

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO

DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS BIOTECNOLÓGICOS

MODELAGEM HÍBRIDO NEURONAL DE UM PROCESSO DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA

Autor: Ivana Cristina Cordeiro Mantovaneli

Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Co-orientadora: Prof(a). Dr(a). Aline Carvalho da Costa

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

Campinas - São Paulo

Outubro – 2005

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

M319m Mantovaneli, Ivana Cristina Cordeiro
Modelagem híbrido neuronal de um processo de
fermentação alcoólica / Ivana Cristina Cordeiro
Mantovaneli.--Campinas, SP: [s.n.], 2005.

Orientadores: Rubens Maciel Filho, Aline Carvalho da
Costa
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Biotecnologia. 2. Modelos matemáticos. 3.
Simulação (Computadores). 4. Redes neurais
(Computação). 5. Fermentação. 6. Álcool. I. Maciel Filho,
Rubens. II. Costa, Aline Carvalho da. III. Universidade
Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química.
IV. Título.

Título em Inglês: Hybrid neural network model of an alcoholic
fermentation process

Palavras-chave em Inglês: Alcoholic fermentation process, Hybrid model,
Functional link networks, Adaptive model

Área de concentração: Processos Biotecnológicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Silvio Roberto Andrietta e Francisco Maugeri Filho

Data da defesa: 24/10/2005

Dissertação de Mestrado defendida por Ivana Cristina Cordeiro Mantovaneli e aprovada em 24 de Outubro de 2005 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho (Orientador)

Prof. Dr. Silvio Roberto Andrietta- FEQ/DPB/UNICAMP (Titular)

Prof. Dr. Francisco Maugeri Filho- FEA/UNICAMP (Titular)

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida por Ivana Cristina Cordeiro Mantovaneli em 24 de Outubro de 2005.

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho (Orientador)

Á minha Família.

Meus pais, Maria de Lourdes e Jurandir Mantovaneli, pela confiança depositada em mim, pelo incentivo e apoio aos meus estudos.

Meu irmão, Ériton, pelo carinho e colaboração mesmo estando distante.

E meu namorado, Thiago, pela força e paciência em todos os momentos.

AGRADEÇO

À DEUS;

Aos meus pais e meu irmão que sempre me incentivaram em todas as minhas escolhas;

Ao meu namorado pelo amor, amizade e pela presença nos momentos difíceis;

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho, meu orientador, por ter proporcionado meios para alcançar essa conquista, pela confiança depositada em mim e amizade;

À Prof(a). Dr(a). Aline Carvalho da Costa, minha coorientadora, que esteve presente sempre que precisei, pela dedicação, disponibilidade, paciência e amizade durante todo o mestrado;

Ao Prof. Dr. Sílvio Andrietta, pela contribuição em conhecimento e informações que ajudaram no desenvolvimento desse trabalho;

Aos meus amigos queridos, pela força, amizade, e companheirismo em todas as horas;

Aos amigos e colegas do LOPCA pela ajuda que recebi por inúmeras vezes e troca de informações;

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

“A melhor maneira de prever o futuro é inventá-lo”

RESUMO

MANTOVANELI, I. C. C. *Modelagem Híbrido Neuronal de um Processo de Fermentação Alcoólica*. 2005. Dissertação de Mestrado - Faculdade de Engenharia Química, DPB, UNICAMP. Campinas.

A utilização do etanol como combustível tem muitas vantagens; ele tem competido economicamente com a gasolina e diversos outros combustíveis, substituindo-os em várias utilidades. Desta forma, existe um grande interesse em se otimizar todos os passos da produção de etanol. Apenas um conhecimento profundo da dinâmica do processo gera uma operação ótima, e este pode ser conseguido através de simulações realizadas usando um modelo preciso. Muitos modelos fenomenológicos foram desenvolvidos considerando condições industriais, mas estes só são válidos para condições específicas nas quais foram determinados, invalidando a predição do modelo em outras condições. Mudanças acontecem normalmente em uma unidade industrial e a re-estimação freqüente dos parâmetros do modelo é usualmente difícil e demorada. O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo híbrido neuronal para o processo de fermentação alcoólica usando balanços de massa combinados com redes neuronais do tipo *Functional Link*. Será implementado um esquema para atualização dos pesos da rede sempre que esta não descrever o comportamento dinâmico da planta. O modelo desenvolvido será usado para descrever um processo real no lugar dos modelos fenomenológicos existentes, já que estes têm sido capazes de descrever o processo apenas por curtos espaços de tempo.

Palavras chaves: Fermentação Alcoólica, Modelo Híbrido Neuronal, Modelo Neuronal Funcional Link, Modelo Adaptativo.

ABSTRACT

MANTOVANELI, I. C. C. *Hybrid Neural Network Model of an Alcoholic Fermentation Process*. 2005. In. Portuguese. MSc Thesis, FEQ/DPB/UNICAMP. Campinas, SP, Brazil.

The use of ethanol as a fuel has many advantages; it has economically competed with gasoline and others fuels, substituting them in various uses. Thus, there is a great interest in optimizing all the steps of ethanol production. Only a detailed knowledge of the process dynamics can lead to optimal operation and this can be achieved through simulation using an accurate model. Many phenomenological models were developed considering industrial fermentations, but they are only valid for specific conditions. Changes occur frequently in an industrial unity and frequent reestimation of model parameters is usually expensive and time consuming. The objective of this work is to develop a hybrid neural model for the alcoholic fermentation process using mass balances combined with Functional Link Neural Networks. A scheme to update network weights always that it does not describe plant behavior accurately is implemented. The developed model is used to describe an industrial process substituting the existing phenomenological models, since they have been able to describe the process only for short periods.

Keywords: Alcoholic Fermentation Process, Hybrid Model, Functional Link Networks, Adaptive Model

SUMÁRIO

DEDICATÓRIA.....	v
AGRADECIMENTO.....	vi
EPÍGRAFE.....	vii
RESUMO.....	viii
ABSTRACT.....	ix
SUMÁRIO.....	x
LISTA DE FIGURAS.....	xiii
LISTA DE TABELAS.....	xx
NOMENCLATURA.....	xxii
1. INTRODUÇÃO	1
2. OBJETIVO	3
2.1. OBJETIVO GERAL	3
2.2. OBJETIVO ESPECÍFICO	3
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
3.1. FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA	5
3.1.1. <i>Introdução</i>	5
3.1.2. <i>Histórico</i>	6
3.1.3. <i>Incentivos ao estudo de Controle de Processos Fermentativos</i>	9
3.2. REDES NEURONAIIS ARTIFICIAIS	11
3.2.1. <i>Introdução</i>	11
3.2.2. <i>Histórico</i>	12
3.2.3. <i>Aplicações das redes</i>	12
3.2.4. <i>Características Gerais</i>	16
3.2.5. <i>Multilayer Perceptron (MLP)</i>	19
3.2.6. <i>O Treinamento</i>	22
3.2.7. <i>Rede Funcional Link (FLN)</i>	23
3.2.8. <i>Modelo Híbrido</i>	26
3.2.9. <i>Atualização dos pesos da rede</i>	28
3.3. CONCLUSÃO	28

4. DESCRIÇÃO DO PROCESSO FERMENTATIVO PARA PRODUÇÃO DE ETANOL	29
4.1. INTRODUÇÃO	29
4.2. DESCRIÇÃO DO PROCESSO FERMENTATIVO	30
4.3. VARIÁVEIS DE PROCESSO	31
4.4. MODELAGEM MATEMÁTICA	33
4.4.1. <i>Modelo e Parâmetros Cinéticos</i>	33
4.4.2. <i>Equações de Balanço de Massa</i>	36
4.4.3. <i>Equações de Balanço de Energia</i>	37
4.4.4. <i>Balanço de Massa Aplicado ao Sistema</i>	39
4.4.5. <i>Rendimento e Produtividade</i>	40
4.5. CONCLUSÃO	41
5. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	43
5.1. INTRODUÇÃO	43
5.2. PROCESSO DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICO	43
5.3. PLANEJAMENTO FATORIAL FRACIONÁRIO	44
5.4. ANÁLISE DOS RESULTADOS	48
5.5. CONCLUSÃO	56
6. DESENVOLVIMENTO E ANÁLISE DO MODELO HÍBRIDO	57
6.1. INTRODUÇÃO	57
6.2. DESENVOLVIMENTO DA REDE NEURONAL FUNTIONAL LINK (FLN)	57
6.2.1. <i>Caracterização da Qualidade de Predição</i>	57
6.2.2. <i>Rede para Reatores Isotérmicos</i>	58
6.2.3. <i>Rede para Reatores Não-Isotérmicos</i>	85
6.3. CONCLUSÃO	101
7. MODELO ADAPTATIVO	103
7.1. INTRODUÇÃO	103
7.2. ATUALIZAÇÃO DOS PESOS DA REDE	103
7.3. MODELO ADAPTATIVO CONSIDERANDO PROCESSO ISOTÉRMICO	105
7.4. MODELO ADAPTATIVO CONSIDERANDO PROCESSO NÃO-ISOTÉRMICO	116

7.5. CONCLUSÃO	125
8. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	127
9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRAFIAS	129
APÊNDICE A	139
A.1. FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA - O METABOLISMO NO INTERIOR DA CÉLULA.....	139
APÊNDICE B.....	141
B.1. PRODUTOS SECUNDÁRIOS DA FERMENTAÇÃO.....	141
B.2. PRODUTOS SECUNDÁRIOS DA FERMENTAÇÃO	143

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1: Elemento de Processamento de uma Rede Neuronal.....	16
Figura 3.2: Estrutura de uma Rede Neuronal Artificial.....	17
Figura 3.3: Estrutura de uma FLN (<i>Functional-Link Network</i>).....	24
Figura 3.4: Expansão Polinomial de grau seis.....	25
Figura 4.1: Desenho esquemático do processo fermentativo contínuo para produção de etanol proposto por ANDRIETTA (1994).....	31
Figura 5.1: Efeitos dos parâmetros nos reatores 1, 2, 3, 4 e 5.....	54
Figura 6.1: Matriz do arquivo de entrada para o treinamento.....	61
Figura 6.2: Matriz do arquivo de saída para o treinamento.....	61
Figura 6.3: Perturbação em F_0	62
Figura 6.4: Perturbação em S_0	62
Figura 6.5: Perturbação aleatória em F_0	65
Figura 6.6: Perturbação aleatória em S_0	65
Figura 6.7: Perturbação aleatória em F_0	68
Figura 6.8: Perturbação aleatória em S_0	68
Figura 6.9: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1	69
Figura 6.10: Perfil de Concentração de Substrato no reator 1, S_1	69
Figura 6.11: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1	69
Figura 6.12: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2	70
Figura 6.13: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2	70
Figura 6.14: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2	70
Figura 6.15: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3	71

Figura 6.16: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3	71
Figura 6.17: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3	71
Figura 6.18: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4	72
Figura 6.19: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4	72
Figura 6.20: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4	72
Figura 6.21: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5	73
Figura 6.22: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5	73
Figura 6.23: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5	73
Figura 6.24: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 1, μ_1	74
Figura 6.25: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 2, μ_2	74
Figura 6.26: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 3, μ_3	74
Figura 6.27: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 4, μ_4	75
Figura 6.28: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 5, μ_5	75
Figura 6.29: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1	78
Figura 6.30: Perfil de Concentração de Substrato no reator 1, S_1	78
Figura 6.31: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1	79
Figura 6.32: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2	79
Figura 6.33: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2	79
Figura 6.34: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2	80
Figura 6.35: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3	80
Figura 6.36: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3	80
Figura 6.37: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3	81

Figura 6.38: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4	81
Figura 6.39: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4	81
Figura 6.40: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4	82
Figura 6.41: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5	82
Figura 6.42: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5	82
Figura 6.43: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5	83
Figura 6.44: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 1, μ_1	83
Figura 6.45: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 2, μ_2	83
Figura 6.46: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 3, μ_3	84
Figura 6.47: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 4, μ_4	84
Figura 6.48: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 5, μ_5	84
Figura 6.49: Perturbação em S_0	86
Figura 6.50: Perturbação em T_0	86
Figura 6.51: Perturbação aleatória em S_0	88
Figura 6.52: Perturbação aleatória em T_0	88
Figura 6.53: Perturbação aleatória em S_0	91
Figura 6.54: Perturbação aleatória em T_0	91
Figura 6.55: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1	92
Figura 6.56: Perfil de Concentração de Substrato no reator, S_1	92
Figura 6.57: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1	93
Figura 6.58: Perfil de Temperatura no reator 1, T_1	93
Figura 6.59: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2	93

Figura 6.60: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2	94
Figura 6.61: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2	94
Figura 6.62: Perfil de Temperatura no reator 2, T_2	94
Figura 6.63: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3	95
Figura 6.64: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3	95
Figura 6.65: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3	95
Figura 6.66: Perfil de Temperatura no reator 3, T_3	96
Figura 6.67: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4	96
Figura 6.68: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4	96
Figura 6.69: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4	97
Figura 6.70: Perfil de Temperatura no reator 4, T_4	97
Figura 6.71: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5	97
Figura 6.72: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5	98
Figura 6.73: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5	98
Figura 6.74: Perfil de Temperatura no reator 5, T_5	98
Figura 6.75: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 1, μ_1	99
Figura 6.76: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 2, μ_2	99
Figura 6.77: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 3, μ_3	99
Figura 6.78: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 4, μ_4	100
Figura 6.79: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 5, μ_5	100
Figura 7.1: Esquema usado para re-estimação dos pesos da rede (Costa, 1998).....	104
Figura 7.2: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1	106

Figura 7.3: Perfil de Concentração de Substrato no reator, S_1	106
Figura 7.4: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1	107
Figura 7.5: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2	107
Figura 7.6: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2	107
Figura 7.7: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2	108
Figura 7.8: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3	108
Figura 7.9: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3	108
Figura 7.10: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3	109
Figura 7.11: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4	109
Figura 7.12: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4	109
Figura 7.13: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4	110
Figura 7.14: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5	110
Figura 7.15: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5	110
Figura 7.16: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5	111
Figura 7.17: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1	111
Figura 7.18: Perfil de Concentração de Substrato no reator, S_1	112
Figura 7.19: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1	112
Figura 7.20: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2	112
Figura 7.21: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2	113
Figura 7.22: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2	113
Figura 7.23: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3	113
Figura 7.24: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3	114

Figura 7.25: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3	114
Figura 7.26: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4	114
Figura 7.27: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4	115
Figura 7.28: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4	115
Figura 7.29: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5	115
Figura 7.30: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5	116
Figura 7.31: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5	116
Figura 7.32: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1	117
Figura 7.33: Perfil de Concentração de Substrato no reator, S_1	118
Figura 7.34: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1	118
Figura 7.35: Perfil de Temperatura no reator 1, T_1	118
Figura 7.36: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2	119
Figura 7.37: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2	119
Figura 7.38: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2	119
Figura 7.39: Perfil de Temperatura no reator 2, T_2	120
Figura 7.40: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3	120
Figura 7.41: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3	120
Figura 7.42: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3	121
Figura 7.43: Perfil de Temperatura no reator 3, T_3	121
Figura 7.44: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4	121
Figura 7.45: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4	122
Figura 7.46: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4	122

Figura 7.47: Perfil de Temperatura no reator 4, T_4	122
Figura 7.48: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5	123
Figura 7.49: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5	123
Figura 7.50: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5	123
Figura 7.51: Perfil de Temperatura no reator 5, T_5	124
Figura B.1: Sequência das reações enzimáticas pela fermentação alcoólica de carboidratos endógenos (glicogênio e trealose) ou exógenos (sacarose e maltose), conduzida por <i>Saccharomyces</i> . Adaptata de LIMA <i>et al.</i> (2001b).....	142

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1: Descrições e valores das principais variáveis de processo.....	28
Tabela 4.2: Valores dos parâmetros cinéticos para temperatura de 32°C (ANDRIETTA, 1994).....	33
Tabela 4.3: Valores das constantes no processo (ANDRIETTA, 1994).....	35
Tabela 4.4: Parâmetros de projeto.....	38
Tabela 4.5: Parâmetros do modelo fenomenológico.....	41
Tabela 5.1: Variáveis de entrada do Processo de produção de Etanol.....	44
Tabela 5.2: Níveis de análise para cada parâmetro.....	45
Tabela 5.3: Matriz do planejamento fatorial fracionário 2^{8-3}	46
Tabela 4.4: Resposta das Simulações para cada corrida do planejamento.....	47
Tabela 5.5: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X1.....	48
Tabela 5.6: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S1.....	49
Tabela 5.7: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P1.....	49
Tabela 5.8: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X2.....	49
Tabela 5.9: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S2.....	50
Tabela 5.10: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P2.....	50
Tabela 5.11: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X3.....	50
Tabela 5.12: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S3.....	51
Tabela 5.13: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P3.....	51
Tabela 5.14: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X4.....	51
Tabela 5.15: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S4.....	52
Tabela 5.16: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P4.....	52
Tabela 5.17: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X5.....	52

Tabela 5.18: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S5.....	53
Tabela 5.19: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P5.....	53
Tabela 6.1: Valores da variáveis em cada nível do planejamento.....	60
Tabela 6.2: Planejamento para perturbação de treinamento da rede.....	60
Tabela 6.3: Vetores de entrada da rede.....	63
Tabela 6.4: Estrutura obtida para o treinamento da rede.....	64
Tabela 6.5: Características do monômios gerados para cada reator.....	65
Tabela 6.6: Número de termos gerados na equação de μ_{FLN} em cada reator.....	67
Tabela 6.7: DPR em porcentagem da média dos valores determinístico.....	75
Tabela 6.8: Estrutura para o treinamento da única rede.....	76
Tabela 6.9: DPR (%) da média dos valores determinístico para a única rede.....	77
Tabela 6.10: Valores da variáveis em cada nível do planejamento.....	86
Tabela 6.11: Planejamento para perturbação de treinamento da rede.....	86
Tabela 6.12: Vetores de entrada da rede.....	87
Tabela 6.13: Estrutura obtida para o treinamento da rede sem controle de temperatura...	88
Tabela 6.14: Número de termos gerados na equação de μ_{FLN} em cada reator.....	91
Tabela 6.15: DPR em porcentagem da média dos valores determinístico.....	100
Tabela 7.1: Perturbação dos parâmetros cinéticos (condição 1 e 2).....	105
Tabela 7.2: Perturbação dos parâmetros cinéticos (condição 3).....	117
Tabela B.1: Proporção dos diversos produtos da fermentação alcólica, em g/100g de glicose metabolizada, de acordo com várias fontes e para diferentes eficiências fermentativas. Adaptada de LIMA <i>et al.</i> (2001b).....	144

Nomenclatura

A	Constante de ajuste da dependência de P_{MAX} com a temperatura ($^{\circ}C$)
a	Constante de ajuste da dependência de μ_{MAX} com a temperatura ($^{\circ}C$)
A_i	Área de troca térmica no trocador i (m^2)
Cp_i	Calor específico do fluido reagente ($cal.g^{-1}.^{\circ}C^{-1}$)
Cp_j	Calor específico do fluido refrigerante ($cal.g^{-1}.^{\circ}C^{-1}$)
e	Vetor dos erro da rede
E	Energia de ativação ($cal.mol^{-1}$)
F_a	Vazão de água no tanque de tratamento ($m^3.h^{-1}$)
FC_i	Vazão do fluido reagente no trocador de calor ($m^3.h^{-1}$)
F_i	Vazão do meio de alimentação ($m^3.h^{-1}$)
FJ_i	Vazão do fluido de resfriamento no trocador de calor i ($^{\circ}C$)
F_L	Vazão de leite de levedura ($m^3.h^{-1}$)
F_{L1}	Vazão de leite de levedura após sangria ($m^3.h^{-1}$)
FLN	Functional link
F_R	Vazão de reciclo ($m^3.h^{-1}$)
F_S	Vazão de sangria de levedura ($m^3.h^{-1}$)
F_V	Vazão de vinho de levedurado ($m^3.h^{-1}$)
F_W	Vazão de alimentação ($m^3.h^{-1}$)
F_0	Vazão de alimentação de mosto ($m^3.h^{-1}$)
$f(\bullet)$	Função que estabelece uma relação entre as entradas e a saída de cada neurônio, chamada de função de ativação do nó
$(h_j(\mathbf{x}_e))$	Série de monômios de \mathbf{x}_e

ΔH	Calor de reação (Kcal.Kg ⁻¹)
J	Matriz Jacobiana
K_s	Constante de afinidade ao substrato (g.L ⁻¹)
K_0	Constante do modelo de dependência de P_{MAX} com a temperatura (°C)
$LMDT_i$	Média logarítmica das temperaturas no trocador i
m	Potência do termo de inibição pela concentração celular
M	Número de monômios dados por uma rede
MLP	Multi Layer Perceptron
n	Potência do termo de inibição pelo produto
N	Número de dados experimentais
n_g	Grau dos monômios
n_x	Tamanho do vetor das entradas
P	Concentração de etanol (g.l ⁻¹)
P_i	Concentração de etanol no reator i (g.l ⁻¹)
P_{MAX}	Tolerância da levedura ao etanol (g.l ⁻¹)
P_R	Concentração de etanol no reciclo (g.l ⁻¹)
$PROD$	Produtividade de etanol (g.l ⁻¹ .h ⁻¹)
P_w	Concentração de etanol na entrada do primeiro reator (g.l ⁻¹)
P_5	Concentração de etanol no reator 5 (g.l ⁻¹)
R	Constante dos gases (cal.Kmol ⁻¹)
$REND$	Rendimento do processo (%)
r_p	Velocidade de formação de produto (g.l ⁻¹ .h ⁻¹)
RR	Taxa de reciclo

r_s	Velocidade de consumo de substrato ($\text{g.l}^{-1}.\text{h}^{-1}$)
r_x	Velocidade de crescimento celular ($\text{g.l}^{-1}.\text{h}^{-1}$)
S	Concentração de ART (g.l^{-1})
S_0	Concentração de ART no meio de Alimentação (g.l^{-1})
S_i	Concentração de ART no reator i (g.l^{-1})
S_R	Concentração de ART no reciclo (g.l^{-1})
S_w	Concentração de ART na entrada do primeiro reator (g.l^{-1})
S_5	Concentração de ART no reator 5 (g.l^{-1})
t	Tempo (h)
T	Temperatura ($^{\circ}\text{C}$)
Tc_i	Temperatura do fluido reagente na saída do trocador de calor i ($^{\circ}\text{C}$)
T_i	Temperatura do reator i ($^{\circ}\text{C}$)
TJe	Temperatura do fluido de resfriamento na entrada do trocador de calor i ($^{\circ}\text{C}$)
TJ_i	Temperatura do fluido de resfriamento na saída do trocador de calor i ($^{\circ}\text{C}$)
T_w	Temperatura de entrada do primeiro reator ($^{\circ}\text{C}$)
U	Coefficiente global de troca térmica ($\text{Kcal.h}^{-1}.\text{^{\circ}C}^{-1}.\text{m}^{-2}$)
Vc_i	Volume do fluido reagente na saída do trocador i (m^3)
V_i	Volume do reator i (m^3)
VJ_i	Volume do fluido refrigerante no trocador de calor i (m^3)
X	Concentração de células (g.l^{-1})
$\mathbf{x_e}$	Vetor de entradas da rede
X_i	Concentração de células no reator i (g.l^{-1})

