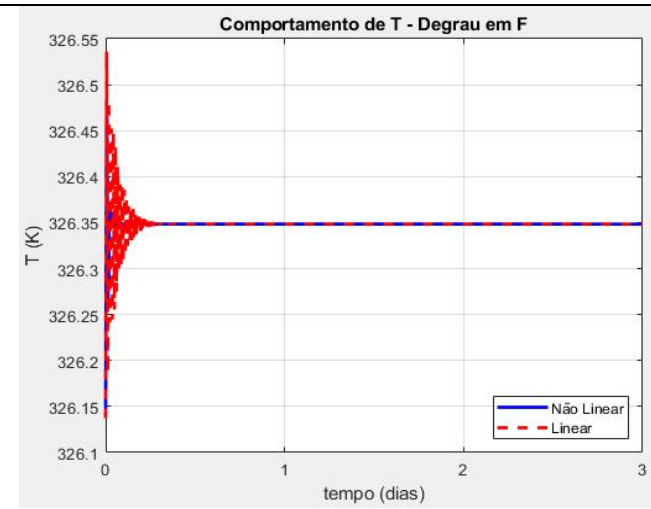
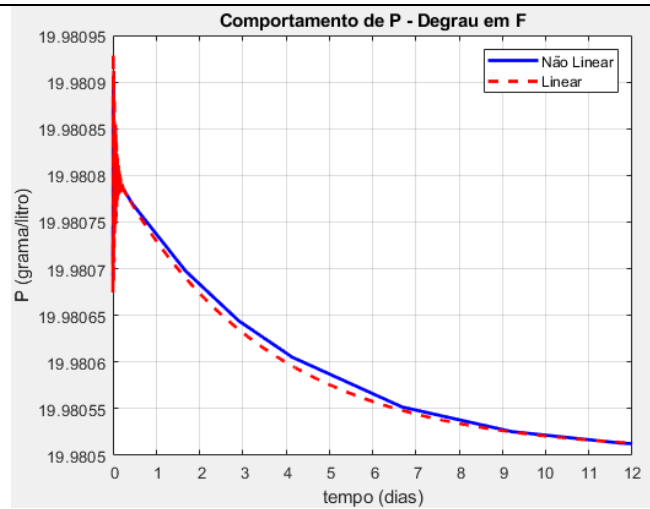
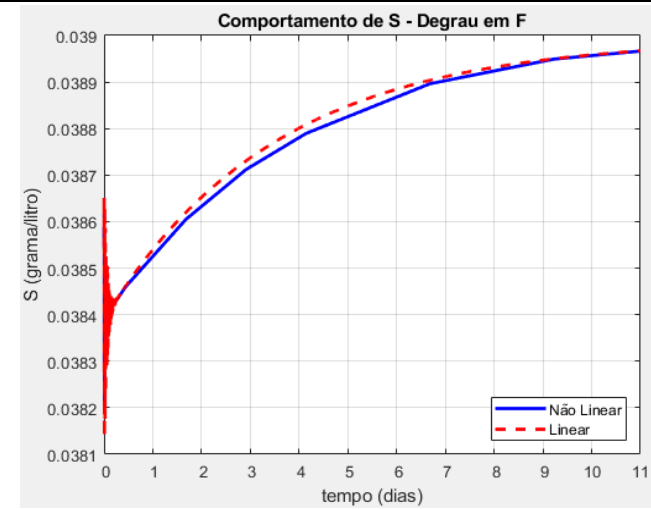
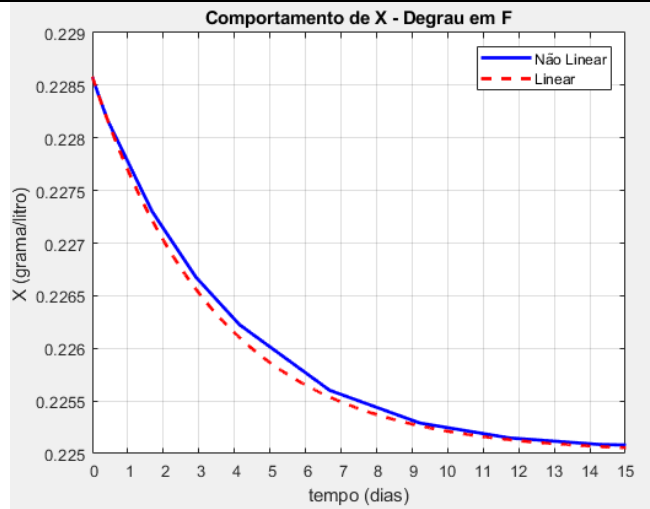


Figura 11: Degrau aplicado na variável F

Fonte: *MATLAB*

Tabela 3: Comportamento do sistema ao degrau de +1% em F



- Degrau de +1% em relação a variável T0 no instante t=0 (o valor de T0 antes do degrau era 310 K):

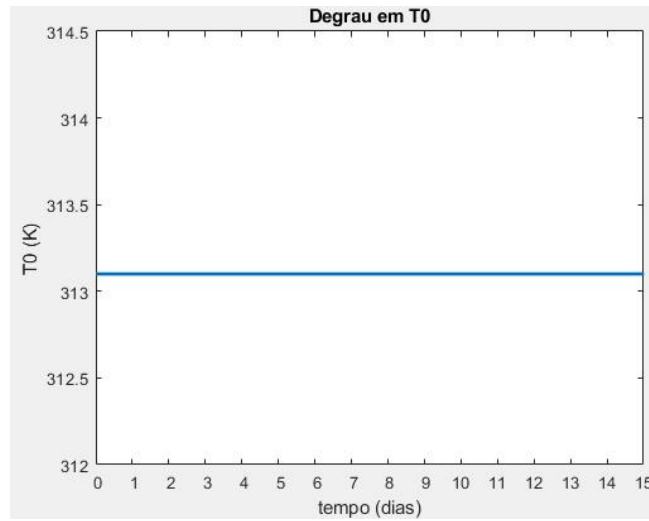
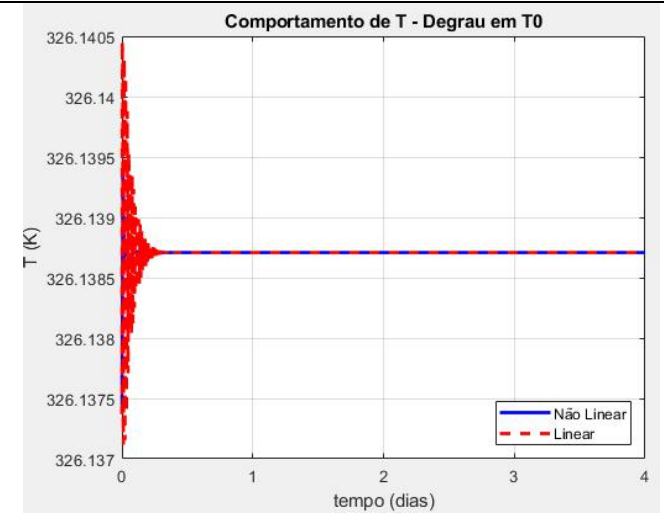
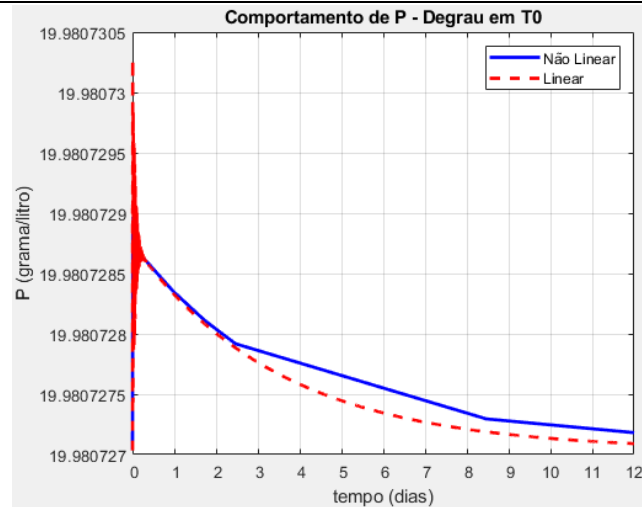
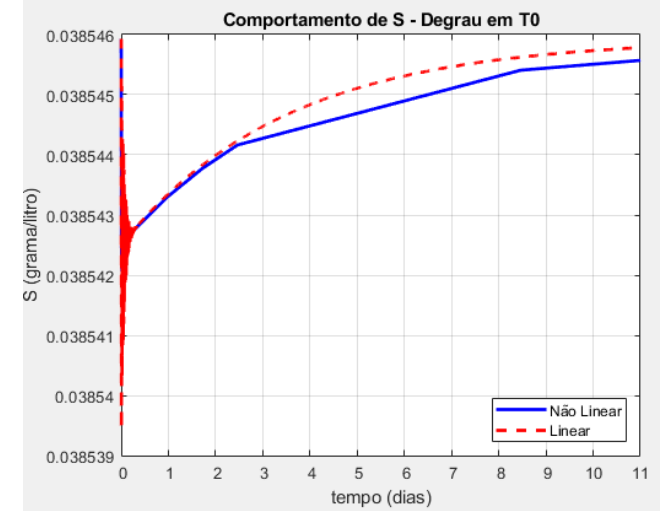
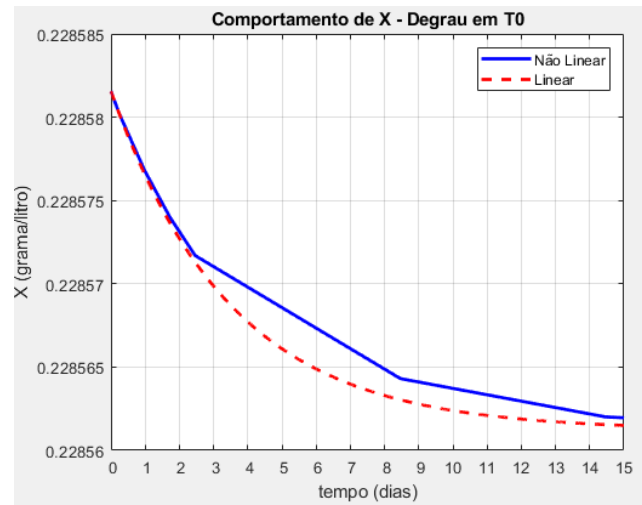


Figura 12: Degrau aplicado na variável T0

Fonte: *MATLAB*

Tabela 4: Comportamento do sistema ao degrau de +1% em T0



As respostas apresentadas demonstram que os modelos têm comportamento bastante semelhantes quando o sistema é submetido a perturbações em suas variáveis de entrada. Isso demonstra que a linearização foi bem-sucedida e que o modelo em espaço de estado obtido é apropriado para representar o sistema. Algumas respostas (principalmente de S e T) apresentam oscilações que não são bem visíveis nessa representação e em primeiro momento parecem estranhas, no próximo item essas respostas serão apresentadas em diversos intervalos de tempo, o que facilita sua visualização.

4.2.2 Funções de transferência

As funções de transferência podem ser usadas para determinar o comportamento dinâmico do processo depois de mudanças nas variáveis de entrada. Essas também têm um papel importante no projeto e análise de sistemas de controle (SEBORG, EDGAR, *et al.*, 2011).

As FT encontradas para o modelo proposto, possuem a seguinte equação característica em malha aberta:

$$(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5}) = 0$$

As raízes (polos) dessa equação são: $(-0,0002+0,0059i)$, $(-0,0002-0,0059i)$, $(-3,3029E-6)$ e $(-3,8332E-6)$. Portanto, quando não houver cancelamento com zeros das funções de transferência as respostas serão oscilatórias e alcançarão um novo patamar dada uma perturbação nas variáveis de entrada.

Abaixo estão apresentadas as respostas das saídas i para variações do tipo degrau de magnitude 1 (na unidade da respectiva entrada) nas entradas j e também a própria função de transferência G_{ij} . Ao analisar as respostas é importante lembrar que o efeito da entrada é diretamente na derivada (variação) do vetor de estado. Isso significa que o valor atual do estado não depende do valor atual a entrada (ALBERTOS e MAREELS, 2010).

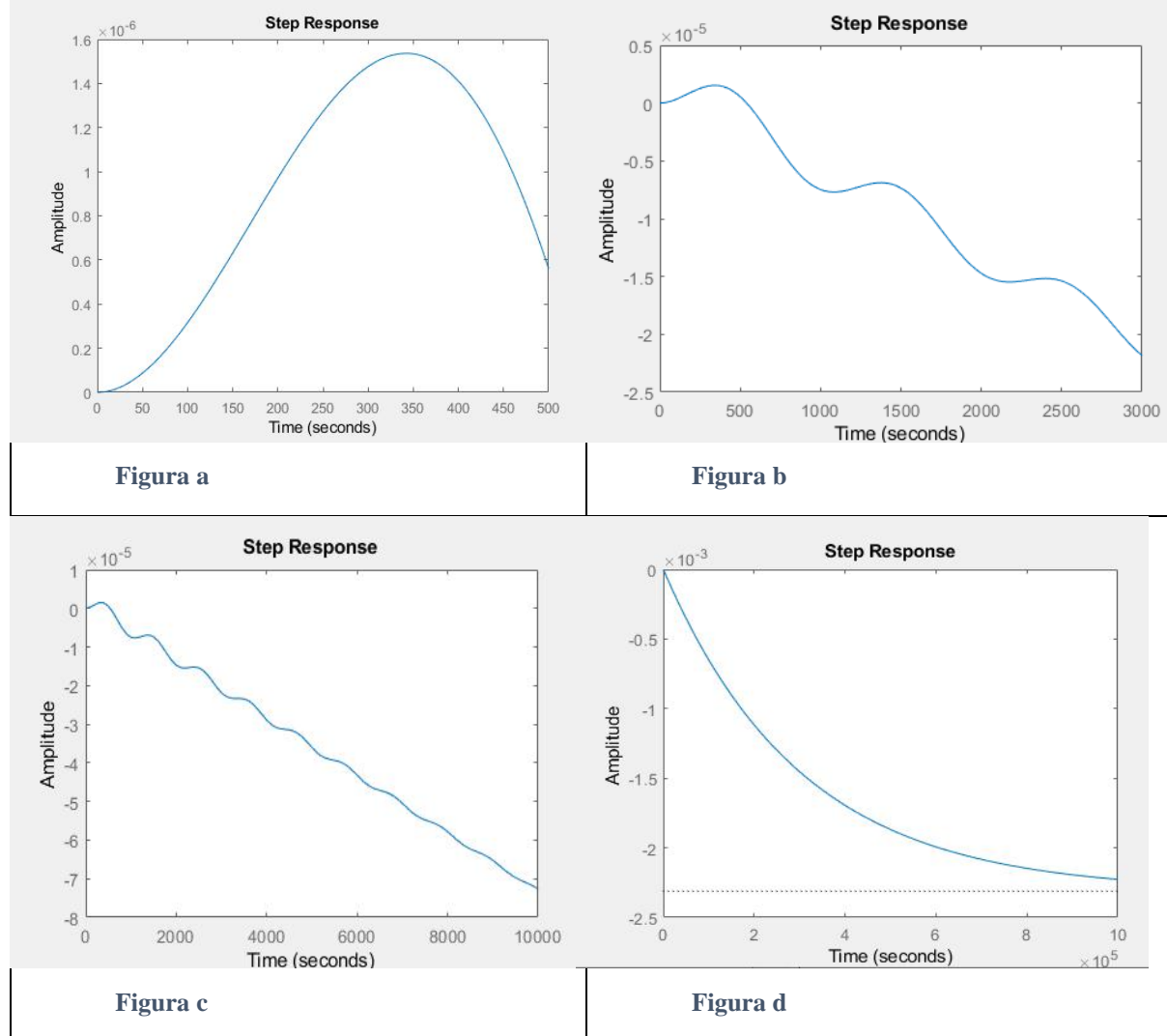
Esse item foi adicionado para demonstrar como o conhecimento da localização dos polos e zeros no diagrama *rotus locus* pode ajudar a prever o comportamento dinâmico da resposta, e ainda para mostrar que as respostas à perturbação fazem sentido físico. Aqui também consegue-se olhar com mais detalhes as oscilações das respostas e se constata que o perfil das respostas é igual ao do item anterior, mesmo se utilizando de outra ferramenta do

MATLAB, no último item foi usado o *ode15s* e nesse item o *step*, o que mais uma vez valida a linearização.

O restante das respostas está apresentado no Apêndice A. (Observação: as respostas foram expostas em diversos períodos de tempo para melhor compreensão).

