

---

# SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO *ON-LINE* PARA PROCESSOS BIOTECNOLÓGICOS COM MÚLTIPLAS ENTRADAS

Pedro S. Pereiralima, Eduardo A. Tannuri

*Agrupamento de Sistemas de Controle, Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo  
Caixa Postal 7141 CEP 01064-970 - São Paulo, SP  
E-mail: peralima@ipt.br*

---

**Resumo**— No presente trabalho é aplicada a metodologia do cálculo variacional para determinação da trajetória ótima de sistemas dinâmicos multivariáveis biotecnológicos de conversão de substratos em produtos (descritos por modelos não estruturados) conhecidas as condições iniciais e estando livres as condições finais. A solução do problema de otimização da função objetivo rentabilidade fornece o subespaço das variáveis de estado onde a trajetória por arco singular pode existir, e também a lei de controle por realimentação de estados não linear. Ocorrendo saturação nos controles há como comutar para a solução *bang-bang* por integração *on-line* das variáveis adjuntas, eliminando a necessidade de uma solução prévia *off-line*.

**Abstract**— In this work it is applied the variational calculus methodology to establish the optimal trajectory for biotechnological multivariable dynamical systems involving substrate conversion into products (described by non-structured models), with fixed initial conditions and free final conditions. The optimization of the objective function furnishes the state variables subspace where the singular arc trajectory exists, besides the non-linear state feedback control law. If the control variables saturate, it is also possible to switch to the *bang-bag* solution by means of an on-line integration of the adjunct variables, vanishing the need of a previous *off-line* solution.

## 1 INTRODUÇÃO

A aplicação da teoria de cálculo variacional para otimização de sistemas é bastante utilizada em várias áreas do conhecimento, notadamente na mecânica aeroespacial. No entanto não se observa a mesma aplicação em processos biotecnológicos, devido à grande complexidade das equações e por serem de natureza singular (San e Stephanopoulos, 1984).

Os trabalhos de Modak e Lim (1987, 1989) resolvem o problema de otimização de sistemas *fed-batch* com uma única variável de controle, baseando-se em solução desenvolvida por Bryson (1969) para uma classe genérica de sistemas não lineares com uma única entrada. Já Rahman e Palanki (1996)

propõem a solução para duas variáveis de controle. Por outro lado, otimizações paramétricas são largamente utilizadas, notadamente o programa TOMP (Kraft, 1994), porém nem sempre há a certeza de se alcançar a optimalidade.

Será mostrado que a partir da teoria de cálculo variacional, com a solução conhecida do problema de controle ótimo para uma classe de sistemas singulares com uma entrada e múltiplas saídas, consegue-se generalizar a solução para uma ampla classe de processos biotecnológicos com múltiplas entradas e múltiplas saídas com condição inicial conhecida e final livre. Esta solução define a lei de controle ótimo por realimentação de estados e a região no espaço onde esta solução é aplicada, fora da qual se terá um controle tipo *bang-bang*. A otimização visa maximizar a rentabilidade do processo.

O modelo dinâmico do processo biotecnológico tem como base a lei de conservação de massas acrescida de um termo de conversão de substratos em produtos. Como não se pretende particularizar a solução para um determinado processo, optou-se pela não explicitação destas funções, assumindo-se apenas sua dependência com as variáveis de estado e também serem de classe  $C^2$ .

Outro artifício utilizado foi trabalhar-se com as massas dos substratos e produtos como variáveis de estado (Pyun et al., 1989), ao invés do normalmente utilizado, as concentrações. Ganhou-se com isso uma facilidade maior ao se trabalhar com o Hamiltoniano, no entanto ao preço de os gradientes das velocidades de conversão passarem a depender da variável volume.

## 2 DINÂMICA DE PROCESSOS BIOTECNOLÓGICOS

O início da discussão será o estabelecimento de um conjunto de equações diferenciais ordinárias não lineares que represente os processos biotecnológicos de conversão de substratos em produtos. Para uma descrição não estruturada, ou mais explicitamente, que não entre na discussão de como são feitos os fluxos metabólicos, pode-se dizer que microorganismos consomem substratos elaborando produtos e se reproduzindo, ou seja, criando mais biomassa (Moser, 1985). Portanto, genericamente pode-se escrever:

---

Artigo Submetido em 17/11/98

1a. Revisão em 29/12/98; 2a. Revisão em 18/05/99;

Aceito sob recomendação do Ed. Consultor Prof. Dr. Liu Hsu

$$\begin{aligned}
\dot{m}_s &= A_s \cdot \beta \cdot v + u_s \\
\dot{m}_p &= A_p \cdot \beta \cdot v \\
\dot{v} &= k_v^t \cdot u_s + k_{v0} \cdot u_o \\
\dot{c} &= a_c^t \cdot \beta \cdot v + k_c^t \cdot u_s + k_{c0} \cdot u_o
\end{aligned} \quad (1)$$

sendo:  $m_s$  as massas dos substratos [g],  $m_p$  as massas dos produtos [g],  $v$  o volume da dorna [l],  $A_s$  e  $A_p$  os coeficientes de conversão [g/g],  $\beta$  as velocidades de conversão [g/(l.h)],  $u_s$  as vazões mássicas de alimentação dos substratos [g/h],  $u_o$  a vazão de água [l/h],  $k_v$  o inverso das concentrações dos substratos nas vazões de alimentação [l/g],  $k_{v0}$  um coeficiente de ajuste entre as unidades de vazão de água e volume (no presente caso, um coeficiente unitário adimensional). Para efeito de notação,  $z$  será qualquer variável de estado,  $m$  será massa, o índice  $s$  representará os substratos, o índice  $p$ , os produtos. A biomassa é tratada como mais um produto, e quando for necessário especificá-la, o índice  $x$  representa-la-á. A variável auxiliar lucro  $c$  [\$] será justificada no próximo item, juntamente com a função objetivo.

Estas equações foram escritas baseando-se tão somente no princípio da conservação de massa acrescido do conceito da velocidade de conversão que representa o metabolismo do microorganismo do ponto de vista macroscópico. A velocidade de conversão  $\beta$  é um vetor de funções empíricas, não lineares, das concentrações das substâncias envolvidas no processo (biomassa, substratos e produtos), que descrevem o comportamento do microorganismo:  $\beta = \beta\left(\frac{m_s}{v}, \frac{m_p}{v}\right)$ . São

específicas a cada processo e a única restrição, aqui feita, a estas funções é que sejam de classe  $C^2$  em relação às variáveis de estado  $m_s$ ,  $m_p$  e  $v$ .

A vantagem de se analisar o problema sob essa ótica é explicitar a dependência direta das variáveis massa de substrato com as respectivas vazões. Indiretamente qualquer vazão influencia todas as demais massas, porém através da variação do volume em primeiro lugar e em segundo lugar através das velocidades de conversão. Como o volume depende das vazões multiplicadas pelos inversos das concentrações dos substratos na alimentação, quanto maior for esta concentração, tanto menor será o efeito sobre o volume, tanto menor será o efeito sobre as velocidades de conversão e, portanto, tanto menor será o efeito sobre as demais concentrações de substrato. Do ponto de vista de controle, esta é uma situação ideal pois, praticamente, haveria um controle desacoplado sobre cada massa de substrato, restando ainda a vazão de água como um grau de liberdade a mais que faria o ajuste da diluição das concentrações de produtos. A figura 1 mostra esquematicamente estas variáveis.

### 3 VARIÁVEL AUXILIAR LUCRO E FUNÇÃO OBJETIVO RENTABILIDADE

A aplicação de estratégias de controle para a otimização de processos biotecnológicos é bastante utilizada, porém com resultados muito diversos dependendo do critério de desempenho utilizado (Trilli, 1977). Conforme Himmelblau e Edgar (1988), a sistematização da função objetivo é um dos passos cruciais na aplicação prática de problemas de otimização. Primeiramente é feito o agrupamento dos custos

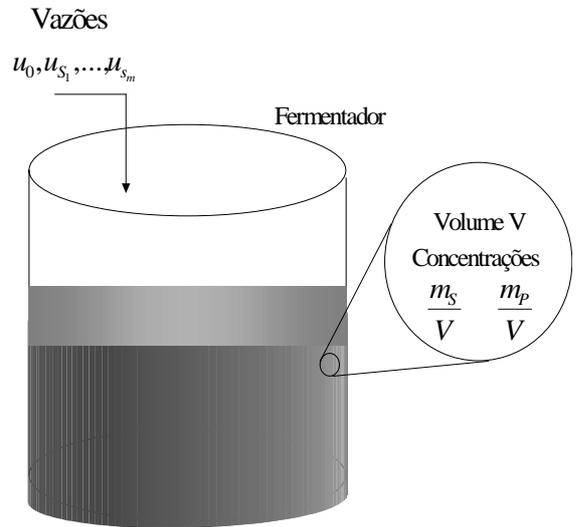


Figura 1 - Esquema simplificado do processo fermentativo.

em: capital, envolvendo basicamente equipamentos e infraestrutura; e operacional, proporcional à quantidade produzida. Ainda segundo Himmelblau, a função objetivo, por sua vez, é classificada de três formas: aquelas que ponderam somente o capital; aquelas que ponderam somente os custos operacionais; ou ainda aquelas que ponderam o capital e os custos operacionais juntos. Das três categorias de função a última é a mais trabalhosa para sua formulação. Na literatura de otimização de processos fermentativos encontram-se os seguintes problemas:

- maximização da produção: Lee et al (1997), Tartakovsky et al. (1995), San e Stephanopoulos (1984),
- maximização da produtividade: Palanki et al. (1994) e Costa et al. (1996),
- maximização do lucro: San e Stephanopoulos (1989).