$X_{MÁX}$	Concentração de células onde o crescimento celular se cessa (g.L^{-1})
X_R	Concentração de células no reciclo (g.L^{-1})
X_L	Concentração de células no leite de levedura (g.L^{-1})
X_V	Concentração de células no vinho de levedurado (g.L^{-1})
X_W	Concentração de células na entrada do primeiro reator (g.L^{-1})
X_5	Concentração de células no reator 5 (g.L^{-1})
$w_{ij}^{(K)}$	Peso de conexão entre os nós, unindo o nó j da camada (k-1) com nó i da camada (k)
$y(k)$	Saída da rede correspondente
$y_e(k)$	Saída experimental k
$\overline{y_e}$	Valor médio das saídas experimentais
$y_i^{(K)}$	Valor da camada de saída do i-ésimo neurônio na camada k
$y_j^{(K-1)}$	Saída do nó j da camada anterior (k-1)
$y_i(\mathbf{x}_e)$	Saídas das redes
$Y_{P/S}$	Rendimento teórico em etanol
$Y_{X/S}$	Rendimento teórico em biomassa
$\theta_i^{(K)}$	Bias
μ	Velocidade específica de crescimento do microrganismo (h^{-1})
μ_i	Velocidade específica de crescimento do microrganismo no reator i (h^{-1})
$\mu_{MÁX}$	Velocidade específica máxima de crescimento do microrganismo (h^{-1})
ρ_i	Densidade do fluido reagente no reator i (Kg.m^3)
ρ_j	Densidade do fluido refrigerante (Kg.m^3)

1. INTRODUÇÃO

O Programa Brasileiro do Álcool Combustível tem mais de 20 anos e demonstrou três vantagens evidentes em relação ao uso de derivados do petróleo. A primeira está ligada ao desenvolvimento tecnológico e à estratégia de abastecimento; a segunda relaciona-se com o desempenho da economia e o nível do emprego; a terceira é de ordem ambiental. Graças a esse programa, o Brasil conquistou uma tecnologia, única no mundo, para a utilização em larga escala de um combustível renovável que independe do mercado internacional do petróleo. Vastas regiões do país ganharam vida nova, oferecendo oportunidade de trabalho a centenas de milhares de pessoas. Para produzir a mesma quantidade de energia, o álcool emprega 152 vezes mais pessoas do que a indústria do petróleo. Para um investimento total de US\$ 11 bilhões, desde a sua criação, o programa obteve para o país, via substituição de importações, uma economia de divisas de US\$ 27 bilhões. Hoje, o Brasil dispõe de um "combustível verde", renovável e neutro em relação ao efeito estufa, que reduz em 50% a emissão de monóxido de carbono dos motores de veículos e que promoveu a substituição total do chumbo tetraetila que era misturado à gasolina. Essas três vantagens constituem a lógica do Programa Brasileiro de Álcool Combustível, são reconhecidas até pelos seus inimigos e tendem a se tornar cada vez mais evidentes à medida que crescem as preocupações mundiais com o desemprego, com o meio ambiente e com o aumento da dependência mundial de petróleo extraído em áreas instáveis como o Oriente Médio (UDOP, 2006)

A importância econômica na produção de álcool promove a necessidade de melhorar o desempenho dos processos fermentativos, sendo necessário obter condições ótimas de operação. Mas quando se trabalha diretamente com uma planta de fermentação durante sua operação industrial, as interrupções necessárias do processo durante etapas de teste geram altos custos. Por isso o desenvolvimento de modelos e controladores eficiente que o mantenham operando nas condições ótimas torna-se muito importante para melhorar o desempenho deste tipo de processo.

Os modelos fenomenológicos existentes proporcionam um grande conhecimento sobre o processo de produção de etanol, mas mudanças acontecem normalmente em uma unidade industrial e a reestimação freqüente dos parâmetros do modelo é usualmente difícil

e demorada. Uma maneira de se lidar com este problema é o uso de modelos híbrido neuronais.

2. OBJETIVO

2.1. Objetivo Geral

O objetivo deste trabalho é obter modelos confiáveis de forma rápida e fácil para facilitar a implementação de controladores *on-line*.

2.2. Objetivo Específico

- Analisar a sensibilidade dos parâmetros do modelo cinético
- Estudar o uso das redes neurais Functional Link (FLN) na descrição do processo de fermentação alcoólica.
- Desenvolver modelos a partir de dados de simulação.
- Implementar um esquema de adaptação dos pesos da rede.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Fermentação Alcoólica

3.1.1. Introdução

As vantagens na escala econômica e tecnológica para o aumento da competitividade dos recursos renováveis crescem cada vez mais, pois esta, além de reduzir o espaço dos combustíveis fósseis convencionais, é considerada uma tecnologia limpa e segura comparada a processos químicos tradicionais (MELEIRO e MACIEL FILHO, 2000). GOLDEMBERG *et al.* (2004a) em seus estudos dizia que a energia renovável está obtendo maior apoio no Brasil devido a fatores externos como a dependência de combustível fóssil, desvalorização da moeda, problemas na política de companhias que produzem óleo, restrições ambientais na poluição do ar, questões de mudança de clima e um aumento da consciência para um desenvolvimento sustentável, incluindo a criação de empregos e energia integrada às comunidades isoladas.

Hoje, podemos confirmar segundo UDOP (2006) que a experiência do Programa Brasileiro do Álcool Combustível é um dos principais modelos de desenvolvimento sustentável no Brasil e com certeza é a maior contribuição mundial em combustíveis líquidos a partir da biomassa.

A utilização em larga escala do álcool combustível no Brasil nasceu como um Programa do Governo, dentro de uma estratégia para se buscar uma maior independência diante do petróleo importado. Para isso, o governo instituiu parceria com o setor privado e nesses moldes o programa se desenvolveu, tornando-se um sucesso social, ambiental e tecnológico. Com o álcool, o Brasil teve ótimas razões para respirar aliviado. Primeira: auto-suficiência em combustíveis. Segunda: o ar ficou menos poluído. Terceira: a geração de milhares de empregos. A crise momentânea de competitividade do álcool, face aos baixos preços internacionais do petróleo, pode ser contornada para que não se jogue fora um patrimônio da sociedade e que certamente ainda trará muitos dividendos aos países. Especialmente porque os preços relativos dos energéticos devem refletir não apenas os seus

custos privados de produção, mas também todos os custos e benefícios sociais e ambientais envolvidos em sua produção e uso (UDOP, 2006).

3.1.2. Histórico

O Brasil foi um dos países que mais investiu no setor de processos fermentativos alcoólicos nas últimas décadas. A cana de açúcar foi introduzida na região nordeste do Brasil no século XVII para quebrar o monopólio da França que produzia açúcar nas ilhas do Caribe, desde então tem sido importante a atividade agrícola no país. Mas o etanol derivado da cana-de-açúcar só passou a ser utilizado como combustível em 1903, quando o Primeiro Congresso Nacional de Aplicação Industrial de Álcool propôs uma infra-estrutura que promovia a produção e uso do álcool (MOREIRA e GOLDEMBERG, 1999). O objetivo era transformar o melaço, um sub-produto sem grande valor comercial, em outro produto com maior valor agregado, o etanol (ANDRIETTA, 1994).

Em 1930, na França, o processo de fermentação alcoólico foi melhorado passando a produção do etanol em regime batelada alimentada (processo MELLE-BOINOT), mas no Brasil, esse desenvolvimento só se deu no início dos anos 60, proporcionando um grande avanço tecnológico. E foi principalmente na década de 80, através de estudos de otimização, aumento de rendimento e produtividade, que o processo fermentativo no Brasil passou a merecer destaque (ANDRIETTA, 1994).

Com a crise do petróleo no início da década de 1970, o governo Federal decidiu encorajar a produção do álcool para substituir a gasolina com a idéia de reduzir a importação de petróleo. Foi promovido O Programa Nacional do Álcool (PROÁLCOOL), em 1975, que gerou aspectos positivos nas áreas ambiental, social e econômica, e tornou-se o mais importante programa de biomassa no mundo. Entre 1975 e 1985 a produção de cana-de-açúcar quadruplicou e o álcool tornou-se o combustível mais importante usado no país (MOREIRA e GOLDEMBERG, 1999). Programas similares foram então criados nos Estados Unidos, em 1978, e no Canadá (WHEALS *et al.*, 1999).

Apesar dos processos contínuos resultarem em maiores produtividades, sua implantação foi desestimulada pela resistência natural a inovações tecnológicas e a presença de alguns problemas técnicos de implantação das primeiras plantas contínuas,

devido a adaptações inadequadas de plantas semi-contínuas já existentes. Mas com o esgotamento da capacidade produtiva das plantas semi-contínuas existentes, houve a necessidade de se obter maior eficiência, então a implantação dos processos contínuos passou a ser mais intensa, gerando um salto tecnológico caracterizado pelo aumento da eficiência e produtividade das destilarias brasileiras (ANDRIETTA, 1994). Nos anos 90, o estudo da cinética de fermentação alcoólica em regime contínuo foi necessário para se projetar um processo contínuo, como mostra o trabalho de ANDRIETTA (1994), pois, além da necessidade do conhecimento da cinética para a correção das falhas no processo, esta é necessária também para se elaborar uma estratégia de controle eficiente para as unidades industriais de produção de etanol, visando sobretudo, maximizar a eficiência (ANDRIETTA, 1994).

O etanol é um excelente combustível, tem um índice de octanagem que excede a gasolina e uma pressão de vapor inferior, diminuindo emissões evaporativas. A inflamabilidade no ar é também muito menor que da gasolina, o que reduz o número e a severidade de fogo em veículos. O etanol anidro tem poder calorífico na faixa de $21,2 \times 10^6$ J/l e $23,4 \times 10^6$ J/l, em contraste com $30,1 \times 10^6$ J/l e $34,9 \times 10^6$ J/l da gasolina. Essas propriedades do etanol (como combustível) levaram ao desenvolvimento e modificações de motores para a mistura etanol-gasolina no Brasil. O uso de álcool como combustível no Brasil teve um sucesso extraordinário até 1990: em 1985 promoções de carros usando etanol puro representaram 96% do mercado e no final da década 4,5 milhões de automóveis foram vendidos. Até 1988, várias indústrias automobilísticas (GM, Ford, Volkswagen, Fiat) realizaram desenvolvimentos para sistemas carburados; atualmente, encontram-se disponíveis todos os motores e sistemas com injeção eletrônica (GOLDEMBERG e MOREIRA, 1999).

A energia cogenerada, uma prática comum no processo da indústria brasileira, é obtida da utilização dos resíduos, como o bagaço, que representa cerca de 40×10^6 toneladas de material seco que pode ser reutilizado. A produção do álcool está baseada na geração de grandes quantidades de resíduos sólidos, líquidos e gasosos. Portanto o custo da produção do álcool pode ser reduzido. Cerca de 280 Kg de bagaço são produzidos por tonelada de cana, que é equivalente a $2,1 \times 10^9$ J da energia por tonelada. Cerca de 90% de bagaço produz vapor (450 a 500 Kg de vapor pode ser gerados por 1 tonelada de cana) que pode ser usado para a cogeração de força elétrica e mecânica (MOREIRA e

GOLDEMBERG, 1999). A maioria das unidades de produção de álcool no Brasil é auto-suficiente na produção de vapor e energia elétrica para toda unidade. Os resíduos sólidos como as tortas dos filtros, bagacilhos, fuligem das caldeiras e o lodo do sistema de tratamento são incorporados ao solo melhorando a qualidade do solo e conseqüentemente aumentando a produção agrícola. A utilização dos resíduos sólidos junto com resíduos líquidos no solo pode reduzir a quantidade de fertilizantes químicos em algumas unidades (BARRERO, 2003).

As prioridades políticas direcionavam o que era desejável à indústria de etanol, quando essas prioridades mudaram, a produção da frota automotiva movida a álcool passou de cerca de 95% na década de 1980 (auge do Programa PROÁLCOOL) para menos de 5% em 1999. Inicialmente, o objetivo era tornar-se independente do mercado petrolífero e reduzir as importações de óleo; agora, a ênfase é dada a questões ambientais como redução da poluição, que está relacionada à diminuição de emissão de CO₂ comparado aos combustíveis fósseis e contribuição na diminuição dos efeitos de aumento da temperatura global (WHEALS *et al.*, 1999).

Muitos benefícios foram obtidos pela utilização do etanol combustível como: a criação de 700.000 empregos na área rural com custos de investimentos modestos, desenvolvimento de tecnologias de produção de cana-de-açúcar e seus processos de açúcar e etanol, demonstração a nível mundial de que um programa de combustível alternativo e renovável pudesse ser implementado em menos de 10 anos, significando um forte sistema econômico. O Programa Proálcool foi um meio eficiente de trocar débitos externos por subsídios nacionais, mas mesmo com as diversas vantagens do uso do etanol como combustível, para esse programa expandir terá que contar com: um aumento da demanda nacional ou a criação de um mercado internacional de combustível alternativo (MOREIRA e GOLDEMBERG, 1999).

Atualmente as perspectivas para o mercado do álcool são muito boas. A tecnologia dos veículos bi-combustíveis, que possibilita o abastecimento de álcool ou gasolina no mesmo tanque, além do crescente interesse pelo álcool no mercado externo, tendem a impulsionar o consumo nos mercados doméstico e internacional (Szklo *et al.*, 2005). Em maio de 2004 o álcool foi lançado como *commodity* na bolsa de valores de Nova Iorque. A expectativa é de que ao ser cotado na bolsa de Nova Iorque, o álcool possa vir a ter uma larga aceitação no mercado internacional, principalmente quando se leva em conta que leis

ambientais obrigam dezenas de países a adicionar índices que variam de 10% a 30% de álcool à gasolina. Segundo (UDOP, 2006), no ano de 2005 foram negociados na bolsa o equivalente a 285 milhões de dólares em álcool anidro, cerca de 800 milhões de litros.

Outro aspecto a ser considerado é o protocolo de Kyoto, documento elaborado há sete anos para reduzir a emissão dos gases que provocam o aquecimento e as mudanças do clima na terra. Com a adesão da Rússia em novembro de 2004, surge com força total o comércio de créditos de carbono, que está previsto no mecanismo de flexibilização do protocolo e permite que cada tonelada de gás carbônico que deixa de ser emitida por um país que não precisa reduzir suas emissões seja negociada no mercado mundial. O Brasil pode vir a ter uma grande oferta de créditos de carbono com diversos projetos, entre eles: projetos relacionados à produção e uso de biocombustíveis.

Apesar de ser lembrado como resposta do Brasil às crises do petróleo, o álcool anidro era usado desde os anos 30 como aditivo na gasolina brasileira. Instalou raízes com uma capacidade instalada de produção anual de 16 bilhões de litros/ano, o equivalente a 84 milhões de barris de petróleo/ano. Hoje, o Brasil produz 10,4 bilhões de litros/ano (cerca de 62% em SP). E vários países do mundo estão atentos ao filão de negócios e as vantagens ambientais representados pela biomassa energética, do qual o álcool representa a fatia mais testada e já aprovada como substituto limpo e renovável de energia derivada do petróleo (UDOP, 2006).

3.1.3. Incentivos ao estudo de Controle de Processos Fermentativos

Além do incentivo de expansão tanto no mercado interno e externo do uso do etanol (como combustível), muitos estudos têm investigado formas de manter o alto rendimento e aumentar a produtividade do processo através da otimização da produção de etanol.

A definição de estratégias e projeto do sistema de controle requer um conhecimento profundo do comportamento dinâmico do processo, o que pode ser conseguido através de simulações realizadas usando um modelo preciso, pois os processos biotecnológicos apresentam comportamento dinâmico complexo como, por exemplo,

resposta inversa, tempo morto, atraso nos instrumentos de medida, parâmetros que variam ao longo do tempo e fortes não linearidades (MELEIRO, 2000).

A utilização de microorganismos requer cuidados, pois esses são extremamente sensíveis às variações ambientais do seu meio fermentativo, tais como temperatura, concentração de substrato e produto, variação de pH, etc. É necessário manter o processo em condições ótimas de funcionamento, por isso o uso de modelagem, simulação e controle de processos vem crescendo cada dia mais na área de processos biotecnológicos.

No processo fermentativo industrial, duas variáveis extremamente importantes sofrem flutuações constantes: o microorganismo e a matéria-prima. O microorganismo, que compõe a população muda, pois o sistema é aberto, ou seja, além do inóculo estarão entrando células nativas e selvagens que podem ser varridas ou não, podendo ou não dominar o processo, dependendo das suas características e das características do meio. Cada microorganismo tem uma característica específica, ou seja, parâmetros cinéticos que descrevem seu metabolismo (K_S , $P_{MÁX}$, etc.). A qualidade da matéria-prima muda meio que sem controle, pois depende de variáveis externas como o clima, adubação, etc. (ANDRIETTA, 2005). O apêndice A mostra a composição da cana-de-açúcar e suas variações durante o ano.

O modo como a planta está operando também influencia muito o processo fermentativo, pois dependendo o que se está fabricando, mais açúcar ou mais álcool, a unidade de fermentação estará recebendo um mel mais ou menos esgotado. Menos esgotado significa maior pureza, mais ART em relação aos sólidos solúveis totais na solução. O esgotamento influencia o teor alcoólico e a pressão osmótica, além disso, compostos formados da decomposição de glicose e frutose nos cristalizadores e nas centrífugas provocada por altas temperaturas, podem ser tóxicos para levedura dependendo da quantidade presente no processo (ANDRIETTA, 2005).

A obtenção de rendimento satisfatório e manutenção das condições ótimas de processo provocou o direcionamento de vários trabalhos científicos para o estudo e aplicação de técnicas de controle avançado, que são capazes de modificar as condições operacionais ótimas de acordo com as mudanças operacionais, as quais promovem modificações na cinética de crescimento e adaptação dos microorganismos no meio de reação (DECHECHI, 1996).

O modelo que será desenvolvido neste trabalho tem como objetivo descrever um processo real no lugar dos modelos fenomenológicos existentes, já que estes têm sido capazes de descrever o processo apenas por curtos espaços de tempo. O tipo de modelagem híbrido neuronal usada para a descrição da cinética de bioprocessos possibilita a implementação de esquemas adaptativos de forma bastante simples.

3.2. Redes Neurais Artificiais

3.2.1. Introdução

O cérebro humano é considerado o mais fascinante processador baseado em carbono, sendo formado de bilhões de células nervosas intensamente conectadas entre si. Na tentativa de simular e entender a grande capacidade de processamento e armazenamento de informações dos sistemas biológicos surgiram as redes neurais artificiais.

Redes Neurais são técnicas computacionais que apresentam um modelo matemático inspirado na estrutura neuronal de organismos inteligentes e que adquirem conhecimento através da experiência. Uma grande Rede Neuronal Artificial pode ter centenas ou milhares de unidades de processamento.

Podem ser utilizadas na resolução de uma grande classe de problemas encontrados em várias áreas aplicadas: classificação, identificação, diagnóstico, análise de sinais e de imagens, otimização e controle. As redes neurais têm se mostrado de fácil implementação, robustas no tratamento de dados com ruído e eficientes, especialmente nos problemas em que não temos formulação analítica ou não temos um conhecimento explícito acessível ou os dados "estão contaminados" por ruído ou o próprio problema modifica-se com o tempo.

3.2.2. Histórico

As principais informações na área de redes neuronais iniciaram-se na década de 40. MC CULLOCH e PITTS (1943) descreveram um modelo simplificado do neurônio real que passou a representar a unidade básica das redes neuronais artificiais nos trabalhos desenvolvidos posteriormente. Mais tarde, HEBB (1949) propôs uma lei de aprendizagem específica para as sinapses dos neurônios, servindo de inspiração para muitos outros pesquisadores (HAIKIN, 2001).

ROSENBLATT (1958) criou o modelo neuronal *Perceptron* de uma única camada e introduziu o conceito de aprendizagem supervisionada em redes neuronais. Em 1960, WIDROW e HOFF introduziram o algoritmo do mínimo quadrado médio (LMS, Least Mean-Square) e o usaram para formular o Adeline (*adaptive linear element*, elemento linear adaptativo) (HAIKIN, 2001).

As técnicas de treinamento foram se aperfeiçoando, porém MINSKY e PAPPERT (1969) demonstraram as limitações do *perceptron* de uma única camada causando um grande desinteresse dos pesquisadores em redes neuronais. O surgimento, no início da década de 80, de algoritmos de aprendizado mais eficientes, como a descrição de HOPFIELD (1982) sobre redes neuronais recorrentes, provocou um ressurgimento do interesse pelas redes neuronais artificiais. Mas somente após a publicação do livro *Parallel Distributed Processing: Exploration in Microstructures of Cognition*, de RUMELHART e MC CLELLAND (1986), trabalhos importantes em diversas áreas foram desenvolvidos utilizando redes neuronais (HAIKIN, 2001).

3.2.3. Aplicações das redes

BHAT e McAVOY (1990) utilizaram uma rede *feedforward* para propor um algoritmo de controle da resposta dinâmica do pH em um CSTR, dando ênfase ao fato que redes com grande número de pesos tem uma forte tendência em “sobre ajustar” os pesos, tornando o desempenho da rede ruim para descrever dados que não foram utilizados no treinamento.

YDSTIE (1990) publicou uma análise da aplicação de redes neuronais em diversas técnicas de controle de processos.

THIBAUT *et al.* (1990) conseguiram prever variáveis de um bioprocessamento utilizando redes neuronais de estrutura *feedforward* na modelagem dinâmica, visando o controle de processos.

LINKO e ZHU (1991) utilizaram redes neuronais de estrutura *feedforward* para estudo da dinâmica de um bioprocessamento, obtendo estimativas precisas e de forma rápida, na presença ou ausência de ruído, mesmo sob a dinâmica variante do processo.

CLERAN *et al.* (1991) realizaram um estudo de identificação e previsão da taxa de produção de CO₂ durante uma fermentação alcoólica para produção de vinho, comparando o desempenho obtido pelo *Group Method of Data Handling* (GMDH) e as redes neuronais *feedforward*, obtendo em geral modelos mais precisos quando as redes neuronais foram utilizadas.

HOSKINS e HIMMELBLAU (1992) utilizaram uma rede neuronal para controlar um CSTR, comparando o seu desempenho com um controlador PID existente. Os autores concluíram que a implementação da rede neuronal para o processo de controle do processo apresenta resultados próximos ao do controlador PID, podendo, então, ser utilizada quando não se conhecem informações essenciais para a escolha do modelo do controlador, exemplo, na ausência de função objetivo.

CHEN e BILLINGS (1992) discutiram as vantagens e desvantagens de três diferentes arquiteturas de redes neuronais artificiais, *MultiLayer Perceptron* (MLP), do tipo *Radial Basis Function* (RBF) e a do tipo *Functional Link* (FLN), na identificação de sistemas não lineares. Todas estas arquiteturas de rede apresentam boa capacidade para representação de sistemas não lineares, e podem ser escolhidas de acordo com a obtenção de soluções adequadas a cada sistema.

SYU e TSAO (1993) demonstraram que redes neuronais do tipo *backpropagation* têm uma boa capacidade tanto de simulação quanto de previsão quando aplicadas à modelagem de condições iniciais de crescimento celular em um reator batelada.