4.2.2.1 Resposta para X

Tabela 5: Comportamento de X diante a um degrau de 1 g/L na variável S0



$$G_{11} = \frac{7,5076 * 10^{-11} * (s + 0,003589) * (s + 3,829 * 10^{-6})}{(s + 3,833 * 10^{-6}) * (s + 3,303 * 10^{-6}) * (s^2 + 0,0003853s + 3,525 * 10^{-5})}$$

Observa-se nas Figuras a e b que a resposta tem um comportamento de um sistema de segunda ordem. Isso ocorre porque o polo $-3,833E-6$ e o zero $-3,829E-6$ são praticamente

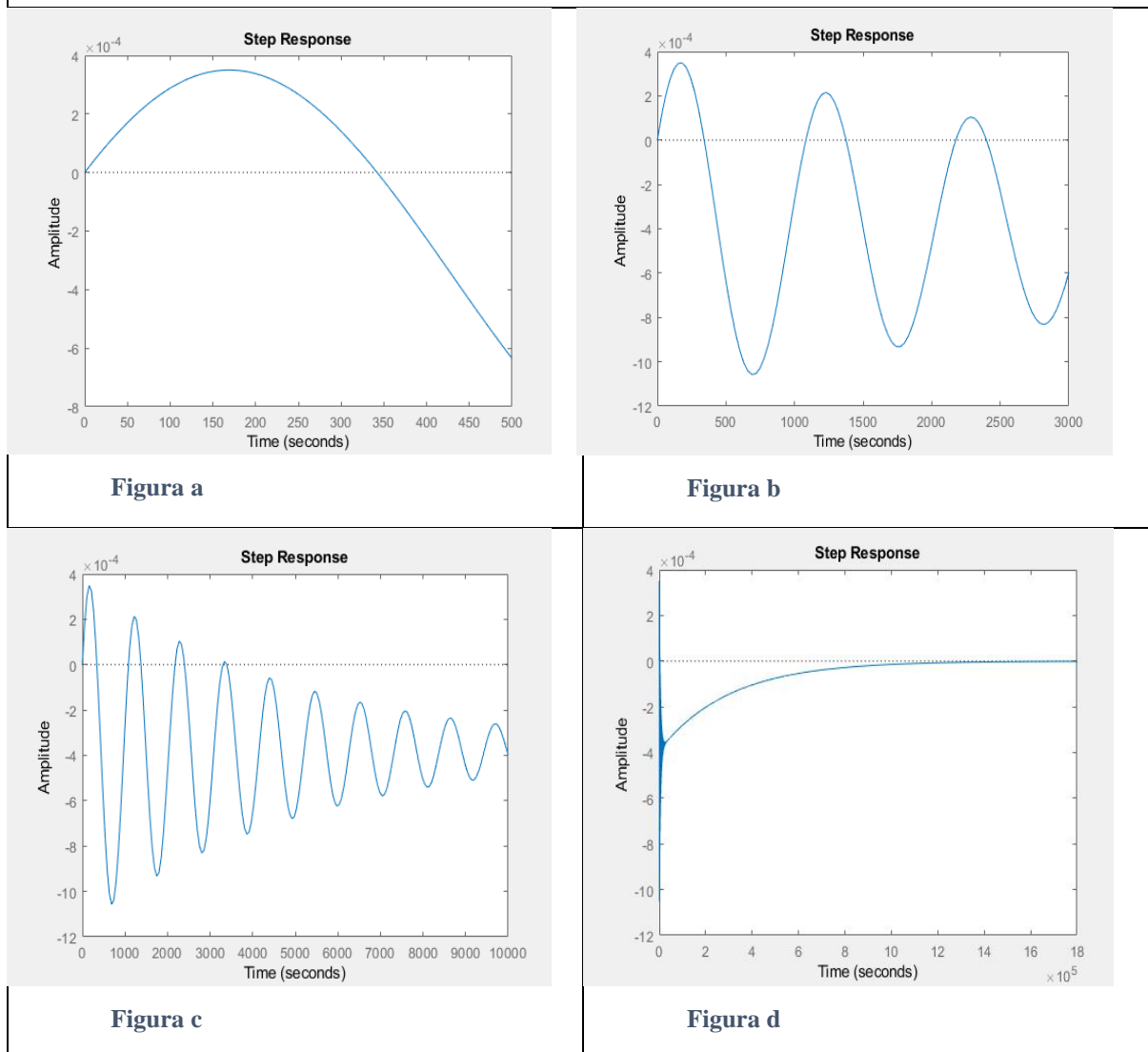
cancelados, e assim a FT tem como polo dominante aquele presente no termo de segunda ordem. Entretanto, quando se olha para a Figura d, o comportamento é de um sistema de primeira ordem, isso pode ser explicado porque o polo resultante de primeira ordem tem constante de tempo na ordem de $3E+5$, enquanto os polos de segunda ordem têm constante de tempo da ordem de $5E+3$, o que significa que em um maior intervalo de tempo a resposta tem comportamento de primeira ordem. Por fim a resposta apresenta uma resposta inversa devido ao zero real positivo.

Na prática, quando há um aumento na concentração de substrato no reator (aumento de S), a variação da concentração de células é positiva (Figura a). Ao se analisar o balanço material de substrato, nota-se que a variação da sua concentração aumenta de forma linear com o aumento do termo $F \cdot S_0 / V$ e diminui de forma exponencial com o termo de consumo de substrato r_s . Um aumento em S_0 gera um aumento em S e assim aumenta o consumo de substrato (r_s), e por fim há o efeito contrário, S diminui novamente, portanto um comportamento oscilatório é esperado (Figuras b e c).

Como o termo exponencial (consumo de substrato) predomina com o tempo, o estado estacionário final atinge um patamar abaixo do que o inicial (Figura d).

4.2.2.2 Resposta para S

Tabela 6: Comportamento de S diante a um degrau de 1 g/L na variável S0



$$G_{21} = \frac{3,8332 \times 10^{-6} \times s \times (s + 3,829 \times 10^{-6}) \times (s - 0,003589)}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Outra vez ocorre o cancelamento do polo $-3,833\text{E-}6$ com o zero $-3,829\text{E-}6$ devido à proximidade entre eles e a resposta se parece com uma de segunda ordem subamortecida ($\zeta = 3,24\text{e-}02$) até o tempo de 10.000 segundos (Figura c), a partir desse momento a resposta deixa de ser oscilatória (Figura d). Como mencionado no item anterior, isso ocorre pela diferença entre as constantes de tempo de primeira e segunda ordem.

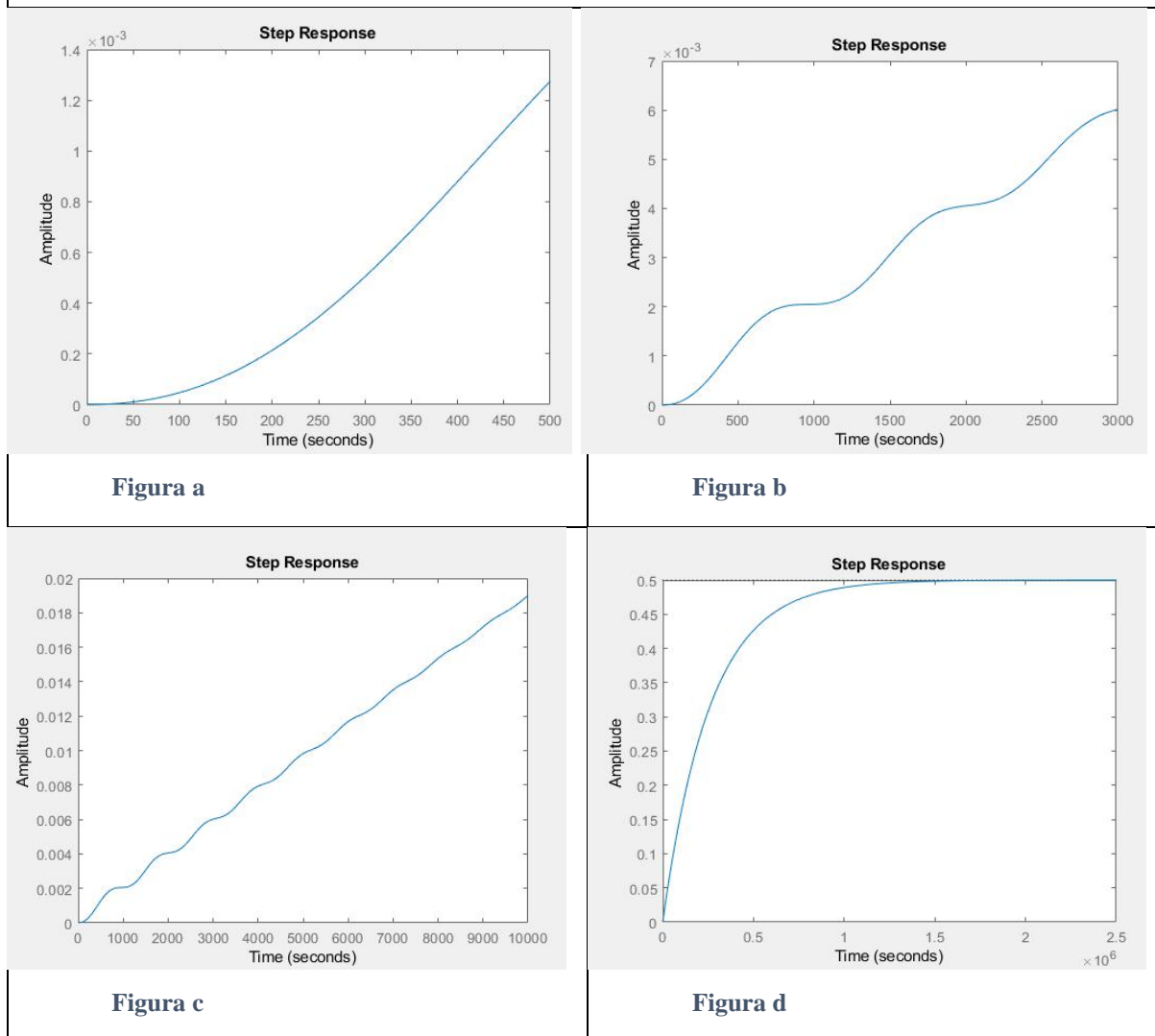
Dessa vez, observa-se uma mudança de direção na estabilização da resposta devido ao zero positivo (0,003589) e ainda, o estado estacionário resultante se aproxima da amplitude zero devido ao zero nulo.

Em um primeiro momento ocorre uma variação positiva na concentração de substrato devido ao termo $(F \cdot S_0 / V)$ – Figura a. Entretanto o aumento da concentração de substrato significa aumento do seu consumo ($-r_s$), e isso gera uma mudança de direção, em seguida ocorre o efeito contrário, com a diminuição de S , o seu consumo diminui e dS/dt volta a ser positivo, o que explica o comportamento oscilatório (Figuras b e c).

O interessante aqui, é que ao aproximar o conteúdo da corrente de saída pelo conteúdo do reator (a variável S se refere a ambos), a concentração de substrato é autorregulada. Ou seja, com a diminuição de S , dS/dt tem variação positiva e assim S volta a crescer e encontra um novo estado estacionário próximo a zero (Figura d).

4.2.2.3 Resposta para P

Tabela 7: Comportamento de P diante a um degrau de 1 g/L na variável S0



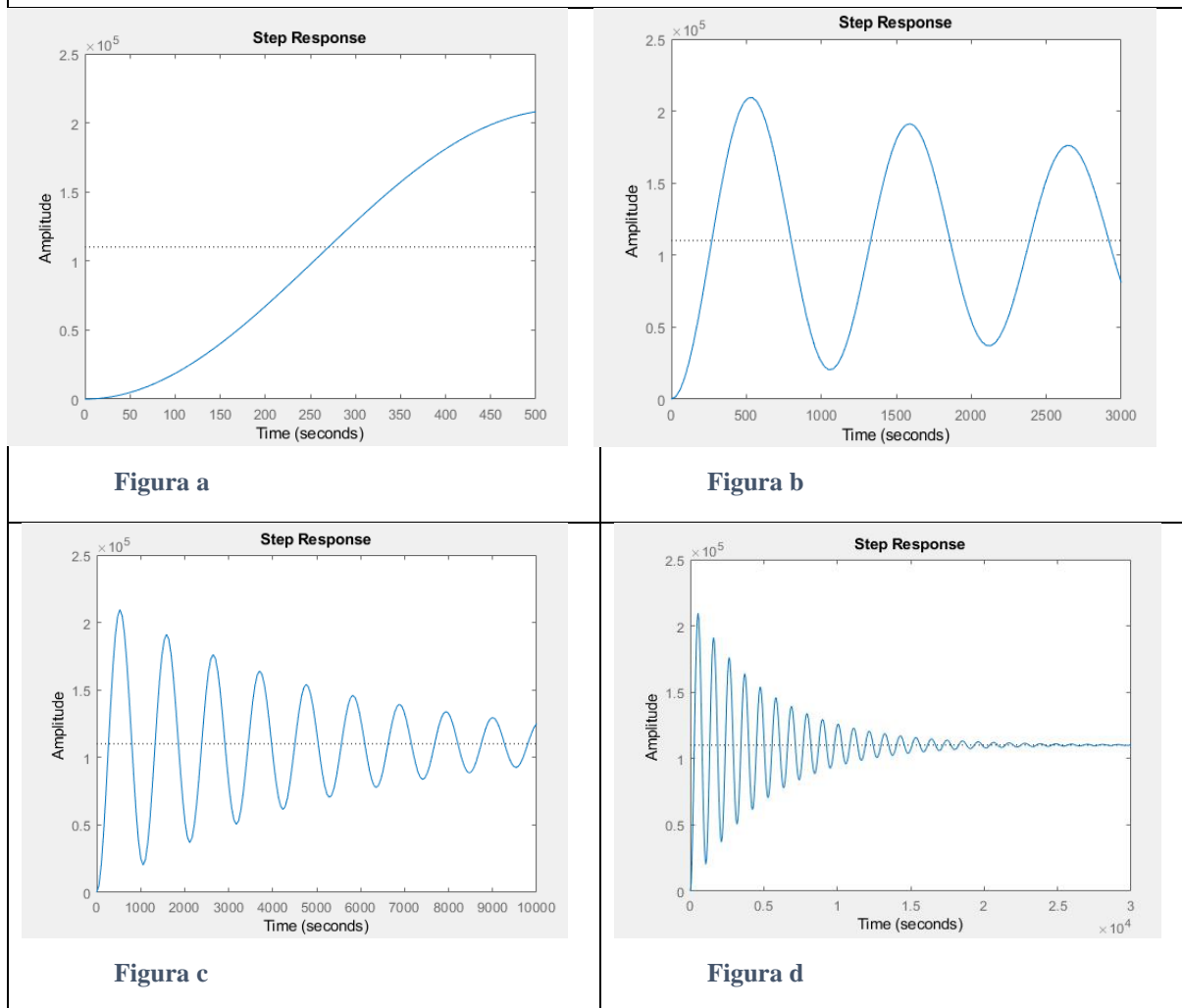
$$G_{31} = \frac{7,6165 \times 10^{-9} \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s + 0,008871)}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Outra vez ocorre o cancelamento do polo/zero $-3,303E-6$ e novamente a resposta em um primeiro momento tem caráter oscilatório, desta vez com a amplitude de oscilação menor devido ao zero negativo resultante, e depois apresenta perfil típico de primeira ordem.

Até o instante de tempo 500 segundos, o crescimento da concentração de produto é exponencial, isso é consequência do aumento da concentração de substrato e assim da taxa de formação de produto (termo exponencial). Posteriormente, devido à alta concentração de P e também, devido ao decréscimo da concentração de substrato, a taxa de formação de produto diminui. Ambos efeitos fazem com que dP/dt deixe de ser exponencial.

4.2.2.4 Resposta para T

Tabela 8: Comportamento de T diante a um degrau de 1 L/s na variável F



$$G_{42} = \frac{-0,32275 \times (s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,302 \times 10^{-6}) \times (s - 12,03)}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Devido ao cancelamento zeros/polos, a resposta apresenta o comportamento do polo dominante: sistema de segunda ordem subamortecido ($\zeta = 3,24e-02$). Esse caso difere dos anteriores porque os dois polos reais negativos são cancelados com os zeros, e assim a resposta é oscilatória até atingir um novo estado estacionário.

O degrau em F aumenta a entrada de substrato S0 que indiretamente aumenta a taxa de consumo de substrato (-rs) e assim a temperatura do reator aumenta. Entretanto, como já visto nas respostas de S, o consumo de substrato passa por oscilações de aumento e diminuição, o que explica a resposta oscilatória.

Observa-se que as respostas obtidas apresentam um perfil não muito comum, essas têm grandes oscilações em um primeiro momento e depois apontam para um novo patamar. Como esse trabalho foi feito a partir de um modelo adaptado do experimento de d'Hugues et al. (2008) de acordo com dados e constantes obtidos na literatura, é provável que na junção dessas informações, tenha ocorrido algum erro numérico. Mesmo com esse possível erro, os procedimentos para parametrização e análise dos controladores apresentados no trabalho ainda são válidos.

Observa-se que nesse caso o degrau aplicado foi muito grande em relação ao valor inicial de F, por isso, houve um crescimento muito alto da variável controlado. Idealmente seria melhor aplicar um degrau proporcional ao valor da variável.

4.3 Pareamento obtido pela matriz de ganho relativo

Para o problema em questão será checado o pareamento entre as variáveis:

- i = 1: Concentração de produto na saída (P);
- i = 2: Temperatura no interior do reator (T);
- j = 1: Concentração de substrato (S0);
- j = 2: Vazão da corrente de entrada (F).

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,9989 & 0,0011 \\ 0,0011 & 0,9989 \end{bmatrix}$$

Nesse caso, é evidente que o melhor pareamento é: P x S0 e T x F.

4.4 Controlador obtido usando as correlações de Ziegler e Nichols

4.4.1 Obtenção de Kcu através da Matriz de Routh

Para ambas as malhas de controle a equação característica é $(1 + Kc \times G = 0)$, em que Kc é o ganho do controlador puramente proporcional e G é a função de transferência que relaciona a variável manipulada com a variável controlada. As funções G (depois do cancelamento dos polos e zeros comuns) e a matriz de Routh para a malha de controle 1 (S0 x P) e para malha 2 (F x T) estão apresentadas abaixo:

Malha 1:

$$G_{31} = \frac{7,6165 \times 10^{-9} \times (s + 0,008871)}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 * 10^{-5})}$$

Malha 2:

$$G_{42} = \frac{-0,32275 \times (s - 12,03)}{(s^2 + 0,0003853s + 3,525 * 10^{-5})}$$

Matriz de Routh para a malha de controle 1		
Linha		
1	1	$7,6165 \times 10^{-9} \times Kc + 3,5253 \times 10^{-5}$
2	$3,890968 \times 10^{-4}$	$6,7567 \times 10^{-11} \times Kc + 1,35127 \times 10^{-10}$
3	$3,4906 \times 10^{-5} - 1,66035 \times 10^{-7} \times Kc$	0
4	$6,756731 \times 10^{-11} \times Kc + 1,35127 \times 10^{-10}$	0

Matriz de Routh para a malha de controle 2		
Linha		
1	1	$3,88255 \times Kc + 3,5251 \times 10^{-5}$
2	$3,85263 \times 10^{-4} - 0,32274 \times Kc$	0
3	$3,88255 \times Kc + 3,52518 \times 10^{-5}$	0

Para encontrar o limite da estabilidade (K_{cu}), iguala-se o n -ésimo elemento da primeira coluna das matrizes a zero. Para a malha 1 encontra-se para K_{cu} o valor de 210,237. Já para a malha 2, o valores obtido é 0,00119.

4.4.2 Obtenção da frequência crítica através do diagrama de Bode

Abaixo estão apresentados os diagramas de Bode das duas malhas de controle com $K_c = 1$, (já que o atraso de fase não mudará com a mudança de K_c).