Estes índices, conforme se notam, recaem na segunda categoria acima. Neste trabalho será estabelecido como critério de desempenho o negativo da rentabilidade (Pereiralima e Bonomi, 1998), pois expressa o capital investido, os custos operacionais e o total de vendas em função das variáveis de estado e de controle do processo. Esta proposição recai na terceira categoria de funções objetivo de acordo com Himmelblau.

Para um melhor equacionamento do problema será definida uma variável auxiliar  $c(t)$ , como sendo o negativo do lucro e calculada pela diferença entre o total dos gastos de produção e o total vendido. A venda é quantificada por  $k_p\{m_p(t_f) - m_p(t_o)\}$ , sendo  $k_p$  [\$/g] o preço unitário de venda do produto já descontados os impostos,  $t_f$  [h] o tempo final do processo e  $t_o$  [h] o tempo inicial. Os gastos de produção podem ser totalizados pela soma de três parcelas: 1ª. a alimentação, quantificada pela integral das vazões dos substratos na alimentação, multiplicadas pelos respectivos custos  $k_{c1}$  [\$/g] e  $k_{c0}$  [\$/l]; 2ª. a partida, calculada pela quantidade inicial de substratos  $k_{c1} \cdot m_s(t_o)$ , 3ª. a sobra, calculada pela quantidade final de substrato  $k_s \cdot m_s(t_f)$ , onde  $k_s$  [\$/g] é o custo unitário de processamento de descarte ou reaproveitamento. Assim pode-se escrever:

$$c_{1 \times 1}(t_f) = \int_{t_o}^{t_f} \left( k_{c1}^t \cdot u_s(t) + k_{c0} \cdot u_o(t) \right) dt + k_s^t \cdot m_s(t_f) + k_{c1}^t \cdot m_s(t_o) - k_p^t \cdot \left[ m_p(t_f) - m_p(t_o) \right]$$

ou ainda, converter-se para a forma diferencial:

$$\dot{c}_{1 \times 1} = k_{c1}^t \cdot u_s + k_{c0} \cdot u_o + k_s^t \cdot \dot{m}_s - k_p^t \cdot \dot{m}_p$$

com a seguinte condição inicial:

$$c_{1 \times 1}(t_o) = \left[ k_s^t + k_{c1}^t \right] \cdot m_s(t_o)$$

Definindo-se:

$$a_c^t \equiv k_s^t \cdot A_s - k_p^t \cdot A_p$$

$$k_c^t \equiv k_s^t + k_{c1}^t$$

e substituindo as relações das variáveis de estado da equação (1), obtém-se:

$$\dot{c}_{1 \times 1} = a_c^t \cdot \beta \cdot v + k_c^t \cdot u_s + k_{c0} \cdot u_o$$

Feitas estas considerações, pode-se montar o negativo da função rentabilidade como:

$$\phi_{1 \times 1}(t_f) = \frac{c(t)}{k_I \cdot (t + t_m) \left[ v(t)/v_0 \right]^{pot}} \Big|_{t=t_f} \quad (2)$$

Esta função se encontra na forma de Mayer (Bryson,1969), representando simplificada a rentabilidade do processo biotecnológico, pois tem-se no numerador o negativo do lucro e no denominador o capital necessário ao empreendimento, suposto proporcional a uma potência do volume, e o tempo de produção, quantificado por  $(t+t_m)$  ou seja a soma de um tempo

de processo  $t$  [h], a ser otimizado, e um tempo de manutenção  $t_m$  [h] fixo. A constante  $k_I$  [ \$.ano/h ] estabelece o capital de referência e faz a conversão de unidades de hora para ano; a constante  $v_0$  [l] fixa o volume de referência para o capital de referência. A potência **pot** é empírica e, por ser positiva e menor do que a unidade, representa a economia de escala no investimento (Perry, 1984).

A rentabilidade tem vantagem sobre as demais funções pelo fato de poder comportar-se como cada uma delas em se considerando algumas simplificações. Assim, para efeito de exemplificação, estando-se interessado somente no lucro, basta tomar na rentabilidade  $t_m \gg t_f$  e  $pot=0$ . Estando-se interessado na produção, basta zerar os custos na simplificação anterior. Estando-se interessado em produtividade, basta considerar o termo relativo ao tempo na simplificação anterior. Estando-se interessado em lucratividade basta acrescentar os custos na simplificação anterior. E assim por diante; a tabela 1 sintetiza o que foi exemplificado.

#### 4 O PROBLEMA DO CONTROLE ÓTIMO

Dadas as equações dinâmicas e o critério de desempenho, pode-se formular o problema de otimização: minimizar a função objetivo  $\phi$  da equação (2) sujeita aos vínculos dinâmicos das equações (1), admitido o conhecimento do valor inicial das variáveis de estado e estando livre seu valor final.

O princípio de mínimo de Pontryagin estabelece que o controle que minimiza a função objetivo, na forma de Mayer, sujeita aos vínculos dinâmicos, deve minimizar o Hamiltoniano dado por:

$H \equiv \lambda^t \cdot \dot{z}$ , onde  $\lambda$  é o vetor de variáveis adjuntas. Explicitando-se as relações dinâmicas das variáveis de estado z da equação (1), obtém-se:

$$H = \lambda_c \left( a_c^t \cdot \beta \cdot v + k_c^t \cdot u_s + k_{c0} \cdot u_o \right) + \lambda_v \left( k_v^t \cdot u_s + k_{v0} \cdot u_o \right) + \lambda_s^t \left( A_s \cdot \beta \cdot v + u_s \right) + \lambda_p^t \left( A_p \cdot \beta \cdot v \right)$$

ou, reagrupando os termos, tem-se:

Tabela 1 – Comparação entre diferentes funções objetivo.

Objetivo	Função	Simplificações na Rentabilidade			
		CUSTOS	$k_I$	$T_M$	pot
Produção [\$]	$k_p \cdot m_p(t_f)$	0	$1/t_m$	$\gg t_f$	0
Produtividade <sup>1</sup> [\$/h]	$\frac{k_p \cdot m_p(t_f)}{t_f}$	0	1	0	0
Produtividade Específica [\$/(h.l)]	$\frac{k_p \cdot m_p(t_f)}{t_f \cdot v(t_f)}$	0	$v_0$	0	1
Lucro [\$]	$-c(t_f)$	>0	$1/t_m$	$\gg t_f$	0
Lucratividade [\$/h]	$\frac{-c(t_f)}{(t_f + t_m)}$	>0	1	>0	0
Rentabilidade [%/ano]	$\frac{-c(t_f)}{k_I \cdot (t_f + t_m) \cdot [v(t_f)/v_0]^{pot}}$	>0	>0	>0	>0

<sup>1</sup> A literatura adota o nome produtividade no lugar de produtividade específica ;aqui se faz uma definição mais correta do termo para facilitar a comparação com lucratividade.

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_c \cdot k_c^t + \lambda_v \cdot k_v^t + \lambda_s^t \\ \lambda_c \cdot k_{co} + \lambda_v \cdot k_{vo} \\ \lambda_s^t \cdot A_s + \lambda_p^t \cdot A_p + \lambda_c \cdot d_c^t \end{pmatrix} u_s + \begin{pmatrix} \lambda_c \cdot k_{co} + \lambda_v \cdot k_{vo} \\ \lambda_c \cdot k_c^t + \lambda_v \cdot k_v^t + \lambda_s^t \end{pmatrix} u_o + \begin{pmatrix} \lambda_s^t \cdot A_s + \lambda_p^t \cdot A_p + \lambda_c \cdot d_c^t \\ \lambda_s^t \cdot A_s + \lambda_p^t \cdot A_p + \lambda_c \cdot d_c^t \end{pmatrix} \beta \cdot v \quad (3)$$

De posse do Hamiltoniano podem-se calcular as variáveis adjuntas por:  $\dot{\lambda} = -\frac{\partial H}{\partial z}$ .