IORDACHE *et al.* (1993) apresentaram uma nova estrutura de rede neuronal organizada como um modelo poliestocástico para a caracterização da cinética de um processo de fermentação alcoólica. Esta estrutura, quando comparada à estrutura

feedforward, tem como vantagem uma drástica diminuição do esforço experimental, além de apresentar flexibilidade sob condições reais, o que está relacionado mais ou menos à hierarquia durante a classificação de dados.

SAVKOVIC-STEVANOVIC (1994) estudou as redes neuronais para a descrição de produção industrial, aplicando métodos de treinamento *Poweel* e a regra delta generalizada em diferentes topologias de redes *feedforward*. Os métodos de treinamento apresentaram pouca diferença entre eles, e ainda foi verificado que o desempenho da rede melhora com a adição da camada interna na estrutura *feedforward*.

GLASSEY *et al.* (1994) utilizaram rede neuronal *feedforward* em um processo de fermentação industrial de produção de proteína recombinante para a predição de concentração de biomassa para diferentes taxas de alimentação, obtendo uma boa predição comparado aos valores experimentais. Os autores enfocam que a escolha de um conjunto de treinamento de forma a abranger toda a região na qual o modelo é válido é essencial para evitar problemas de interpolação e extrapolação.

ZHU *et al.* (1996) estudaram a utilização de redes neuronais multicamadas no monitoramento de consumo de substrato na produção de lisina em um processo de fermentação em batelada alimentada com *Brevibacterium flavum* em larga escala. Obtiveram um bom desempenho da rede, mas os autores enfocam que o sucesso depende da representatividade dos dados para o treinamento e validação.

SAXÉN e SAXÉN (1996) compararam o uso das redes neuronais *feedforward* e recorrente para descrição da cinética de um processo de fermentação em batelada por *Sacharomyces cerevisiae*, concluindo que ambas redes foram capazes de descrever o crescimento bifásico, mas a rede neuronal recorrente tem um melhor desempenho, já que é necessária uma capacidade dinâmica para modelar as fases “lag” que ocorrem quando células mudam seu metabolismo.

LINKO *et al.* (1997) demonstraram que redes neuronais bem treinadas podem ser aplicadas como *software sensors* para a estimação e predição de parâmetros chaves do processo em tempo real, tanto na produção do fungo glicoamilase quanto da lipase.

ACUÑA *et al.* (1998) estudaram redes neuronais na modelagem estática e dinâmica para estimar a concentração de biomassa *on-line* durante cultura em batelada conduzida a temperatura e pH controlados. Os modelos estáticos poderiam fornecer

estimações parciais diante dos valores iniciais de concentração de biomassa errados. Os modelos dinâmicos, entretanto, apesar de terem o desempenho parecido com os modelos estáticos, oferecem respostas mais estáveis devido a uma ação contínua vinda da metodologia de treinamento e método associado para estimação da biomassa.

HUSSAIN (1999) realizou uma revisão das aplicações de redes neuronais no controle de processos químicos, tais como: sensor de análise de dados, detecção de falhas e identificação de processos não lineares.

HENRIQUES *et al.* (1999) propuseram um modelo híbrido utilizando a rede neuronal *Functional Link* modificada para estimar a cinética do processo usando dados experimentais de fermentação em batelada e batelada alimentada.

SILVA *et al.* (1999) propuseram um novo algoritmo para determinar a estrutura do modelo na rede neuronal artificial. Os resultados indicaram que a técnica ortogonal dos mínimos quadrados é muito eficiente e determina precisamente parâmetros redundantes e insignificantes da rede.

MELEIRO e MACIEL FILHO (2000) utilizaram redes neuronais artificiais para desenvolver um controlador adaptativo multivariável para aplicação em processos biotecnológicos. Verificaram que *soft-sensors* baseados em redes neuronais artificiais e modelos híbridos são ferramentas computacionais confiáveis para sistemas de identificação *on-line* e podem ser usados como bons suportes para estratégias de controle adaptativo.

NAGATA e CHU (2003) utilizaram redes neuronais artificiais e algoritmos genéticos para modelar e otimizar um meio de fermentação de produção de enzima com *Agrobacterium radiobacter* obtendo um desempenho melhor que os modelos convencionais polinomiais quadráticos para os dados experimentais. Mostraram que a rede híbrida neuronal com algoritmo genético é uma alternativa viável para modelagem e otimização de processos fermentativos em substituição à técnica estatística de superfície de resposta.

PATNAIK (2003) utilizou um sistema integrado de rede híbrida neuronal para filtragem de ruídos, simulação e controle de um reator batelada alimentada de fermentação para obtenção de β -galactosidase produzida por *Escherichia coli* recombinada. Esse sistema permitiu uma maior robustez durante a operação na presença de perturbações e produziu concentrações mais uniformes.

3.2.4. Características Gerais

Redes neuronais são compostas por um conjunto de elementos conectados, unidades ou nós de processamento simples (PE), cuja funcionalidade é baseada no neurônio animal. A habilidade de processamento da rede está na memória armazenada nas conexões dessas unidades, nos pesos, obtida por um processo de aprendizagem a partir de padrões de treinamento (GURNEY, 1996).

3.2.4.1. O neurônio Artificial

Um neurônio é uma unidade de processamento de informação que é fundamental para a operação de uma rede neuronal (HAYKIN, 2001). É uma estrutura que procura simular a forma, o comportamento e as funções de um neurônio biológico. Assim sendo, os dendritos foram substituídos por sinais de entradas, cujas ligações com o corpo celular artificial são realizadas através de elementos chamados de peso (simulando as sinapses). Os estímulos captados pelas entradas são processados pela função de soma, e o limiar de disparo do neurônio biológico foi substituído pela função de transferência. Pode ser observado na figura 3.1.

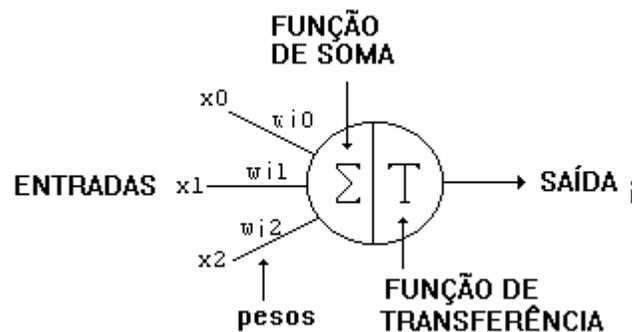


Figura 3.1: Elemento de Processamento de uma Rede Neuronal

3.2.4.2. A rede

Combinando diversos neurônios artificiais podemos formar o que é chamado de rede neuronal artificial. Os neurônios estão arranjados em camadas, como pode ser visto na figura 3.2. Segundo PHAM (1995), as camadas estão classificadas em três grupos:

Camada de entrada: onde os padrões são apresentados à rede;

Camadas intermediárias ou internas: onde é feita a maior parte do processamento, através das conexões ponderadas;

Camada de saída: o resultado final é concluído e apresentado.

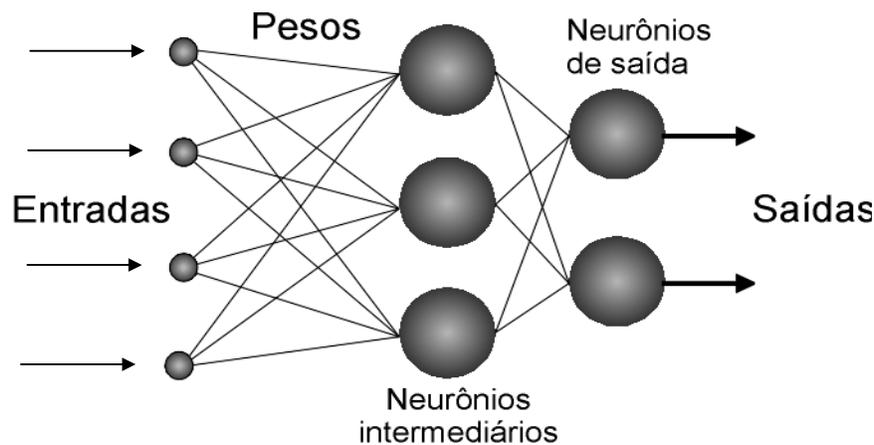


Figura 3.2: Estrutura de uma Rede Neuronal Artificial

As entradas, simulando uma área de captação de estímulos, podem ser conectadas em muitos neurônios, resultando, assim, em uma série de saídas, onde cada neurônio representa uma saída. Essas conexões, em comparação com o sistema biológico, representam o contato dos dendritos com outros neurônios, formando assim as sinapses. A função da conexão em si é transformar o sinal de saída de um neurônio em um sinal de entrada de outro, ou ainda, orientar o sinal de saída para o mundo externo (mundo real). As diferentes possibilidades de conexões entre as camadas de neurônios podem gerar n números de estruturas diferentes. Mais detalhes podem ser vistos em HAYKIN (2001).

3.2.4.3. Classificação de Redes Neurais Artificiais

Segundo GONTARSKI (2000), tentando estabelecer uma classificação dos tipos de redes neuronais existentes, leva-se em consideração duas características básicas:

- A forma como a informação flui pela rede.

Em algumas ela flui sempre em um sentido único, da entrada para a saída. Em outras a informação flui independente de sentido ou direção.

- A forma como os resultados são interpretados.

Quando a rede neuronal compara as suas respostas com uma desejada durante o seu treinamento, ou quando a rede neuronal por si própria estabelece a melhor forma de encontrar uma resposta.

Por causa de diferenças entre algumas ou às vezes todas as entidades envolvidas, diferentes estruturas de redes neuronais têm sido desenvolvidas por pesquisadores. Do ponto de vista estrutural, a arquitetura de redes neuronais pode ser classificada como estática, dinâmica ou *fuzzy*, e de única camada ou múltiplas. Além disso, diferenças computacionais surgem também quando se trata da maneira com que são feitas as conexões existentes entre os neurônios. Estas conexões podem ser estritamente no sentido de ida, no sentido de ida e volta, lateralmente conectadas, topologicamente ordenadas ou híbridas (GONTARSKI, 2000).

As redes denominadas *feedforward* têm suas informações avançadas em apenas uma direção, são bastante comuns por sua relativa simplicidade e estabilidade. As *Multilayer Perceptron* (MLP) são exemplos deste tipo (PHAM, 1995).

Aquelas redes onde as conexões permitem que as informações fluam em qualquer sentido são chamadas de recorrentes (*feedback*) (PHAM, 1995). Em geral, as redes deste tipo são capazes de representar sistemas mais complexos, mas isto pode ser às custas de complicações indesejáveis para o treinamento da rede (GONTARSKI, 2000).

A forma como são treinadas as redes também é uma característica usada em sua classificação. A rede neuronal pode ser treinada alimentando-a com dados de entrada e de saída desejados. Toda vez que for apresentada à rede uma entrada, deverá ser verificado se a saída obtida (gerada a partir dos cálculos efetuados a partir dos pesos que a rede possui)

confere com a saída desejada para aquela entrada. Sendo diferente, a rede deverá ajustar os pesos de forma que armazene o conhecimento desejado. Esta interatividade do treino deverá ser repetida com todo conjunto de treinamento (entradas e saídas), até que a taxa de acerto esteja dentro de uma faixa considerada satisfatória. Esta forma de treinamento é chamada de supervisionada, e é o caso das redes de retropropagação. Este algoritmo é baseado numa regra de aprendizagem que “corrige” o erro durante o treinamento (HAYKIN, 2001).

Em algumas redes não se fornece o resultado desejado, mas a ela é permitido organizar os dados numa forma que ela entenda estarem ajustados. A rede trabalha as entradas e se organiza de modo que acabem classificando-as, usando, para isso os seus próprios critérios. Esse tipo de rede utiliza os neurônios como classificadores, e os dados de entrada, como os elementos para classificação. O processo de classificação fica a encargo da rede neuronal e o seu algoritmo de aprendizado. A auto-organização demonstrada nessas redes neuronais, chamadas não-supervisionadas, envolve o processo de competição e o processo de cooperação entre os neurônios da rede. Algumas redes têm uma fase inicial auto-organizada seguida de uma fase supervisionada (GONTARSKI, 2000).

3.2.5. Multilayer Perceptron (MLP)

MLPs são talvez o tipo de rede *feedforward* mais conhecido (PHAM, 1995). Sua estrutura é uma extensão do *Perceptron* proposto por ROSENBLATT (1958), composta de várias camadas de EPs (Elementos Processadores), onde cada EP de uma camada antecedente geralmente se conecta com todos EPs de uma camada conseqüente, por isso é chamada de *Perceptron* Multicamadas ou *Multilayer Perceptron* (MLP).

A camada de entrada tem por objetivo transferir os estímulos apresentados aos EPs às camadas seguintes. O número de elementos dessa camada depende das características do problema. A camada de saída contém tantos EPs quantos forem necessários à modelagem do problema. A estrutura pode apresentar uma ou mais camadas intermediárias de EPs. O número de camadas intermediárias e a quantidade de EPs por camada depende da complexidade do problema que se deseja representar. Não há nenhuma regra confiável, que permita previamente determinar os parâmetros da(s) camada(s) intermediária(s). Eles são

ajustados no decorrer do treinamento e dependem muito da experiência do profissional que está implementando a RNA. TSAPTSINOS (1995) diz que a determinação do tamanho das camadas é muito importante e cita algumas orientações que podem ser seguidas.

Um elemento na rede *feedforward*, observado na figura 3.1, relaciona suas entradas (saídas do nó da camada anterior) e suas saídas de acordo com as seguintes operações:

$$y_i^{(K)} = f\left(\sum_{j=1}^{K-1} w_{ij}^{(K)} y_j^{(K-1)} + \theta_i^{(K)}\right) \quad (3.1)$$

Onde:

$y_i^{(K)}$ é o valor da camada de saída do i-ésimo neurônio na camada k;

$w_{ij}^{(K)}$ é o peso de conexão entre os nós, unindo o nó j da camada (k-1) com nó i da camada (k);

$y_j^{(K-1)}$ é a saída do nó j da camada anterior (k-1);

$\theta_i^{(K)}$ é o bias;

$f(\bullet)$ é a função que estabelece uma relação entre as entradas e a saída de cada neurônio, chamada de função de ativação do nó.

Segundo HAYKIN (2001), a função de ativação, denotada por $f(\bullet)$, define a saída de um neurônio de acordo com a sua entrada. A função sigmoideal é a mais empregada (HAYKIN, 2001). Um exemplo de função sigmoideal é a função logística definida como:

$$f(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}, \text{ varia num intervalo de } [0,1] \quad (3.2a)$$

Ou ainda, a função tangente hiperbólica definida como:

$$f(z) = \tanh(z) = \frac{1 - \exp(-2z)}{1 + \exp(-2z)}, \text{ varia } [-1,1] \quad (3.2b)$$

Outras funções de ativação também podem ser empregadas de acordo com o problema, mas estas devem ser diferenciáveis. Exemplos:

Linear:

$$f(z) = Az + B \quad (3.3)$$

Limite (*threshold*):

$$f(z) = \begin{cases} +1 & \text{se } z \geq 0 \\ 0 & \text{se } z < 0 \end{cases} \quad (3.4)$$

Gaussiana:

$$f(z) = \exp\left(\frac{-z^2}{\sigma^2}\right) \quad (3.5)$$

Função de base radial:

$$f(z) = \exp\left(\frac{-z^2}{\beta^2}\right) \quad (3.6)$$

3.2.6. O Treinamento

O algoritmo *Backpropagation* (BP), um algoritmo de gradiente descendente, é o algoritmo de treinamento mais utilizado para a MLP (PHAM, 1995). O treinamento utilizando o algoritmo *backpropagation*, também denominado Regra Delta Generalizada, é dividido em duas fases principais: uma fase de propagação do sinal funcional (*feedforward*) e uma de retro-propagação do erro (*backpropagation*). Primeiro, um padrão é apresentado à camada de entrada da rede. A atividade resultante flui através da rede, camada por camada, até que a resposta seja produzida pela camada de saída. A segunda etapa ocorre em sentido contrário. A saída obtida é comparada à saída desejada para esse padrão particular, ou seja, a resposta da rede em um instante de tempo é subtraída da saída desejada obtendo um sinal de erro. O erro é propagado a partir da camada de saída até a camada de entrada, e os pesos das conexões das unidades das camadas internas vão sendo modificados conforme o erro é retro-propagado. Os pesos são ajustados de forma que a distância entre a resposta da rede e a resposta desejada seja reduzida (SILVA, 1998).

Apesar do *backpropagation* ser o algoritmo mais utilizado nos mais variados tipos de problemas (PHAM, 1995), em diversas aplicações apresenta algumas dificuldades como: tempo de convergência longo, a não linearidade torna a estimação dos pesos difícil, regras de treinamentos não lineares, e outros. São necessárias muitas tentativas com diferentes estruturas e pesos aleatórios iniciais, e os resultados com a *backpropagation* dependem da sorte (WILAMOWSKI, 2003). Por isso, as pesquisas procuram obter maiores conhecimentos para explicar os comportamentos dessas redes e incentivam os pesquisadores a desenvolver redes *feedforward* mais confiáveis (WILAMOWSKI, 2003).

Uma estrutura obtida para evitar o treinamento não linear da rede é a do tipo *Functional Link* (PAO, 1989). Essa estrutura, através de uma expansão não linear das entradas da rede, combina os termos resultantes linearmente, obtendo uma boa aproximação não linear e ainda assim mantém a estimação dos pesos da rede como sendo um problema linear.

3.2.7. Rede Functional Link (FLN)

Uma rede neuronal do tipo *Functional Link* (PAO, 1989) tem uma estrutura similar a MLP com uma única camada interna. É formada por nós lineares usados dentro das camadas de entrada e emprega termos polinomiais ou trigonométricos na camada interna. O uso desse tipo de função dentro da camada interna tem sido feito para introduzir não linearidades dentro do algoritmo linear convencional, o que evita o treinamento não linear (BROWN e HARRIS, 1994).

Essas redes neuronais são algoritmos de aproximação universal; elas podem aproximar uma função não linear contínua dentro de uma precisão arbitrária, dado um número suficiente de nós na camada interna. Os termos polinomiais têm uma saída diferente de zero para o espaço de entrada total e são chamados funções base de generalização global. A aplicação com sucesso destas redes requer um conjunto de funções base que podem representar a função desejada adequadamente dentro do domínio das entradas, mas sem aumentar o número de parâmetros da rede. Modificações no peso ou introdução (ou remoção) de um novo termo dentro da camada interna afetam a saída da rede globalmente e, então, não fica claro como a estrutura deve ser escolhida ou que tipo de relação é armazenado dentro da rede. O sucesso da rede depende criticamente das representações armazenadas dentro dos nós da camada interna (BROWN e HARRIS, 1994).

COSTA *et al.* (2002) desenvolveram um controlador preditivo não linear para um processo de fermentação alcoólica extrativa usando redes do tipo *Functional Link* como modelo interno. Apresentaram bons resultados, pois com a estrutura *Functional Link* obtiveram uma boa aproximação não linear e ainda como vantagem a estimação dos pesos como um problema linear.

HARADA *et al.* (2002) desenvolveu um modelo híbrido neuronal para um processo de fermentação alcoólica extrativa comparando o desempenho de dois tipos de estruturas, *Functional Link* (FLN) e *feedforward*, para utilização do modelo na otimização e estudos de controle. Ambos os modelos apresentaram um bom desempenho na descrição da cinética do processo. A vantagem do uso de redes do tipo *Functional Link* é que a estimação dos seus pesos é um problema linear, logo o treinamento destas redes é rápido e

tem convergência garantida, o que facilita bastante a implementação de um esquema adaptativo.

A estrutura geral de uma FLN é mostrada na figura 3.3, onde \mathbf{x}_e é o vetor de entradas da rede e $y_i(\mathbf{x}_e)$ é uma das saídas. A camada interna faz uma expansão funcional das entradas da rede, transformando o espaço das entradas, de dimensão n_1 , num espaço de dimensão maior, M ($M > n_1$). A camada de saída consiste em m nós, sendo cada nó, de fato, um combinador linear. A relação entrada-saída da FLN é definida como:

$$y_i(\mathbf{x}_e) = \sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(\mathbf{x}_e), \quad 1 \leq i \leq m \quad (3.10)$$

Há várias maneiras de se fazer a expansão funcional. A mais fácil e mais usada é a expansão em polinômios. Neste caso, o resultado da expansão ($h_j(\mathbf{x}_e)$) é uma série de monômios de \mathbf{x}_e . Os monômios gerados para uma expansão polinomial de grau máximo igual a seis são mostrados na figura 3.4.

O número de monômios gerados pode ser calculado por:

$$M = \frac{(n_x + n_g)!}{n_x! n_g!} \quad (3.11)$$

onde: n_x = tamanho do vetor das entradas

n_g = grau dos monômios

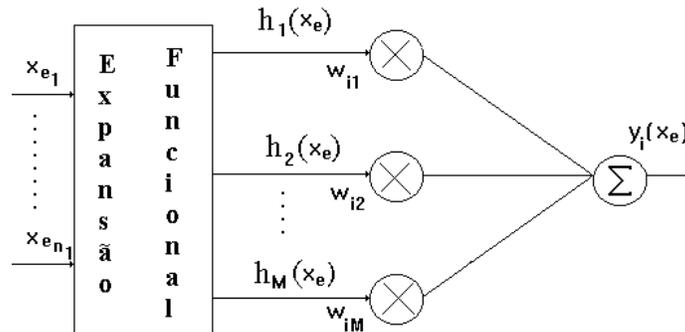


Figura 3.3: Estrutura de uma FLN (*Functional-Link Network*)

Grau	Monômios
0	1
1	x_i $i=1, n_x$
2	$x_i x_j$ $i=1, n_x; j=i, n_x$
3	$x_i x_j x_k$ $i=1, n_x; j=i, n_x; k=j, n_x$
4	$x_i x_j x_k x_l$ $i=1, n_x; j=i, n_x; k=j, n_x; l=k, n_x$
5	$x_i x_j x_k x_l x_m$ $i=1, n_x; j=i, n_x; k=j, n_x; l=k, n_x; m=l, n_x$
6	$x_i x_j x_k x_l x_m x_n$ $i=1, n_x; j=i, n_x; k=j, n_x; l=k, n_x; m=l, n_x; n=m, n_x$

Figura 3.4: Expansão Polinomial de grau seis

Entre as vantagens das FLNs sobre as redes *feedforward* está o fato de que a rede resultante é linear nos pesos, os quais podem ser estimados por métodos lineares e, logo, de convergência garantida.

HENRIQUE (1999) propôs uma modificação na estrutura das FLNs na qual a saída descrita pela equação 3.10 é transformada por uma função de ativação não linear inversível. A nova saída é:

$$y_i(\mathbf{x}_e) = f\left(\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(\mathbf{x}_e)\right) \quad (3.12)$$

Onde $f(\bullet)$ é uma função não linear inversível.

Esta modificação é feita com o objetivo de aumentar a capacidade de aproximação não linear das FLNs. Neste caso, o treinamento é feito usando-se uma saída transformada, que é igual à saída original da FLN transformada pela inversa da função de ativação f . Por

exemplo, se f é uma função logaritmo neperiano, a saída transformada que é usada para o treinamento é $\exp(y)$. Desta forma, a estimação dos pesos continua a ser linear (COSTA, 1998).