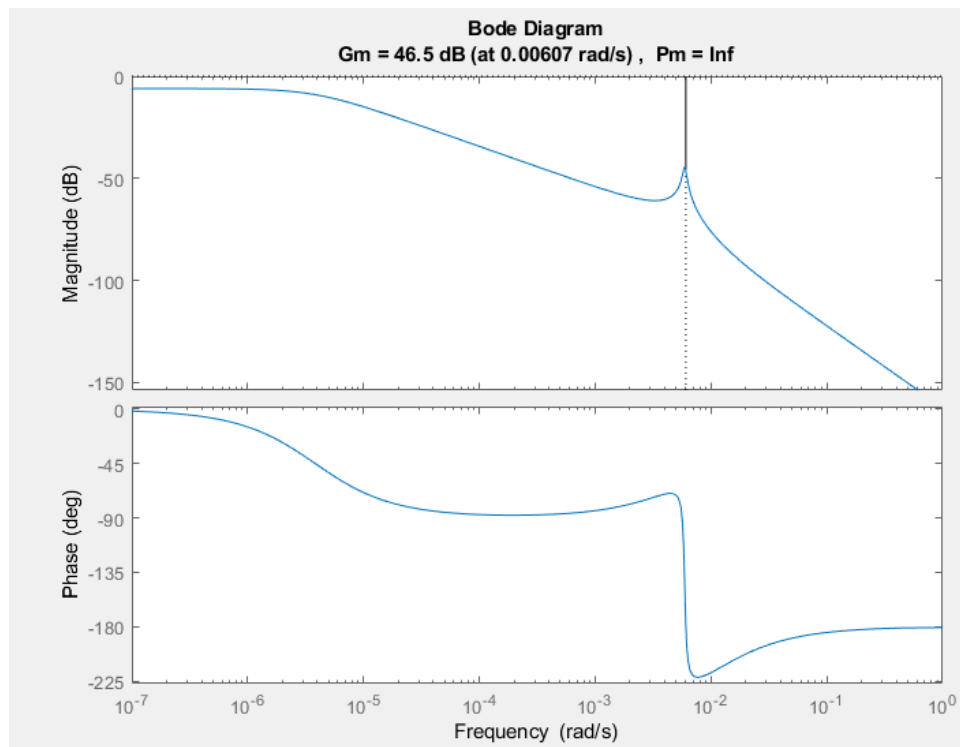


Figura 13: Diagrama de Bode – Malha 1

Fonte: *MATLAB*

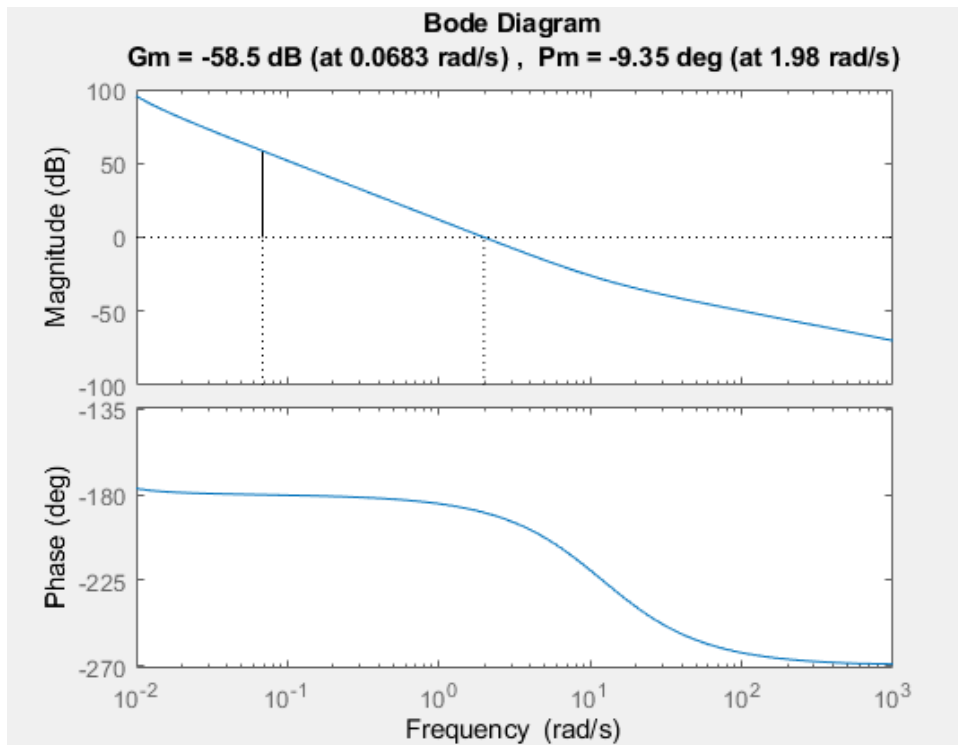


Figura 14: Diagrama de Bode – Malha 2^c

Fonte: *MATLAB*

Analisando os diagramas, o valor de ω_c para a malha 1 é 0,00607 rad/s e para a malha 2 é 0,06833 rad/s. Sendo assim os valores de P_u são 1034,97 s e 91,93 s respectivamente.

4.4.3 Parametrização do controlador

Com os valores de K_{cu} e P_u obtidos através dos modelos do processo, utilizam-se as relações sugeridas por Ziegler e Nichols (1942) para determinar os parâmetros dos controladores, dependendo de sua configuração (P, PI ou PID):

Ziegler-Nichols	K_c	τ_I	τ_D
P	$0.5K_{cu}$	—	—
PI	$0.45K_{cu}$	$P_u/1.2$	—
PID	$0.6K_{cu}$	$P_u/2$	$P_u/8$

Figura 15: Relações de Ziegler e Nichols

^c Nesse caso, o diagrama de Bode é de um sistema instável porque o *feedback* negativo aplicado é de uma unidade e é maior do que o limite de estabilidade (0,06833).

Fonte: Seborg, Edgar, et al. 2011

$$C = Kc * \left(1 + \left(\frac{1}{Ti \times s}\right) + Td \times s\right) \quad \text{Eq. 40}$$

Utilizando os valores de K_{cu} e P_u obtidos através dos modelos de cada malha de controle, projeta-se os parâmetros dos controladores (controladores PID em paralelo – Eq. 40) usando as relações de Ziegler Nichols. Esses estão apresentados abaixo, juntamente com as respostas das malhas 1 (S0 x P) e 2 (F x T) para um degrau de magnitude 1 no instante $t=0$ nas variáveis manipuladas, essas respostas serão utilizadas para determinar qual a melhor configuração de controlador (P, PI ou PID) para cada malha. Importante ressaltar que essas respostas foram obtidas apenas com a malha estudada fechada e as outras abertas.

Tabela 9: Parâmetros obtidos para os controladores da malha 1

Malha 1	$K_{cu} = 210,2375; P_u = 1034,9793$		
C1	Kc	Ti	Td
P	105,1187	100.000	-
PI	94,6069	859,0328	-
PID	124,0401	517,4897	124,1975

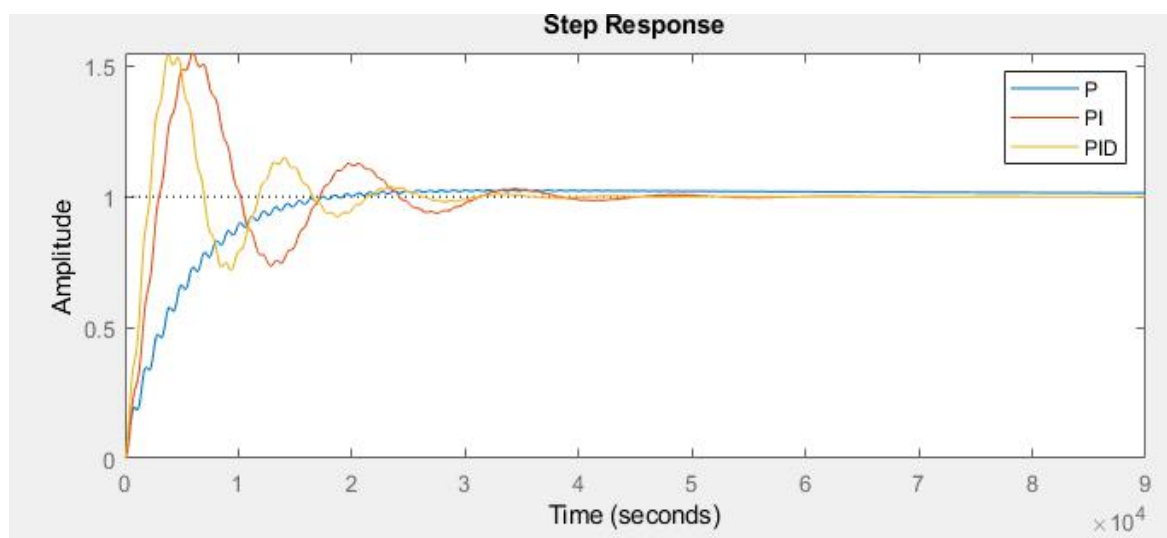


Figura 16: Respostas da malha 1 as diferentes conFigurações de controlador

Fonte: MATLAB

Tabela 10: Parâmetros obtidos para os controladores da malha 2

Malha 2	Kcu = 0,0011939; Pu = 91,9354		
C2	Kc	Ti	Td
P	5,9697e-04	10.000.000	-
PI	5,3727e-04	76,3064	-
PID	7,0442e-04	45,9677	11,0323

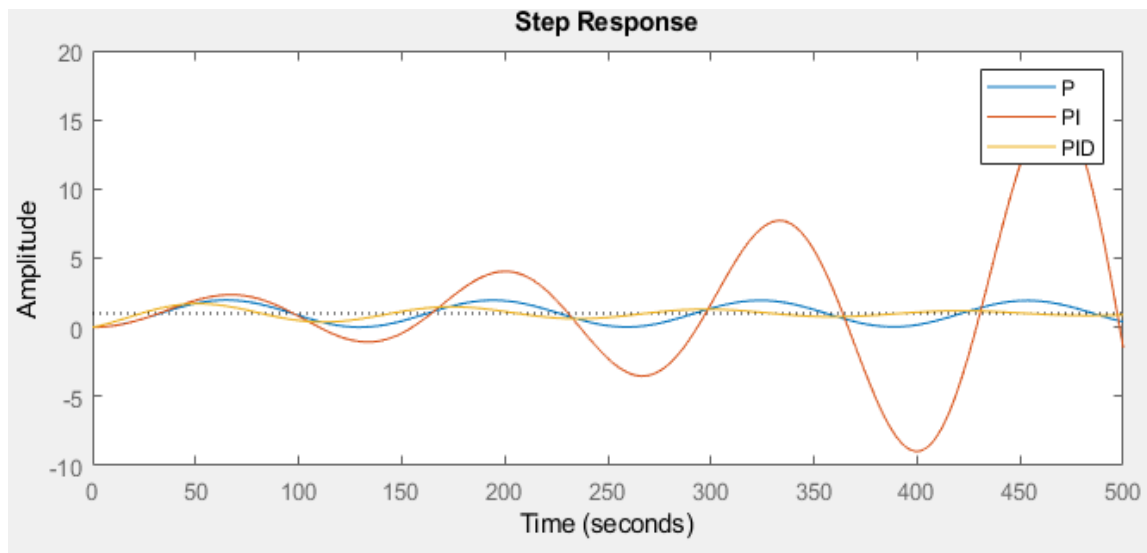


Figura 17: Respostas da malha 2 às diferentes configurações de controlador

Fonte: *MATLAB*

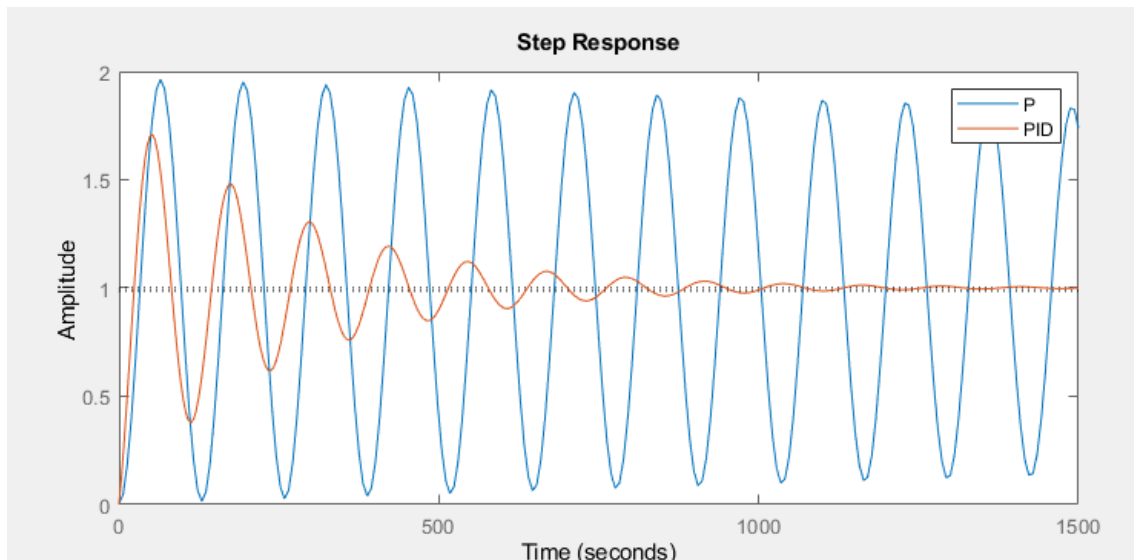


Figura 18: Ampliação das respostas da malha 2 às diferentes configurações de controlador

Fonte: MATLAB

Dos resultados obtidos, conclui-se que para a malha 1, com os parâmetros obtidos, o controlador adequado é puramente proporcional. Já para a malha 2, era esperado que os três controladores tivessem respostas estáveis por apresentarem K_c menor do que o crítico. Entretanto, como visto na figura 17, a malha com o controlador PI apresentou uma resposta instável, provavelmente isso ocorreu devido a algum erro na determinação do K_{cu} ou do P_u , porém nenhuma solução para esse problema foi encontrada e esse controlador foi descartado. Pela Figura 18 nota-se que o controlador adequado é o PID por ser mais rápido e menos oscilatório do que o puramente proporcional.

4.4.4 Aplicação dos controladores no sistema

4.4.4.1 Mudança na referência

O primeiro caso em que os controladores obtidos serão testados é na mudança no sinal da referência, as duas malhas são fechadas simultaneamente para se estudar o comportamento da planta. Foi aplicado um degrau de 0,01 g/L na referência no instante inicial, P deve acompanhar a referência e T deve rejeitar esse distúrbio e voltar ao estado estacionário inicial. Os resultados obtidos com os controladores adequados estão nas Figuras abaixo:

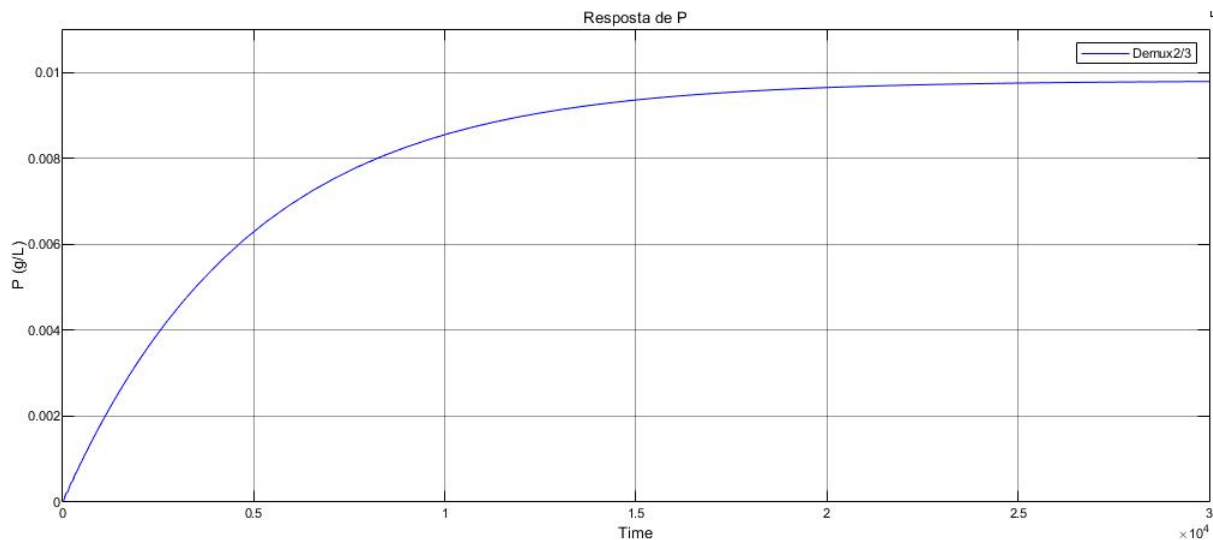


Figura 19: Resposta de P ao degrau de 0,01 g/L em S0 – Ziegler e Nichols

Fonte: *MATLAB*

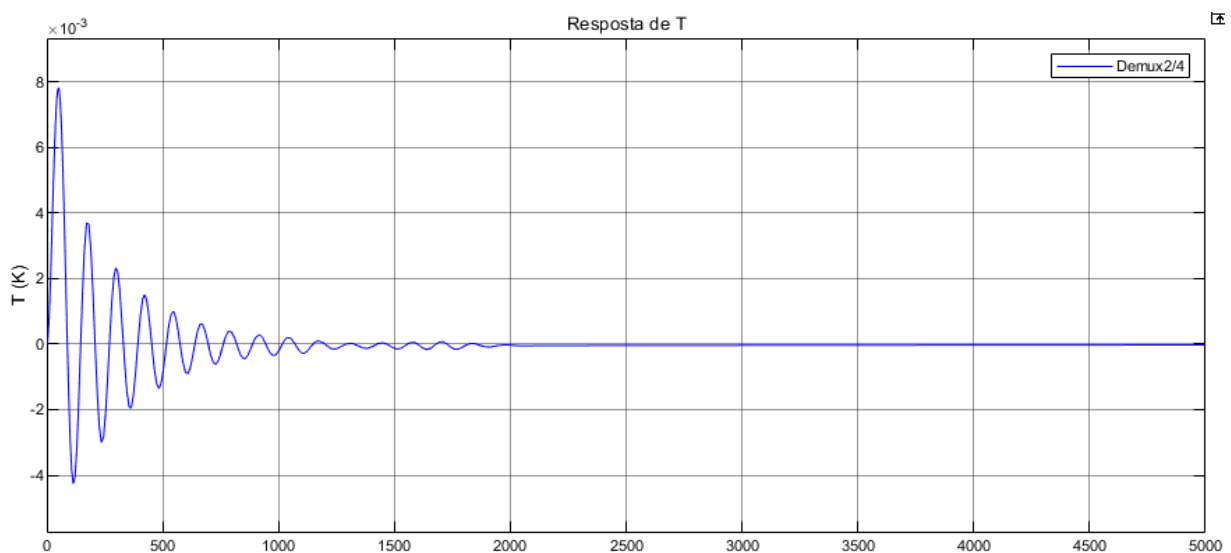


Figura 20: Resposta de T ao degrau de 0,01 g/L em S0 – Ziegler e Nichols

Fonte: *MATLAB*

Observa-se que ambas as respostas se estabilizaram em um novo patamar, o que é satisfatório. Entretanto, a resposta de P, ficou próxima, porém não alcançou o valor esperado que é 0,01; em relação a T, a resposta é rápida, porém bastante oscilatória.