Para efeito de simplificação definem-se:

$$\lambda_\beta \equiv A_s^t \cdot \lambda_s + A_p^t \cdot \lambda_p + a_c \cdot \lambda_c$$

$$\beta_v \equiv \frac{\partial \beta}{\partial v}; \beta_s \equiv \nabla_{ms} \beta; \beta_p \equiv \nabla_{mp} \beta \quad (4)$$

Isto posto, chega-se ao seguinte sistema de equações para as variáveis adjuntas:

$$\dot{\lambda}_s = -\beta_s^t \cdot \lambda_\beta \cdot v$$

$$\dot{\lambda}_p = -\beta_p^t \cdot \lambda_\beta \cdot v$$

$$\dot{\lambda}_v = -\left( \beta_v^t + \frac{\beta^t}{v} \right) \lambda_\beta \cdot v$$

$$\dot{\lambda}_c = 0 \quad (5)$$

## 5 O PROBLEMA DO CONTROLE SINGULAR

As variáveis de controle ótimo são calculadas aplicando-se o princípio do mínimo de Pontryagin, e obtidas pelas derivadas do Hamiltoniano em relação às mesmas igualadas a zero:

$$\frac{\partial H}{\partial u_o} = \begin{pmatrix} \lambda_c \cdot k_{co} + \lambda_v \cdot k_{vo} \\ \lambda_c \cdot k_c^t + \lambda_v \cdot k_v^t + \lambda_s^t \end{pmatrix}$$

$$\nabla_{us} H = \begin{pmatrix} \lambda_c \cdot k_{co} + \lambda_v \cdot k_{vo} \\ \lambda_c \cdot k_c^t + \lambda_v \cdot k_v^t + \lambda_s^t \end{pmatrix}$$

Estas equações não trazem explícitas as variáveis de controle, caracterizando assim o problema de controle singular, o qual admite solução não estacionária tipo *bang-bang* ou estacionária por arco singular (Cytron, 1969).

A solução *bang-bang* é regida pelo sinal das funções de chaveamento:

$$\xi_i \equiv \frac{\partial H}{\partial u_{si}}, \text{ para } i = 0, 1, \dots, m \quad (6)$$

Se  $\xi_i > 0$ , então o valor da variável de controle que minimiza o Hamiltoniano será o seu valor mínimo  $u_{si, min}$ . Se  $\xi_i < 0$ , então o valor da variável de controle que minimiza o Hamiltoniano será o seu valor máximo  $u_{si, max}$ .

A solução por arco singular ( $\xi_i = 0$ ) requer que as seguintes relações entre as variáveis adjuntas sejam satisfeitas:

$$\frac{\partial H}{\partial u_o} = 0 \Rightarrow \lambda_v = -\frac{k_{co}}{k_{vo}} \cdot \lambda_c$$

$$\nabla_{us} H = 0 \Rightarrow \lambda_s = \left( \frac{k_{co}}{k_{vo}} \cdot k_v - k_c \right) \lambda_c \quad (7)$$

Além disso, precisa-se explicitar o valor das variáveis de controle.

## 6 SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE CONTROLE ÓTIMO POR ARCO SINGULAR

Neste caso, a solução é obtida impondo-se que as derivadas sucessivas em relação ao tempo das funções de chaveamento devam se anular (Bryson, 1969). Assim tem-se para a primeira derivada:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial H}{\partial u_o} \right) = \begin{pmatrix} \dot{\lambda}_c \cdot k_{co} + \dot{\lambda}_v \cdot k_{vo} \\ \dot{\lambda}_c \cdot k_c^t + \dot{\lambda}_v \cdot k_v^t + \dot{\lambda}_s^t \end{pmatrix}$$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial H}{\partial u_o} \right) = 0 \Rightarrow \dot{\lambda}_v = -\frac{k_{co}}{k_{vo}} \cdot \dot{\lambda}_c = 0$$

$$\frac{d(\nabla_{us} H)}{dt} = \begin{pmatrix} \dot{\lambda}_c \cdot k_c^t + \dot{\lambda}_v \cdot k_v^t + \dot{\lambda}_s^t \\ \dot{\lambda}_c \cdot k_{co} + \dot{\lambda}_v \cdot k_{vo} \end{pmatrix}$$

$$\frac{d(\nabla_{us} H)}{dt} = 0 \Rightarrow \dot{\lambda}_s = \left( -k_c + \frac{k_{co}}{k_{vo}} \cdot k_v \right) \dot{\lambda}_c = 0 \quad (8)$$

Como a primeira derivada não fornece informações a respeito do controle, procede-se o cálculo da segunda derivada<sup>2</sup>:

Equação para a vazão de água:

$$\frac{d^2}{dt^2} \left( \frac{\partial H}{\partial u_o} \right) = 0 \Rightarrow \ddot{\lambda}_v = 0$$

Definindo-se:

$$\theta \equiv \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial v} + \frac{2}{v} \cdot \beta_v^t \right) \lambda_\beta$$

pode-se então obter  $u_o$  a partir de  $u_s$ , por:

$$u_{o, sing} = \theta^{-1} \cdot \left\{ \left( \beta_v^t + \frac{\beta^t}{v} \right) \begin{pmatrix} A_p^t \cdot \beta_p^t \\ \lambda_\beta \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \beta_{si}^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{v} \right) \begin{pmatrix} A_{si} \cdot \beta + \frac{u_{si}}{v} \\ \lambda_\beta \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \beta_{pi}^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_{pi}^t}{v} \right) \begin{pmatrix} A_{pi} \cdot \beta \\ \lambda_\beta \end{pmatrix} \right\} \lambda_\beta \cdot \frac{v}{k_{vo}} - \frac{k_c^t}{k_{vo}} \cdot u_s \quad (9)$$

<sup>2</sup> Para um desenvolvimento detalhado da dedução das equações de controle veja o apêndice.

Sendo  $A_{si}$  e  $A_{pi}$  as  $i$ -ésimas linhas de  $A_s$  e  $A_p$  respectivamente.

Equação para as vazões dos substratos:

$$\frac{d^2(\nabla_{us} H)}{dt^2} = 0 \Rightarrow \ddot{\lambda}_s = 0$$

Definindo-se:

$$\beta_\lambda \equiv \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial v} + \frac{\beta_s^t}{v} \right)_{q \times 1} \lambda_\beta \cdot \theta^{-1}$$

$$\Delta \equiv \left[ \left\{ \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{s1}} - \beta_\lambda \cdot \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{s1}} + \frac{\beta_s^t}{1xq} \right) \right\}_{q \times 1} \lambda_\beta \cdot \left\{ \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{sm}} - \beta_\lambda \cdot \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{sm}} + \frac{\beta_s^t}{1xq} \right) \right\}_{q \times 1} \lambda_\beta \right]$$

pode-se então obter  $u_s$  a partir das variáveis de estado e  $\lambda_\beta$ :

$$u_{s, \text{sing}} = \Delta^{-1} \cdot \left\{ \left( \frac{\beta_s^t}{mxq} \right) - \beta_\lambda \cdot \left( \frac{\beta_s^t}{mxq} + \frac{\beta^t}{1xq} \right) \right\}_{q \times n} \cdot A_p^t \cdot \beta_p^t + \sum_{i=1}^m \left\{ \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{si}} \right) - \beta_\lambda \cdot \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_s^t}{1xq} \right) \right\}_{q \times 1} \cdot A_{si} \cdot \beta + \sum_{i=1}^n \left\{ \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{pi}} \right) - \beta_\lambda \cdot \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_s^t}{1xq} \right) \right\}_{q \times 1} \cdot A_{pi} \cdot \beta \cdot \lambda_\beta \cdot v$$

As equações (9) e (10) fornecem os controles a partir do conhecimento das variáveis de estado, pois as velocidades de conversão  $\beta$ , bem como suas derivadas parciais, só dependem destas. É ainda necessário determinar o valor das variáveis adjuntas contidas em  $\lambda_\beta$ , o que será feito a seguir.

## 7 DEFINIÇÃO DA SUPERFÍCIE SINGULAR

A superfície singular é por definição a região no espaço de variáveis de estado e adjuntas onde é possível encontrar-se uma solução por arco singular (Jonhson, 1965). Sua determinação é obtida das equações (5), (7), (8) e a relação para  $\beta$ , apresentada no apêndice:

$$\beta_s^t \cdot \lambda_\beta = 0 \Rightarrow \left[ \begin{array}{c} \beta_s^t \\ m^t_p \cdot \beta_p^t - \beta^t \end{array} \right]_{q \times 1} \cdot \lambda_\beta = 0$$

$$\left( \frac{\beta_s^t}{1xq} + \frac{\beta^t}{1xq} \right)_{q \times 1} \lambda_\beta = 0$$

Substituindo-se  $\lambda_\beta$  da equação (4),  $\lambda_s$  da equação (7) e definindo-se:

$$k_{sc} \equiv A_s^t \cdot \left( \frac{k_{co}}{k_{vo}} \cdot k_v - k_c \right) + a_c$$

obtm-se:

$$\left[ \begin{array}{cc} \beta_s^t \cdot A_p^t & \beta_s^t \cdot k_{sc} \\ mxq & qx1 \end{array} \right] \cdot \left[ \begin{array}{c} \lambda_p \\ nx1 \\ \lambda_c \\ 1x1 \end{array} \right] = 0$$

Em termos da solução deste sistema, de  $m+1$  equações com  $n$  incógnitas, isto considerando-se  $\lambda_c$  conhecido, é necessário analisar quatro possibilidades:

- 1  $n > m+1$ , ou seja  $n^\circ$  de incógnitas maior do que o  $n^\circ$  de equações, se isto ocorrer pode-se escrever:

$$r = n - (m+1), \text{ e particionando-se } A_p^t = \left[ \begin{array}{cc} A_{p1}^t & A_{p2}^t \\ qx1 & qx1 \end{array} \right] \text{ e}$$

$$\lambda_p = \left[ \begin{array}{c} \lambda_{p1} \\ m+1x1 \\ \lambda_{p2} \\ rx1 \end{array} \right], \text{ tem-se:}$$

$$\left[ \begin{array}{cc} \beta_s^t \cdot A_{p1}^t & \beta_s^t \cdot A_{p2}^t \\ mxq & qx1 \end{array} \right] \cdot \left[ \begin{array}{c} \lambda_{p1} \\ m+1x1 \\ \lambda_{p2} \\ rx1 \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{cc} m^t_p \cdot \beta_p^t - \beta^t & A_{p2}^t \\ 1xn & nxq \end{array} \right]_{q \times n} \cdot \left[ \begin{array}{c} \lambda_{p1} \\ m+1x1 \\ \lambda_{p2} \\ rx1 \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \beta_s^t \\ mxq \end{array} \right] \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

Como há mais graus de liberdade, pode-se arbitrariamente escolher uma matriz  $r \times q$   $K_{pc}$ , escrever  $\lambda_{p2} = K_{pc} \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$  e obter:

$$\lambda_{p1} = \left[ \begin{array}{c} \beta_s^t \cdot A_{p1}^t \\ mxq \end{array} \right]^{-1} \cdot \left[ \begin{array}{c} \beta_s^t \\ mxq \end{array} \right] \cdot \left( I + A_{p2}^t \cdot K_{pc} \right) \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

Pode-se também expressar  $\lambda_\beta$  por:

$$\lambda_\beta = \left[ I - A_{p1}^t \cdot \left[ \begin{array}{c} \beta_s^t \cdot A_{p1}^t \\ mxq \end{array} \right]^{-1} \cdot \left[ \begin{array}{c} \beta_s^t \\ mxq \end{array} \right] \right] \cdot \left( I + A_{p2}^t \cdot K_{pc} \right) \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

- 2  $n = m+1$ , ou seja  $n^\circ$  de incógnitas igual ao  $n^\circ$  de equações, se se isto ocorrer, então:

$$\lambda_p = \left[ \begin{array}{c} \beta_s^t \cdot A_p^t \\ mxq \end{array} \right]^{-1} \cdot \left[ \begin{array}{c} \beta_s^t \\ mxq \end{array} \right] \cdot \left[ \begin{array}{c} m^t_p \cdot \beta_p^t - \beta^t \\ 1xn \end{array} \right] \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

Pode-se também expressar  $\lambda_\beta$  por:

$$\lambda_{\beta} = \left\{ \begin{matrix} I - A_p^t & & \\ q \times q & q \times n & \\ & \left[ \begin{matrix} \beta_s^t \cdot A_p^t & \\ m_p^t \cdot \beta_p^t - \beta^t & \end{matrix} \right] & A_p^t \\ & \left[ \begin{matrix} 1 \times n & n \times q & 1 \times q \end{matrix} \right] & q \times n \end{matrix} \right\}^{-1} \left\{ \begin{matrix} \beta_s^t & \\ m_p^t \cdot \beta_p^t - \beta^t & \end{matrix} \right\} \cdot \begin{matrix} k_{sc} \cdot \lambda_c \\ q \times 1 & 1 \times 1 \end{matrix}$$

Nestes dois primeiros casos não há limitação no espaço das variáveis de estado onde se possa encontrar solução por arco singular. Isto implica que qualquer condição física inicial pode pertencer à superfície singular desde que se satisfaçam as condições de existência das matrizes inversas.

3 n = m, ou seja n° de incógnitas menor do que o n° de equações, se isto ocorrer, então, para que se tenha solução diferente da trivial é necessário que:

$$\det \left[ \begin{matrix} \beta_s^t \cdot A_p^t & & \beta_s^t \cdot k_{sc} \\ m_p^t \cdot \beta_p^t - \beta^t & & \end{matrix} \right] \cdot \begin{matrix} A_p^t & \\ k_{sc} & \end{matrix} = 0$$

Esta equação define uma superfície no espaço das variáveis de estado na qual é possível haver solução por arco singular. Isso implica que para atender à equação do determinante na partida, uma das n+m variáveis de estado na condição inicial deva ser calculada em função das demais. Pode-se ainda obter:

$$\lambda_p = - \left[ \beta_s^t \cdot A_p^t \right]^{-1} \cdot \left[ \beta_s^t \right] \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

e também expressar  $\lambda_{\beta}$  por:

$$\lambda_{\beta} = \left\{ I - A_p^t \cdot \left[ \beta_s^t \cdot A_p^t \right]^{-1} \cdot \left[ \beta_s^t \right] \right\} \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

4 n < m, se isto ocorrer pode-se escrever: r = m - n, e

particionando-se  $\beta_s^t = \begin{bmatrix} \beta_{s1}^t \\ \beta_{s2}^t \end{bmatrix}$ , obtém-se:

$$\left[ \begin{matrix} \beta_{s1}^t \cdot A_p^t & & \beta_{s1}^t \cdot k_{sc} \\ m_p^t \cdot \beta_p^t - \beta^t & & \end{matrix} \right] \cdot \begin{matrix} A_p^t & \\ k_{sc} & \end{matrix} = 0$$

Para que se tenha solução diferente da trivial é necessário que:

$$\det \left[ \begin{matrix} \beta_{s1}^t \cdot A_p^t & & \beta_{s1}^t \cdot k_{sc} \\ m_p^t \cdot \beta_p^t - \beta^t & & \end{matrix} \right] = 0$$

Esta equação também define uma superfície no espaço das variáveis de estado na qual é possível haver solução por arco singular. Além disso é necessário que<sup>3</sup>:

$$\left[ \begin{matrix} \beta_{s2}^t \cdot A_p^t & \beta_{s2}^t \cdot k_{sc} \\ r \times q & q \times n \end{matrix} \right] = 0$$

Pode-se ainda obter:

$$\lambda_p = - \left[ \beta_{s1}^t \cdot A_p^t \right]^{-1} \cdot \left[ \beta_{s1}^t \right] \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

e também expressar  $\lambda_{\beta}$  por:

$$\lambda_{\beta} = \left\{ I - A_p^t \cdot \left[ \beta_{s1}^t \cdot A_p^t \right]^{-1} \cdot \left[ \beta_{s1}^t \right] \right\} \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

Agora, se nos três últimos casos a matriz  $A_p$  for quadrada (q=n), então o termo entre colchetes da equação de  $\lambda_{\beta}$  se anula, anulando consequentemente  $\lambda_{\beta}$ , o que não leva à definição dos controles. Neste caso, far-se-á uso do seguinte artifício: substituir-se-á a matriz nula pela matriz identidade multiplicada por um escalar  $\epsilon$  nulo. Observando que  $\lambda_{\beta}$  aparece nas equações de controle tanto no numerador quanto no denominador, então tem-se uma indeterminação do tipo zero dividido por zero, e calculando-se o limite destas expressões para  $\epsilon$  tendendo a zero através da regra de L'Hôpital, pode-se expressar:  $\lambda_{\beta} = k_{sc} \cdot \lambda_c$ . Para o primeiro

caso, o mesmo acontecerá se  $A_{p1}$  for quadrada (q=m+1) e utilizando-se o mesmo artifício obtém-

$$\text{se: } \lambda_{\beta} = \left( I + A_{p2}^t \cdot K_{pc} \right) k_{sc} \cdot \lambda_c$$

Por último, é interessante ressaltar que para todas as alternativas estudadas pode-se expressar  $\lambda_{\beta}$  em função de  $\lambda_c$ , da seguinte maneira<sup>4</sup>:

$$\lambda_{\beta} = \delta_{\beta}(z) \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c$$

Nesta forma necessita-se tão somente conhecer o multiplicador de Lagrange escalar constante  $\lambda_c$ . Isto é relevante, pois quando substituído o valor de  $\lambda_{\beta}$  nas equações de controle (9) e (10), haverá o cancelamento do multiplicador de Lagrange, pois tanto o escalar  $\theta$  como a matriz  $\Delta$  são diretamente proporcionais a  $\lambda_{\beta}$ , sendo as variáveis de controle inversamente proporcionais a estes e também diretamente proporcionais a  $\lambda_{\beta}$ . A lei de controle passa, portanto, a ser do tipo realimentação de estados não linear. Estes resultados explicitam o fato de as informações econômicas da função objetivo serem inseridas na estratégia de controle via variável auxiliar lucro, através do vetor  $k_{sc}$  modificado pela matriz  $\delta_{\beta}$ , função dos estados, que o precede.

<sup>3</sup> Dificilmente poder-se-á satisfazer estas equações, o que praticamente exclui a solução por arco singular neste caso, restando somente a solução *bang-bang*.

<sup>4</sup> A matriz  $\delta_{\beta}$  representa todos os termos para os quatro casos.