O desempenho da rede é medido por (MILTON e ARNOLD, 1990):

$$\text{cor} = \left(1 - \frac{\text{SEE}}{S\tau\tau}\right)100\% \quad (3.13)$$

Onde:

$$\text{SEE} = \sum_{k=1}^N (y_e(k) - y(k))^2 \quad (3.14)$$

$$S\tau\tau = \sum_{k=1}^N (y_e(k) - \overline{y_e})^2 \quad (3.15)$$

$y_e(k)$ é a saída experimental k , $y(k)$ é a saída da rede correspondente, $\overline{y_e}$ é o valor médio das saídas experimentais e N é o número de dados experimentais.

3.2.8. Modelo Híbrido

A dificuldade de entendimento no comportamento das redes neuronais artificiais em determinadas situações torna os modelos por elas gerados muitas vezes não muito confiáveis. Na tentativa de se obter modelos que representem melhor o processo em que este foi aplicado, passou-se a utilizar modelos híbridos. Estes modelos são baseados em princípios fundamentais do processo, como balanço de massa e energia, além das redes neuronais, o que os torna mais confiáveis.

PSICHOGIOS e UNGAR (1992) desenvolveram um modelo híbrido neuronal para simulação de um biorretor em batelada alimentada. A modelagem do processo foi desenvolvida utilizando modelos a partir de considerações físicas (balanço de massa e energia) e a rede neuronal, para modelar termos difíceis a partir de princípios básicos. Foi comparado o desempenho da rede híbrida com o resultado obtido com a da rede usada como “caixa-preta”, verificando resultados superiores deste novo modelo.

AZEVEDO *et al.* (1997) compararam métodos convencionais, várias topologias de redes neuronais artificiais e aproximação determinística com um modelo híbrido neuronal na produção de fermento biológico em um fermentador operando em batelada alimentada, obtendo como resultado um melhor desempenho do modelo híbrido neuronal em relação aos demais métodos testados.

COSTA *et al.* (1998) desenvolveram um modelo híbrido neuronal, utilizando rede do tipo *Functional Link* (FLN), para fermentação alcoólica em batelada alimentada e implementação de um controle ótimo adaptativo. Os resultados obtidos mostraram que o esquema adaptativo proposto obteve resultados próximos do ótimo mesmo na presença de erros de modelagem.

SHENE *et al.* (1999) desenvolveram um estudo comparativo do desempenho de uma rede neuronal do tipo “caixa preta” e o modelo híbrido para a predição das variáveis mais significativas da fermentação em batelada por *Zymomonas mobilis* CP4. Neste trabalho, a rede neuronal sozinha obteve melhor resultado comparado ao modelo híbrido.

COSTA *et al.* (1999) desenvolveram um modelo híbrido neuronal utilizando a rede neuronal *Functional link* (FLN) para a predição das taxas cinéticas na fermentação alcoólica. O modelo foi utilizado como estratégia de otimização para biorreatores que operam em batelada alimentada.

ZORZETTO *et al.* (2000) compararam diferentes estruturas de modelos neuronais, dois modelos caixa preta e dois modelos híbridos, para produção em batelada de cerveja. Utilizaram dados experimentais para avaliar o desempenho dos modelos “caixa preta” na predição das variáveis de processo. Eles concluíram uma maior capacidade de predição dos modelos híbridos, pois a rede descreve apenas a cinética, que é o comportamento pouco conhecido do processo.

RADKE (2002) estudou a modelagem híbrida para descrever a cinética do processo de produção de etanol usando redes neuronais *feedforward*. Foi comparado o desempenho dos modelos híbridos na descrição do processo, utilizando variáveis de estado e variáveis secundárias (pH, brix e turbidez), e modelos determinísticos. Foi obtido um resultado superior na descrição do processo dinâmico pelos dois modelos híbridos utilizados.

3.2.9. Atualização dos pesos da rede

No modelo híbrido proposto as taxas cinéticas são descritas por redes neuronais FLN, nas quais a estimação dos parâmetros é linear. Como a estimação destes parâmetros tem convergência garantida e não requer grande esforço computacional, torna-se simples propor um esquema de atualização, no qual os pesos são reestimados sempre que necessário (COSTA, 1998).

No esquema de atualização dos pesos proposto, a estrutura das redes neuronais é considerada definida durante a fase de treinamento. Durante a fase de treinamento, quanto maior o número de dados experimentais usados (o tamanho do conjunto de treinamento), melhor a rede obtida descreve o processo considerado (COSTA, 1998).

Na fase de atualização dos pesos, a estrutura determinada na etapa de treinamento é mantida e os pesos da rede são reestimados usando-se o estimador ortogonal de BILLINGS *et al.* (1989). Para isso, novos dados das variáveis de estado medidos são usados juntamente com alguns dos dados originais de treinamento (COSTA, 1998).

3.3. Conclusão

Devido a importância econômica da produção de álcool combustível e a necessidade de manter altos rendimentos e produtividade, estudos procuram alternativas viáveis para entender e melhorar o processo de fermentação alcoólica.

As redes neuronais são algumas dessas alternativas, pois podem ser utilizadas em várias áreas e têm se mostrado de fácil implementação. Modelos híbridos têm sido utilizados com o objetivo de obter modelos que melhor representem o processo no qual está sendo aplicado, porque utilizam princípios fundamentais, no caso balanço de massa e energia, e as redes neuronais que substituem a cinética do processo.

Apesar do vários tipos e configurações de redes, como apresentado neste capítulo 3, a rede neuronal artificial *Functional Link* foi utilizada neste trabalho porque apresenta algumas vantagens em relação às demais, apresentam uma boa aproximação não linear e estimação dos pesos linear.

4. DESCRIÇÃO DO PROCESSO FERMENTATIVO PARA PRODUÇÃO DE ETANOL

4.1. Introdução

A importância econômica na produção de álcool promove a necessidade de melhorar o desempenho dos processos fermentativos, onde condições ótimas de operação devem ser obtidas, necessitando assim de um conhecimento profundo da dinâmica do processo em estudo. Mas várias são as dificuldades para encontrá-las quando se trabalha diretamente com uma planta de fermentação durante sua operação industrial, as interrupções necessárias do processo durante etapas de teste geram altos custos. Por isso o desenvolvimento de modelos e controladores eficientes que mantenham o processo operando nas condições ótimas torna-se bastante importantes para melhorar o desempenho deste tipo de processo.

Apesar de modelos fenomenológicos eficientes, como o desenvolvido no trabalho de ATALA *et al.* (2001), proporcionarem bastante conhecimento sobre o processo de produção de etanol, mudanças acontecem normalmente em uma unidade industrial e a reestimação freqüente dos parâmetros do modelo é usualmente difícil e demorada. Uma maneira de se lidar com este problema é o uso de modelos híbridos neuronais.

O processo fermentativo em estudo existe em escala industrial, tendo sido projetado segundo os princípios descritos por ANDRIETTA (1994). Os parâmetros cinéticos do modelo descrito por LEE *et al.* (1983) foram determinados e validados experimentalmente por ANDRIETTA (1994) e ANDRIETTA e MAUGERI FILHO (1994). A modelagem matemática também utiliza os parâmetros de processo que levam a operação da planta a uma região ótima, previamente determinada e implementada na Usina Guarani, a qual será utilizada para o desenvolvimento da modelagem híbrida neuronal.

4.2. Descrição do Processo Fermentativo

O processo em estudo foi apresentado por ANDRIETTA (1994) e representa uma unidade em escala industrial. Inicialmente a unidade consistia de quatro reatores de mistura perfeita ligados em série com reciclo de células, passando mais tarde a ser constituída de cinco reatores bem agitados em série com volumes úteis de 423.000, 370.000, 366.000, 359.000, 333.000 litros, respectivamente. Cada reator possui um sistema externo de troca térmica cujo objetivo é manter a temperatura do meio reacional constante, já que a conversão da glicose em etanol é um processo exotérmico. A produção máxima da planta é de 320.000 litros de álcool anidro por dia.

Após o preparo da matéria-prima, o caldo extraído da cana-de-açúcar é tratado e enviado para a unidade de fermentação. O caldo tratado é um xarope açucarado rico em glicose denominado industrialmente como mosto, que é convertido em álcool pela levedura *Saccharomyces cerevisiae*. Juntamente com este mosto adiciona-se um reciclo de células de levedura que foram centrifugadas do vinho bruto e previamente submetidas a um tratamento ácido e de diluição. A saída do quinto reator, denominada vinho bruto (produto final do processo), contendo de 9% a 12% de álcool, passa por um processo de separação mecânica para separação de células por um conjunto de seis centrífugas de prato, que trabalham a uma velocidade angular de aproximadamente 8000 rpm. As centrífugas recebem o vinho bruto contendo 30 a 45g de células por litro de vinho e fornecem dois produtos: uma fase leve e outra pesada. A fase pesada, com concentração entre 160 e 200 g de células por litro, é enviada para a unidade de tratamento ácido constituída por três tanques de 20.000 litros ligados entre si em série, na forma de creme. O creme é diluído com água na proporção de 1:1 e o pH é ajustado a uma faixa de 2,0 a 2,5 adicionando-se ácido sulfúrico concentrado. E essas células tratadas são misturadas em linha com o meio de alimentação e enviadas para o reator 1. A outra fase, leve, também chamada de vinho de levedurado, ou simplesmente de vinho, e geralmente contendo de 9 a 12 % de álcool e no máximo 3 g/l de células, é enviada ao processo de destilação para ser separada da água. O material em fermentação flui do primeiro reator até o quinto, onde o vinho é enviado para a centrífuga completando o ciclo.

O vinho isento de células de levedura que deixa as separadoras centrífugas é enviado para o tanque pulmão dos aparelhos de destilação. O desenho esquemático do processo é mostrado na figura 4.1.

O processo fermentativo desta unidade possui um sistema de monitoramento e controle baseado em uma unidade supervisora (Software Wiscon), acoplado a um CLP (Controlador Lógico Programável). O sistema de controle da planta possui as seguintes malhas: Controle de vazão de substrato, controle de taxa de reciclo, controle de nível dos reatores 1, 2, 3, 4 e 5, controle de concentração de substrato na alimentação, controle de temperatura dos reatores 1, 2, 3, 4 e 5. Além das malhas de controle, é possível obter informações sobre as vazões de meio de alimentação, reciclo e vinho fermentado, temperatura de todos os reatores, temperatura de alimentação do primeiro reator e volume de todos os reatores. Mas, na simulação do processo, essas informações são consideradas constantes, ou seja, sem a presença de controladores no processo.

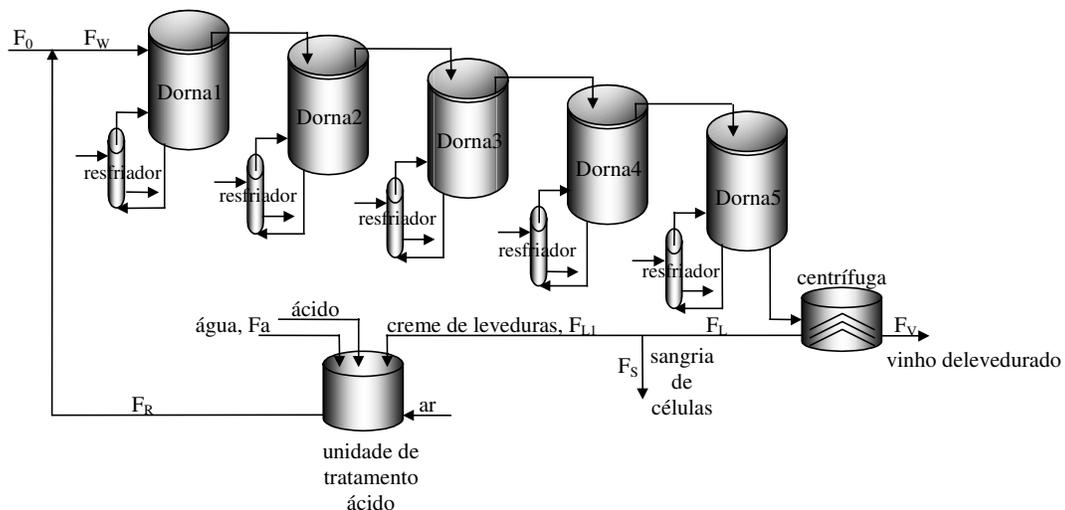


Figura 4.1: Desenho esquemático do processo fermentativo contínuo para produção de etanol proposto por ANDRIETTA (1994)

4.3. Variáveis de Processo

As variáveis definidas representam uma condição real de um processo fermentativo de produção operando em regime contínuo e em escala industrial.

A tabela 4.1 mostra os valores operacionais das variáveis de maior importância do processo. Essas variáveis são:

Tabela 4.1: Descrições e valores das principais variáveis de processo

Variável	Descrições e Valores
S_0	Concentração de açúcares redutores totais (ART) no meio de alimentação: a concentração de ART deve ser tal que não prejudique a fermentação nem a destilação. Geralmente deve estar em torno de 180g.l ⁻¹ .
RR	Taxa de reciclo: definida como a razão entre a vazão do creme de levedura tratado e a vazão total de alimentação do fermentador. O valor utilizado normalmente pela indústria é de 0,3. Quando o valor está muito acima deste, a dinâmica do sistema é perturbada demais.
X_r	Concentração de células no reciclo: está diretamente ligada ao desempenho das unidades separadoras e da quantidade de água adicionada a cuba de tratamento. É fixada em 90g.l ⁻¹ na maioria das unidades industriais.
X_L	Concentração de células no creme de levedura: a concentração de células no creme de levedura deve ser 180g.l ⁻¹ para que se possa manter a concentração de células no reciclo de 90g.l ⁻¹ e a quantidade de água adequada no tratamento ácido.
X_v	Concentração de células no vinho de levedurado: as condições de operação das centrífugas para a separação da fase leve e fase pesada deve ser aceitável até uma concentração de 3 g.l ⁻¹ .
T	Temperatura de operação: a temperatura é estabelecida de maneira que o processo gere um custo mínimo na combinação da área de troca térmica do trocador para o resfriamento e o volume de conversão do reator. Foi estabelecido de 33,5°C.
T_{Je}	Temperatura da água de resfriamento: Este valor depende da temperatura da água onde esta será captada (geralmente rios e lagoas). O valor médio no estado de São Paulo é de 28°C.

O estudo do comportamento dinâmico deste processo quando sujeito a testes degrau nas principais variáveis manipuláveis e perturbações foi realizado em trabalhos anteriores (ANDRIETTA, 1994; DECHECHI, 1996; GOUVEIA, 2000).

4.4. Modelagem Matemática

As equações do modelo matemático determinístico que representam o processo foram desenvolvidas por ANDRIETTA (1994) baseado em balanços de massa e energia. A modelagem desse tipo de processo é complexa, pois necessita de um modelo cinético adequado e seus parâmetros devem ser confiáveis. O modelo cinético utilizado foi descrito por LEE *et al.* (1983) e seus parâmetros foram obtidos por ANDRIETTA (1994). Este tipo de modelo cinético é do tipo não estruturado e não segregado, sendo este um dos tipos mais simples aplicados em bioengenharia, o qual tem como vantagem a obtenção de parâmetros mais precisos utilizando ensaios simples (ANDRIETTA, 1994).

Os reatores são considerados como tanques perfeitamente agitados, a retenção gasosa (*hold-up*) é desprezada no balanço de massa, pois esta na prática é bastante baixa. E o volume das células também é considerado desprezível, já que representa cerca de 10% do volume total de mosto.

4.4.1. Modelo e Parâmetros Cinéticos

A transformação dos açúcares redutores totais (glicose e frutose) em etanol envolve um grande número de reações enzimáticas e a descrição completa deste modelo cinético geraria muitos parâmetros, tornando o modelo complexo e inviável para aplicações industriais, pois para aplicação industrial, o modelo deve ser simples, com poucos parâmetros para o ajuste e deve descrever o processo com precisão. Além disso, modelos com grande complexidade são pouco utilizáveis para o controle do processo, pois o tempo computacional inviabiliza sua aplicação em tempo real. Por isso a utilização de um modelo não estruturado e não segregado é uma boa opção para esse tipo de processo.

O modelo proposto por LEE *et al.* (1983) foi utilizado neste trabalho, este modelo é derivado do modelo de “*Monod*” aplicável a processos contínuos de fermentação alcoólica em estado estacionário considerando apenas um substrato, a concentração de ART (ANDRIETTA, 2005). Ou quando a dinâmica é lenta, que é o que acontece normalmente nos processos fermentativos em escala industrial, como é o caso do processo apresentado por ANDRIETTA (1994). Este modelo é válido para uma variação de 10% até 15% de volume de levedura em relação ao volume total (ANDRIETTA, 2005).

$$\mu = \mu_{MÁX} \frac{S}{K_S + S} \left(1 - \frac{P}{P_{MÁX}}\right)^N \left(1 - \frac{X}{X_{MÁX}}\right)^M \quad (4.1)$$

A velocidade máxima de crescimento $\mu_{MÁX}$ é afetada pela temperatura, sendo definida pela equação de *Arrhenius*:

$$\mu_{MÁX} = A e^{\frac{-E}{RT}} \quad (4.2)$$

E $P_{MÁX}$, abaixo de uma temperatura crítica de 32°C, segundo ANDRIETTA (1994), é um valor constante, mas acima desta temperatura seu valor decresce exponencialmente segundo a equação 4.3.

$$P_{MÁX} = K_0 e^{aT} \quad (4.3)$$

Os parâmetros cinéticos e as constantes utilizadas nas equações mostradas acima estão presentes nas tabelas 4.2 e 4.3. Estes valores foram extraídos do trabalho de ANDRIETTA (1994) o qual fornece as informações sobre a obtenção.

Não é preciso considerar a taxa de morte no modelo cinético porque a sangria e o reciclo mantêm a idade das células no processo entre 7 e 10 dias, sendo consideradas

células jovens. São consideradas células velhas aquelas com idade acima de 10 dias, havendo maior probabilidade de morte. A viabilidade celular é mantida no processo em torno de 70%, ou seja, considera-se que 70% das células estão vivas e 30% mortas. A presença da sangria e do reciclo mantêm um estado estacionário. A taxa de morte é igual à taxa de reposição celular, não havendo acúmulo no processo, nem de células vivas nem de células mortas. A massa celular viva é mantida (ANDRIETTA, 2005).

Tabela 4.2: Valores dos parâmetros cinéticos para temperatura de 32°C (ANDRIETTA, 1994)

<i>Parâmetro</i>	<i>Valor</i>
$\mu_{MÁX}$	0,41 L/h
$P_{MÁX}$	103 g.L ⁻¹ (T ≤ 32°C)
$X_{MÁX}$	100 g.L ⁻¹
n	3,0
m	0,9
K_S	1,6
$Y_{P/S}$	0,445
$Y_{X/S}$	0,033

Tabela 4.3: Valores das constantes no processo (ANDRIETTA, 1994)

<i>Constante</i>	<i>Valor</i>
E	1,54 x 10 ⁴ cal.Kmol ⁻¹
A	4,5 x 10 ¹⁰
R	1,987 cal.Kmol ⁻¹
K_0	895,6 g.L ⁻¹
a	-0,0676 °C ⁻¹

4.4.2. Equações de Balanço de Massa

As equações que descrevem o comportamento dinâmico do sistema apresentado na figura 3.1 seguem os procedimentos de balanço material, considerando os reatores como reatores contínuos e perfeitamente agitados (CSTR). A fase gasosa e o volume preenchido pelas células foram desprezados no balanço de massa (ANDRIETTA, 1994). E ainda ANDRIETTA (1994) engloba no balanço de massa celular de células vivas e mortas, ou seja, não se considera a taxa de morte celular, desprezando as células incapazes de crescer e se reproduzir.

- **Balanço global para o reator i**

$$\frac{d(\rho_i V_i)}{dt} = F_{i-1} \rho_{i-1} - F_i \rho_i \quad (4.14a)$$

A densidade (ρ_i) é considerada constante em cada reator.

$$\frac{d(V_i)}{dt} = \frac{F_{i-1} \rho_{i-1} - F_i}{\rho_i} \quad (4.14b)$$

- **Balanço do Substrato no reator i**

$$\frac{d(S_i V_i)}{dt} = F_{i-1} S_{i-1} - F_i S_i - V_i X_i \frac{1}{Y_{X/S}} \mu_i \quad (4.15)$$

- **Balanço do Produto no reator i**

$$\frac{d(P_i V_i)}{dt} = F_{i-1} P_{i-1} - F_i P_i + V_i X_i \frac{Y_{P/S}}{Y_{X/S}} \mu_i \quad (4.16)$$

- **Balço de Células no reator i**

$$\frac{d(X_i V_i)}{dt} = F_{i-1} X_{i-1} - F_i X_i + V_i X_i \mu_i \quad (4.17)$$

4.4.3. Equações de Balço de Energia

No processo em estudo, figura 4.1, em cada fermentador um trocador de calor está acoplado externamente mantendo a temperatura do fermentador nas condições ótimas pré-determinadas.

- **Fluido reagente no reator i**

O balço de energia para o fluido reagente é dado por:

$$\frac{\rho_i C_{p_i} d(V_i T_i)}{dt} = F_{i-1} T_{i-1} \rho_i C_{p_i} - F_i T_i \rho_i C_{p_i} + F_{c_i} (T_{c_i} - T_i) \rho_i C_{p_i} + V_i \Delta H r_s \quad (4.18a)$$

Rearranjando tem-se:

$$\frac{d(V_i T_i)}{dt} = F_{i-1} T_{i-1} - F_i T_i + F_{c_i} (T_{c_i} - T_i) + \frac{V_i \Delta H X_i}{\rho_i C_{p_i} Y_{x/s}} \mu_i \quad (4.18b)$$

- **Fluido reagente no trocador de calor i**

$$\frac{\rho_i C_{p_i} d(V_{c_i} T_{c_i})}{dt} = F_{c_i} (T_i - T_{c_i}) \rho_i C_{p_i} - U A_i L M D T_i \quad (4.19a)$$

Considerando V_{c_i} constante:

$$\frac{d(T_{c_i})}{dt} = F_{c_i} (T_i - T_{c_i}) \rho_i C_{p_i} - \left(\frac{U A_i}{V_{c_i} \rho_i C_{p_i}} \right) L M D T_i \quad (4.19b)$$

Onde $LMDT_i$ é a média logarítmica de temperatura do trocador de calor i , definida como:

$$LMDT_i = \frac{(T_i - TJ_i) - (Tc_i - TJe)}{\ln\left(\frac{(T_i - TJ_i)}{(Tc_i - TJe)}\right)} \quad (4.20)$$

• **Fluido de resfriamento no trocador de calor i**

$$\frac{\rho_j C_{p_j} d(VJ_i TJ_i)}{dt} = FJ_i (TJe - TJ_i) \rho_j C_{p_j} + UA_i LMDT_i \quad (4.21a)$$

VJ_i é considerado constante, então:

$$\frac{d(TJ_i)}{dt} = \frac{FJ_i}{VJ_i} (TJe - TJ_i) + \left(\frac{UA_i}{VJ_i \rho_j C_{p_j}} \right) LMDT_i \quad (4.21b)$$

O cálculo das vazões de fluido reagente e de resfriamento nos trocadores de calor foi feito para cada reator com o objetivo de minimizar a área de troca térmica e conseqüentemente minimizar os custos de investimentos e operacionais. Para isso as vazões de fluido refrigerante e de fluido reagente foram consideradas iguais em cada estágio como condição do projeto, baseado que o meio reacional é bem diluído aproximando-se de uma solução aquosa (ANDRIETTA, 1994). A tabela 4.4 mostra os valores destas variáveis para cada reator, que foram obtidos diretamente da unidade industrial.