Para melhorar a performance do sistema, os parâmetros dos controladores serão ajustados de acordo com os efeitos desejados, deseja-se que P atinja o valor final de 0,01 g/L em variável desvio e que T oscile menos até voltar ao estado estacionário. Para que ambos os requerimentos sejam satisfeitos, pode-se aumentar o ganho proporcional (K_c) de ambos os

controladores, pois os efeitos esperados dessa mudança são (ABDULAMEER, SULAIMAN, *et al.*, 2016):

- Diminuição do tempo de subida;
- Aumento do *overshoot*;
- Pequeno aumento no tempo de decaimento (para o novo estado estacionário);
- Diminuição do erro do estado estacionário.

Nota-se que o aumento do *overshoot* e o aumento no tempo de decaimento não são desejados, porém ocorrem com o aumento do K_c .

Para fazer o controle de P, além do aumento do ganho proporcional, aumentou-se o ganho integral (K_c/T_i) para a eliminação do erro do novo estado estacionário. Já para T, é necessário também aumentar o ganho derivativo ($K_c \cdot T_d$) do controlador com o objetivo de diminuir o tempo de decaimento e o *overshoot*.

Após um processo de tentativa e erro, os novos parâmetros do controlador e as respostas encontradas são as seguintes:

Tabela 11: Parâmetros obtidos para os controladores

	Ziegler e Nichols (1942)		Novos parâmetros	
	Malha 1	Malha 2	Malha 1	Malha 2
P	$K_c = 105,1187$	$K_c = 7,0442e-04$	$K_c = 157,6780$	$K_c = 7,0442e-03$
I	$T_i = 10.000.000$	$T_i = 45,9677$	$T_i = 350.395,666$	$T_i = 459,6781$
D	-	$T_d = 11,0323$	-	$T_d = 1,7648$

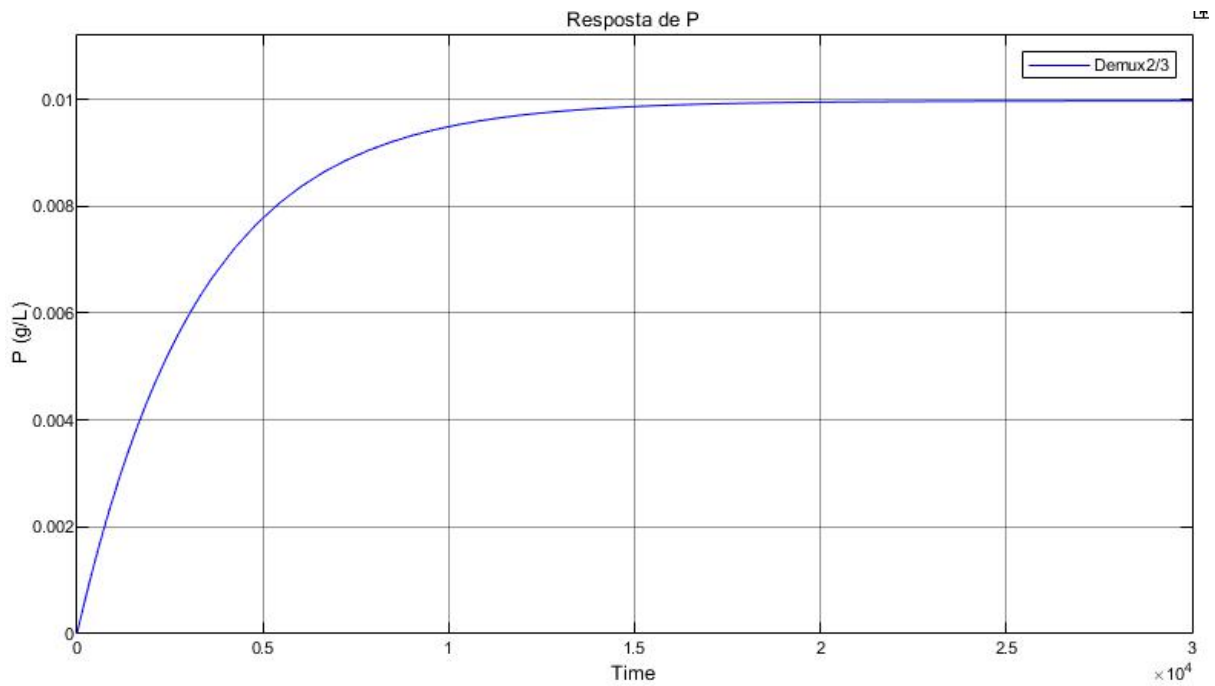


Figura 21: Resposta de P ao degrau em de 0,01 em S0 – Novos parâmetros

Fonte: *MATLAB*

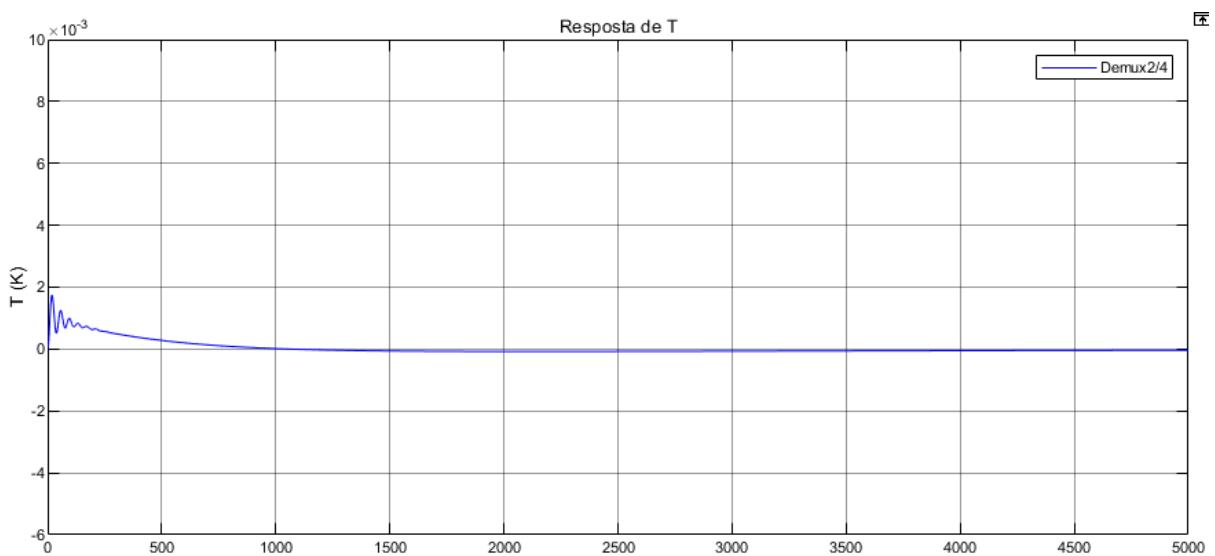


Figura 22: Resposta de T ao degrau de 0,01 em S0 – Novos parâmetros

Fonte: *MATLAB*

A resposta de P continua muito parecida com aquela com os parâmetros de Ziegler e Nichols, porém agora atinge o valor requerido. Já a resposta de T, apresenta um *overshoot* quatro vezes menor e um tempo de caimento de metade do valor anterior, indicando que a

performance do sistema melhorou consideravelmente e que os controladores projetados estão adequados.

4.4.4.2 Rejeição de distúrbio

Mesmo sabendo que o controlador foi inicialmente projetado para que seja eficaz em seguir uma mudança na referência, testou-se esse controlador também para rejeição de um distúrbio na concentração de produto e na temperatura do reator. Nesse caso, P e T tiveram seu valor em variável desvio aumentado em 0,01 g/L e 1 K no instante inicial da simulação. Abaixo estão apresentadas as respostas para os controladores obtidos diretamente pelas relações de Ziegler e Nichols:

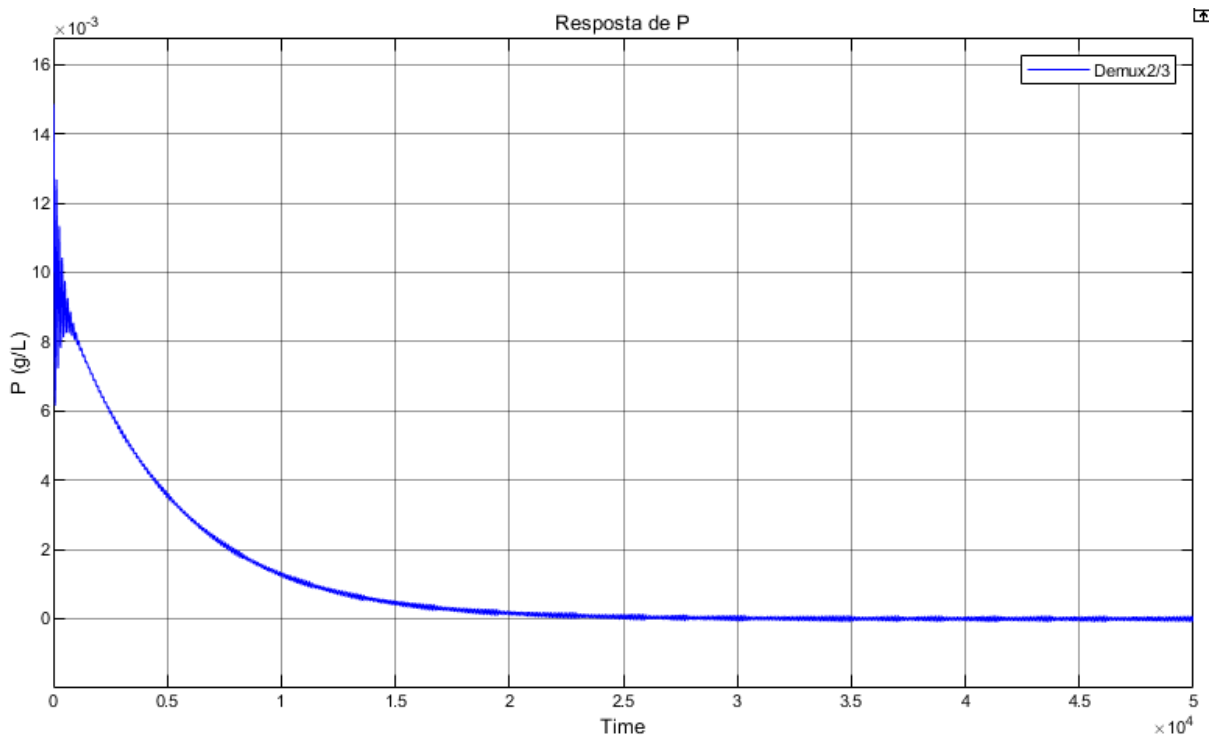


Figura 23: Resposta de P ao distúrbio – Ziegler e Nichols

Fonte: *MATLAB*

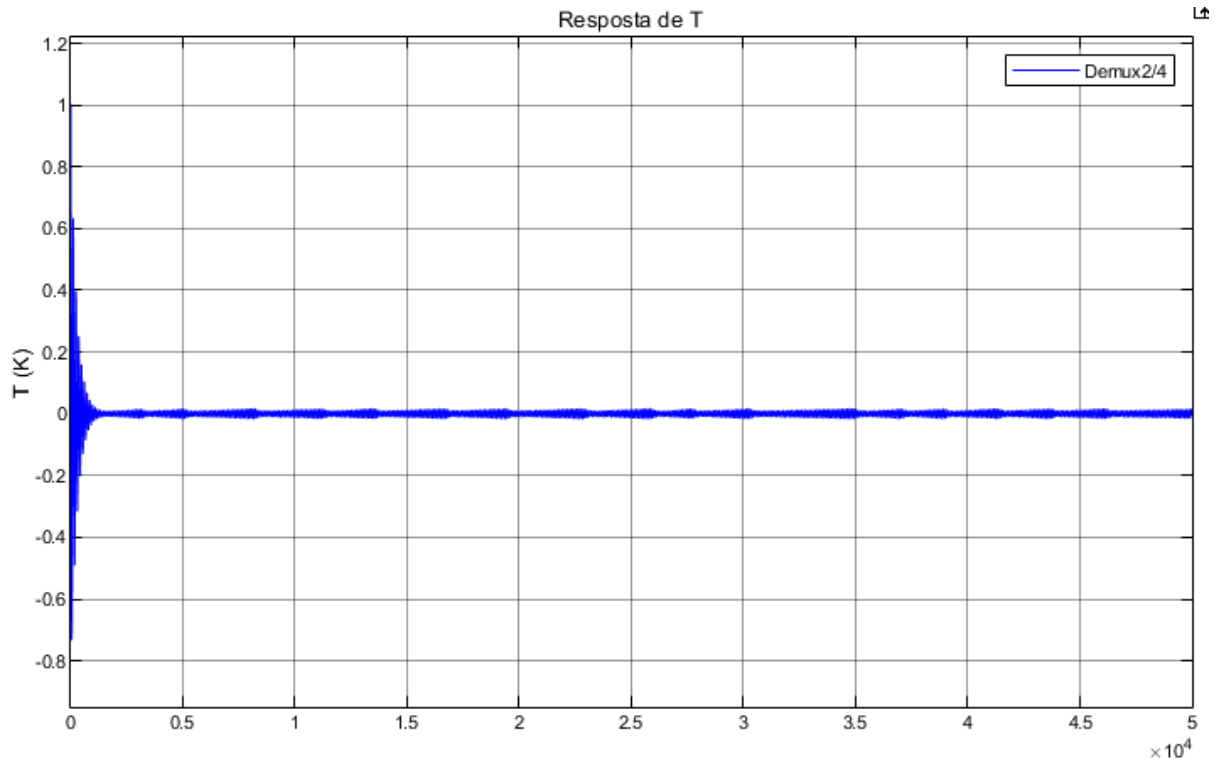


Figura 24: Resposta de T ao distúrbio – Ziegler e Nichols

Fonte: *MATLAB*

Visualmente ambos as respostas atingem o valor desejado (0 em variável desvio), porém no *MATLAB*, nota-se que P e T apresentam pequenas oscilações que continuam indefinidamente, ou seja, o sistema não atinge um novo estado estacionário perfeitamente. Algumas causas prováveis para esse comportamento: a escolha do tipo de controlador para cada malha (P, PI ou PID) foi baseado no melhor controle para seguir uma referência e não para rejeitar um distúrbio nos estados, e ainda, a parametrização dos controladores foi feita fechando uma malha por vez (usando o pareamento do RGA), o que não garante o sucesso do sistema com ambas as malhas fechadas.

4.5 Controlador obtido usando a síntese direta

4.5.1 Mudança na referência

Substituindo os parâmetros das equações 29, 30, 32, 33 e 34 pelos valores das funções de transferências (G), obtém-se os seguintes controladores. Abaixo também são apresentadas as respostas das variáveis controladas a um degrau de 0,01 em S_0 no instante $t=0$.

Tabela 12: Parâmetros obtidos para os controladores

Malha 1	Malha 2
$K_c = 1,00E4$	$K_c = 1,20E-5$
$T_i = 2,61E5$	$T_i = 10,93$
-	$T_d = 11,0323$

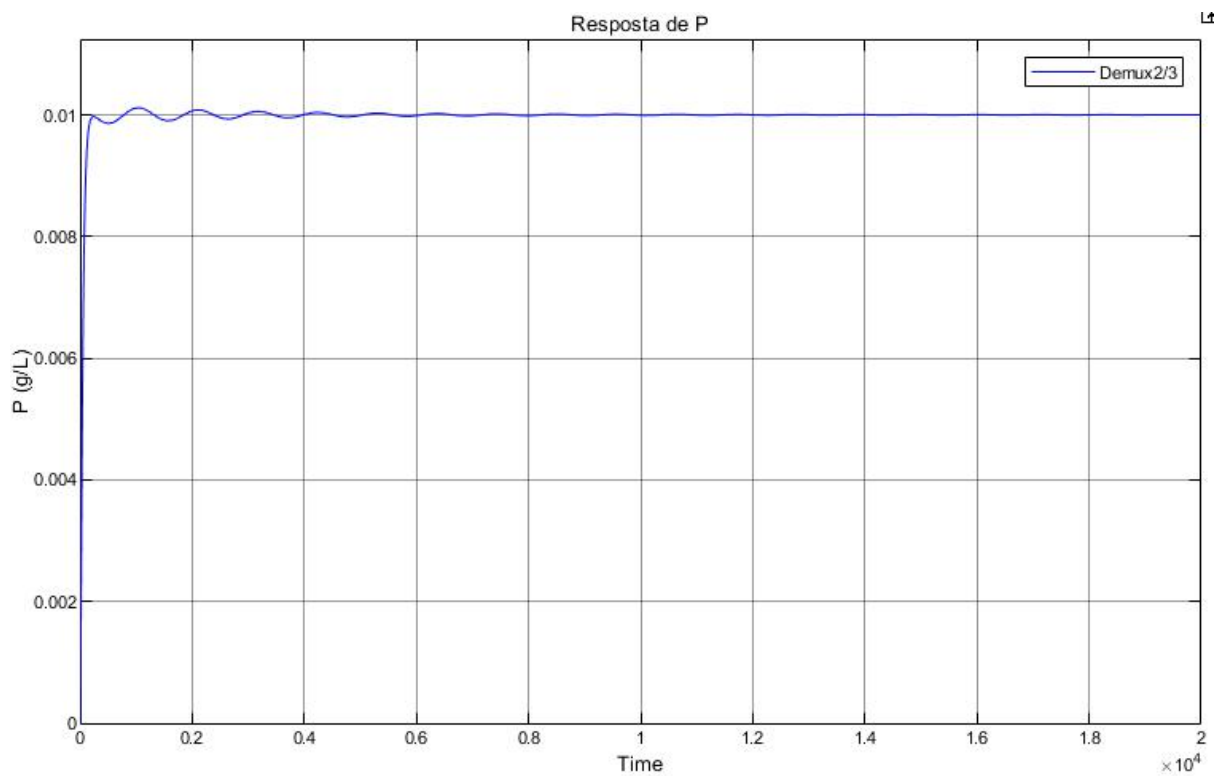


Figura 25: Resposta de P ao degrau de 0,01 em S0 – Síntese Direta

Fonte: *MATLAB*

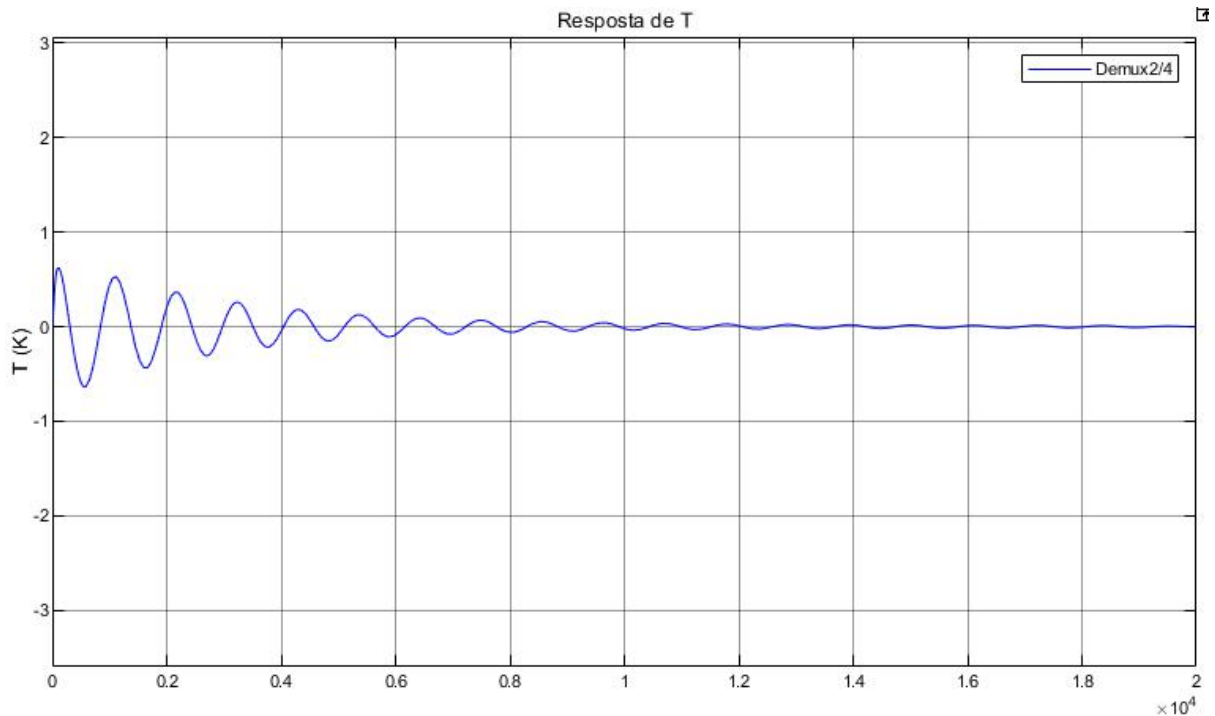


Figura 26: Resposta de T ao degrau de 0,01 em S0 – Síntese Direta

Fonte: *MATLAB*

Novamente, os controladores atingem seus objetivos, P segue a referência e atinge um novo patamar em 0,01 e T rejeita o distúrbio e volta ao patamar 0 em variável desvio.