## 8 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Podem-se determinar as condições de contorno (Bryson, 1969) para satisfazer o ótimo da função objetivo e ainda os vínculos na condição final através do vetor de funções  $\Psi[z(t_f)]$ :

$$\Phi = \phi + \eta^t \cdot \Psi$$

onde  $\eta$  é o multiplicador de Lagrange auxiliar para o vínculo final. As condições são:

$$\begin{aligned} \lambda_c(t_f) &= \frac{\partial \Phi}{\partial c(t_f)} & \lambda_s(t_f) &= \nabla_{m_s(t_f)}^t \Phi \\ \lambda_v(t_f) &= \frac{\partial \Phi}{\partial v(t_f)} & \lambda_p(t_f) &= \nabla_{m_p(t_f)}^t \Phi \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t_f} = \left( \lambda_p^t \cdot \dot{m}_p + \lambda_s^t \cdot \dot{m}_s + \lambda_c \cdot \dot{c} + \lambda_v \cdot \dot{v} \right)_{t=t_f} \quad (12)$$

Supondo que não há vínculos na condição final então,  $\Phi = \phi$  e:

$$\begin{aligned} \lambda_s(t_f) &= \nabla_{m_s(t_f)}^t \phi = 0 & \lambda_p(t_f) &= \nabla_{m_p(t_f)}^t \phi = 0 \\ \lambda_v(t_f) &= \frac{\partial \phi}{\partial v(t_f)} = \frac{-pot(t_f)}{k_i(t_f + t_m) v^{pot+1}(t_f)} = -pot \frac{\phi(t_f)}{v(t_f)} \neq 0 \\ \lambda_c(t_f) &= \frac{\partial \phi}{\partial c(t_f)} = \frac{1}{k_i(t_f + t_m) v^{pot}(t_f)} = \frac{\phi(t_f)}{c(t_f)} \neq 0 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t_f} = \frac{-c(t_f)}{k_i(t_f + t_m)^2 v^{pot}(t_f)} = \frac{-\phi(t_f)}{(t_f + t_m)} = \left[ \frac{\phi(t_f)}{c(t_f)} \dot{c}(t_f) - pot \frac{\phi(t_f)}{v(t_f)} \dot{v}(t_f) \right] \quad (13)$$

Podem-se utilizar as equações (13) para obter o valor de  $t_f$  como critério de parada:

$$t_f = \left[ \frac{\dot{c}(t)}{c(t)} - pot \frac{\dot{v}(t)}{v(t)} \right]^{-1} \Bigg|_{t=t_f} - t_m \quad (14)$$

Este resultado é válido não só para a função rentabilidade como também para lucratividade, pois neste caso basta fazer  $pot=0$ . Se a função objetivo for o lucro, então  $t_f$  será obtido pela condição  $\dot{c}(t_f) = 0$ , o que mostra que estas funções objetivo, na forma de Mayer, definem somente o momento de parada, não influenciando na lei de realimentação.

Se agora comparar-se a equação (13) com as relações entre as variáveis adjuntas no arco singular:

$$\begin{aligned} \lambda_v(t) &= \frac{k_{co}}{k_{vo}} \cdot \lambda_c(t) \\ \lambda_s(t) &= \left( \frac{k_{co}}{k_{vo}} k_v - k_c \right) \lambda_c(t) \\ \lambda_p(t) &= \delta_p [z(t)] \cdot k_{sc} \cdot \lambda_c(t)^5 \end{aligned} \quad (15)$$

ver-se-á que a solução é  $\lambda_c(t_f)$  igual a zero. Isto não é possível, portanto a solução ótima pode não estar contida na superfície singular e será necessário no mínimo um trecho final de processo com controle tipo *bang-bang*.

## 9 SOLUÇÃO INTEGRADA BANG-BANG E ARCO-SINGULAR

Neste caso serão utilizadas as funções de chaveamento  $\xi$  para definir o valor da variável de controle. Para tanto é preciso conhecer o valor das variáveis adjuntas, que pode ser obtido da integração das equações do sistema (5), desde que se conheçam seus valores iniciais.

Admitindo que a partida seja feita no arco singular, o único valor que é necessário conhecer é o da variável adjunta  $\lambda_c(t_0)$ , pois os demais valores são obtidos da equação (15) e, uma vez que a derivada desta variável é nula, basta conhecer seu valor final  $\lambda_c(t_f)$ , obtido da equação (13).

Como a função objetivo  $\phi$  pode arbitrariamente ser multiplicada por um valor real positivo, p.e.  $k_i$ , sem que a solução se altere, então o módulo de  $\lambda_c(t_f)$  também pode arbitrariamente ser unitário e, por simples inspeção da equação (13), verifica-se que é positivo. Com esta informação e as relações da equação (15), têm-se todas as condições iniciais da equação (5), sendo possível agora realizar sua integração *on-line*.

Para se poder obter uma solução *on-line* fez-se a hipótese de que as variáveis de estado na partida estivessem contidas na superfície singular. Para os casos 1 e 2 do item 7, esta hipótese está automaticamente satisfeita, pois não há restrições no espaço das variáveis de estado. Agora, nos casos 3 e 4 do item 7, esta hipótese pode não ser satisfeita. No caso 3 ainda é possível determinar o valor da concentração de uma única, das  $m+n$  substâncias, de forma a satisfazer a equação do determinante que define a superfície singular. Perde-se com isso apenas um grau de liberdade na partida. No caso 4 isso é praticamente inviável, devido às outras equações que também devem ser satisfeitas para a existência da superfície singular.

Por último será utilizada a função tangente hiperbólica na definição de  $\xi$ , isto fará com que a passagem entre arco-singular e *bang-bang* não seja abrupta, mas suave:

$$\begin{aligned} \xi_i &\equiv \frac{1 - e^{-\gamma \frac{\partial H}{\partial u_i}}}{1 + e^{-\gamma \frac{\partial H}{\partial u_i}}} \\ u_{si} &= (1 - \xi_i)(1 + \xi_i) u_{si,sing} + \frac{\xi_i}{2} (\xi_i - 1) u_{si,max} + \frac{\xi_i}{2} (\xi_i + 1) u_{si,min} \end{aligned} \quad (16)$$

sendo  $\gamma$  um fator de ajuste experimental real positivo, que regula a intensidade da transição. Valores muito grandes conduzem a transições abruptas, pois neste caso a tangente hiperbólica tende à função sinal.

Tem-se, portanto, uma solução completa: arco singular, dada pela realimentação de estados, e *bang-bang*, dada pelas funções de chaveamento, ambas podendo ser executadas *on-line*, sem necessidade de uma solução prévia *off-line*.

## 10 APLICAÇÃO A UM CASO ESTUDO

Para verificar a metodologia descrita será analisado o seguinte caso: dois substratos alimentados em um processo com formação de biomassa e dois produtos com velocidades de formação independentes. Tem-se também adicionalmente a

<sup>5</sup> A matriz  $\delta_p$  representa todos os termos para os quatro casos.

**Tabela 2 – Parâmetros das equações (1) utilizados para o caso estudo.**

As = [ -1.0 -0.5 -0.1 -0.2 -0.1 -1.0 ]	Ap = [ 1.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.1 ]	ac = [ 0.2995 -2.00 -10.49x10 <sup>-3</sup> ]
kv = [ 0.05 0.05 ]	kc = [ 0.8 0.9 ]x10 <sup>-3</sup>	kco = 0.5x10 <sup>-6</sup> ; kvo = 1.0

**Tabela 3 – Parâmetros da equação (2) utilizados para o caso estudo.**

ki = 1.0	tm = 0.5	v <sub>0</sub> = 1.0	pot = 0.5
----------	----------	----------------------	-----------

**Tabela 4 – Parâmetros das equações (17) utilizados para o caso estudo.**

a = [ 0.38743 0.20996x10 <sup>-3</sup> 45.576 0.22996x10 <sup>-3</sup> 5.2369 8.9412 ]	b = [ 0.38743 0.99982 0.37980 0.99982 0.37407 0.35765 ]	c = [ 0.24214 37.03 x10 <sup>-6</sup> 2.110 x10 <sup>-3</sup> 34.47 x10 <sup>-6</sup> 18.70 x10 <sup>-3</sup> 11.54 x10 <sup>-3</sup> ]
w = [ 1.1909 0.64167 1.2818 0.68333 1.3727 0.72500 ]		μ = [ 1.0 1.0 1.0 ]

**Tabela 5 – Condições iniciais das equações (1) utilizadas para o caso estudo.**

m <sub>s</sub> (0) = [ 146.97 27.839 ]	m <sub>p</sub> (0) = [ 0.0 0.0 1.0 ]
v(0) = [ 1.0 ]	c(0) = [ 0.14263 ]

adição de água. Foram adotados o modelo de Andrews (inibição e limitação) para os substratos e Monod (inibição) para os produtos e biomassa, com constantes cinéticas distintas (Moser, 1985).<sup>6</sup> Assim:

$$\beta_1 \left( \frac{m}{v} \right) = \mu_1 \left( a_{11} \frac{v}{m_{S1}} + b_{11} + c_{11} \frac{m_{S1}}{v} \right)^{-1} \left( 1 + w_{11} \frac{m_{p1}}{v} \right)^{-1} \frac{m_x}{v} \left( a_{12} \frac{v}{m_{S2}} + b_{12} + c_{12} \frac{m_{S2}}{v} \right)^{-1} \left( 1 + w_{12} \frac{m_x}{v} \right)^{-1}$$

$$\beta_2 \left( \frac{m}{v} \right) = \mu_2 \left( a_{21} \frac{v}{m_{S1}} + b_{21} + c_{21} \frac{m_{S1}}{v} \right)^{-1} \left( 1 + w_{21} \frac{m_{p1}}{v} \right)^{-1} \frac{m_x}{v} \left( a_{22} \frac{v}{m_{S2}} + b_{22} + c_{22} \frac{m_{S2}}{v} \right)^{-1} \left( 1 + w_{22} \frac{m_x}{v} \right)^{-1}$$

$$\beta_3 \left( \frac{m}{v} \right) = \mu_3 \left( a_{31} \frac{v}{m_{S1}} + b_{31} + c_{31} \frac{m_{S1}}{v} \right)^{-1} \left( 1 + w_{31} \frac{m_{p1}}{v} \right)^{-1} \frac{m_x}{v} \left( a_{32} \frac{v}{m_{S2}} + b_{32} + c_{32} \frac{m_{S2}}{v} \right)^{-1} \left( 1 + w_{32} \frac{m_{p2}}{v} \right)^{-1} \quad (17)$$

Os parâmetros utilizados estão listados nas tabela 2 a 5.