Tabela 4.4: Parâmetros de projeto

Reator	$A_i (m^2)$	$V (m^3)$	$Fc (m^3 \cdot h^{-1})$	$FJ (m^3 \cdot h^{-1})$	$Vc (m^3)$	$VJ (m^3)$
1	76,361	433	400	400	20	20
2	63,242	370	350	350	20	20
3	31,061	366	180	180	20	20
4	6,809	359	60	60	20	20
5	2,869	333	28	30	20	20

4.4.4. Balanço de Massa Aplicado ao Sistema

Observando a figura 4.1, que representa o processo em estudo, observa-se que as correntes de alimentação e de reciclo se juntam para formar a corrente de alimentação do processo. As operações envolvidas no reciclo (centrifugação, purga, diluição e mistura) são significativamente mais rápidas do que a dinâmica do processo fermentativo, sendo esses comportamentos dinâmicos desprezados. Também se considera que as concentrações de substrato e de etanol permanecem constantes e iguais aos seus respectivos valores na saída do último reator depois de passar pela centrífuga. Com isso o equacionamento pode ser descrito por balanços estacionários (ANDRIETTA, 1994). Desprezando as variações de densidade ao longo do processo e aplicando o balanço de massa em partes do sistema dado pela figura 4.1, obtêm-se as seguintes equações:

$$F_w = \frac{F_0}{(1 - RR)} \quad (4.22)$$

$$F_R = F_w - F_0 \quad (4.23)$$

Considerando que através de uma manipulação da vazão de água, F_a , mantém-se a concentração de células constante no reciclo, o balanço no tanque de diluição é dado:

$$F_{L1} = \frac{F_R X_R}{X_L} \quad (4.24)$$

$$F_a = F_R - F_{L1} \quad (4.25)$$

$$S_R = \frac{F_{L1} S_5}{F_R} \quad (4.26)$$

$$P_R = \frac{F_{L1} P_5}{F_R} \quad (4.27)$$

O balanço de massa na centrífuga fornece as seguintes equações:

$$F_V = F_W \frac{X_L - X_5}{X_L - X_V} \quad (4.28)$$

$$F_L = F_W - F_V \quad (4.29)$$

No ponto de purga obtêm-se que:

$$F_S = F_L - F_{L1} \quad (4.30)$$

E o ponto de mistura das vazões de mosto e de reciclo fornece as concentrações da corrente da alimentação do primeiro reator:

$$S_W = \frac{F_R S_R + F_0 S_0}{F_W} \quad (4.31)$$

$$P_W = \frac{F_R P_R}{F_W} \quad (4.32)$$

$$X_W = \frac{F_R X_R}{F_W} \quad (4.33)$$

Os controladores presentes no processo real não são considerados para a simulação do processo. As variáveis como: vazão de alimentação, taxa de reciclo e volume dos fermentadores são consideradas constantes para este estudo.

4.4.5. Rendimento e Produtividade

O rendimento e a produtividade de etanol são variáveis indiretas do processo bastante importantes para a análise. As equações que obtêm o rendimento e produtividade do processo se apresentam abaixo:

$$REN = \frac{F_V P_5}{F_0 S_0} \frac{100}{0,511} \quad (4.33)$$

$$PROD = \frac{F_V P_5}{V} \quad (4.34)$$

As equações obtidas no balanço de massa e energia do processo compõem o modelo matemático que descreve o processo. O modelo é formado por equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, estas foram resolvidas pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem utilizando o estado estacionário como referência para obter as condições iniciais do processo. A vazão de alimentação de mosto utilizada foi de $F_0 = 100 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$.

Outros parâmetros necessários para a integração das equações estão presentes na tabela 4.5 (ANDRIETTA,1994).

Tabela 4.5: Parâmetros do modelo fenomenológico.

<i>Parâmetros</i>	<i>Valores</i>
ΔH	-155,57 Kcal.h ⁻¹
ρ	950 Kg.m ⁻³
C_p	1 Kcal.Kg ⁻¹ .°C ⁻¹
U	3500 Kcal.h ⁻¹ .°C ⁻¹ .m ⁻²
ρ_j	1000 Kg.m ⁻³
C_{p_j}	1 Kcal.Kg ⁻¹ .°C ⁻¹

4.5. Conclusão

A modelagem matemática do processo em estudo, desenvolvida por ANDRIETTA (1994), baseada em balanços de massa e energia, é considerada complexa. É utilizado um modelo cinético adequado do tipo não estruturado e não segregado, descrito por LEE *et al.* (1983), e parâmetros confiáveis obtidos por ANDRIETTA (1994). As equações cinéticas e as equações diferenciais exigiram procedimentos específicos para obtenção de informações

quanto ao projeto de sistema (dimensionamento), definição de operação e definição das condições operacionais. As variáveis definidas representam uma condição real de um processo fermentativo de produção operando em regime contínuo e em escala industrial. Por isso, apesar das simplificações utilizadas na modelagem, este se mostra adequado ao processo em estudo.

A modelagem matemática permitiu avaliar as variáveis do processo, como mostrado por GOUVÊIA (2000), e toda a dinâmica em malha aberta, como feito por DECHECHI (1996), que mostrou ser muito complexa. Assim a avaliação desses estudos auxiliou a modelagem híbrida neuronal que será apresentada neste trabalho.

5. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

5.1. Introdução

A influência dos parâmetros dos modelos nas variáveis de processo é um dado muito importante para otimização do processo e também, como neste caso, para se avaliar onde implementar a rede neuronal no processo.

A utilização do planejamento fatorial é uma análise comum em processos biotecnológicos, principalmente para a otimização das condições de cultura como no trabalho de CHEN (1996), entre vários outros. Dados otimizados são bastante procurados para a utilização em escala industrial, pois os processos biotecnológicos apresentam muitas variáveis e/ou parâmetros que influenciam fortemente o processo e na maior parte das vezes não se sabe a priori a relação completa de todas as variáveis e/ou parâmetros que afetam significativamente o processo, por isso a necessidade de se estudar o maior número possível de variáveis e/ou parâmetros. No caso em estudo, foi avaliada a influência dos parâmetros pertencentes à cinética de LEE *et al.* (1983) nas variáveis de processo por simulação computacional. Os parâmetros analisados são: $\mu_{Máx}$, K_S , $P_{Máx}$, $X_{Máx}$, N , M , $Y_{P/S}$ e $Y_{X/S}$. As variáveis de processo foram concentração de microrganismo (X), substrato (S) e produto (P) para os cinco reatores em série do processo.

Devido ao grande número de parâmetros envolvidos foi usado na análise o planejamento fatorial fracionário de modo a diminuir o número de simulações já que este planejamento é suficiente para obter-se a informação desejada para este tipo de estudo.

5.2. Processo de Fermentação Alcoólica

O processo de produção de etanol considerado, existente em escala industrial, foi desenvolvido por ANDRIETTA e MAUGERI (1994), opera em regime contínuo e consiste em cinco fermentadores ligados em série com reciclo de microrganismo. Este processo foi implementado na destilaria Guarani (SP/Brasil).

As variáveis de entrada usadas na simulação do processo estão na tabela 5.1:

Tabela 5.1: Variáveis de entrada do Processo de produção de Etanol.

<i>Variáveis</i>	<i>Valores</i>
T	33,5 °C
F_0	100 l.h ⁻¹
RR	0,3
S_0	180 g.l ⁻¹
X_R	90 g.l ⁻¹
X_L	180 g.l ⁻¹
X_V	3,0 g.l ⁻¹
V_1	423 m ³
V_2	370 m ³
V_3	366 m ³
V_4	359 m ³
V_5	333 m ³

5.3. Planejamento Fatorial Fracionário

Foi feito um planejamento de experimentos para determinar quais os parâmetros cinéticos que têm maior influência nas variáveis de saída do modelo: concentração de biomassa, ART e etanol. A utilização de um planejamento fatorial completo muitas vezes não se faz necessária porque na maioria dos casos as interações têm valores pequenos. Os efeitos principais (1ª ordem) tendem a ser maiores que as interações de dois fatores (2ª ordem), que por sua vez são mais importantes que as interações de três fatores, e assim por diante. Essa tendência se acentua para efeitos de ordem maior tornando esses efeitos não significativos, além de que quando o número de parâmetros é grande aumentam as chances de que um ou mais deles não afetem significativamente a resposta (BARROS *et al.*, 1996). Por isso se optou por fazer um planejamento fatorial fracionário para este estudo do processo.

A influência de oito parâmetros foi analisada, $\mu_{MÁX}$, K_s , $P_{MÁX}$, $X_{MÁX}$, N , M , $Y_{P/S}$ e $Y_{X/S}$, os quais estão presentes nas equações mostradas anteriormente. A análise desses parâmetros foi feita em relação à sua influência nas variáveis de processo: concentração de microrganismo (X), substrato (S) e produto (P) para os cinco reatores em série do processo. Cada parâmetro independente foi analisado em dois níveis, um nível superior (+) e um inferior (-), cuja variação é de +10% para o nível superior e -10% para o nível inferior com relação aos valores utilizados por ANDRIETTA (1994). A variação do rendimento teórico de etanol em relação ao substrato ($Y_{P/S}$) variou no nível máximo e mínimo de acordo com o rendimento real obtido na indústria. O rendimento segundo ANDRIETTA (2005) varia de 87% a 92%, sendo assim o nível superior (+) será de 0,470 e o nível inferior (-) 0,445. Rendimento acima de 92% não é possível, pois parte da glicose é convertida em outros metabólicos ou é usada para o crescimento e manutenção celular, e rendimento abaixo de 87% é considerado inviável. E o rendimento teórico em biomassa ($Y_{X/S}$) não tem uma grande variação, sendo 10% uma variação alta, segundo ANDRIETTA (2005), por isso será considerada uma variação de apenas de 5% ao nível superior e inferior.

Os valores reais dos níveis para cada parâmetro podem ser visto na tabela 5.2.

Tabela 5.2: Níveis de análise para cada parâmetro

	$\mu_{MÁX}$	K_s	$P_{MÁX}$	$X_{MÁX}$	N	M	$Y_{P/S}$	$Y_{X/S}$
Nível (-1)	0,369	1,44	92,7	90	2,7	0,81	0,445	0,031
Nível (+1)	0,451	1,76	113,3	110	3,3	0,99	0,470	0,035

O planejamento fatorial fracionário em dois níveis escolhido foi de 2^{8-3}_V , o qual gera 32 ensaios mais o ponto central, resultando em 33 ensaios (simulações). O software Estatística 5.0 foi usado para gerar a matriz, tabela 5.3, do planejamento fracionário e na análise dos resultados.

Os resultados de cada corrida foram obtidos pela simulação do processo em estudo em um programa feito no software Fortran 6.0, os resultados podem ser visto na tabela 5.4.

Tabela 5.3: Matriz do planejamento fatorial fracionário 2_{V}^{8-3}

Corridas	$\mu_{Máx}$	Ks	P _{MAX}	X _{MAX}	N	M	Y _{PS}	Y _{X/S}
1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	-1	1	1	-1
3	1	1	1	-1	1	1	-1	-1
4	1	1	1	-1	-1	1	-1	1
5	1	1	-1	1	1	-1	1	-1
6	1	1	-1	1	-1	-1	1	1
7	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
8	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
9	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1
10	1	-1	1	1	-1	-1	-1	1
11	1	-1	1	-1	1	-1	1	1
12	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1
13	1	-1	-1	1	1	1	-1	1
14	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1
15	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
16	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
17	-1	1	1	1	1	-1	-1	1
18	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
19	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1
20	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1
21	-1	1	-1	1	1	1	-1	-1
22	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
23	-1	1	-1	-1	1	1	1	1
24	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1
25	-1	-1	1	1	1	1	1	-1
26	-1	-1	1	1	-1	1	1	1
27	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1
28	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1
29	-1	-1	-1	1	1	-1	1	1
30	-1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1
31	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1
32	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1
33	0	0	0	0	0	0	0	0

5.4. Análise dos Resultados

Os resultados foram analisados utilizando como ferramenta o software Estatística 5.0 que forneceu os efeitos estatisticamente significativos de cada parâmetro em relação a cada variável do processo para um nível de confiança de 95%. Podemos observar os resultados obtidos nas tabelas 5.5 a 5.20. Os parâmetros cujas linhas têm o fundo mais escuro são estatisticamente não-significativos.

Tabela 5.5: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X1

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	29,69992	0,004829	6150,796	0	29,68995	29,70989
μ_{MAX}	0,15364	0,009807	15,6664	4,2E-14	0,1334	0,173881
KS	-0,00507	0,009807	-0,51668	0,610106	-0,02531	0,015174
P_{MAX}	7,89E-05	0,009807	0,008047	0,993646	-0,02016	0,02032
X_{MAX}	0,070674	0,009807	7,206459	1,9E-07	0,050433	0,090914
N	-0,32732	0,009807	-33,3762	1,26E-21	-0,34756	-0,30708
M	0,085198	0,009807	8,687514	7,12E-09	0,064958	0,105439
Y_{PS}	-0,12833	0,009807	-13,086	2,04E-12	-0,14858	-0,10809
Y_{XS}	0,238589	0,009807	24,32846	2,01E-18	0,218348	0,25883

^a valor do coeficiente de regressão pelo erro, mede o quão grande é o efeito com relação ao erro padrão ou resíduo.

^b probabilidade de significância. Se o nível de confiança é de 95% p pode ter seu valor máximo de 0,05 = 5% para que o resultado seja significante.

^c limites de confiança = efeito ou parâmetro

Tabela 5.6: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S1

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	44,2112	0,127044	347,9983	0	43,949	44,47341
μ_{MAX}	-4,74297	0,258028	-18,3816	1,2E-15	-5,27552	-4,21043
KS	0,172623	0,258028	0,669007	0,509875	-0,35992	0,705167
P_{MAX}	-0,00564	0,258028	-0,02186	0,982738	-0,53819	0,526903
X_{MAX}	-2,18252	0,258028	-8,45844	1,16E-08	-2,71506	-1,64997
N	10,12775	0,258028	39,25054	2,75E-23	9,595203	10,66029
M	-2,63129	0,258028	-10,1977	3,35E-10	-3,16384	-2,09875
Y_{PS}	4,053429	0,258028	15,70925	3,95E-14	3,520885	4,585973
Y_{XS}	2,72683	0,258028	10,56795	1,65E-10	2,194286	3,259374

Tabela 5.7: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P1

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	47,56556	0,058255	816,5069	0	47,44533	47,68579
μ_{MAX}	2,168265	0,118316	18,326	1,29E-15	1,924072	2,412458
K_S	-0,07917	0,118316	-0,66916	0,509777	-0,32337	0,16502
P_{MAX}	0,00063	0,118316	0,005324	0,995796	-0,24356	0,244823
X_{MAX}	0,997626	0,118316	8,431855	1,23E-08	0,753433	1,241819
N	-4,63152	0,118316	-39,1452	2,94E-23	-4,87571	-4,38733
M	1,202876	0,118316	10,16661	3,56E-10	0,958683	1,447069
Y_{PS}	0,742175	0,118316	6,272803	1,75E-06	0,497982	0,986368
Y_{XS}	-1,247	0,118316	-10,5395	1,74E-10	-1,49119	-1,00281

Tabela 5.8: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X2

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	30,57873	0,005249	5825,508	0	30,5679	30,58957
μ_{MAX}	0,142714	0,010661	13,38653	1,26E-12	0,12071	0,164717
K_S	-0,00784	0,010661	-0,73495	0,469493	-0,02984	0,014168
P_{MAX}	0,001076	0,010661	0,100894	0,920473	-0,02093	0,023079
X_{MAX}	0,0669	0,010661	6,275203	1,74E-06	0,044897	0,088903
N	-0,38258	0,010661	-35,8857	2,29E-22	-0,40458	-0,36057
M	0,079552	0,010661	7,46193	1,06E-07	0,057548	0,101555
Y_{PS}	-0,16585	0,010661	-15,5566	4,9E-14	-0,18785	-0,14385
Y_{XS}	0,352043	0,010661	33,02162	1,62E-21	0,33004	0,374046

Tabela 5.9: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S2

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	17,59072	0,128874	136,4953	0	17,32473	17,8567
μ_{MAX}	-4,40533	0,261745	-16,8307	8,63E-15	-4,94555	-3,86512
KS	0,252113	0,261745	0,963203	0,345051	-0,2881	0,792327
P_{MAX}	-0,04362	0,261745	-0,16664	0,869046	-0,58383	0,496596
X_{MAX}	-2,06218	0,261745	-7,87859	4,13E-08	-2,60239	-1,52196
N	11,79034	0,261745	45,04521	1,06E-24	11,25013	12,33055
M	-2,4548	0,261745	-9,3786	1,69E-09	-2,99501	-1,91458
Y_{PS}	5,192671	0,261745	19,83869	2,15E-16	4,652456	5,732885
Y_{XS}	2,508255	0,261745	9,582834	1,12E-09	1,96804	3,048469

Tabela 5.10: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P2

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	59,73723	0,062938	949,1383	0	59,60733	59,86713
μ_{MAX}	2,015397	0,127828	15,76642	3,65E-14	1,751572	2,279222
KS	-0,1166	0,127828	-0,91218	0,370748	-0,38043	0,147223
P_{MAX}	0,016846	0,127828	0,131786	0,896253	-0,24698	0,280671
X_{MAX}	0,943259	0,127828	7,379096	1,28E-07	0,679434	1,207083
N	-5,3949	0,127828	-42,2042	4,95E-24	-5,65873	-5,13108
M	1,123094	0,127828	8,785945	5,78E-09	0,859269	1,386919
Y_{PS}	0,885845	0,127828	6,929955	3,63E-07	0,62202	1,14967
Y_{XS}	-1,1484	0,127828	-8,98392	3,82E-09	-1,41223	-0,88458

Tabela 5.11: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X3

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	30,95325	0,009082	3408,076	0	30,9345	30,97199
μ_{MAX}	0,087025	0,018446	4,717755	8,51E-05	0,048954	0,125096
KS	-0,01086	0,018446	-0,5886	0,56163	-0,04893	0,027214
P_{MAX}	-0,00314	0,018446	-0,17049	0,866056	-0,04122	0,034926
X_{MAX}	0,042101	0,018446	2,282358	0,031625	0,00403	0,080172
N	-0,27634	0,018446	-14,9806	1,12E-13	-0,31441	-0,23827
M	0,049638	0,018446	2,69097	0,012768	0,011567	0,08771
Y_{PS}	-0,12107	0,018446	-6,56333	8,67E-07	-0,15914	-0,083
Y_{XS}	0,428318	0,018446	23,21974	5,9E-18	0,390247	0,466389

Tabela 5.12: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S3

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	6,272356	0,272693	23,00149	7,33E-18	5,709544	6,835167
μ_{MAX}	-2,71538	0,553843	-4,90279	5,32E-05	-3,85845	-1,5723
KS	0,337015	0,553843	0,608503	0,54857	-0,80606	1,480091
P_{MAX}	0,071845	0,553843	0,129721	0,897869	-1,07123	1,21492
X_{MAX}	-1,30837	0,553843	-2,36235	0,026609	-2,45145	-0,16529
N	8,539637	0,553843	15,41888	5,95E-14	7,396562	9,682713
M	-1,54076	0,553843	-2,78194	0,010354	-2,68384	-0,39768
Y_{P/S}	3,827508	0,553843	6,910819	3,8E-07	2,684432	4,970584
Y_{X/S}	1,562176	0,553843	2,820611	0,009464	0,4191	2,705251

Tabela 5.13: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P3

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	64,92309	0,132516	489,9257	0	64,64959	65,19659
μ_{MAX}	1,247098	0,269142	4,633613	0,000105	0,691617	1,802579
KS	-0,15712	0,269142	-0,5838	0,564802	-0,71261	0,398356
P_{MAX}	-0,03583	0,269142	-0,13314	0,895192	-0,59131	0,519647
X_{MAX}	0,600845	0,269142	2,232449	0,035177	0,045364	1,156326
N	-3,92754	0,269142	-14,5928	1,97E-13	-4,48302	-3,37206
M	0,707625	0,269142	2,629191	0,0147	0,152144	1,263106
Y_{P/S}	1,792767	0,269142	6,661053	6,87E-07	1,237286	2,348248
Y_{X/S}	-0,71855	0,269142	-2,66978	0,013402	-1,27403	-0,16307

Tabela 5.14: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X4

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	31,09146	0,008054	3860,496	0	31,07484	31,10808
μ_{MAX}	0,041583	0,016357	2,542152	0,017888	0,007823	0,075342
KS	-0,0063	0,016357	-0,38537	0,70336	-0,04006	0,027456
P_{MAX}	-0,00201	0,016357	-0,12283	0,903265	-0,03577	0,031751
X_{MAX}	0,020059	0,016357	1,226314	0,231977	-0,0137	0,053819
N	-0,11983	0,016357	-7,32563	1,45E-07	-0,15359	-0,08607
M	0,024479	0,016357	1,496548	0,147547	-0,00928	0,058239
Y_{P/S}	-0,06771	0,016357	-4,13946	0,00037	-0,10147	-0,03395
Y_{X/S}	0,470349	0,016357	28,7548	4,14E-20	0,436589	0,504109

Tabela 5.15: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S4

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	2,10599	0,256918	8,197116	2,05E-08	1,575737	2,636244
μ_{MAX}	-1,34502	0,521804	-2,57764	0,016517	-2,42198	-0,26807
KS	0,217196	0,521804	0,416241	0,680933	-0,85975	1,294146
P_{MAX}	0,073274	0,521804	0,140424	0,889497	-1,00368	1,150224
X_{MAX}	-0,65134	0,521804	-1,24825	0,223982	-1,72829	0,425611
N	3,803049	0,521804	7,288272	1,58E-07	2,726098	4,879999
M	-0,79136	0,521804	-1,51659	0,142433	-1,86831	0,285589
Y_{P/S}	2,207255	0,521804	4,230047	0,000294	1,130305	3,284205
Y_{X/S}	0,791804	0,521804	1,517436	0,14222	-0,28515	1,868754

Tabela 5.16: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P4

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	66,83833	0,122265	546,6679	0	66,58599	67,09067
μ_{MAX}	0,62087	0,248321	2,500267	0,019642	0,10836	1,13338
KS	-0,10104	0,248321	-0,4069	0,687688	-0,61355	0,411468
P_{MAX}	-0,03401	0,248321	-0,13695	0,892214	-0,54652	0,478503
X_{MAX}	0,301104	0,248321	1,212556	0,237101	-0,21141	0,813614
N	-1,76259	0,248321	-7,09801	2,45E-07	-2,2751	-1,25008
M	0,365238	0,248321	1,470829	0,154328	-0,14727	0,877748
Y_{P/S}	2,638803	0,248321	10,62656	1,48E-10	2,126293	3,151313
Y_{X/S}	-0,3664	0,248321	-1,47552	0,153072	-0,87891	0,146106

Tabela 5.17: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável X5

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	31,13901	0,004197	7419,918	0	31,13035	31,14768
μ_{MAX}	0,016814	0,008523	1,972622	0,060165	-0,00078	0,034405
KS	-0,00339	0,008523	-0,39722	0,694719	-0,02098	0,014206
P_{MAX}	0,000901	0,008523	0,105664	0,916727	-0,01669	0,018492
X_{MAX}	0,008015	0,008523	0,940346	0,356409	-0,00958	0,025607
N	-0,0377	0,008523	-4,42274	0,00018	-0,05529	-0,02011
M	0,009522	0,008523	1,117185	0,274975	-0,00807	0,027114
Y_{P/S}	-0,02798	0,008523	-3,28269	0,003142	-0,04557	-0,01039
Y_{X/S}	0,490816	0,008523	57,58383	3,07E-27	0,473224	0,508407

Tabela 5.18: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável S5

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	0,675977	0,146508	4,613911	0,000111	0,373598	0,978356
μ_{MAX}	-0,5965	0,29756	-2,00464	0,056409	-1,21063	0,017634
KS	0,13236	0,29756	0,444817	0,660438	-0,48177	0,746493
P_{MAX}	-0,00834	0,29756	-0,02803	0,97787	-0,62247	0,605793
X_{MAX}	-0,28907	0,29756	-0,97146	0,341008	-0,9032	0,325066
N	1,329872	0,29756	4,469255	0,00016	0,715738	1,944006
M	-0,34386	0,29756	-1,1556	0,259218	-0,958	0,270272
Y_{P/S}	1,002373	0,29756	3,368641	0,002546	0,388239	1,616507
Y_{X/S}	0,340158	0,29756	1,143158	0,264248	-0,27398	0,954292

Tabela 5.19: Resultados do planejamento fatorial fracionário para a variável P5

	Efeito	Erro Padrão	t ^a	p ^b	-95,% ^c	+95,% ^c
Média	67,4992	0,069232	974,9653	0	67,35631	67,64209
μ_{MAX}	0,277613	0,140612	1,974325	0,05996	-0,0126	0,567821
KS	-0,06183	0,140612	-0,43976	0,664049	-0,35204	0,228373
P_{MAX}	0,004048	0,140612	0,028788	0,977272	-0,28616	0,294256
X_{MAX}	0,134935	0,140612	0,959628	0,346811	-0,15527	0,425143
N	-0,61977	0,140612	-4,40767	0,000187	-0,90998	-0,32956
M	0,159854	0,140612	1,13685	0,266825	-0,13035	0,450063
Y_{P/S}	3,226197	0,140612	22,94401	7,77E-18	2,935988	3,516405
Y_{X/S}	-0,15866	0,140612	-1,12836	0,270322	-0,44887	0,131548

Analisando os efeitos dos parâmetros em relação as variáveis do processo nos reatores 1, 2 e 3, têm-se que para todas as variáveis analisadas (X, S e P) os únicos parâmetros estatisticamente não-significativos, para um nível de confiança de 95%, são K_S e P_{MAX}. Este resultado pode ser observado utilizando a coluna **p** (probabilidade de significância) nas tabelas 5.5 a 5.13. Os demais parâmetros apresentam resultados significativos.