4.5.2 Rejeição de distúrbio

Mesmo sabendo que o controlador foi inicialmente projetado para que seja eficaz em seguir uma mudança na referência, testou-se esse controlador também para rejeição de um distúrbio na concentração de produto e na temperatura do reator. Nesse caso, P e T tiveram seu valor em variável desvio aumentado em 0,01 g/L e 1 K no instante inicial da simulação. Os resultados são apresentados nas Figura 27 e 28:

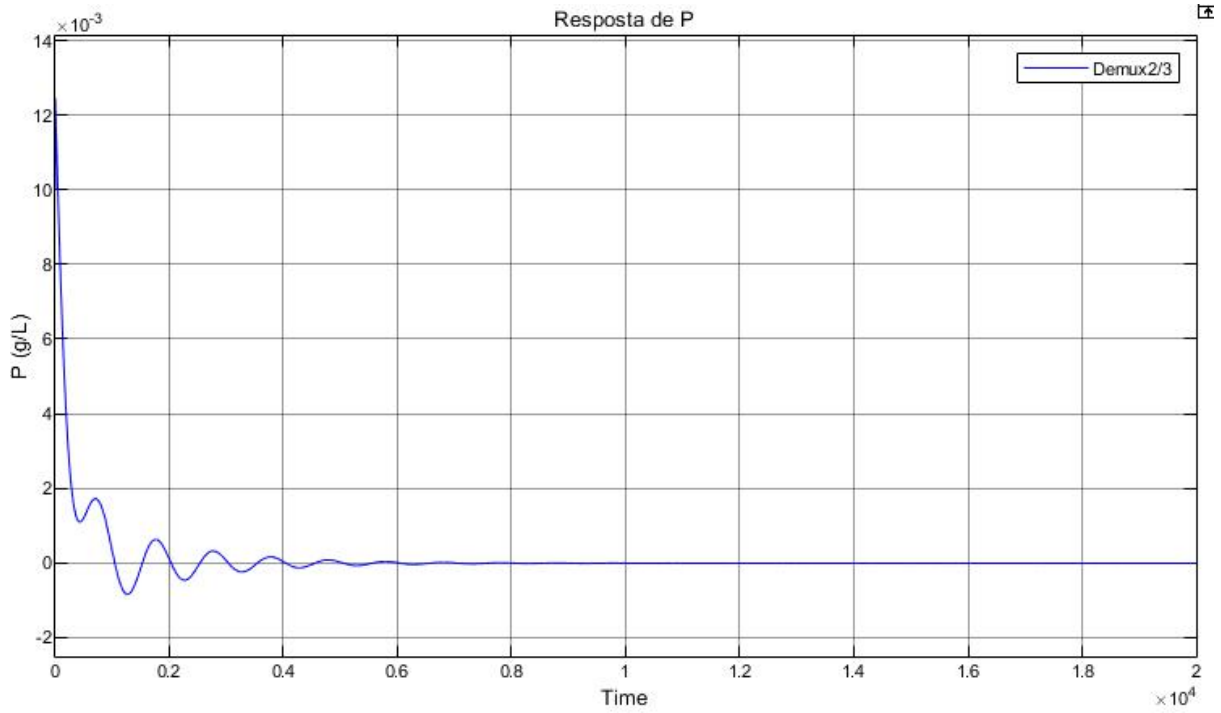


Figura 27: Resposta de P ao distúrbio – Síntese Direta

Fonte: *MATLAB*

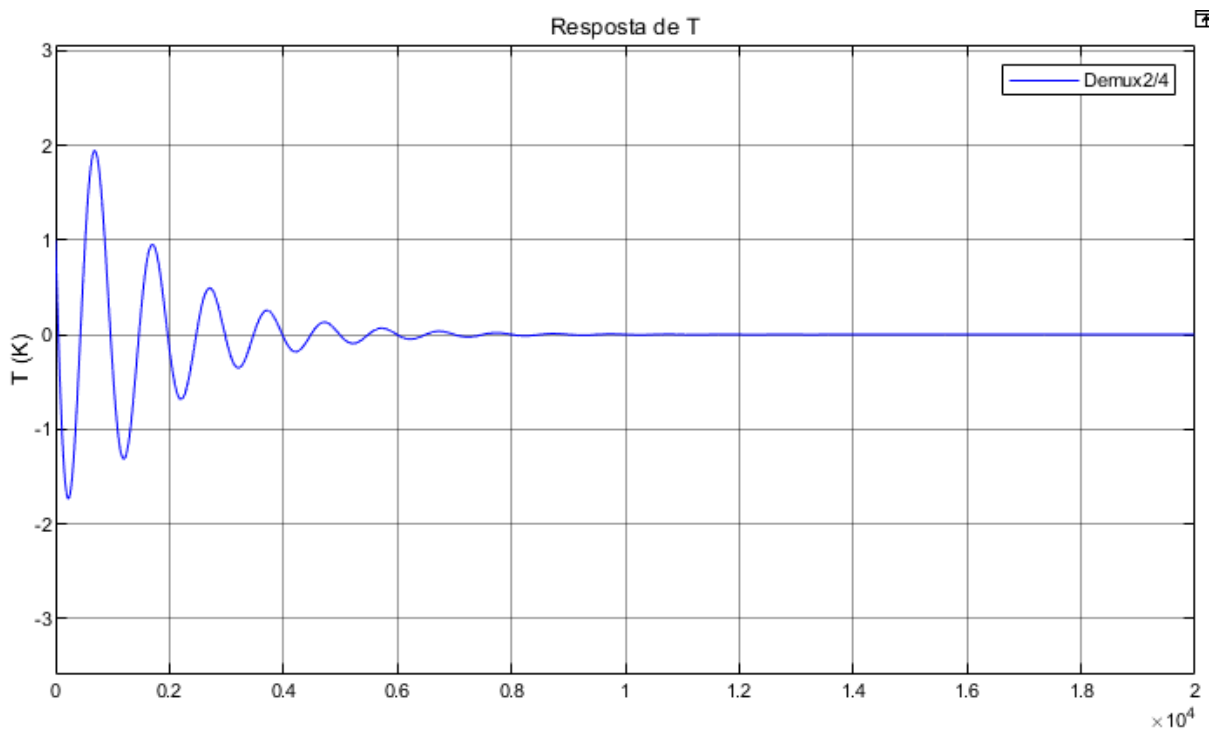


Figura 28: Resposta de T ao distúrbio – Síntese Direta

Fonte: *MATLAB*

Ambas as repostas rejeitam o distúrbio e alcançam o novo estado estacionário desejado.

4.6 Controle ótimo – Regulação quadrática linear (LQR)

O MATLAB resolve a função quadrática de performance do sistema (item 3.2.3) dado as funções de peso Q e R , e retorna a matriz de ganho K do controlador. Inicialmente serão comparados três casos:

- 1) O caso mais simples: R e Q colocam a mesma importância no controle e nas variáveis de saída e, portanto, tem valor 1 nos elementos não-zero;
- 2) Para que a resposta de P seja mais rápida, o elemento $Q(3,3)$ será modificado para 500;
- 3) Agora deseja-se que T volte mais rápido para zero, e por isso, $Q(4,4)$ valerá 1000;
- 4) Será colocado mais custo em S_0 e assim $R(1,1)$ valerá 100.

As matrizes de peso Q e R e a matriz de ganhos K_r estão representadas abaixo:

Tabela 13: Matrizes de peso para regulação quadrática linear e as matrizes de ganho

1º Caso: Todos os estados e entradas com mesmo peso	
$Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Kr = 0.021340735669756 0.118286598794181 0.236286054985721 0.000006288847605 0.666681859125873 3.953531021379421 -0.000257162704875 1.002905978017537 0.000001060654780 0.000006288847603 0.000000421343938 0.000003125251173	
2º Caso: Q(3,3) = 500	
$Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 500 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Kr2 = 1.745805367724641 10.235758075692937 20.451338685934761 0.000109233512314 2.057690144083359 12.202676946625045 0.131179003687292 1.008973202179008 0.000018421946901 0.000109233512282 0.000200783193394 0.000009651206759	
3º Caso: Q(4,4) = 1000	
$Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1000 \end{bmatrix}$	$R = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Kr3 = 0.021401691021400 0.118648069673413 0.236286070475617 0.000517315995033 6.107649004323605 36.219134986882636 -0.000034628682364 31.649471491077708 0.000087235401305 0.000517315994898 0.000000421545997 0.000903393775444	
4º Caso: Maior custo no elemento R(1,1)	
$Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$R = \begin{bmatrix} 100 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Kr4 = 0.000226811996857 0.001252026210796 0.002501027640398 0.000000062896548 0.666678180973988 3.953512203537036 -0.000294756486780 1.002905978033671 0.000001060812113 0.000006289654884 0.000000422956699 0.000003125251173	

4.6.1 Rejeição de distúrbio

Em seguida, o sistema foi testado para o caso em que um distúrbio causa um aumento de 0,01 g/L na concentração de produto e a temperatura do reator é aumentada em 1K. Esse controlador deve ser eficiente para que o sistema retorne a sua condição inicial no menor tempo possível. Abaixo estão apresentadas as respostas em variável desvio.

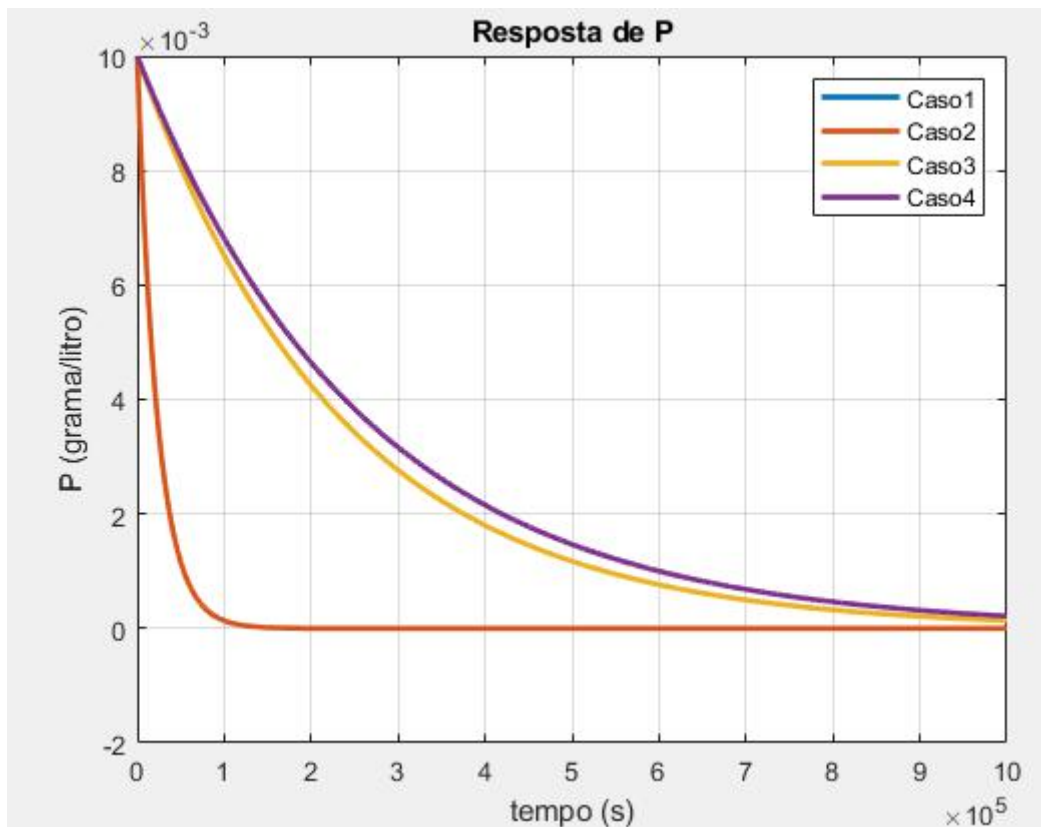


Figura 29: Resposta de P ao distúrbio - LQR

Fonte: *MATLAB*

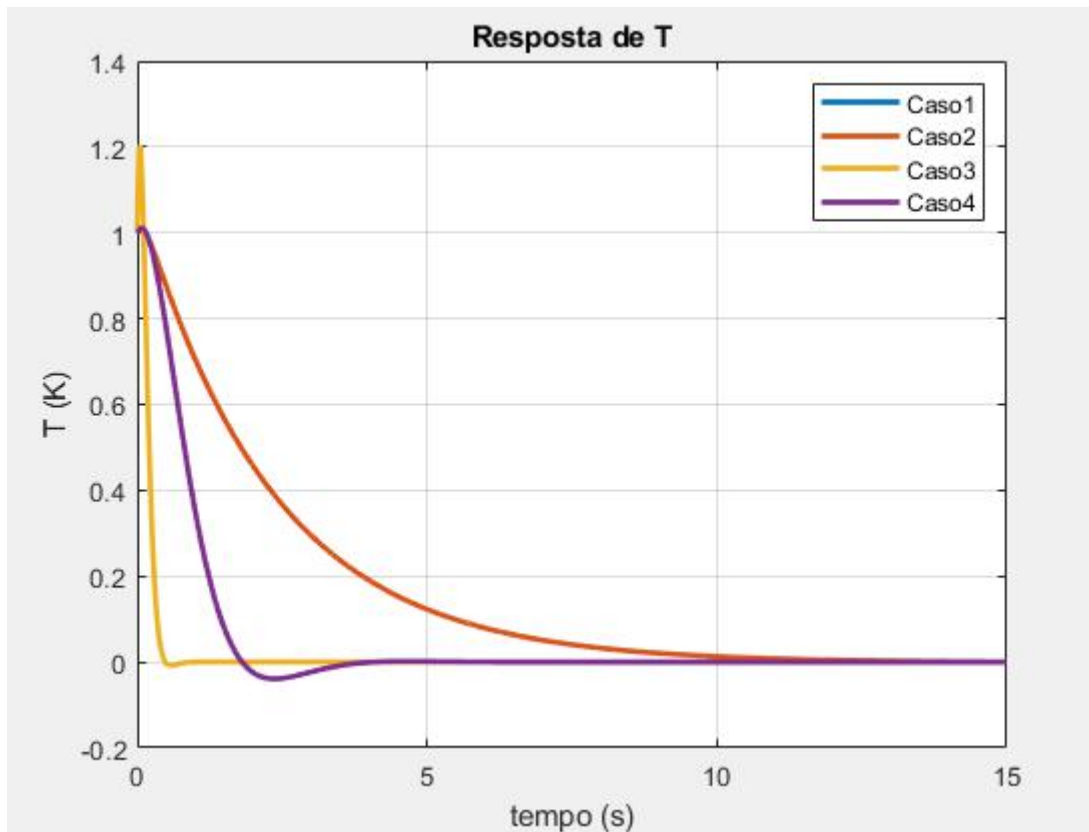


Figura 30: Resposta de T ao distúrbio - LQR

Fonte: *MATLAB*

Ao analisar os gráficos de resposta nota-se que em todos os casos P e T convergem para zero, logo os ganhos de controle aplicados e a regulação quadrática linear foram implementados corretamente. É notável também que a concentração de produto (P) tem uma resposta muitas vezes mais lenta que a temperatura do reator (T).

Para a saída P, a resposta mais rápida foi a do caso 2, ou seja, aquela em que foi atribuído maior valor ao elemento associado ao estado P na matriz Q, priorizando sua trajetória. Acontece o mesmo para a saída T, a resposta mais rápida é a do caso 3, ou seja, aquela em que o elemento associado ao estado T na matriz Q é aumentado.

Não está visível nos gráficos, porém os casos 1 e 4 estão sobrepostos, indicando não ter tido diferença para o sistema aumentar um elemento da matriz R. Além disso, na resposta de T, nota-se que os casos 1 e 4 voltam mais rapidamente para o estado inicial do que o caso 2, isso é mais um indicativo do pareamento $S_0 \times P$ e $F \times T$, pois mostra que o controle prioritário de T (usando majoritariamente F) gera uma resposta mais lenta em P do que o caso em que os controles estão equilibrados.

4.6.2 Mudança na referência

Nesse item, deseja-se que a partir de um degrau de 0,01 g/L em S_0 no instante inicial, a concentração de produto (P) siga esse sinal e atinja um novo patamar em 0,01 g/L em variável desvio (aqui não foi apresentada a resposta de T pela dificuldade de encontrar o valor exato da matriz K_{ff}). Para isso será utilizado o sistema que apresentou o melhor resultado no item anterior, ou seja, o caso 2.

