

## Resumo

No presente trabalho apresenta-se um estudo teórico e experimental sobre métodos com base em modelos para a análise e operação de bioreactores. O estudo engloba modelização e análise dinâmicas, métodos de monitorização e de estimativa de parâmetros e projecto de controlo. Utilizou-se o processo de produção de fermento de padeiro como veículo para os estudos experimentais, os quais incluem a utilização de meios (alimentação) semi-sintéticos e de meios industriais.

A estrutura de desenvolvimento teórico utilizada para o projecto dos observadores do estado do processo e para o projecto de controladores não-lineares, alternativos aos controladores clássicos, tem como base um modelo dinâmico generalizado de fermentadores, tal como proposto recentemente (1990) por Bastin e Dochain.

Construiu-se uma plataforma experimental constituída no essencial por - (i) uma unidade de processo, incluindo um fermentador de cinco litros, sensores para medições em linha e elementos finais de controlo (bombas peristálticas); (ii) um espectrómetro de massa para análise dos gases de saída; e (iii) uma unidade de controlo digital local e um computador de supervisão e controlo. Para este último, desenvolveu-se especificamente um programa em Microsoft Visual Basic 3.0, com funções, em tempo-real, de aquisição de dados (via porta série e via interface AD/DA), de observação de estado e de controlo, e com possibilidade de comunicação com outras plataformas informáticas.

Desenvolveu-se e validou-se experimentalmente um modelo teórico para estudo do processo de crescimento da levedura, em meios semi-sintéticos e industriais. Nos estudos com melaços assumiu-se, nos modelos teóricos, um tratamento dito de "substrato concentrado equivalente", aproximação essa que se verificou válida.

Questões chave na análise e operação de bioreactores são a dificuldade (inexactidão) de medições em linha e a incerteza nos modelos cinéticos. No presente trabalho exploraram-se, teórica e experimentalmente, métodos de estimação do estado em que medindo apenas duas variáveis de estado e as taxas de transferência gasosa para o oxigénio e para o dióxido de carbono, é possível observar as restantes variáveis. Em termos de simulação, os resultados obtidos na estimação de biomassa, glucose e etanol, usando medidas de dióxido de carbono e oxigénio, apontam para um bom desempenho dos estimadores. Na verificação experimental, provou-se a sensibilidade dos algoritmos face ao rigor das medições, em especial a determinação das taxas de transferência gasosa. Testaram-se, também, métodos de estimativa de cinéticas instantâneas, com base no conhecimento do estado, que revelaram problemas de aplicação experimental análogos aos mencionados para a observação do estado.

Em relação ao controlo, estudaram-se algoritmos linearizantes com base em modelos completos e em modelos reduzidos do processo, em termos comparativos com métodos clássicos (algoritmos PID discretos). O estudo foi limitado ao controlo de trajectórias de etanol, através da manipulação da alimentação de substratos. Em relação à problemática das incertezas e variabilidade das características cinéticas, adoptaram-se, nos estudos de controlo não-linear, técnicas de adaptação,

em-linha, de parâmetros relevantes das leis de controlo. Uma vez mais os controladores foram inicialmente testados em simulação e posteriormente validados em laboratório. Os resultados apontam para uma maior robustez e desempenho mais favorável do algoritmo adaptativo. Em particular estes algoritmos incorporam directamente características de antecipação de perturbações nas concentrações da alimentação. O controlador PID, embora com uma notável capacidade de controlo mínimo, é sensível à introdução de perturbações e sofre da não-existência de adaptação automática dos parâmetros do controlador para situações diferentes das que foi sintonizado.

Globalmente, a falta de conhecimento ainda existente sobre o comportamento fundamental dos microorganismos, caracterizado por uma reconhecida variabilidade, e a dificuldade de recolher, em linha e em tempo-real, informação fiável sobre o estado do processo, relevam a importância do desenvolvimento de linhas de estudo, envolvendo de forma complementar, os métodos mecânicos apresentados neste trabalho e métodos da área da inteligência artificial.

## **Abstract**

In this work a theoretical and experimental study on the analysis and operation of bioreactors is presented. It includes dynamical analysis, a study on process monitoring and parameter estimation and, furthermore, the design and implementation of model based non-linear control laws. Baker's yeast fermentation at laboratory scale, with semi-synthetic and industrial feed, has been employed as the experimental vehicle for the studies.

The theoretical framework, for the design of the state observers and of the non-linear control laws, is based on the generalised dynamical model of fermenters, proposed in 1990 by Bastin and Dochain.

An experimental rig was constructed. The rig includes, viz. - (i) a process unit, with a five litre fermenter, equipped with on-line sensors and final control elements (peristaltic pumps); (ii) a mass spectrometer for the analysis of the exhaust gases; and (iii) a digital control unit and a supervisory control computer. For the latter, a software package has been developed (in Microsoft Visual Basic 3.0, running in Windows), which includes tasks of data acquisition, on-line state and parameter estimation and fermenter control.

A theoretical model for the production of baker's yeast was developed and tested experimentally, in semi-synthetic and industrial media. In the theoretical studies with multiple substrates (molasses) a "lumped substrate" assumption was considered for the theoretical studies, with the substrate concentration taken as the sum of all sugars in solution. This approach was experimentally tested and on the basis of those tests accepted as valid.

Key questions in the analysis and operation of bioreactors are the lack of reliable on-line measures and the uncertainty of the kinetic models. In the present work, methods for state and parameter estimation were explored, both theoretically and experimentally. With the on-line measure of only two state variables and the measure of the gaseous transfer rate for oxygen and carbon dioxide, it has

been possible to observe the other variables. Three selections of direct measures were tested, viz. - oxygen/carbon dioxide, ethanol/oxygen and ethanol/carbon dioxide. Simulation results were good for all three alternative sets of measurements. The experimental validation has clearly shown that the proposed algorithms are most sensitive to the quality of the direct and indirect measurements available. The difficult estimates of the gaseous transfer rates, through mass balances incorporating the mass spec information, are indeed a source of problems.

Referring to control studies, these were limited to developing control laws for the regulatory problem of keeping the ethanol concentration at a required pre-set level. Model-based adaptive linearizing controllers (based on full and reduced models of the process) were theoretically and experimentally studied and their performances compared with those observed when employing classical PID laws (in the digital velocity form). The results point out for a superior robustness and performance of the adaptive algorithm. The PID controller, albeit with a remarkably reasonable performance, is sensitive to perturbations and has to be fine tuned or re-tuned for the different operating conditions.

Globally, the lack of knowledge about the fundamental behaviour of the microorganisms still observed, together with the lack of reliable measurements, on-line and in real-time, lead to this recognition of the importance of developing, in parallel and with complementary objectives, two directions of research on the analysis and operation of bioreactors, one focusing on mechanistic methods, as presented in this work, and the other exploring concepts on the domain of artificial intelligence.