Os parâmetros que promovem maiores efeitos para a concentração de microrganismos (X) em todos os reatores são N, Y_{X/S} e Y_{P/S}. Para a concentração de substrato e produto (S e P, respectivamente) em todos os reatores, N e Y_{P/S} são os parâmetros que promovem os maiores efeitos.

Uma comparação entre os efeitos pode ser feita utilizando a figura 5.1, verificando que todas as variáveis dos cinco reatores do processo sofrem maior influência dos parâmetros N e $Y_{P/S}$, com exceção de X que é afetada principalmente por $Y_{X/S}$, além de N e $Y_{P/S}$.

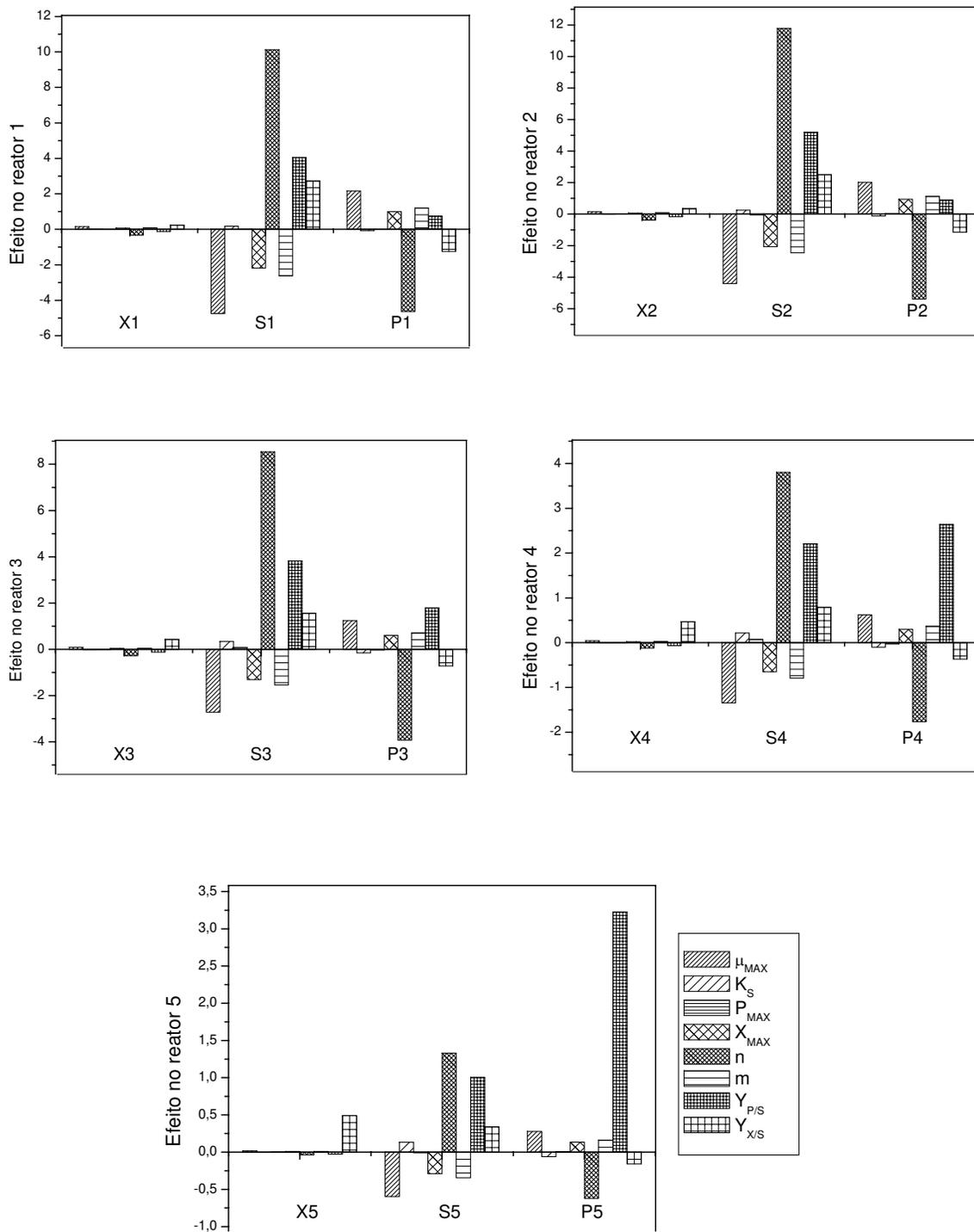


Figura 5.1: Efeitos dos parâmetros nos reatores 1, 2, 3, 4 e 5

Analisando-se o reator 4, observa-se que além dos parâmetros K_s e $P_{MÁX}$, também $X_{MÁX}$ e M não são estatisticamente significativos para a variável X_4 . E no caso das variáveis S_4 e P_4 , também $Y_{X/S}$.

No reator 5, os parâmetros, $\mu_{MÁX}$, K_s , $P_{MÁX}$, $X_{MÁX}$ e M não são significativos para X_5 , ou seja, não influenciam esta variável. E S_5 e P_5 além desses já citados para X_5 , o parâmetro $Y_{X/S}$ também não influencia.

Os parâmetros que promovem maiores efeitos no processo são N e $Y_{P/S}$ para todas as variáveis do processo. Tem-se ainda, que $Y_{X/S}$ é o efeito que mais influencia a variável X em todo processo além das duas citadas anteriormente, mas este não é significativo para S e P nos dois últimos reatores.

Sendo N a potência do termo de inibição pelo produto e o $Y_{P/S}$ o rendimento teórico em etanol, pode-se verificar a partir desses resultados a grande influência que o teor alcoólico tem na cinética do processo, pois os parâmetros que causam maior efeito estão relacionadas com a concentração de produto. Segundo ANDRIETTA (2005) isso é observado na fermentação em escala industrial, a concentração de etanol no meio de fermentação tem grande influência no desempenho do processo.

Se aumentarmos o parâmetro N do nível inferior para o superior verifica-se que este causa um efeito negativo na concentração de microrganismo presente no processo, isso pode ser observado em todos os reatores (figura 5.1). O mesmo ocorre para a concentração de produto, e ao contrário, a concentração de substrato sofre um efeito positivo, ou seja, quando N passa do nível inferior para o superior ele promove um aumento de concentração de substrato no processo, o que não é desejável, pois diminui a conversão de substrato em etanol. E $Y_{P/S}$ também gera efeito positivo em S e P , e negativo em X , o que também é desejável, pois aumenta a produção de etanol no processo.

O parâmetro $Y_{X/S}$ gera um efeito sempre positivo na concentração de X e S , e negativo em P , mas este parâmetro influencia pouco ou não influencia em S e P quando comparado à N e $Y_{P/S}$, portanto seu efeito é importante apenas em X .

5.5. Conclusão

A análise feita permitiu avaliar a sensibilidade dos parâmetros existentes na modelagem determinística e na cinética do processo de fermentação alcoólica em estudo de maneira que pudesse determinar os parâmetros que influenciam mais ou menos nas variáveis de processo.

Obteve-se que dentre os oito parâmetros analisados, N e $Y_{P/S}$ são os parâmetros que promovem maiores efeitos nas variáveis de processo. E ainda, o maior efeito em X é promovido pelo parâmetro $Y_{X/S}$, o qual não é significativo para as variáveis S e P . Esse resultado demonstra a grande influência da concentração de etanol no meio de fermentação para o processo, o que realmente é observado na indústria segundo ANDRIETTA (2005).

A análise de sensibilidade mostrou que todos os parâmetros são significativos para o processo, com exceção de K_S e $P_{MÁX}$. E estando esses parâmetros presentes nos modelos cinéticos r_X , r_S e r_P , esses modelos são considerados importantes.

A partir da análise dos dados obtidos optou-se em substituir a velocidade específica de crescimento celular (μ) pela rede, pois todas as outras taxas cinéticas dependem dela. E dessa forma, pretende-se melhorar a simulação do processo e tentar aproximá-lo o possível do processo real.

6. DESENVOLVIMENTO E ANÁLISE DO MODELO HÍBRIDO

6.1. Introdução

As condições ótimas de operação são obtidas a partir de um conhecimento profundo da dinâmica do processo, mas é necessário utilizar um modelo preciso. As equações das taxas cinéticas para a fermentação alcoólica foram determinadas em vários trabalhos na literatura. Estas equações, no entanto, são válidas apenas para as condições nas quais foram determinadas. Mudanças na composição do meio, perturbações no processo e/ou uso de diferentes cepas fazem com que estas equações passem a não descrever bem o comportamento cinético do processo. No entanto, as equações de balanço permanecem inalteradas.

No modelo híbrido neuronal, para este estudo, as equações de balanço de massa são consideradas conhecidas e as redes neuronais são utilizadas para descrever a cinética do processo com o objetivo de aumentar a capacidade de predição do modelo.

6.2. Desenvolvimento da Rede Neuronal Funtional Link (FLN)

Serão desenvolvidas duas redes para a simulação do processo em estudo, em uma os reatores serão considerados isotérmicos, temperatura constante durante todo o processo, e outra onde a temperatura também será submetida a perturbações, de forma que as taxas cinéticas são funções da temperatura.

6.2.1. Caracterização da Qualidade de Predição

Para caracterizar a qualidade de predição do modelo foi usado o desvio padrão residual (DPR), sugerido por CLERAN *et al.* (1991), dado pela equação 6.1:

$$DPR = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - y_{Pi})^2}}{n} \quad (6.1)$$

Onde: y_i é o valor calculado pelo modelo determinístico;
 y_{Pi} é o valor calculado pelo modelo híbrido neuronal e
 n é o número de dados utilizados.

Devido a diferença de magnitude das variáveis preditas pela rede, deve-se utilizar o DPR em forma de porcentagem de média dos valores calculados pelo modelo determinísticos para facilitar a análise (ATALA *et al.*, 2001).

$$DPR(\%) = \frac{DPR}{\overline{y_i}} \times 100 \quad (6.2)$$

Onde: $\overline{y_i}$ é a média dos valores calculados pelo modelo determinístico.

Essas equações fornecem a precisão da predição da rede em relação aos valores obtidos pelo modelo determinístico.

6.2.2. Rede para Reatores Isotérmicos

6.2.2.1. Geração dos Dados para Desenvolvimento da Rede

As variáveis de estado do processo, dadas pela concentração de células, substrato e produto, são entradas da rede, pois são elas que influenciam a cinética do processo. A temperatura de entrada do mosto também é uma variável que tem grande influência na cinética, mas considerando que haja um controle adequado desta variável, no cálculo da

velocidade específica de crescimento celular do processo pela rede, esta não foi considerada.

A saída da rede é dada pela velocidade específica de crescimento celular (μ), que foi escolhida para ser descrita pela rede pois todas as outras taxas cinéticas dependem dela.

Os dados de entrada e saída foram obtidos a partir da simulação do processo não apresentando ruídos e estão facilmente disponíveis para serem utilizados, o que não acontece com dados obtidos experimentalmente que devem ser filtrados antes do cálculo das taxas, obtidas a partir da discretização da equação de balanço de biomassa, senão serão obtidos resultados não satisfatórios (COSTA *et al.*, 1998).

Foi gerada uma rede para cada reator. Para se gerar dados de treinamento da rede, foi feito um planejamento completo com pontos axiais aplicado às variáveis de entrada selecionadas; e para a validação essas mesmas variáveis foram perturbadas aleatoriamente. A seleção das variáveis a serem perturbadas foi feita de acordo com a influência que estas exercem sobre as variáveis do processo a partir da análise do comportamento dinâmico do sistema em malha aberta.

O estudo do comportamento dinâmico deste processo foi feito por vários pesquisadores (ANDRIETTA, 1994; DECHECHI, 1996; GOUVEIA, 2000), testes de grau foram aplicados nas principais variáveis manipuláveis e o comportamento das variáveis de saída foi analisado determinando o efeito e a sensibilidade destas variáveis diante das variações impostas. A análise da dinâmica do sistema em malha aberta demonstrou ser altamente complexa, pois apresenta respostas não lineares, assimétricas e resposta inversa em algumas variáveis de saída quando submetidas a determinadas perturbações (DECHECHI, 1998).

Segundo DECHECHI (1998), duas variáveis seriam passíveis de manipulação: a vazão de entrada de mosto (F_0) e a razão de refluxo (RR). Segundo uma análise de sensibilidade desenvolvida por GOUVEIA (2000), as variáveis que poderiam ser utilizadas para manipulações seriam: vazão de entrada de mosto (F_0) e a concentração de substrato no mosto (S_0). Então para o desenvolvimento da rede, considerando controle de temperatura, foram escolhidas para serem perturbadas F_0 e S_0 , como sugerido por GOUVEIA (2000), por serem estas variáveis mais fáceis de serem perturbadas na prática.

6.2.2.2. Treinamento da Rede *Functional Link*

As perturbações de treinamento da rede foram feitas de acordo com um planejamento fatorial completo com pontos axiais. As variáveis perturbadas, F_0 e S_0 , foram variadas num intervalo de $85 \text{ m}^3/\text{h} < F_0 < 115 \text{ m}^3/\text{h}$ e $150 \text{ g/l} < S_0 < 200 \text{ g/l}$ como uma seqüência de degraus com período de dez horas, tempo esse suficiente para que o processo pudesse atingir o estado estacionário, como citado por MELEIRO (2002).

A tabela 6.1 mostra os níveis correspondentes de cada variável perturbada no intervalo escolhido. E o planejamento completo pode ser observado na tabela 6.2 para 90 horas de operação do processo.

Tabela 6.1: Valores das variáveis em cada nível do planejamento

Variáveis	- α (-1,4142)	-1	0	+1	+ α (1,4142)
F_0	85	89,4	100	110,6	115
S_0	150	158,8	180	201,2	210

Tabela 6.2: Planejamento para perturbação de treinamento da rede

Tempo (horas)	$F_0 \text{ m}^3/\text{h}$	$S_0 \text{ g/l}$
10	89,4	158,8
20	89,4	201,2
30	110,6	158,8
40	110,6	201,2
50	85	180
60	115	180
70	100	150
80	100	210
90	100	180

Os arquivos de entrada e saída para o treinamento da rede foram obtidos segundo as matrizes dadas nas figuras 6.1 e 6.2, com um intervalo de amostragem de 30 minutos como sugerido por MELEIRO (2002).

$$\begin{bmatrix} X_{11} & S_{11} & P_{11} \\ X_{12} & S_{12} & P_{12} \\ X_{13} & S_{13} & P_{13} \\ M & M & M \\ X_{1n} & S_{1n} & P_{1n} \end{bmatrix}$$

Figura 6.1: Matriz do arquivo de entrada para o treinamento

Onde em X_{ij} , S_{ij} , P_{ij} , i se refere ao reator (1, 2, 3, 4 ou 5) e j se refere ao tempo. Foram usados dados de 0,5 em 0,5 hora.

O arquivo de saída é dado pela matriz mostrada na figura 6.2:

$$\begin{bmatrix} \mu_{11} \\ \mu_{12} \\ \mu_{13} \\ M \\ \mu_{1n} \end{bmatrix}$$

Figura 6.2: Matriz do arquivo de saída para o treinamento

As perturbações podem ser visualizadas pelas figuras 6.3 e 6.4 respectivamente.

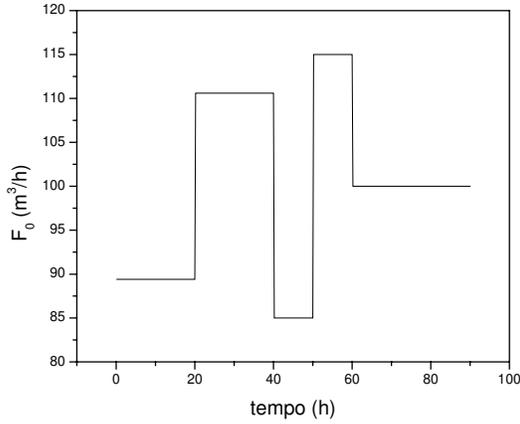


Figura 6.3: Perturbação em F_0

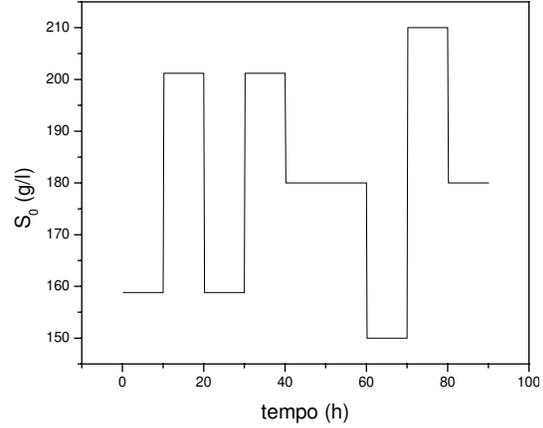


Figura 6.4: Perturbação em S_0

Com o objetivo de melhorar o desempenho das redes FLN, foram feitas algumas modificações. HENRIQUE (1999) propuseram que a saída dada pela equação (3.8) fosse transformada por uma função de ativação linear inversível:

$$y_i(\mathbf{x}_e) = f \left(\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(\mathbf{x}_e) \right) \quad (6.3)$$

As entradas reais, x_e , são transformadas em um número maior (n_z) de entradas auxiliares, $z = \left(x_{e1}, x_{e2}, \dots, \frac{1}{x_{e1}}, \frac{1}{x_{e2}}, x_{e1}^{0.5}, x_{e2}^{0.5}, etc. \right)$ antes que seja feita a expansão funcional, e essas entradas auxiliares são escolhidas de acordo com o problema. Então, uma expansão polinomial, de ordem máxima igual a seis, é feita nestas novas entradas.

Segundo COSTA *et al.* (1998), essas modificações aumentam a capacidade de aproximação não linear da rede e a estimação dos parâmetros continua sendo um problema linear.

Um método baseado no estimador ortogonal de BILLINGS *et al.* (1989) é usado para eliminar os nós não significativos durante o treinamento da rede, reduzindo

significativamente o tamanho e a complexidade da rede, evitando o sobreajuste dos dados. COSTA (1998) apresenta a descrição detalhada desse estimador.

A função de ativação escolhida para esta rede foi a função inversa pela facilidade de implementação, dada por:

$$f\left(\sum_{j=1}^M w_{ij}h_j(z)\right) = \frac{1}{\sum_{j=1}^M w_{ij}h_j(z)} \quad (6.4)$$

O vetor z de entradas auxiliares foi determinado após vários testes onde foram consideradas as funções de X , S e P para cada reator até se chegar a um bom desempenho. A tabela 6.3 mostra o vetor z encontrado para cada reator.

A determinação do vetor z talvez seja a maior dificuldade encontrada para o treinamento de uma rede do tipo *functional link*, pois é feita por tentativa e erro. Normalmente, é escolhido de forma a aumentar a aproximação não linear da rede neuronal.

Tabela 6.3: Vetores de entrada da rede

Reator	Vetor Z
1	$z = \left[X^{6,04} \quad \frac{1}{S} \quad P^{4,98} \quad \frac{1}{P} \right]$
2	$z = \left[X^{3,0} \quad \frac{1}{S} \quad P^{2,0} \quad \frac{1}{P} \right]$
3	$z = \left[X^{6,9} \quad \frac{1}{S} \quad P^{4,0} \quad \frac{1}{P} \right]$
4	$z = \left[X^{6,7} \quad \frac{1}{S} \quad P^{4,3} \quad \frac{1}{P} \right]$
5	$z = \left[X^{6,0} \quad \frac{1}{S} \quad P^{4,9} \quad \frac{1}{P} \right]$

Um resumo da estrutura considerada para treinamento pode ser vista na tabela 6.4.

Tabela 6.4: Estrutura obtida para o treinamento da rede

Entrada da Rede	$x_e = \begin{bmatrix} X & S & P \end{bmatrix}$
Vetor Z	Tabela 6.3
Saída da Rede	$y(x_e) = [\mu]$
Função de Ativação	$f\left(\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(z)\right) = \frac{1}{\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(z)}$

O desempenho da rede é medido, segundo MILTON e ARNOLD (1990), pela equação (3.11).

O número de monômios gerado é função do tamanho do vetor z e do grau da expansão polinomial. O estimador ortogonal foi usado para eliminar os monômios pouco significantes e estimar os pesos.