Como explicado no item 3.2.3, para que isso ocorra é necessário adicionar a matriz de ganho K_{ff} para escalar a resposta, a matriz obtida foi:

$$K_{ff} = \begin{bmatrix} 22,45 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Abaixo está apresentada a resposta de P em variável desvio:

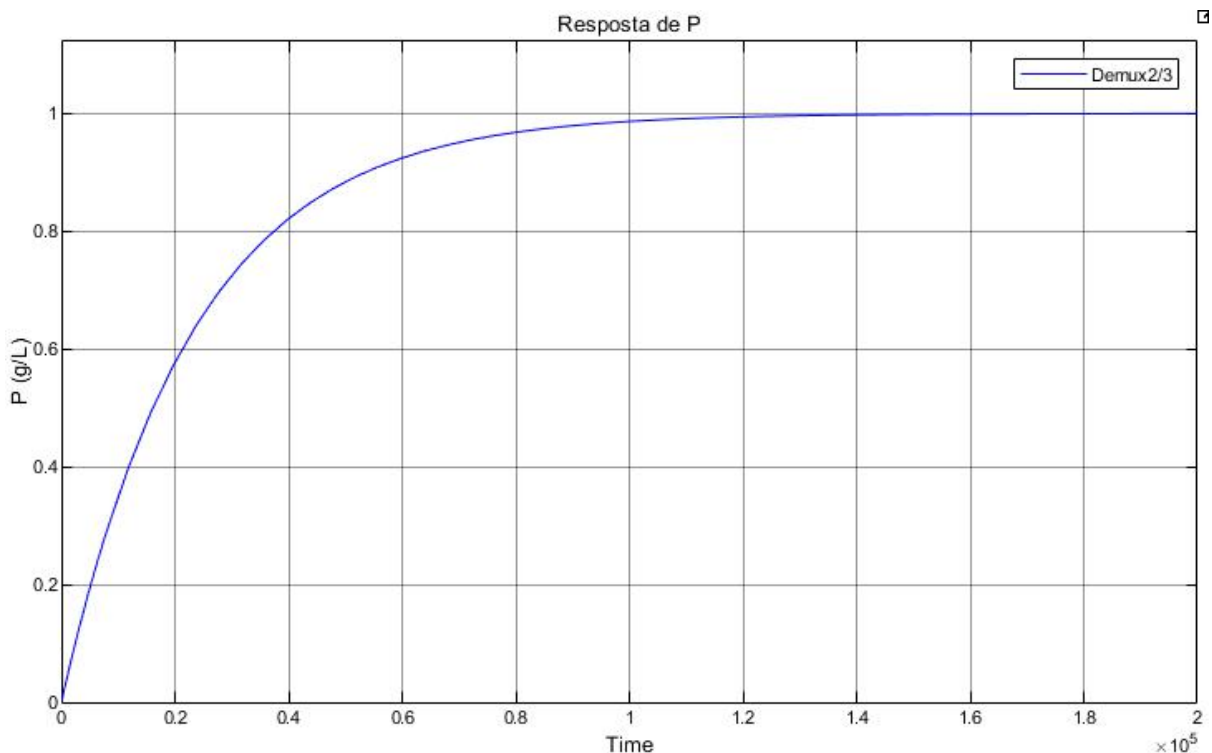


Figura 31: Resposta de P ao degrau em de 0,01 em S_0 – LQR

Fonte: *MATLAB*

Como visto na Figura 31, a malha de controle obtida usando a Regulação Quadrática Linear também cumpriu seu objetivo em acompanhar a mudança na referência da variável de entrada.

4.7 Comparação entre o Ziegler e Nichols e Síntese Direta

Nesse item o ideal seria comparar as respostas do sistema com todos os projetos de controladores, no entanto, nesses projetos não foram definidos critérios específicos para as respostas desejadas, e assim a comparação entre os controladores do tipo PID com o multivariável obtido por LQR não é satisfatória e, portanto, não foi feita e ficará de sugestão para aprofundamento em trabalhos futuros.

Os controladores do tipo PID foram inicialmente pensados para seguir uma mudança na referência, abaixo estão rerepresentadas as respostas da variável controlada P a essa mudança na referência.

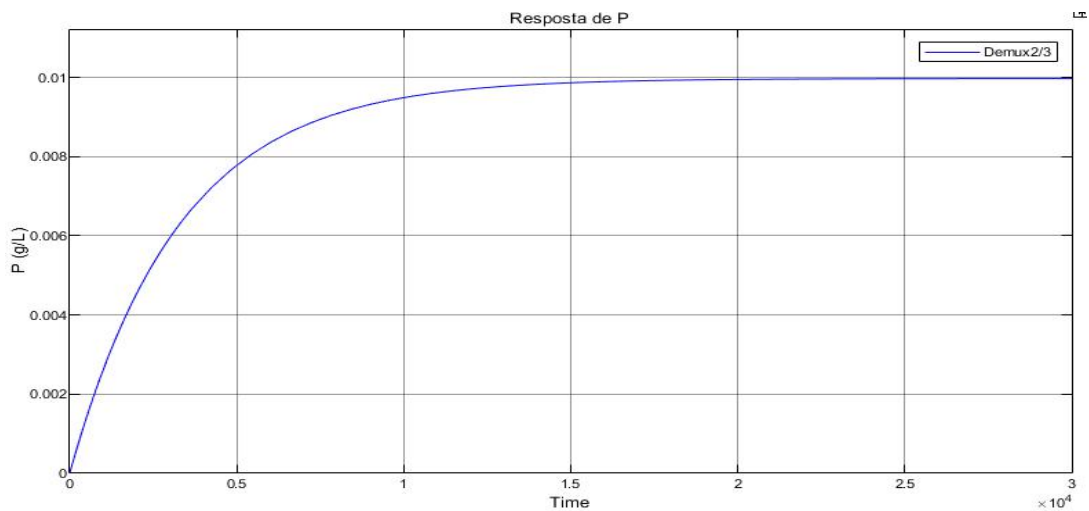


Figura 21: Resposta de P ao degrau de 0,01 em S0 – ZN ajustado

Fonte: *MATLAB*

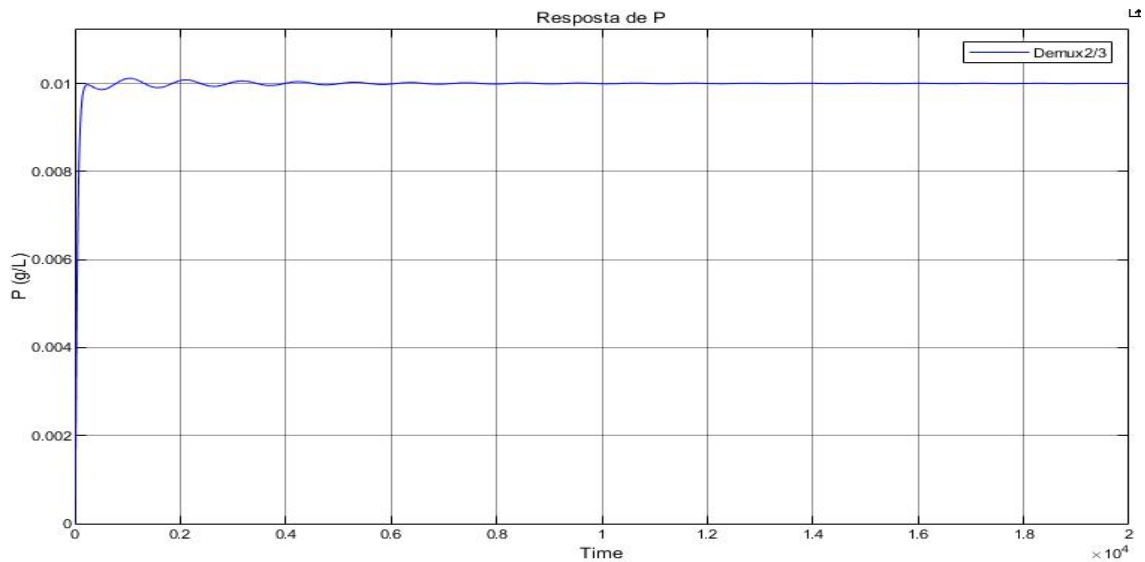


Figura 25: Resposta de P ao degrau de 0,01 em S0 – Síntese Direta

Fonte: *MATLAB*

Observou-se que a resposta obtida no método da Síntese Direta é mais rápida, esta atinge um novo estado estacionário em 5.000 segundos, enquanto a que utiliza as relações de ZN demora 20.000 segundos, entretanto, essa rapidez é oriunda de uma maior ação de controle, K_c aproximadamente 60 vezes maior.

Já para a malha 2, observou-se o contrário, a temperatura voltou para o estado estacionário mais rápido no controle usando as relações de ZN, 1.000 segundos contra 10.000 segundos da Síntese Direta, novamente o controlador com maior K_c apresentou a resposta mais rápida.

Não foi feita uma comparação em relação à rejeição do distúrbio nos estados pois o controlador obtido pelas relações de Ziegler e Nichols apresentou instabilidades não desejadas como mostrado na Figura 24.

5 Conclusão e Sugestões

Esse trabalho final cumpriu seu objetivo principal que era estudar a modelagem e o controle do processo de biolixiviação da pirita. A biolixiviação da pirita em um reator contínuo foi o processo escolhido por ser uma alternativa mais sustentável e com menores custos para a indústria de mineração.

5.1 Modelagem

Embora existam modelos que descrevam importantes aspectos do processo de biolixiviação como oxidação, crescimento bacteriano e temperatura, esses modelos são tipicamente de uma grande complexidade matemática (GODOY, BRASLAVSKY e AGUERO, 2007). Por isso, fazer uma modelagem que inclua todos esses parâmetros necessita de inúmeras simplificações e tem uma extensão de alcance limitada. O modelo de reator obtido nesse trabalho conseguiu incorporar grande parte dos parâmetros utilizados no estudo base a modelos do processo de biolixiviação obtidos na literatura. Ao usar o espaço de estados, fez-se a linearização desse modelo e a similaridade com o modelo não linear foi aceitável para valores próximos do estado estacionário inicial diante a degraus nas variáveis de entrada, lembra-se, porém, que as respostas tiveram um comportamento diferente do esperado, apresentando grandes oscilações. A partir da resolução do sistema em espaço de estados, no *MATLAB*, foram obtidas as funções de transferência que relacionam as variáveis de entrada com as de saída, pôde ser visto que a localização dos polos e dos zeros ditam o comportamento dinâmico do sistema e que as variações nos estados são fisicamente explicáveis.

5.2 Controle

O estudo do controle do processo foi dividido em dois problemas, o primeiro consistiu em fazer que a variável controlada P acompanhasse uma mudança no sinal de referência, enquanto a variável T retornava ao valor inicial. No segundo, as variáveis controladas partiam de um estado diferente do estacionário e deveriam retornar para o estado estacionário inicial.

Em um primeiro momento adotou-se uma estratégia similar à de Godoy (2007), fez-se uma análise de sensibilidade entre as variáveis para buscar o melhor pareamento. Em seguida, através do diagrama de Routh e do gráfico de Bode das FT encontraram-se o ganho e o período de oscilação críticos para cada malha, e utilizando-se das relações de Ziegler e Nichols projetou-se os controladores. Também foram projetados controladores através do método da

Síntese Direta, ajustando as equações do sistema para se obter respostas de primeira ordem em malha fechada foram definidos os parâmetros dos controladores. Por último, foi utilizada a regulação quadrática linear (LQR) para minimizar uma função de performance para o sistema e assim se obteve uma matriz de ganhos de controle. Nesse caso, o sistema foi estudado diante a diferentes escolhas das matrizes Q e R presentes na função de performance.

Todos os métodos de síntese dos controladores se mostraram eficazes e cumpriram seus objetivos de seguir uma referência ou rejeitar um distúrbio.

5.3 Sugestões

As técnicas de modelagem e controle aprendidas em sala de aula se mostraram válidas para se estudar um processo complexo como o da biolixiviação da pirita, logo um estudo assim pode ser feito para uma vasta gama de processos industriais. Trabalhos como o da disciplina de modelagem e o de controle devem ser estimulados porque além de reforçar os conceitos teóricos, fazem os alunos se aprofundarem em temas que tenham interesse e ainda fomentam o aprendizado de ferramentas computacionais como o *MATLAB*.

Em relação à modelagem e controle da biolixiviação da pirita, esse projeto final teve como base (para modelagem) um experimento em laboratório da biolixiviação da pirita. Seria interessante tentar utilizar dados reais da indústria para se fazer esse estudo e assim obter ia-se real noção da sua validade. Um ponto importante é que se notou que a temperatura do reator no estado estacionário é alta demais para esse tipo de bactéria, para um próximo estudo seria interessante definir a temperatura da camisa do reator como variável manipulada. Também seria válido aprofundar o estudo do processo para se entender se a concentração da corrente de entrada e a vazão podem ser variáveis manipulada.

Como próximos passos, também seria válido pesquisar os problemas de controle mais comuns que essa indústria tem e fazer um estudo a partir deles. Outro ponto de aprofundamento, seria definir critérios específicos desejados para as respostas e projetar os controladores através desses critérios, para que assim se pudesse comparar as respostas obtidas de forma mais justa e precisa.

6 Referências

ABDULAMEER, A. et al. GUI Based Control System Analysis Using PID Controller for Education. **Indonesian Journal of Electrical Engineering and Computer Science**, Melaka, 2016. 91-101.

ACEVEDO, F. The use of reactors in biomining processes. **Electron Journal of Biotechnology**, 2000. p.1-11.

ALBERTOS, P.; MAREELS, I. **Feedback and Control for Everyone**. [S.l.]: Springer, 2010.

BOON, M. **Theoretical and Experimental Methods in the Modelling of Bio-oxidation kinetics of Sulphide Minerals**. Delft University of Technology. Delft. 1996.

BOON, M.; HEIJNEN, J. J. Gas-liquid mass transfer phenomena in bio-oxidation experiments of sulphide minerals: a critical review of literature data. **Hydrometallurgy**, 1998. p. 187-204.

BOON, M.; RAS, C.; HEIJNEN, J. J. The ferrous iron oxidation kinetics of *Thiobacillus ferrooxidans* in batch cultures. **Appl Microbiol Biotechnol**, v. 51, p. 813-819, February 1999.

BRIERLEY, C. L.; BRIERLEY, J. A. Progress in bioleaching: Part B: applications of microbial processes by the minerals industries. **Appl Microbiol Biotechnol**, 23 Julho 2013.

CARVALHO, F. D. F. et al. MINERAÇÃO SUSTENTÁVEL: OS DESAFIOS DE CONCILIAR A EXPLORAÇÃO DE RECURSOS NÃO-RENOVÁVEIS A UMA PRÁTICA SUSTENTÁVEL GERADORA DE DESENVOLVIMENTO ECONÔMICO. **XXIX Encontro Nacional de Engenharia de Produção**, Salvador, Outubro 2009.

D'HUGUES, P. et al. Continuous bioleaching of a pyrite concentrate in stirred reactors: Population. **Hydrometallurgy**, Orléans, 3 June 2008. p. 34-411.

DOS SANTOS, E. C. **Mecanismo de oxidação da pirita: Uma abordagem através de cálculos DFT**. Universidade Federal de Minas Gerais. Belo horizonte. 2015.

FADALI, M. S. **Digital Control Engineering - Analysis and Design**. [S.l.]: Elsevier, 2009.

FENG, J. et al. Pyrite oxidation mechanism in aqueous medium. **Journal of the Chinese Chemical Society**, Taipei, 22 Dezembro 2019. 345-354.

FRANCISCO JÚNIOR, W. E.; BEVILAQUA, D.; GÁRCIA JÚNIOR, O. Estudo da dissolução oxidativa microbiológica de uma complexa amostra mineral contendo pirita (FeS₂), Pirrotita (Fe_{1-X}S) e Molibdenita (MoS₂). **Química Nova**, 30, n. 5, 2007.

GODOY, B.; BRASLAVSKY, J.; AGUERO, J. **Model Predictive control applied to heap bioleaching processes**. The University of Newcastle. [S.l.]. 2007.

HANSFORD, G. S. Recent Developments in Modeling the Kinetics of Bioleaching. In: RAWLINGS, D. E. **Biomining: Theory, Microbes and Industrial Processes**. [S.l.]: [s.n.], 1997. Cap. 8, p. 153-177.

MESSNER, B.; TILBURY, D. Aircraft Pitch: State-Space Methods for Controller Design. **Control Tutorials for MATLAB and Simulink**. Disponível em: <<https://ctms.engin.umich.edu/CTMS/index.php?example=AircraftPitch§ion=ControlStateSpace>>. Acesso em: 12 Novembro 2020.

MINTEK. Agitated Tank Bioleaching. **Site da Mintek**. Disponível em: <<https://www.mintek.co.za/technical-divisions/biotechnology-bio/services-facilities/agitated-tank-bioleaching/>>. Acesso em: 1 nov. 2019.

MOSES, C. O.; HERMAN, J. S. Pyrite oxidation at circumneutral pH. **Geochimica et Cosmochimica Acta**, Charlottesville, 20 Novembro 1990. p. 471-482.

NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY - U.S. National Institute of Standards and Technology - U.S Department of Commerce. **Site da National Institute of Standards and Technology**, 2018. Disponível em: <<https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C1309360&Type=JANAFS&Table=on>>. Acesso em: 15 Março 2020.

OGUNNAIKE, A. B.; RAY, W. H. **process, dynamics, modeling, and control**. New York: Oxford University Press, 1994.

OLIVEIRA, D. M. et al. Biolixiviação: Utilização de Micro-organismos na Extração de Metais. **Série de Tecnologia Ambiental**, Rio de Janeiro, 2010.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W.; MALONEY, J. O. (Eds.). **Perry's chemical engineers' handbook**. 7ª. ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 1997.

PESIC, B.; OLIVER, D. J. An Electrochemical Method of Measuring the Oxidation Rate of Ferrous to Ferric Iron with Oxygen in the Presence of Thiobacillus ferrooxidans. **Biotechnology and Bioengineering**, 1989. p. 428-439.

PETERSEN, J. Modelling of bioleach process: Connection between science and engineering. **Hydrometallurgy**, v. 104, Outubro 2010. p. 404-409.

POOLEY, F. D. **Bacterial oxidation of an auriferous arsenical concentrate**. Hydrometallurgy. Cambridge: Springer-Science+Business Media. 1994. p. 351-359.

PRADHAN, N. et al. Heap Bioleaching of chalcopyrite: a review. **Minerals Engineering**, Orissa, v. 21, n. 5, Abril 2008. p.355-365.

ROHWERDER, T.; SHIPPERS, A.; SAND, W. Determination of reaction energy values for biological pyrite oxidation by calorimetry. **Thermochimica Acta**, Hamburg, 28 Agosto 1997. 79-85.