Os resultados da simulação para o comportamento do sistema, utilizando o controle proposto, podem ser visto nas figuras 2 e 3.

Na figura 2, estão mostrados três índices de desempenho, o Hamiltoniano, os tempos finais ótimos, as funções de chaveamento, e os controles. A escala de tempo vai de 0 a 15 h, exceto para os gráficos relativos à rentabilidade, neste caso varia de 0 a 2.5 h.

Os índices de desempenho são os três últimos mostrados na tabela 1. Verifica-se que os tempos em que ocorrem seus valores máximos coincidem com as previsões do tempo final, calculadas pela diferença entre o tempo de simulação e o valor

dado pela equação (14), nos gráficos, Tfinal da Rentabilidade = 2.46 h com Rentabilidade Máxima = 0.718 e Tfinal da Lucratividade = 14.6 h com Lucratividade Máxima = 1.25. O índice de desempenho Lucro não chegou a atingir o seu máximo.

As funções de chaveamento permanecem muito próximas a zero pois foram normalizadas para serem comparadas à unidade. O Hamiltoniano também é próximo a zero, o que está em acordo com a solução estacionária.

A estratégia de controle singular basicamente manipulou a vazão do substrato 1, exigindo muito pouco da água e do substrato 2. Os valores de controle foram saturados entre 0 e 10.

Na figura 3 são mostradas as variáveis de estado e as velocidades de conversão específicas ( $\beta/m_x$ ). Nota-se que estas não têm um comportamento constante, variando continuamente, e havendo somente uma mudança no comportamento da tendência quando há a saturação do controle de vazão do substrato 1.

## 11 DISCUSSÃO

O princípio de Pontryagin diz que o mínimo da função objetivo é o ponto de mínimo do Hamiltoniano. Este por sua vez é solucionado por  $\nabla_u H = 0$  e, uma vez que o problema é singular, procede-se o cálculo das derivadas de 1<sup>a</sup>. e 2<sup>a</sup>. ordem em relação ao tempo, quando então explicita-se o valor das variáveis de controle. Nesta busca, as condições intermediárias:

$$\nabla_u H = 0 \text{ e } \frac{d(\nabla_u H)}{dt} = 0 \text{ devem ser satisfeitas, o que permite}$$

resolver o problema de síntese definindo a superfície singular em função das variáveis adjuntas e de estado. Além disto, neste caso, permitiu a determinação da lei de controle por realimentação de estados. Se o ponto de partida do processo, por hipótese conhecido, estiver nesta superfície, e se o controle não for limitado, então a solução ótima estará contida na superfície singular.

<sup>6</sup> Apesar do problema apresentado não ser real, a abordagem segue rigorosamente os modelos clássicos utilizados na literatura de processos fermentativos, sendo portanto de grande valia para a análise e compreensão dos resultados.

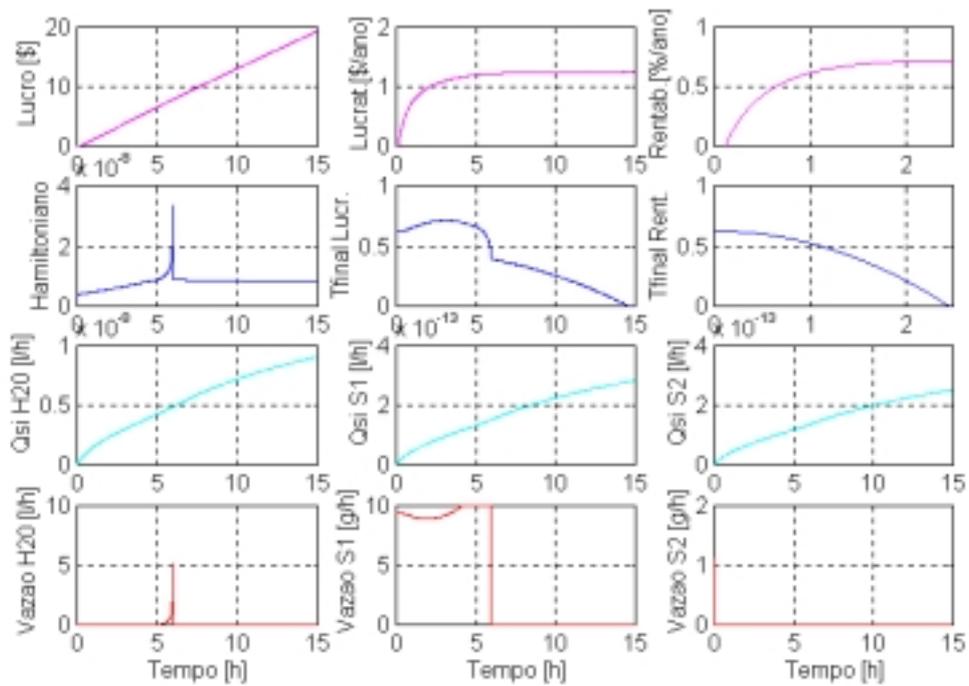


Figura 2 – Perfil dos índices de desempenho e variáveis de controle.

Impondo-se limites às variáveis de controle então, toda vez que a lei de controle necessitar de um valor além dos limites, o controle estará saturado, e as condições da equação (14) deixarão de ser válidas, passando a reger a solução *bang-bang*. Portanto, esta solução surgirá naturalmente da solução singular, considerando-se limitação nos controles.

Uma condição necessária para que possa haver este chaveamento entre a solução singular e *bang-bang*, é dada pela condição de atingibilidade da superfície singular (Johnson,

1965):

$$\nabla_u \left[ \frac{d^2(\nabla_u H)}{dt^2} \right]_{t=t_s} > 0$$

Esta condição, por sua vez, pode ser traduzida em  $\Delta$  e  $\theta$  serem definidas positivas no momento que houver a transição entre a solução singular e *bang-bang*.

Pode-se também relaxar a restrição da partida no arco com o

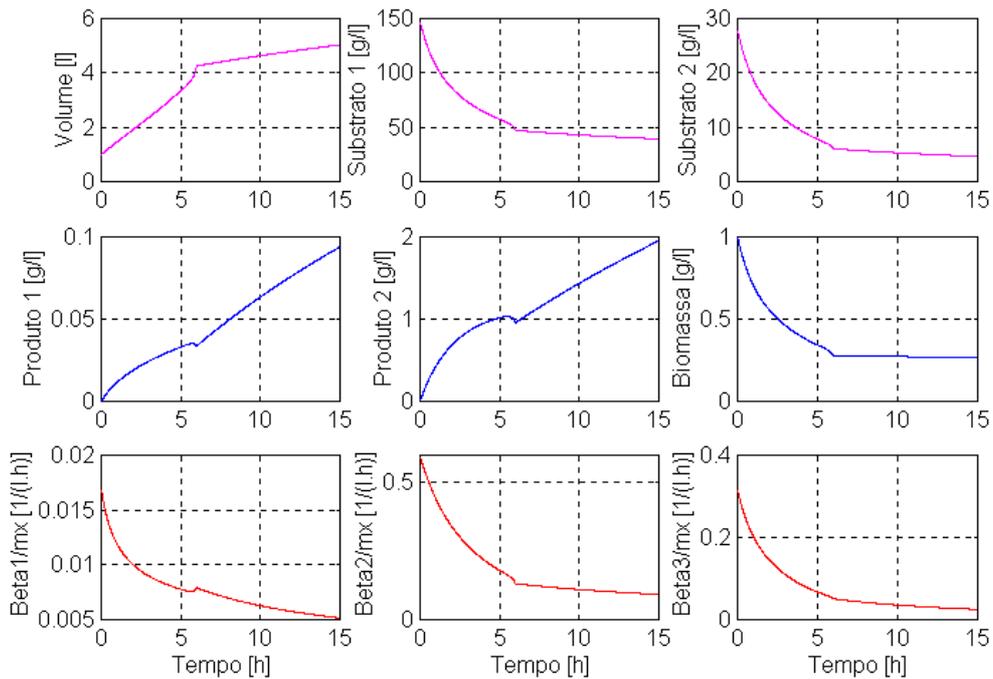


Figura 3 – Perfil das velocidades de conversão e variáveis de estado.

seguinte artifício. Primeiramente calcula-se o valor de um substrato, quando necessário, para satisfazer à equação da superfície singular no instante  $t_0$ . Após isto, calculam-se as condições iniciais dos multiplicadores de Lagrange para esta condição de partida, em  $t_0$ . Feito isto, no instante inicial  $t_0$ , aplica-se uma entrada impulsiva de forma a levar o substrato calculado em  $t_0$  ao estado real em  $t_{0+}$ . O efeito desta manobra é semelhante à saturação de uma variável de controle, que leva a trajetória a sair do arco.