Durante o treinamento, o erro a ser minimizado é dado pela diferença entre as concentrações calculadas pela rede e as concentrações obtidas na simulação do processo.

6.2.2.3. Validação da Rede *Functional Link*

Para a validação da rede utilizou-se uma perturbação aleatória em F_0 e S_0 , também de 10 em 10 horas, cujo intervalo está dentro da faixa de treinamento, esta é dada por: $90 \text{ m}^3/\text{h} < F_0 < 110 \text{ m}^3/\text{h}$ e $162 \text{ g/l} < S_0 < 198 \text{ g/l}$. As figuras 6.5 e 6.6 mostram essas perturbações.

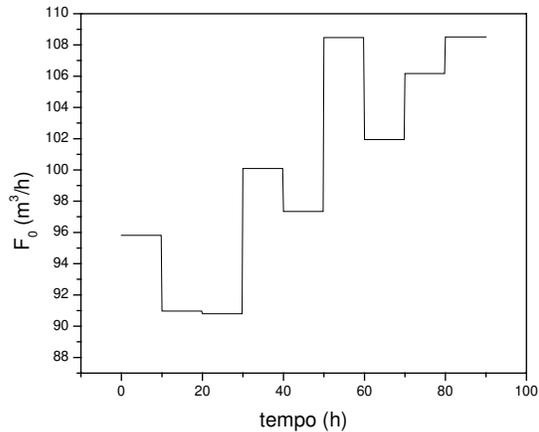


Figura 6.5: Perturbação aleatória em F_0

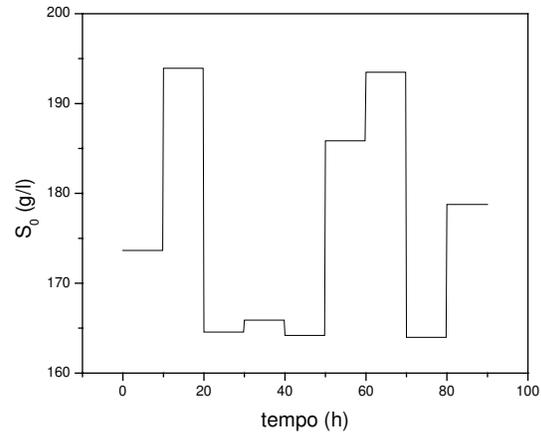


Figura 6.6: Perturbação aleatória em S_0

Os arquivos de dados de entrada e saída foram gerados de forma similar à explicada na seção 6.2.1.2.

A capacidade de reprodução dos dados de simulação pelas redes foi avaliada pelo desempenho medido segundo a relação de MILTON e ARNOLD (1990), pela equação (3.11).

O grau de monômio que levou a uma melhor desempenho foi diferente para os diferentes reatores. A tabela 6.5 mostra o melhor grau de monômio e o número de monômios gerados para cada reator.

Tabela 6.5: Características do monômios gerados para cada reator

Reator	Monômio de melhor desempenho	
	Grau	Número
1	5	126
2	4	70
3	4	70
4	5	126
5	5	126

O número de entradas auxiliares utilizado foi 4, como observado pela tabela 6.3. Redes com monômios de grau 4 e 5 foram então escolhidas como padrão para o modelo híbrido uma vez que obtiveram bom desempenho na descrição da cinética. As seguintes equações foram geradas:

Reator 1:

$$\mu_{FLN} = \frac{1}{-1,8225 \times 10^{-35} X^{24,16} + 0,00042626 \frac{1}{S} P^{2,98} + 1,9541 \times 10^{-11} X^{6,04} P^{1,98}}$$

Reator 2:

$$\mu_{FLN} = \frac{1}{4,3999 \times 10^{-6} P^{4,0} + 2,7147 \times 10^{-9} \frac{1}{S} P^{6,0} + 6,908 \times 10^{-14} P^{8,0}}$$

Reator 3:

$$\mu_{FLN} = \frac{1}{1,1017 \times 10^{-8} \frac{1}{S^{2,0}} P^{4,0} + 0,0002814 \frac{1}{S} P^{3,0} + 3,0885 \times 10^{-20} P^{12,0}}$$

$$\frac{1}{+ 1,751 \times 10^{-23} X^{6,9} \frac{1}{S} P^{8,0} + 5,1653 \times 10^{-9} \frac{1}{S^{3,0}} P^{4,0} - 7,489 \times 10^{-28} P^{16,0}}$$

$$\frac{1}{+ 3,2818 \times 10^8 \frac{1}{P^{4,0}}}$$

Reator 4:

$$\mu_{FLN} = \frac{1}{5,926 \times 10^{-14} P^{8,6} + 2,6772 \times 10^{-26} X^{13,14} \frac{1}{S} P^{4,3} - 1,8572 \times 10^{-32} X^{13,4} P^{7,6}} \frac{1}{+ 9,2327 \times 10^{-31} \frac{1}{S} P^{17,2} + 1,3908 \times 10^8 \frac{1}{S} \frac{1}{P^{4,0}}}$$

Reator 5:

$$\mu_{FLN} = \frac{1}{2,3629 \times 10^{-16} X^{6,0} \frac{1}{S} P^{4,9} + 8,5202 \times 10^{-13} P^{7,8} + 6,1298 \times 10^{-35} \frac{1}{S} P^{19,6}} \frac{1}{+ 1,1036 \times 10^8 \frac{1}{S} \frac{1}{P^{4,0}}}$$

O treinamento e validação do processo foram feitos utilizando um programa desenvolvido no Matlab (HENRIQUE, 1999). As equações das redes obtidas para a cinética em cada reator geraram poucos termos (tabela 6.6), demonstrando um bom desempenho e um treinamento rápido, o que facilita a implementação de um esquema de reestimação dos pesos da rede. A relação dada por MILTON e ARNOLD (1990) foi utilizada para medir o desempenho e estes podem ser observados também na tabela 6.6.

Tabela 6.6: Número de termos gerados na equação de μ_{FLN} em cada reator

Reator	Número de termos em μ_{FLN}	Desempenho (%)
1	3	99,8700
2	3	99,9447
3	7	99,9981
4	5	99,9807
5	4	99,9950

6.2.2.4. Modelo Híbrido Neuronal

O modelo híbrido desenvolvido é constituído de equações determinísticas de balanço de massa e energia da equação que descreve a taxa específica de crescimento (substituída por redes neuronais FLN). Este modelo simula o processo de fermentação alcoólica descrito no capítulo 4.

Para a análise do modelo híbrido neuronal utilizou-se a mesma faixa de perturbação aleatória em F_0 e S_0 utilizada na validação do processo, também de 10 em 10 horas, com o intervalo dado por: $90 \text{ m}^3/\text{h} < F_0 < 110 \text{ m}^3/\text{h}$ e $162 \text{ Kg}/\text{m}^3 < S_0 < 198 \text{ Kg}/\text{m}^3$. Uma comparação entre os intervalos das perturbações de F_0 e S_0 para o treinamento e o teste do modelo híbrido neuronal podem ser observados nas figuras 6.7 e 6.8.

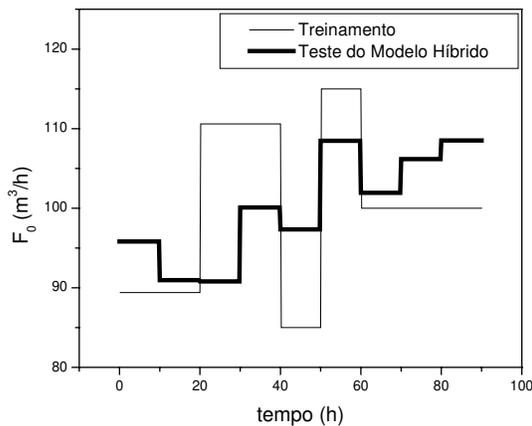


Figura 6.7: Perturbação aleatória em F_0

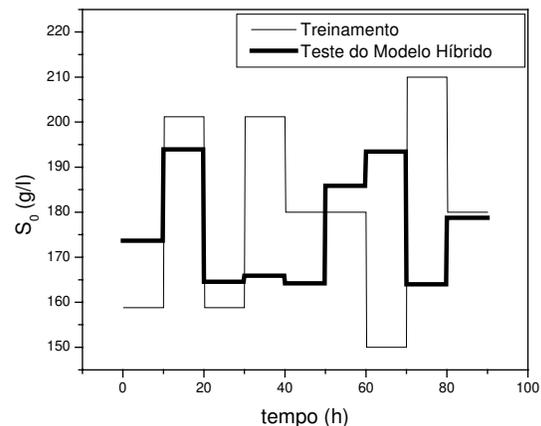


Figura 6.8: Perturbação aleatória em S_0

O desempenho do modelo híbrido neuronal e o erro calculado pela equação 6.2 podem ser observados e comparados ao modelo determinístico nas figuras 6.9 à 6.28 a seguir, quando submetidas as perturbações aleatórias dadas nas figuras 6.7 e 6.8 (teste do modelo híbrido).

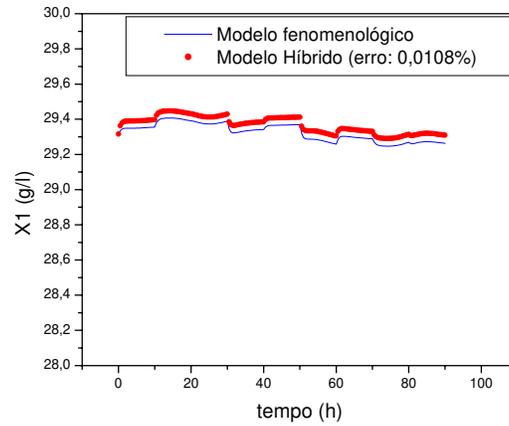


Figura 6.9: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1

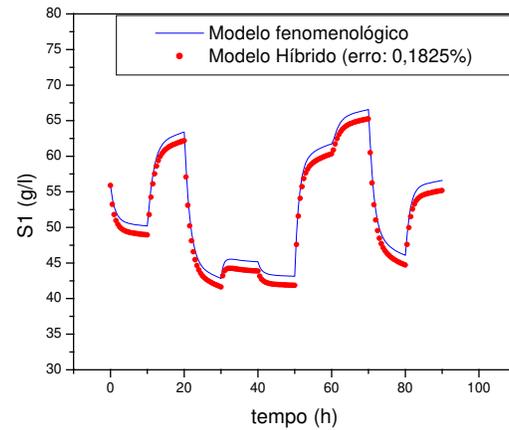


Figura 6.10: Perfil de Concentração de Substrato no reator 1, S_1

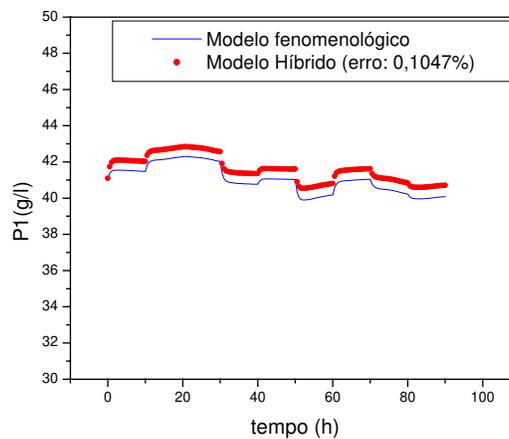


Figura 6.11: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1

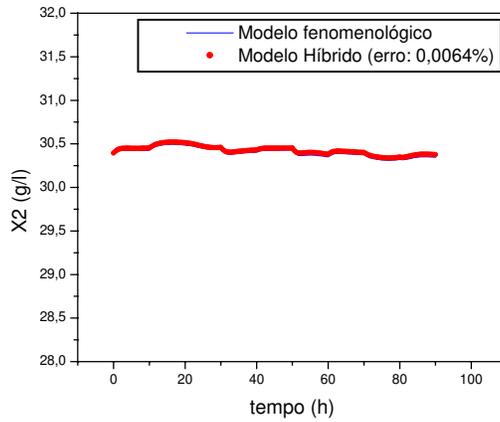


Figura 6.12: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2

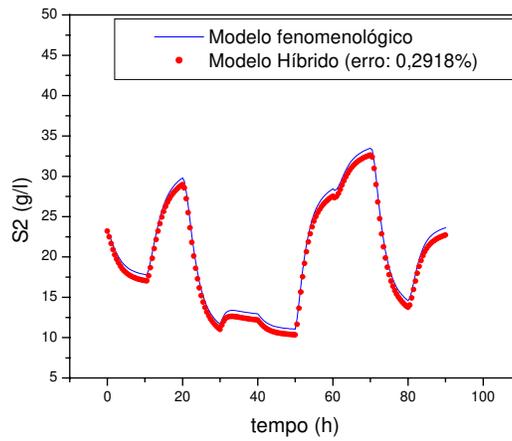


Figura 6.13: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2

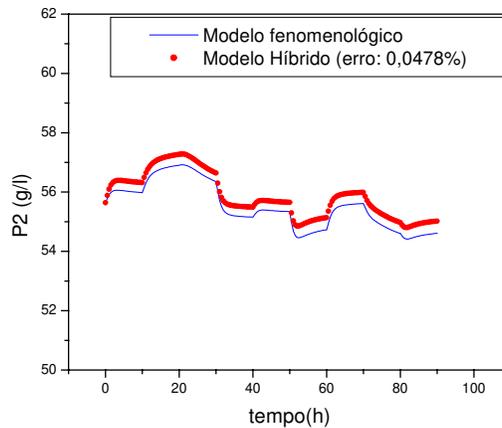


Figura 6.14: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2

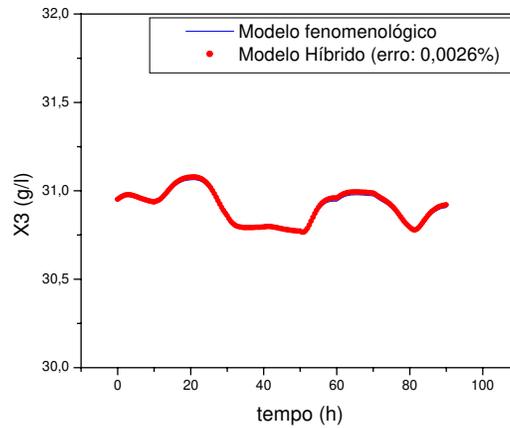


Figura 6.15: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3

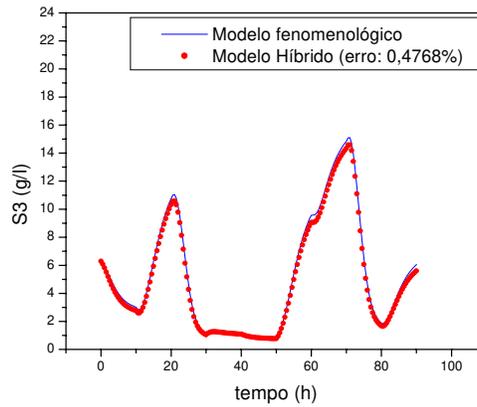


Figura 6.16: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3

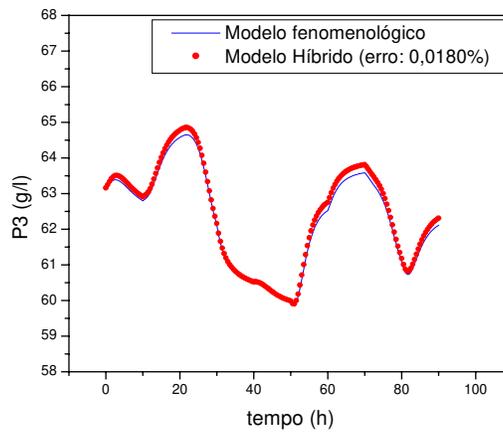


Figura 6.17: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3

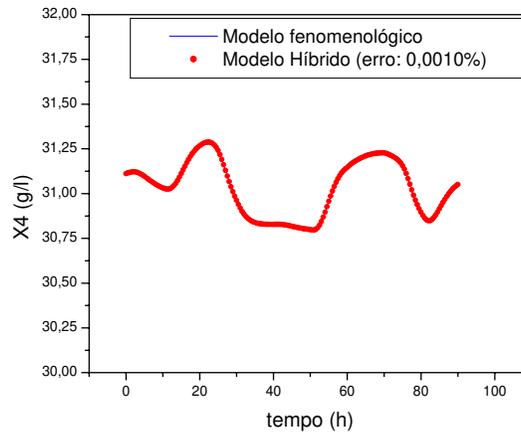


Figura 6.18: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4

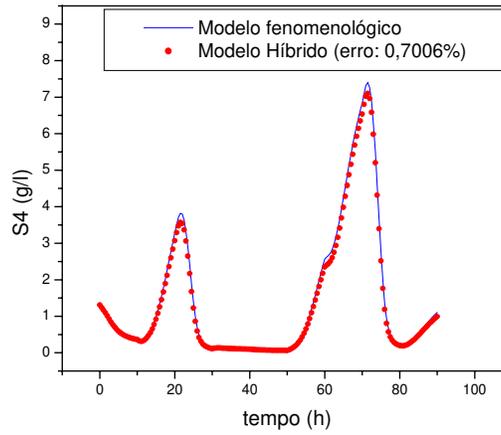


Figura 6.19: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4

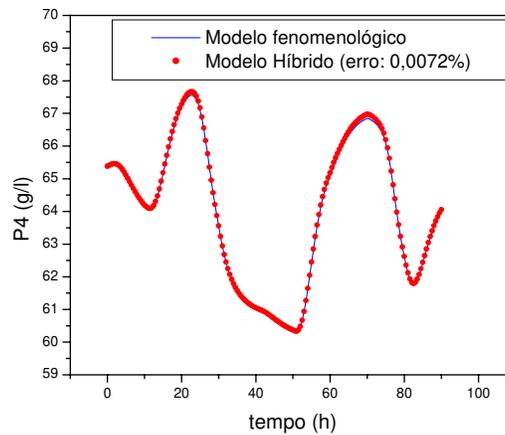


Figura 6.20: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4

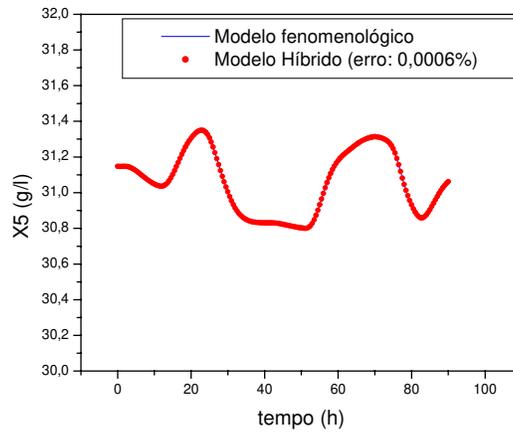


Figura 6.21: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5

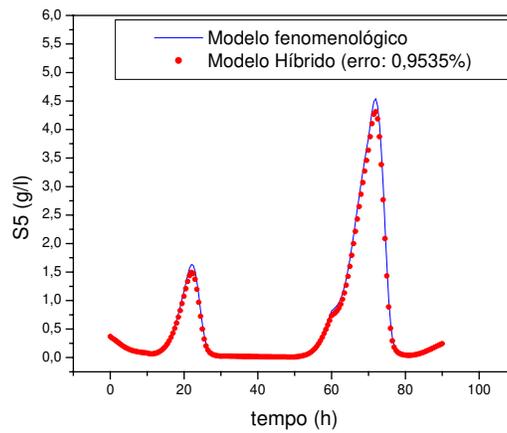


Figura 6.22: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5

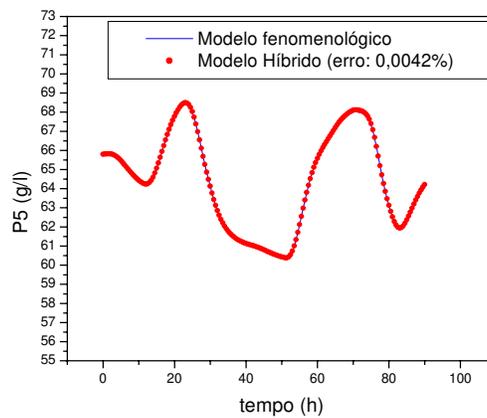


Figura 6.23: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5

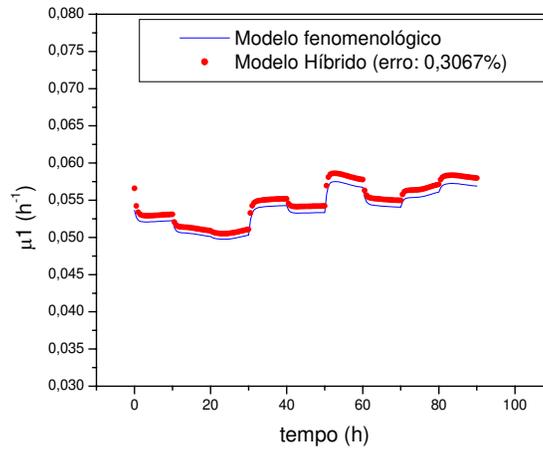


Figura 6.24: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 1, μ_1

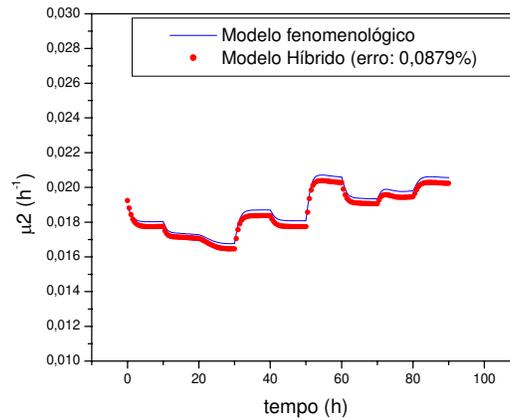


Figura 6.25: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 2, μ_2

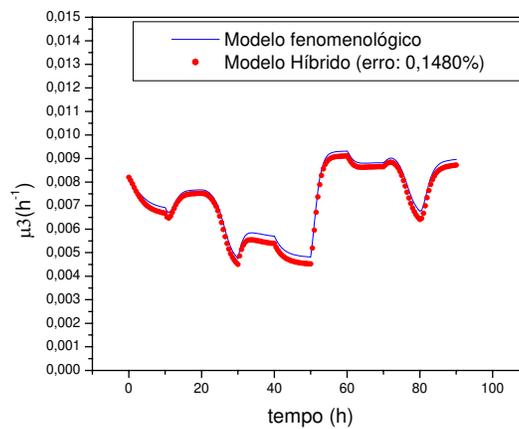


Figura 6.26: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 3, μ_3

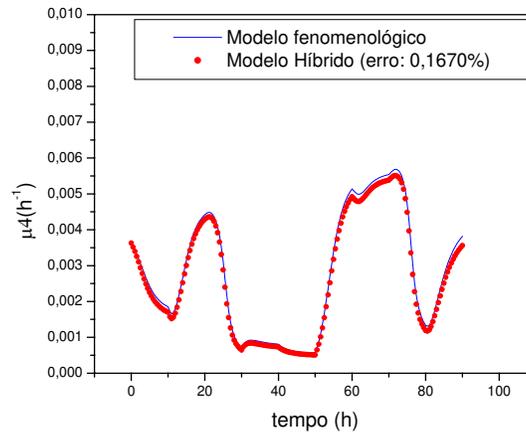


Figura 6.27: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 4, μ_4

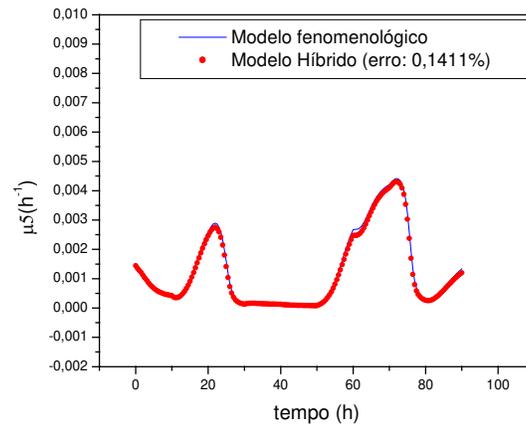


Figura 6.28: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 5, μ_5

Os erros calculados pela equação 6.2 para a rede com controle de temperatura podem ser melhor visualizados na tabela 6.7.