ROWELL, D. **State-Space Representation of LTI Systems**. Department of Mechanical Engineering - MIT. Massachusetts. 2002.

SEBORG, D. E. et al. **Process Dynamics and Control**. 3^a. ed. [S.l.]: [s.n.], 2011.

TRIERWEILER, J. O. **A systematic approach to control structure design**. Universitat Dortmund. Dortmund. 1997.

UNDP E UN ENVIRONMENT. **Managing mining for sustainable development: A sourcebook**. United Nations Development Programme. Bangkok. 2018.

WATLING, H. R. The bioleaching of sulphide minerals with emphasis on copper sulphides. **Hydrometallurgy**, v. 84, Outubro 2006. p. 81-108.

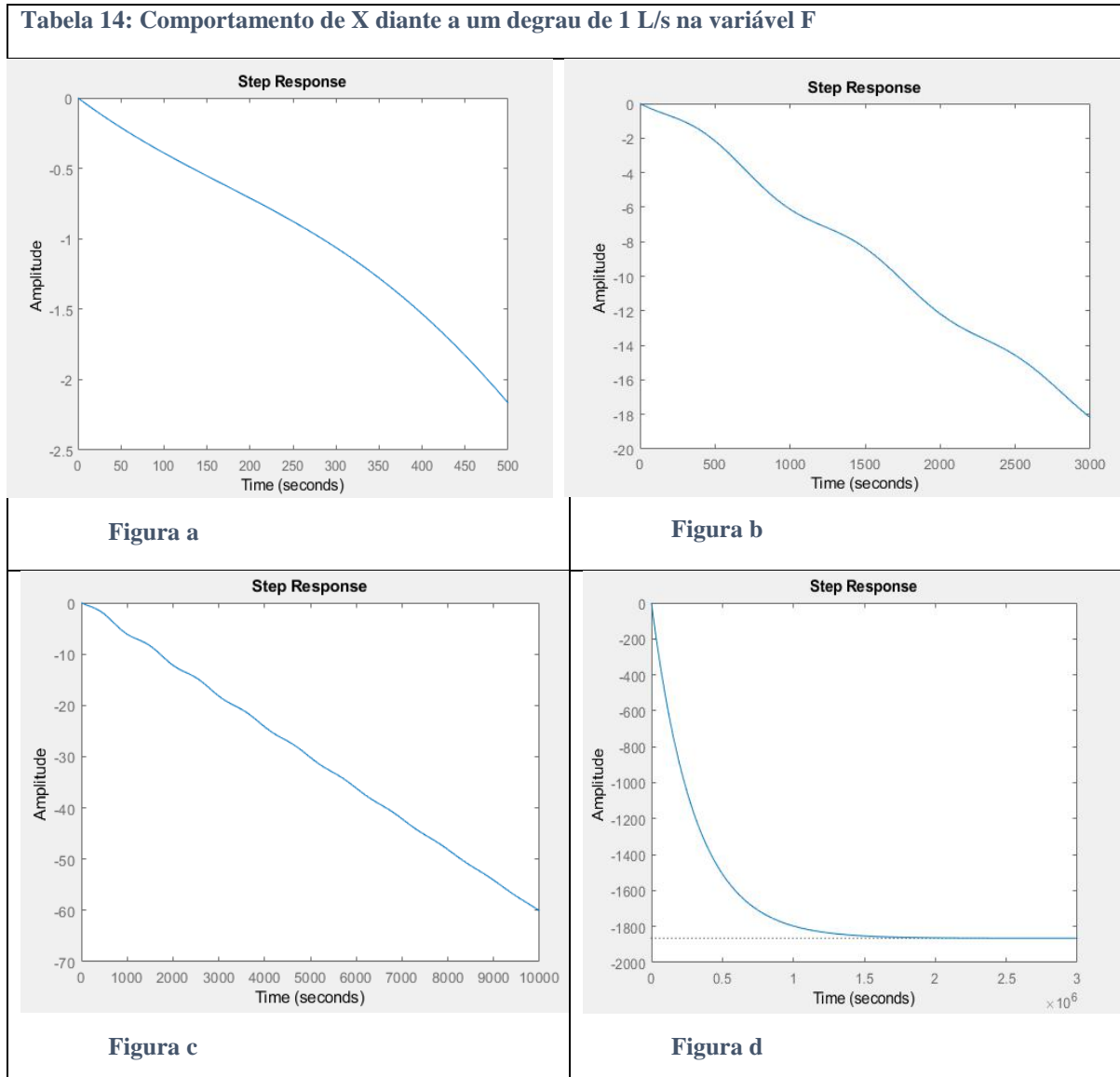
WILIAMNS II, R. L.; LAWRENCE, A. D. **Linear State-Space Control Systems**. Ohio: John Wiley & Sons, Inc., 2007.

YAHYA A., D.; B, J. Bioleaching of pyrite at low pH and low redox potentials by novel mesophilic Gram-positive bacteria. **Hydrometallurgy**, v. 63, p. 181-188, 2002.

7 Apêndice A

Continuação das respostas obtidas no item 4.2.2:

Tabela 14: Comportamento de X diante a um degrau de 1 L/s na variável F



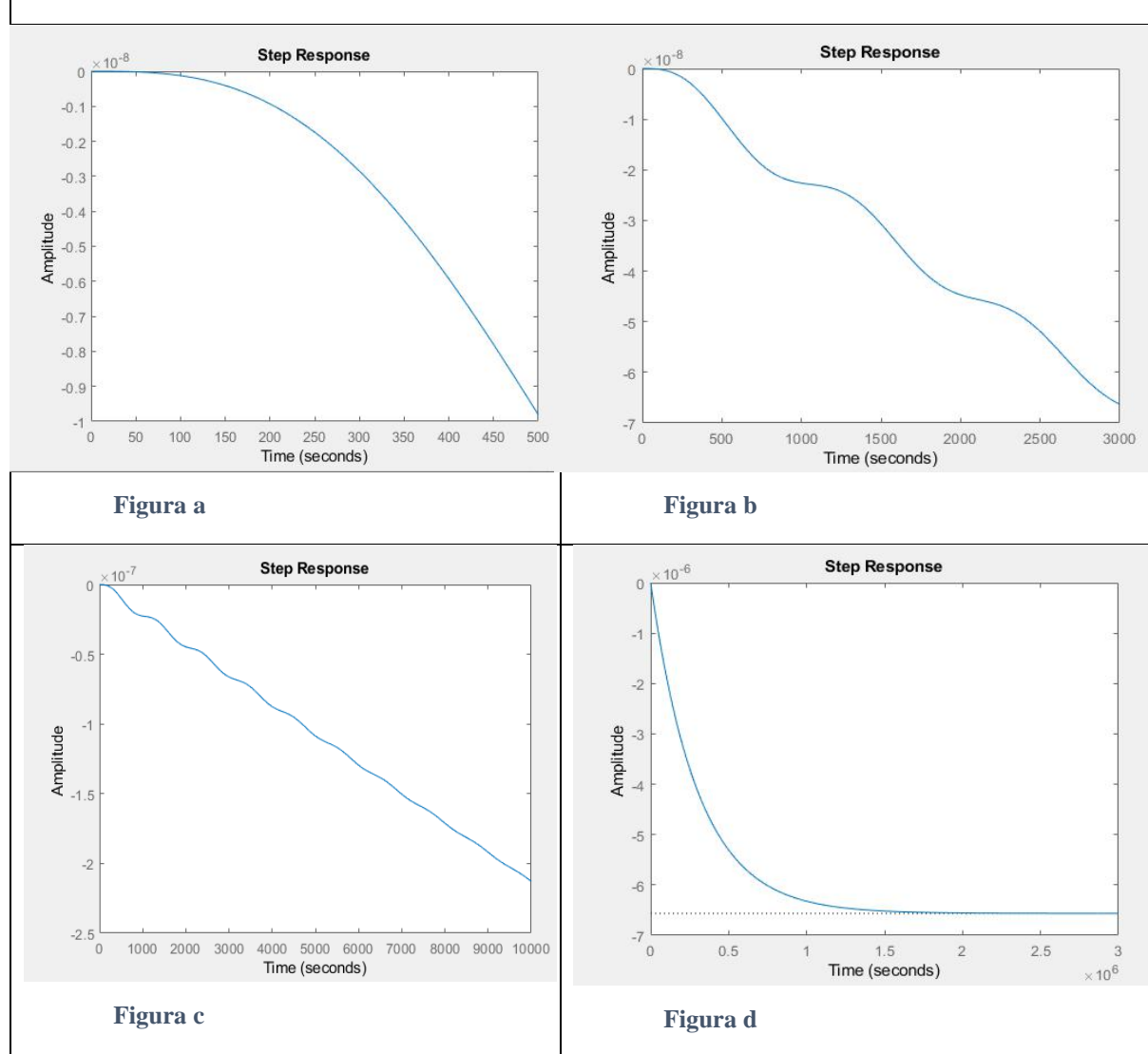
$$G_{12} = \frac{-0,0045716 \times (s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s^2 - 0,003035s + 4,752 \times 10^{-5})^2}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Novamente, devido a diferença entre as constantes de tempo dos polos de primeira e segunda ordem, observa-se que uma resposta que tem comportamento oscilatório quando se

olha para intervalos de tempo curtos, e que tem comportamento de primeira ordem ao se olhar para todo o período de tempo (Figura d). E ainda, o par de zeros complexos no numerador atenua o efeito oscilatório da resposta.

Como não há entrada de células no reator, o único efeito direto do aumento da vazão é a saída de células e diminuição da sua concentração no reator.

Tabela 15: Comportamento de X diante a um degrau de 1 K na variável T0

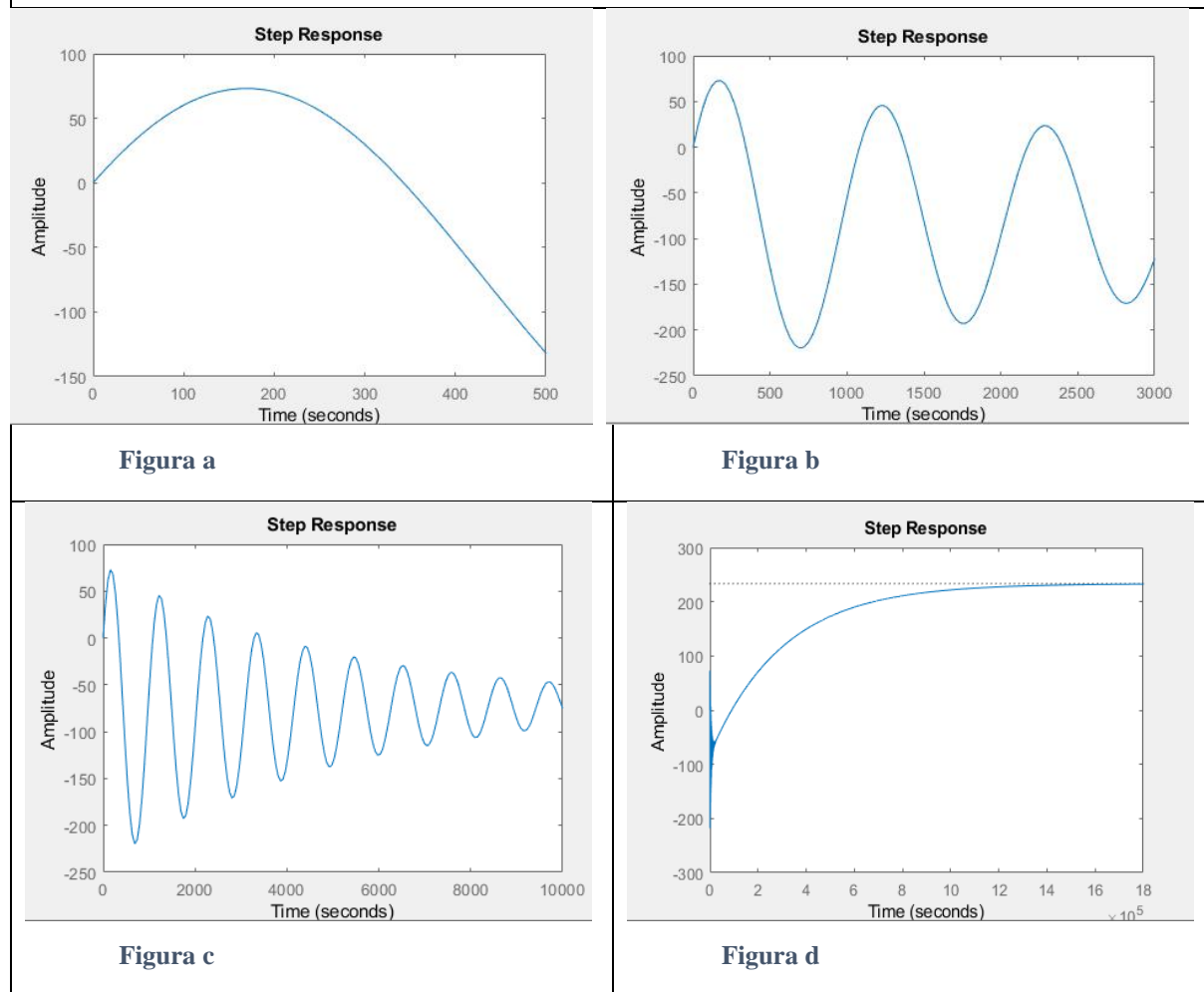


$$G_{13} = \frac{-7,6427 \times 10^{-16} \times (s + 3,833 \times 10^{-6})}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Esse caso é igual aos anteriores, o comportamento é de primeira ordem ao se analisar todo o intervalo de tempo.

T0 é a variável de entrada com menor impacto no valor de X, devido ao fato de não estar presente no balanço de X e também por não estar no balanço de S.

Tabela 16: Comportamento de S diante a um degrau de 1 L/s na variável F



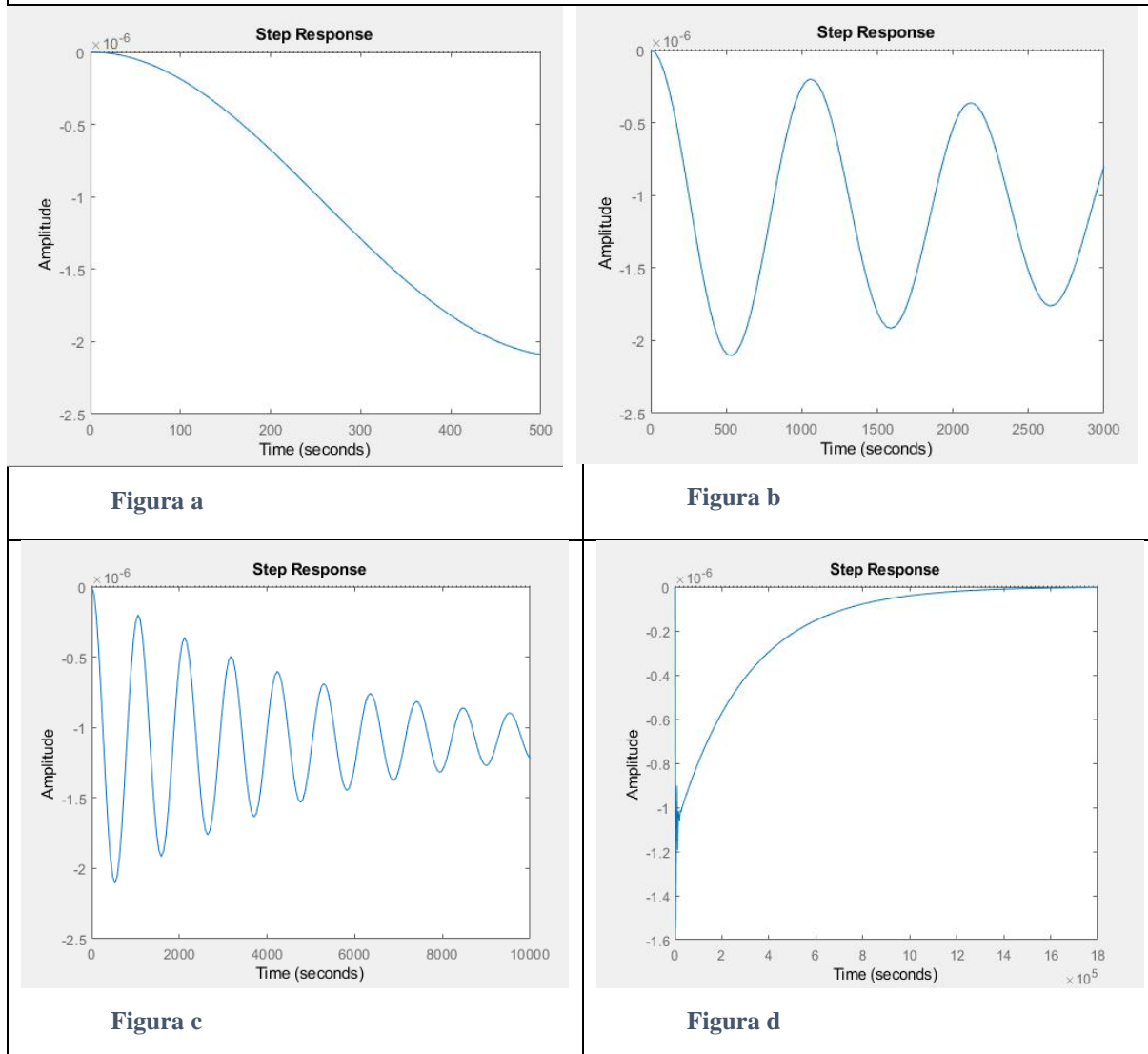
$$G_{22} = \frac{0,79923 \times (s + 3,829 \times 10^{-6}) \times (s - 9,52 \times 10^{-6}) \times (s - 0,003572)}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Função de transferência com características similares ao caso anterior, o comportamento é praticamente o mesmo.

A primeira consequência do degrau é o aumento da saída de células diminuindo sua concentração no reator e isso gera uma diminuição na taxa de consumo de substrato (r_s), o que explica um primeiro crescimento da resposta (Figura a). Em seguida, com uma maior concentração de substrato, r_s cresce, momento que a resposta oscila em torno da amplitude de

-75 (Figura c). Em um último momento ocorre um efeito análogo ao caso anterior, com a diminuição de S, dS/dT passa a ser positivo a resposta volta a um patamar superior (Figura d).