Como última observação ressalta-se a praticidade em se trabalhar com redes neurais para a descrição das velocidades de conversão  $\beta$ . Foi visto, nesta solução, que as derivadas de primeira e segunda ordem destas são necessárias ao cálculo das variáveis de controle. Se o sistema for de ordem  $n+m$  elevada, e se ainda as  $q$  velocidades de conversão dependerem de todas as variáveis de estado, então têm-se  $q \cdot (n+m)$  derivadas de primeira ordem e  $q/2 \cdot (n+m)^2$  de segunda ordem que deverão ser calculadas. Em se tratando de um modelo funcional<sup>7</sup> isto é possível porém trabalhoso. Se o modelo for paramétrico, então o cálculo destas derivadas se reduz a manipulações algébricas de parâmetros, tornando-o muito mais simples e próprio para aplicações computacionais (Pereiralima, 1999).

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bryson, A. E. Jr., Ho, Y., (1969). Applied Optimal Control: Optimization, estimation and Control. Ginn and Company, USA.
- Citron, S. J. (1969). Elements of optimal control. Holt, Rinehart and Winston Inc., USA.
- Costa, A. C., Lima, E. L., Alves, T. L. M. (1996). Otimização de processos fermentativos em batelada alimentada através da teoria de controle singular. XI SINAIFERM – Simpósio Nacional de Fermentações Industriais (ago/96). São Carlos, SP.
- Himmelblau, D. M., Edgar, T. F. (1988) Optimization of Chemical Process. Mc graw Hill book Company
- Johnson, C. D. (1965). Singular Solutions in Problems of Optimal Control. In Advances in Control Systems, Leondes, C. T. Editor. Academic Press, vol 2, pp 211-267.
- Kraft, D. (1994). Algorithm 733: TOMP – Fortran Modules for Optimal Control Calculations. ACM Transactions on Mathematical Software. vol 20, no. 3, pp 264-281.
- Lee, J. H., Hong, J., Lim, H. C. (1997). Experimental optimization of fed-batch culture for poly $\beta$ -hydroxybutyric acid production, Biotechnology and Bioengineering. Vol 56, Pp 697-705.
- Modak, J. M., Lim, H. C., (1989). Simple nonsingular control approach to fed-batch fermentation optimization, Biotechnology and Bioengineering. Vol 33, Pp 11-15.
- Modak, JM, Lim, HC, (1987). Feed-back optimization of fed-batch fermentation, Biotechnology and Bioengineering. Vol 30, Pp 528-548.

- Moser, A. (1985). Kinetics of batch fermentations. In: Brauer, H Biotechnology: fundamentals of biochemical engineering. Weinhein: v. 2, cap 14, pp. 243-283.
- Palanki, S, Kravaris, C, Wang, H Y, (1994). On line optimization of batch reaction with two manipulated inputs. Chemical Engineering Science. Vol 49, Pp 85-97.
- Pereiralima, P. S. e Bonomi, A. (1998). Proposta para a função objetivo de processos biotecnológicos. XII SINAIFERM – Simpósio Nacional de Fermentações Industriais (ago/98). Uberlândia MG.
- Pereiralima, P. S. (1999). Arquitetura para um fermentador inteligente. Tese de doutorado apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
- Perry, R. H., (1984). Perry's chemical Engineer's Handbook. 6<sup>th</sup> International Edition, Mc Graw Hill Book Company. USA.
- Pyun, Y. R., Modak, J. M., Chang, Y. K., Lim, H. C., (1989). Optimization of biphasi growth of saccharomyces carlsbergensis in fed-batch culture, Biotechnology and Bioengineering. Vol 33, Pp 1-10.
- Rahman, A K M S, Palanki, S, (1996). On line optimization of batch reaction with two manipulated inputs. Computers Chemical Engineering. Vol 20, Pp 1023-1028.
- San, K. Y., Stephanopoulos, G. (1984). A note on the optimality criteria for maximum biomass production in a fed-batch fermentor, Biotechnology and Bioengineering. Vol 26, Pp 1261-1264.
- San, K. Y., Stephanopoulos, G. (1989). Optimization of fed-batch fermentation: a case of singular optimal control with state constraints, Biotechnology and Bioengineering. Vol 34, Pp 72-78.
- Tartakowsky, B., Ulitzur, S., Sheintuch, M. (1995). Optimal control of feed-batch of batch fermentation with auto-induction of metabolite production. Biotechnology Progress, Vol 11, Pp 80-87.
- Trilli, A. (1977) Prediction of costs in continuous fermentations. Journal Chemical on Biotechnology. Vol 27, Pp 251-259.

## APÊNDICE

Será feita, a seguir, a dedução das equações de controle para o arco singular.

- Equação para a vazão de água:

$$\frac{d^2}{dt^2} \left( \frac{\partial H}{\partial u_o} \right) = 0 \Rightarrow \ddot{\lambda}_{v, 1 \times 1} = 0$$

derivando-se a equação (5) para o volume tem-se:

$$\ddot{\lambda}_{v, 1 \times 1} = - \left( \begin{array}{l} \dot{\beta}'_{v, 1 \times q} \cdot \lambda_{\beta, q \times 1} \cdot v_{1 \times 1} + \beta'_{v, 1 \times q} \cdot \dot{\lambda}_{\beta, q \times 1} \cdot v_{1 \times 1} + \\ \beta'_{v, 1 \times q} \cdot \lambda_{\beta, q \times 1} \cdot \dot{v}_{1 \times 1} + \dot{\beta}'_{v, 1 \times q} \cdot \lambda_{\beta, q \times 1} + \beta'_{v, 1 \times q} \cdot \dot{\lambda}_{\beta, q \times 1} \end{array} \right) = 0$$

<sup>7</sup> Modelo funcional requer funções distintas e particulares ao problema, Modelo paramétrico aplica a mesma função a problemas distintos.

aplicando-se a regra da cadeia chega-se a:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \beta_v^t}{\partial v_{1xq}} \cdot \lambda_{\beta} \cdot \dot{v}_{1x1} \cdot v_{1x1} + \frac{2}{v_{1x1}} \cdot \beta_v^t \cdot \lambda_{\beta} \cdot \dot{v}_{1x1} \cdot v_{1x1} = \\ & + \left( \beta_v^t \cdot v_{1x1} + \beta^t \right) \cdot A_{p' \cdot \beta_p^t} \cdot \lambda_{\beta} \cdot v_{1x1} + \\ & - \sum_{i=1}^m \dot{m}_{si} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \lambda_{\beta} \cdot v_{1x1} + \\ & - \sum_{i=1}^n \dot{m}_{pi} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_{pi}^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \lambda_{\beta} \cdot v_{1x1} \end{aligned}$$

agrupando-se os termos obtém-se:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial v_{1xq}} + \frac{2}{v_{1x1}} \cdot \beta_v^t \right) \cdot \left( k_{vo} \cdot u_o + k_v^t \cdot u_s \right) \cdot \lambda_{\beta} = \\ & + \left( \beta_v^t + \frac{\beta^t}{v_{1xq}} \right) \cdot A_{p' \cdot \beta_p^t} \cdot v_{1x1} \cdot \lambda_{\beta} + \\ & - \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \left( A_{si} \cdot \beta \cdot v_{1x1} + u_{si} \right) \cdot \lambda_{\beta} + \\ & - \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_{pi}^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \left( A_{pi} \cdot \beta \cdot v_{1x1} \right) \cdot \lambda_{\beta} \end{aligned}$$

definindo-se:

$$\theta \equiv \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial v_{1xq}} + \frac{2}{v_{1x1}} \cdot \beta_v^t \right) \cdot \lambda_{\beta}$$

pode-se então obter  $u_o$  a partir de  $u_s$ , por:

$$\begin{aligned} u_o = \theta^{-1} & \cdot \left[ \left( \beta_v^t + \frac{\beta^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \left( A_{p' \cdot \beta_p^t} \right) \cdot \lambda_{\beta} + \right. \\ & - \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \left( A_{si} \cdot \beta + \frac{u_{si}}{v_{1x1}} \right) \cdot \lambda_{\beta} + \\ & \left. - \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_{pi}^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \left( A_{pi} \cdot \beta \right) \cdot \lambda_{\beta} \right] \cdot \left[ \frac{v}{k_{vo}} - \frac{k_v^t}{k_{vo}} \cdot u_s \right] \end{aligned}$$

sendo  $A_{si}$  e  $A_{pi}$  as  $i$ -ésimas linhas de  $A_s$  e  $A_p$  respectivamente.