Tabela 17: Comportamento de S diante a um degrau de 1 K na variável T0

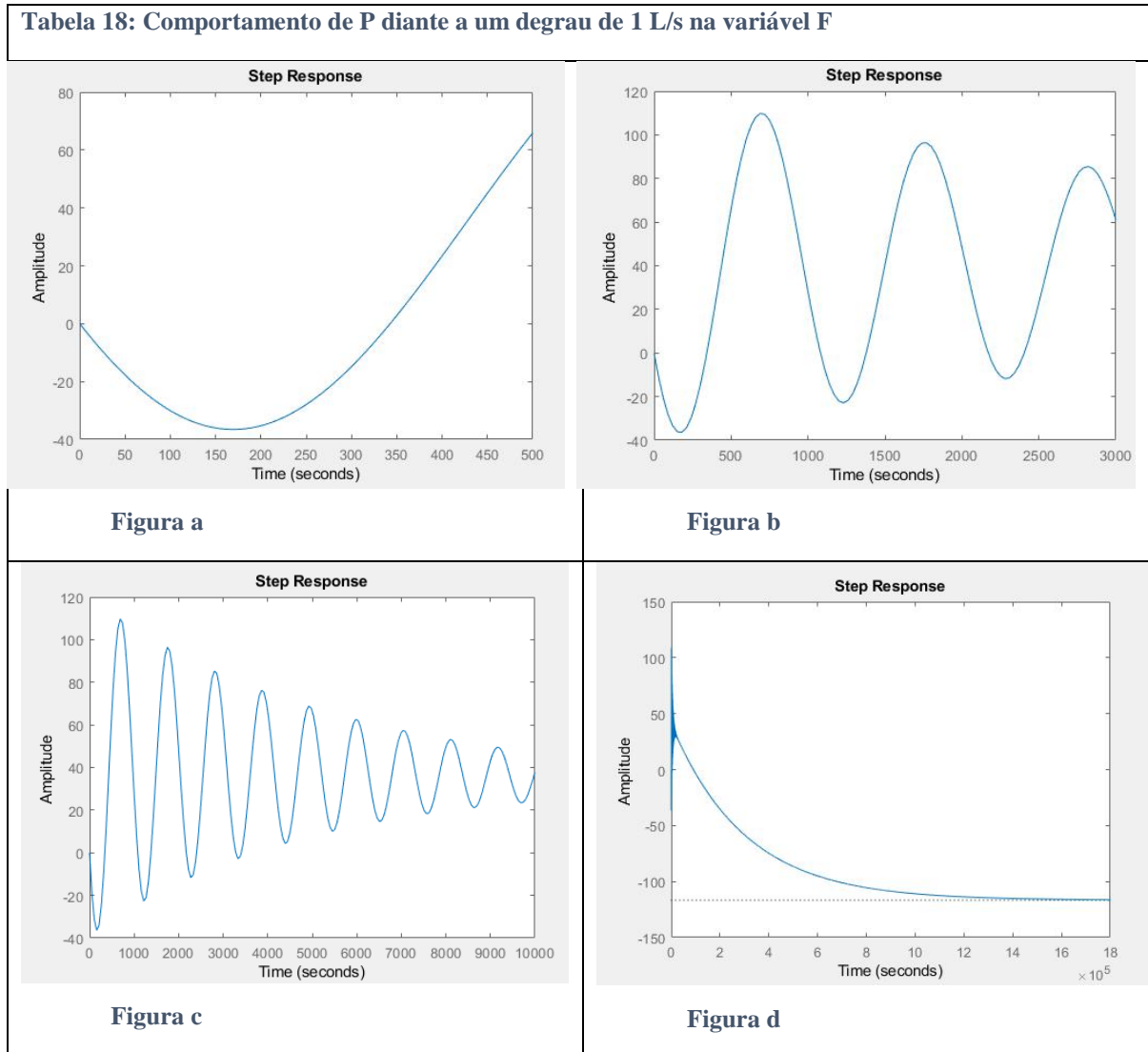


$$G_{23} = \frac{-3,9022 \times 10^{-11} \times s \times (s + 3,829 \times 10^{-6})}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Resposta similar as outras de S. A resposta é oscilatória até aproximadamente t=10.000 e depois tem comportamento de primeira ordem.

Com o aumento da temperatura da corrente de entrada ocorre um aumento na temperatura do reator e um consequente aumento da taxa de consumo de substrato, por isso a tendência de queda no valor de S. No decorrer do tempo, S atinge um patamar bem baixo e dS/dT passa a ser predominantemente positivo e a resposta se aproxima do eixo x.

Tabela 18: Comportamento de P diante a um degrau de 1 L/s na variável F



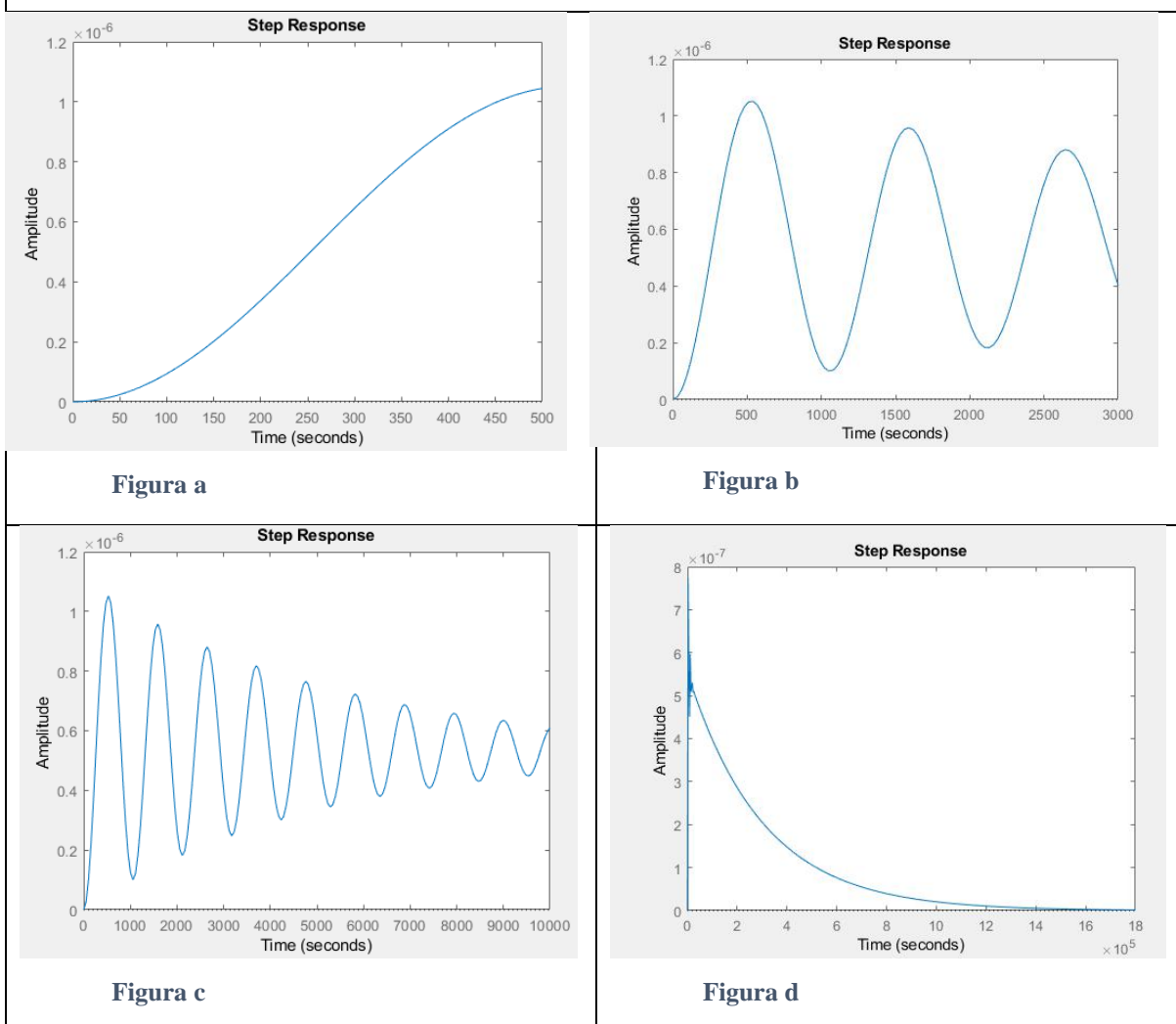
$$G_{32} = \frac{-0,39661 \times (s + 3,829 \times 10^{-6}) \times (s - 9,52 \times 10^{-6})(s - 0,003572)}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Caso inverso a resposta de S em relação em F. O comportamento da resposta é a mesma: devido à presença de dois zeros reais positivos temos duas mudanças na direção da tendência

de estabilização da resposta. Na Figura a, é observada a primeira mudança, a resposta estava tendendo ao eixo negativo de y e, como visto na Figura c, passa a tender para a amplitude de 40, em seguida, como visto na Figura d, ocorre a segunda mudança e o patamar final é na amplitude de -110 (Figura d).

A primeira consequência do degrau é aumentar a saída de produto do reator e assim sua concentração diminui. O aumento e diminuição da concentração de substrato, observado no gráfico de S, tem efeito inverso aqui. Por último, quando P atinge um grande patamar, dP/dt fica negativo e ocorre a tendência de diminuição da concentração de P.

Tabela 19: Comportamento de P diante a um degrau de 1 K na variável T0

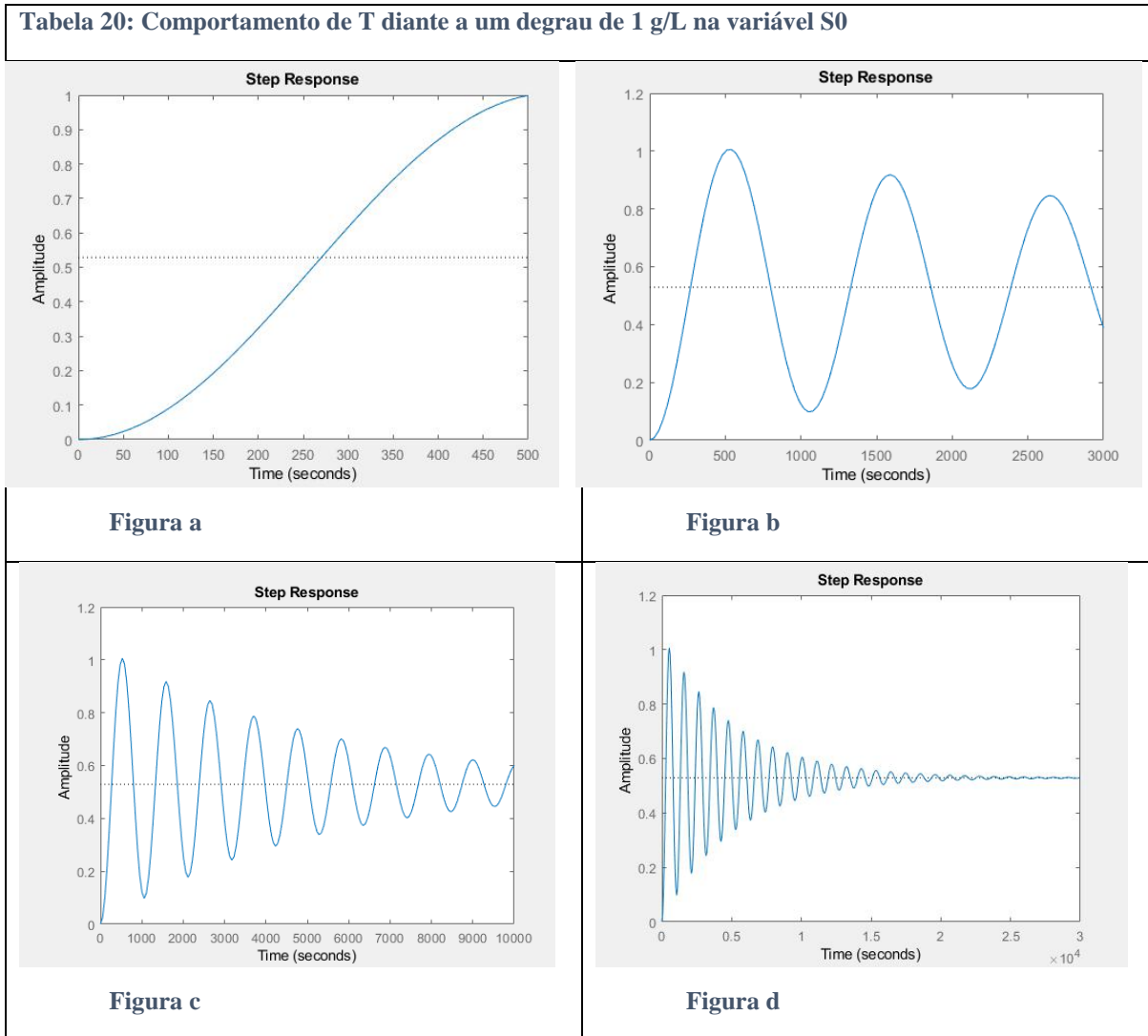


$$G_{33} = \frac{1,9511 \times 10^{-11} \times s \times (s + 3,833 \times 10^{-6})}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Caso análogo aos anteriores: resposta com característica de segunda ordem subamortecida ($\zeta = 3,24e-02$) até $t=10.000s$, resposta com patamar estacionário próximo a zero devido ao zero nulo.

Com o aumento da temperatura da corrente de entrada ocorre um aumento na temperatura do reator e um conseqüente aumento da taxa de formação de produto, por isso a tendência de aumento no valor de P. No decorrer do tempo, P atinge um patamar positivo e dP/dT passa a ser predominantemente negativo e a resposta se aproxima do eixo x.

Tabela 20: Comportamento de T diante a um degrau de 1 g/L na variável S0

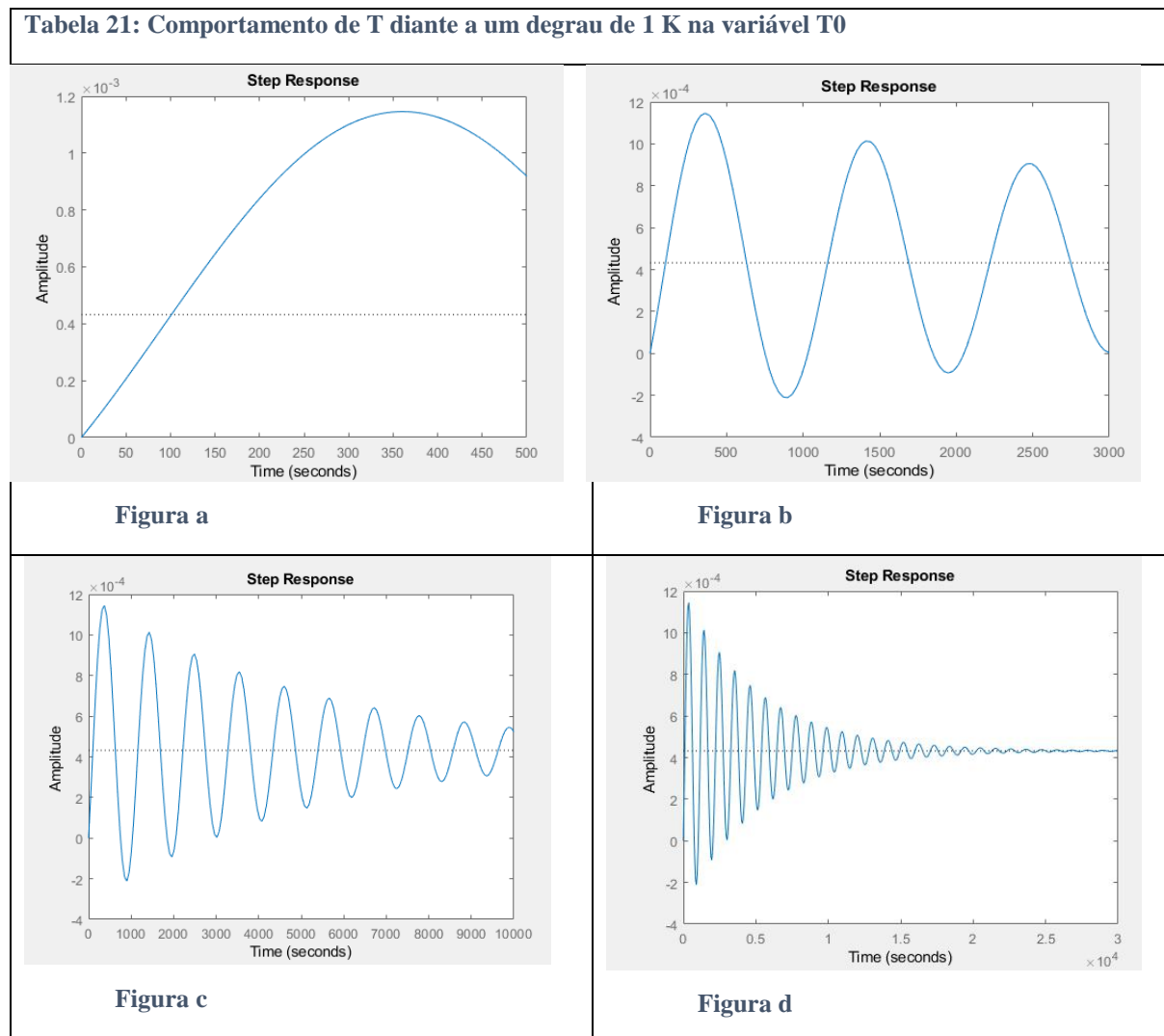


$$G_{41} = \frac{1,8645 \times 10^{-5} \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s + 3,832 \times 10^{-6})}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Devido ao cancelamento zeros/polos, a resposta apresenta o comportamento do polo dominante: sistema de segunda ordem subamortecido ($\zeta = 3,24e-02$). Esse caso difere dos anteriores porque os dois polos reais negativos são cancelados com os zeros, e assim a resposta é oscilatória até atingir um novo estado estacionário.

O degrau em S_0 indiretamente aumenta a taxa de consumo de substrato ($-r_s$) e assim a temperatura do reator aumento. Entretanto, como já visto nas respostas de S , o consumo de substrato passa por ciclos de aumento e diminuição, o que explica a resposta oscilatória.

Tabela 21: Comportamento de T diante a um degrau de 1 K na variável T_0



$$G_{43} = \frac{3,8332 \times 10^{-6} \times (s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,302 \times 10^{-6}) \times (s + 0,003974)}{(s + 3,833 \times 10^{-6}) \times (s + 3,303 \times 10^{-6}) \times (s^2 + 0,0003853s + 3,525 \times 10^{-5})}$$

Devido ao cancelamento zeros/polos, a resposta apresenta o comportamento do polo dominante: sistema de segunda ordem subamortecido ($\zeta = 3,24e-02$).

Inicialmente um aumento em T_0 gera um aumento da temperatura no interior do reator, entretanto, o aumento de T faz com que dT/dt passe a ser negativo, fazendo com que a temperatura diminua. O efeito seguinte é o contrário, com a diminuição de T , dT/dt volta a ser positivo gerando a resposta oscilatória.