• Equação para as vazões dos substratos:

$$\frac{d^2(\nabla_{us} H)}{dt^2} = 0 \Rightarrow \ddot{\lambda}_s = 0$$

derivando-se a equação (5) para os substratos tem-se:

$$\ddot{\lambda}_s = - \left( \dot{\beta}_s^t \cdot \lambda_{\beta} \cdot v_{1x1} + \beta_s^t \cdot \dot{\lambda}_{\beta} \cdot v_{1x1} + \beta_s^t \cdot \lambda_{\beta} \cdot \dot{v}_{1x1} \right) = 0$$

aplicando-se a regra da cadeia chega-se a:

$$\frac{\partial \beta_s^t}{\partial v_{mxq}} \cdot \lambda_{\beta} \cdot v_{1x1} \cdot \dot{v}_{1x1} + \beta_s^t \cdot \lambda_{\beta} \cdot \dot{v}_{1x1} = \beta_s^t \cdot A_{p' \cdot \beta_p^t} \cdot \lambda_{\beta} \cdot v_{1x1} \cdot v_{1x1} +$$

$$- \sum_{i=1}^m \dot{m}_{si} \cdot \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{si}} \right) \cdot \lambda_{\beta} \cdot v_{1x1} - \sum_{i=1}^n \dot{m}_{pi} \cdot \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{pi}} \right) \cdot \lambda_{\beta} \cdot v_{1x1}$$

agrupando-se os termos obtém-se:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial v_{mxq}} + \frac{\beta_s^t}{v_{mxq}} \right) \cdot \lambda_{\beta} \cdot \dot{v}_{1x1} = \left\{ \beta_s^t \cdot A_{p' \cdot \beta_p^t} \cdot v_{1x1} + \right. \\ & - \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{si}} \right) \cdot \left( A_{si} \cdot \beta \cdot v_{1x1} + u_{si} \right) - \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{pi}} \right) \cdot \left( A_{pi} \cdot \beta \cdot v_{1x1} \right) \left. \right\} \cdot \lambda_{\beta} \end{aligned}$$

verificando que:

$$\begin{aligned} \dot{v}_{1x1} & = \theta^{-1} \cdot \left[ \left( \beta_v^t + \frac{\beta^t}{v_{1xq}} \right) \cdot A_{p' \cdot \beta_p^t} \cdot v_{1x1} + \right. \\ & - \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \left( A_{si} \cdot \beta \cdot v_{1x1} + u_{si} \right) + \\ & \left. - \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_{pi}^t}{v_{1xq}} \right) \cdot \left( A_{pi} \cdot \beta \cdot v_{1x1} \right) \right] \cdot \lambda_{\beta} \end{aligned}$$

e definindo-se:

$$\beta_{\lambda} \equiv \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial v_{mxq}} + \frac{\beta_s^t}{v_{mxq}} \right) \cdot \lambda_{\beta} \cdot \theta^{-1}$$

obtém-se

$$\begin{aligned}
& \beta_{\lambda} \cdot \left\{ \left( \begin{array}{c} \beta_v^t + \frac{\beta^t}{v} \\ 1 \times q \quad 1 \times q \end{array} \right) \cdot A_{p}^t \cdot \beta_p^t \cdot v + \right. \\
& - \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{1 \times q} \right) \cdot \left( A_{Si} \cdot \beta \cdot v + u_{Si} \right) + \\
& \left. - \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_{pi}^t}{1 \times q} \right) \cdot \left( A_{pi} \cdot \beta \cdot v \right) \right\} \cdot \lambda_{\beta} = \\
& = \left\{ \begin{array}{c} \beta_s^t \cdot A_p^t \cdot \beta_p^t \cdot v + \\ m \times q \quad q \times n \quad n \times q \quad 1 \times 1 \end{array} \right. \\
& - \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{si}} \right) \cdot \left( A_{Si} \cdot \beta \cdot v + u_{Si} \right) + \\
& \left. - \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{pi}} \right) \cdot \left( A_{pi} \cdot \beta \cdot v \right) \right\} \cdot \lambda_{\beta}
\end{aligned}$$

ou, reagrupando os termos:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^m \left[ \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{si}} \right) - \beta_{\lambda} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{1 \times q} \right) \right] \cdot \lambda_{\beta} \cdot u_{si} = \\
& \left\{ \left[ \left( \begin{array}{c} \beta_s^t \\ m \times q \end{array} \right) - \beta_{\lambda} \cdot \left( \begin{array}{c} \beta_v^t + \frac{\beta^t}{v} \\ 1 \times q \quad 1 \times q \end{array} \right) \right] \cdot A_p^t \cdot \beta_p^t \cdot \lambda_{\beta} + \right. \\
& - \sum_{i=1}^m \left[ \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{si}} \right) - \beta_{\lambda} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{1 \times q} \right) \right] \cdot A_{Si} \cdot \beta \cdot \lambda_{\beta} + \\
& \left. - \sum_{i=1}^n \left[ \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{pi}} \right) - \beta_{\lambda} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_{pi}^t}{1 \times q} \right) \right] \cdot A_{pi} \cdot \beta \cdot \lambda_{\beta} \right\} \cdot v
\end{aligned}$$

e, definindo-se:

$$\Delta \equiv \left[ \left[ \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{s1}} \right) - \beta_{\lambda} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{s1}} + \frac{\beta_{s1}^t}{1 \times q} \right) \right] \cdot \lambda_{\beta} \dots \left[ \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{sm}} - \beta_{\lambda} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{sm}} + \frac{\beta_{sm}^t}{1 \times q} \right) \right] \cdot \lambda_{\beta} \right]$$

pode-se então obter  $u_s$  a partir das variáveis de estado e  $\lambda_{\beta}$ :

$$\begin{aligned}
u_s = \Delta^{-1} \cdot \left\{ \left[ \left( \begin{array}{c} \beta_s^t \\ m \times q \end{array} \right) - \beta_{\lambda} \cdot \left( \begin{array}{c} \beta_v^t + \frac{\beta^t}{v} \\ 1 \times q \quad 1 \times q \end{array} \right) \right] \cdot A_p^t \cdot \beta_p^t \cdot \lambda_{\beta} + \right. \\
- \sum_{i=1}^m \left[ \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{si}} \right) - \beta_{\lambda} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{si}} + \frac{\beta_{si}^t}{1 \times q} \right) \right] \cdot A_{Si} \cdot \beta \cdot \lambda_{\beta} + \\
\left. - \sum_{i=1}^n \left[ \left( \frac{\partial \beta_s^t}{\partial m_{pi}} \right) - \beta_{\lambda} \cdot \left( \frac{\partial \beta_v^t}{\partial m_{pi}} + \frac{\beta_{pi}^t}{1 \times q} \right) \right] \cdot A_{pi} \cdot \beta \cdot \lambda_{\beta} \right\} \cdot v
\end{aligned}$$

Serão detalhadas, em seguida, algumas relações entre as derivadas parciais das velocidades de conversão que auxiliarão na determinação dos controles para o arco singular.

1. Posto que as velocidades de conversão  $\beta$  são funções apenas das concentrações, e que estas são as massas divididas pelo volume, então, pode-se escrever:

$$\begin{aligned}
\beta_v &= \frac{-1}{v} \left( \beta_s \cdot m_s + \beta_p \cdot m_p \right) \\
\frac{\partial \beta_v}{\partial v} &= \frac{1}{v^2} \left( \sum_{i=1}^m \beta_{si} m_{si} + \sum_{i=1}^n \beta_{pi} m_{pi} \right) + \\
& + \frac{1}{v^2} \left( \sum_{i=1}^m \frac{\partial \beta_s}{\partial m_{si}} m_{si} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial \beta_s}{\partial m_{pi}} m_{pi} + \beta_s \right) m_s + \\
& + \frac{1}{v^2} \left( \sum_{i=1}^m \frac{\partial \beta_p}{\partial m_{si}} m_{si} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial \beta_p}{\partial m_{pi}} m_{pi} + \beta_p \right) m_p \\
\frac{\partial \beta_s}{\partial v} &= \frac{-1}{v} \left( \sum_{i=1}^m \frac{\partial \beta_s}{\partial m_{si}} m_{si} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial \beta_s}{\partial m_{pi}} m_{pi} + \beta_s \right) \\
\frac{\partial \beta_v}{\partial m_{si}} &= \frac{-1}{v} \left( \frac{\partial \beta_s}{\partial m_{si}} m_s + \frac{\partial \beta_p}{\partial m_{si}} m_p + \beta_{si} \right) \\
\frac{\partial \beta_v}{\partial m_{pi}} &= \frac{-1}{v} \left( \frac{\partial \beta_s}{\partial m_{pi}} m_s + \frac{\partial \beta_p}{\partial m_{pi}} m_p + \beta_{pi} \right)
\end{aligned}$$

Sendo  $\beta_{si}$  e  $\beta_{pi}$  as  $i$ -ésimas colunas de  $\beta_s$  e  $\beta_p$  respectivamente