Tabela 6.7: DPR em porcentagem da média dos valores determinístico

Reator	Desvio Padrão Residual (%)			
	X	S	P	μ
1	0,0108	0,1825	0,1047	0,3067
2	0,0064	0,2918	0,0478	0,0879
3	0,0026	0,4768	0,0180	0,1490
4	0,0010	0,7006	0,0072	0,1670
5	0,0006	0,9535	0,0042	0,1411

Os desvios obtidos pela rede com temperatura constante foram pequenos, eles variam de 0,0006 à 0,9535 %, sendo eles aceitáveis, pois, para a engenharia de bioprocessos consideram-se aceitáveis desvios de até 10% (ATALA *et al.*, 2001).

6.2.2.5. Modelo Híbrido Neuronal com uma Única Rede para o Processo Isotérmico

A proposta de se gerar uma única rede para processo foi considerada. Assim, foi obtida uma única rede que representa os cinco reatores em série do processo de fermentação alcoólico em estudo.

Os dados de treinamento e validação foram obtidos como nos itens 6.2.2.2 e 6.2.2.3 discutidos anteriormente, também as variáveis perturbadas e seus intervalos de perturbação, assim, o mesmo arquivo de treinamento usado na obtenção das cinco redes foi utilizado para a obtenção de uma única rede para o mesmo processo, considerando reatores isotermicamente isolados.

A função inversa também foi utilizada neste caso como função de ativação pela facilidade de implementação e o vetor z foi determinado após vários testes. O resumo da estrutura obtida para treinamento é mostrado na tabela 6.8.

Tabela 6.8: Estrutura para o treinamento da única rede

Entrada da Rede	$x_e = \begin{bmatrix} X & S & P \end{bmatrix}$
Saída da Rede	$y(x_e) = [\mu]$
Vetor Z	$z = \begin{bmatrix} \frac{1}{X} & \frac{1}{S} & P^{0,9} \end{bmatrix}$
Função de Ativação	$f\left(\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(z)\right) = \frac{1}{\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(z)}$

A relação de MILTON e ARNOLD (1990) foi utilizada para avaliar a capacidade de reprodução dos dados de simulação pelas redes, equação (2.11). Neste caso, o melhor grau

de monômio obtido foi cinco e o número de monômios gerados foi 56. O número de entradas auxiliares utilizado foi 3, e se obteve, então uma rede de grau 5, escolhida como padrão para o modelo híbrido uma vez que teve bom desempenho de (98,9131%) na descrição da cinética.

Após a eliminação dos monômios não significativos usando o algoritmo de BILLINGS *et al.* (1989), obteve-se a equação da Rede, que ficou apenas com 4 dos 56 monômios gerados:

$$\mu_{FLN} = \frac{1}{785,24 \frac{1}{X^{2,0}} \frac{1}{S} P^{1,8} - 1,3895 \frac{1}{X} \frac{1}{S} P^{2,7} + 0,00065683 \frac{1}{S} P^{3,6} + 8,4748 \times 10^{-7} P^{4,5}}$$

Para a análise do modelo híbrido neuronal utilizou-se a mesma faixa de perturbação aleatória em F_0 e S_0 utilizada na validação do processo, como descrito no desenvolvimento das cinco redes ítem 6.2.2.4.

A caracterização da qualidade de predição do modelo foi feito segundo ATALA *et al.* (2001) pelo desvio padrão residual (DPR) em forma de porcentagem de média dos valores calculados pelo modelo determinístico, tabela 6.9, dado pela equação 6.2.

Tabela 6.9: DPR em porcentagem da média dos valores determinístico para uma única rede

Reator	Desvio Padrão Residual (%)			
	X	S	P	μ
1	0,0149	0,2476	0,1421	0,6525
2	0,0150	0,6862	0,1124	4,1848
3	0,0101	1,8218	0,0687	0,4632
4	0,0039	2,6119	0,0270	2,3756
5	0,0018	2,9474	0,0128	2,6337

Os desvios obtidos pela rede variam de 0,0018 à 4,1848 %, sendo eles aceitáveis, mas comparado aos desvios do modelo híbrido, em que cada reator tem uma rede, os desvios deste modelo são maiores.

O desempenho do modelo híbrido neuronal e o erro calculado pela equação 6.2 podem ser observados e comparados ao modelo determinístico nas figuras 6.29 à 6.48 a seguir, quando submetidas as perturbações aleatórias dadas nas figuras 6.7 e 6.8 (teste do modelo híbrido).

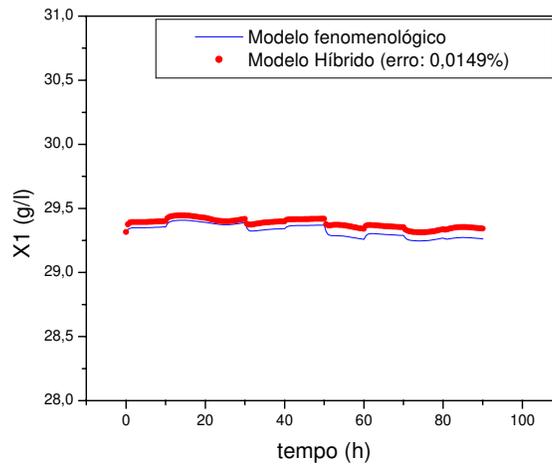


Figura 6.29: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1

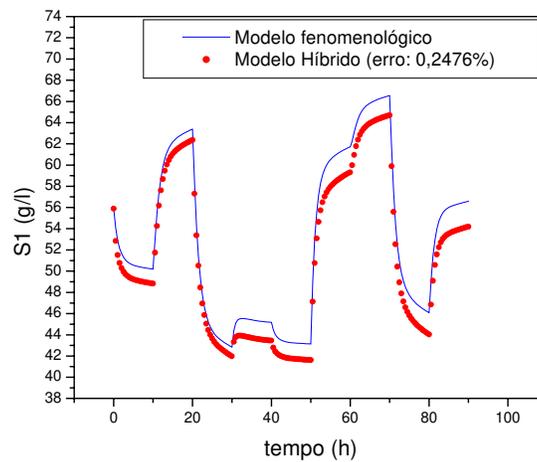


Figura 6.30: Perfil de Concentração de Substrato no reator 1, S_1

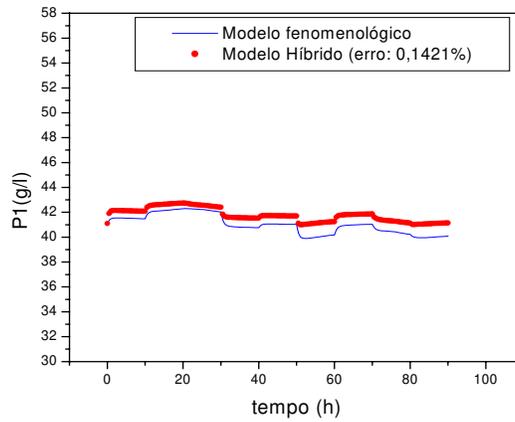


Figura 6.31: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1

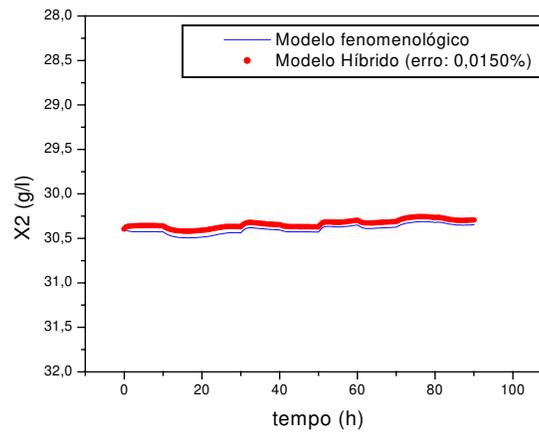


Figura 6.32: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2

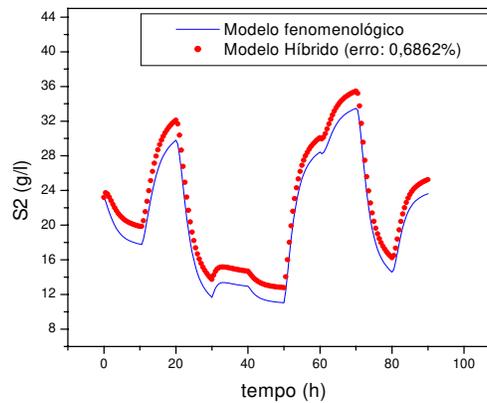


Figura 6.33: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2

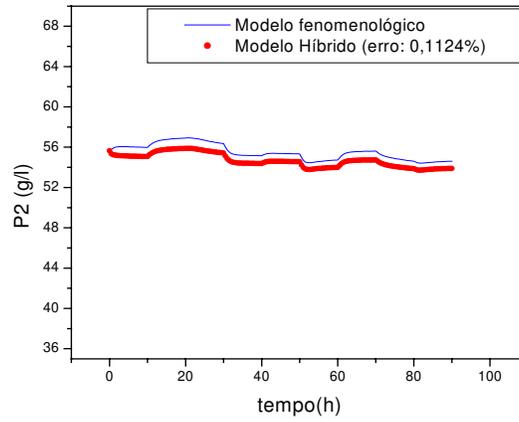


Figura 6.34: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2

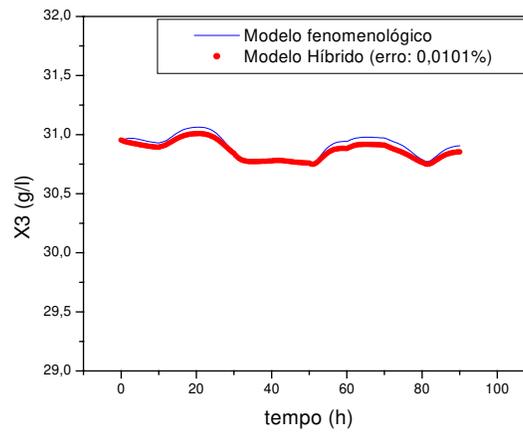


Figura 6.35: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3

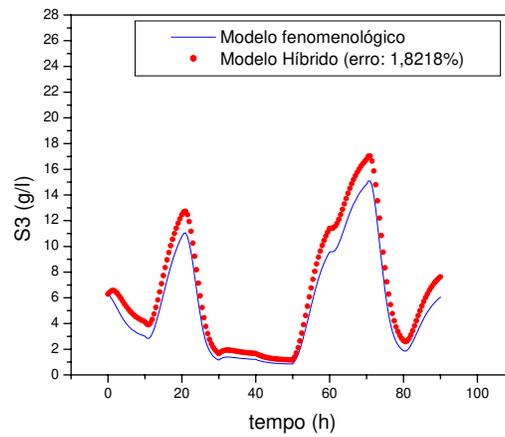


Figura 6.36: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3

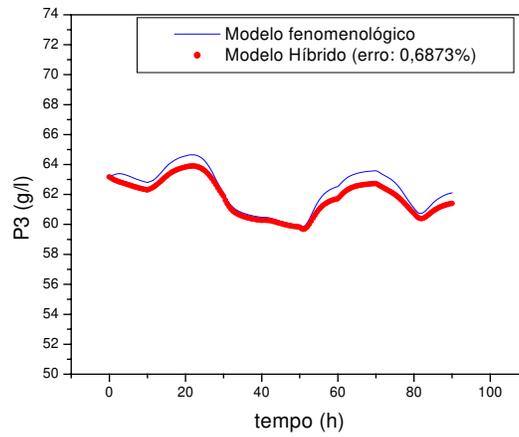


Figura 6.37: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3

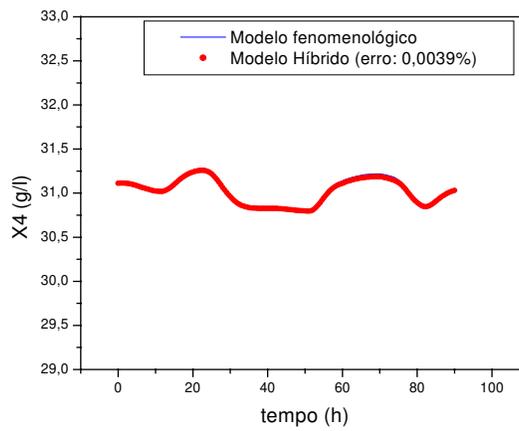


Figura 6.38: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4

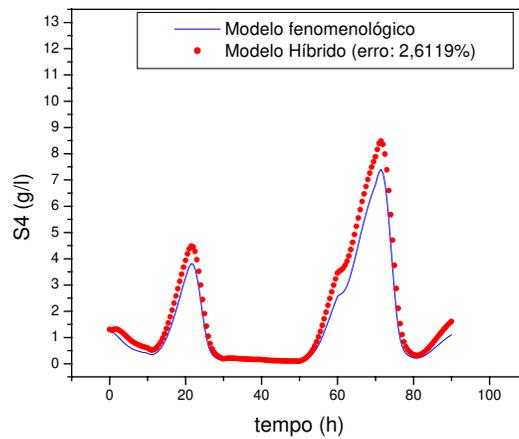


Figura 6.39: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4

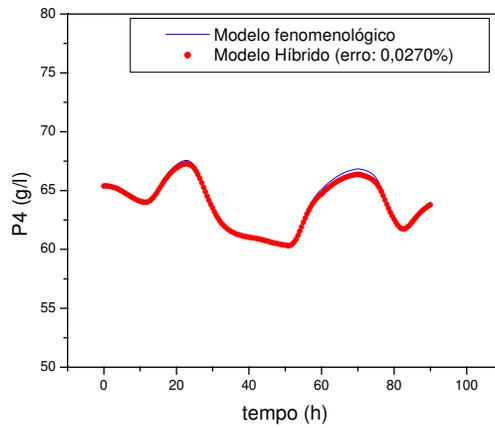


Figura 6.40: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4

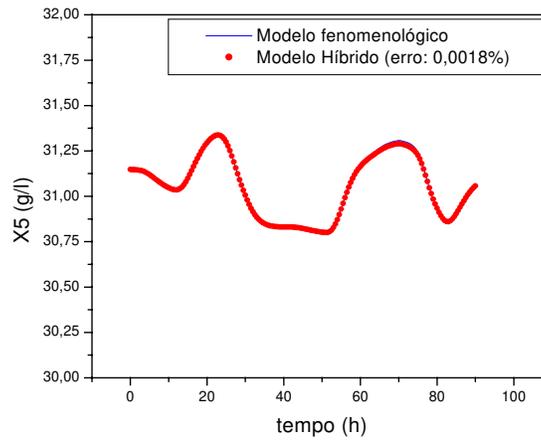


Figura 6.41: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5

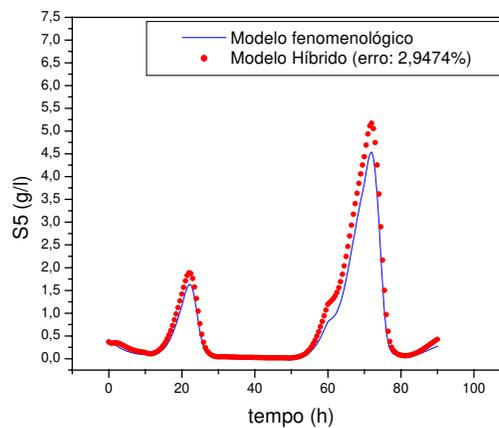


Figura 6.42: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5

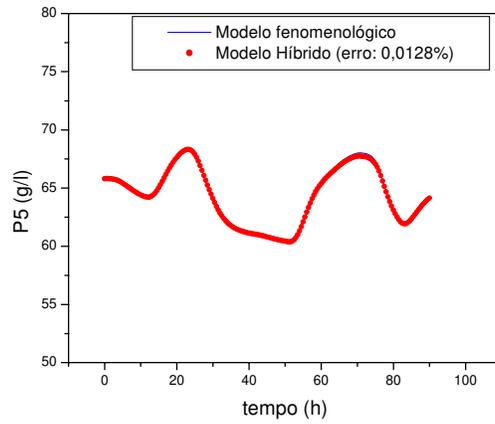


Figura 6.43: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5

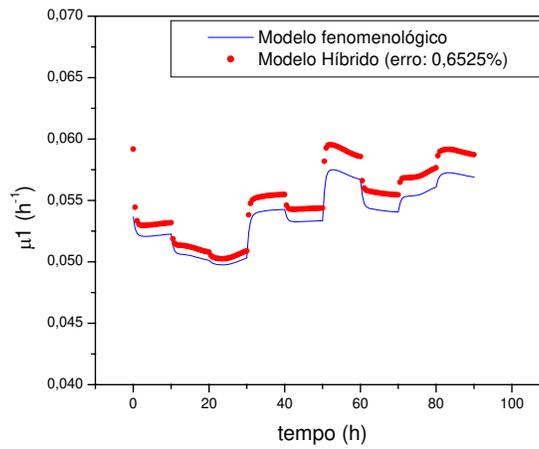


Figura 6.44: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 1, μ_1

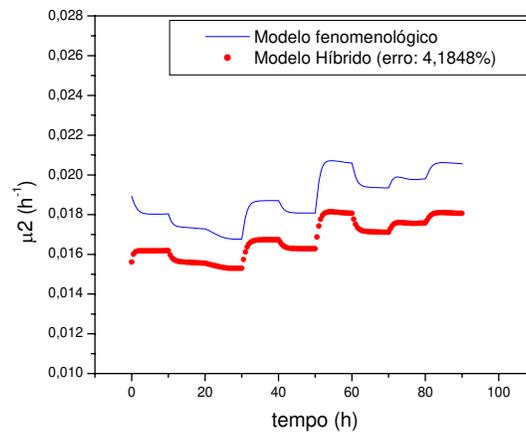


Figura 6.45: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 2, μ_2

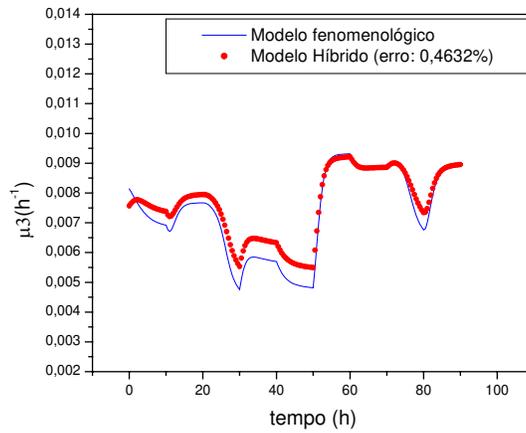


Figura 6.46: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 3, μ_3

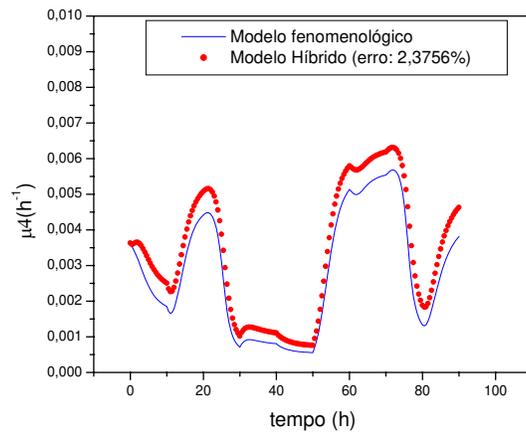


Figura 6.47: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 4, μ_4

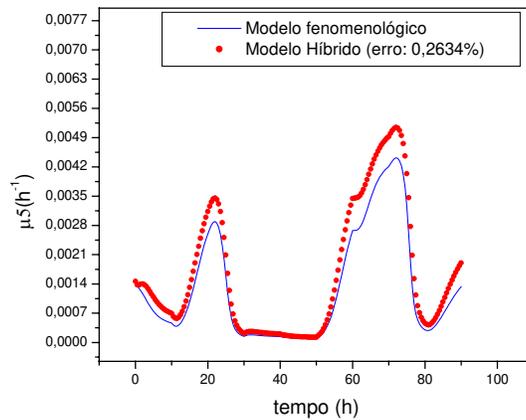


Figura 6.48: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 5, μ_5

6.2.3. Rede para Reatores Não-Isotérmicos

6.2.3.1. Geração dos Dados para Desenvolvimento da Rede

A temperatura de entrada do mosto é uma variável muito importante, pois esta tem grande influência na cinética. Para que a temperatura seja sentida no processo, a velocidade específica de crescimento celular nesta rede foi calculada considerando as variáveis de estado do processo: concentração de células, substrato e produto, e a temperatura.

A velocidade específica de crescimento celular (μ) será a saída, já que todas as outras taxas cinéticas dependem dela.

Como visto na rede desenvolvida anteriormente, optou-se em se treinar e validar uma rede para cada reator. Para isto, foram gerados dados de entrada e saída de treinamento a partir de perturbações planejadas em variáveis de entrada selecionadas de acordo com análises feitas por pesquisadores já citados anteriormente, cujas perturbações foram feitas na concentração de substrato e temperatura de alimentação, S_0 e T_0 . A validação da rede foi feita por perturbações aleatórias.

6.2.3.2. Treinamento da Rede *Functional Link*

As perturbações de treinamento foram obtidas da mesma forma que a rede gerada para o processo com temperatura constante, utilizando um planejamento fatorial completo com pontos axiais. As variáveis perturbadas, S_0 e T_0 , foram variadas num intervalo de $150 \text{ g/l} < S_0 < 210 \text{ g/l}$ e $28^\circ\text{C} < T_0 < 35^\circ\text{C}$ como uma seqüência de degraus com período de dez horas, tempo esse suficiente para que o processo pudesse atingir o estado estacionário, como citado por MELEIRO (2002). Os arquivos de dados de entrada e saída foram montados como já descrito anteriormente.

A tabela 6.10 mostra os níveis correspondentes de cada variável perturbada no intervalo escolhido. O planejamento completo pode ser observado na tabela 6.11 a seguir para 90 horas de operação do processo.

Tabela 6.10: Valores da variáveis em cada nível do planejamento

Variáveis	- α (-1,4142)	-1	0	+1	+ α (1,4142)
S_0	150	158,8	180	201,2	210
T_0	28	29	31,5	34	35

Tabela 6.11: Planejamento para perturbação de treinamento da rede

Tempo (horas)	S_0 g/l	T_0 °C
10	158,8	29
20	158,8	34
30	201,2	29
40	201,2	34
50	150	31,5
60	210	31,5
70	180	28
80	180	35
90	180	31,5

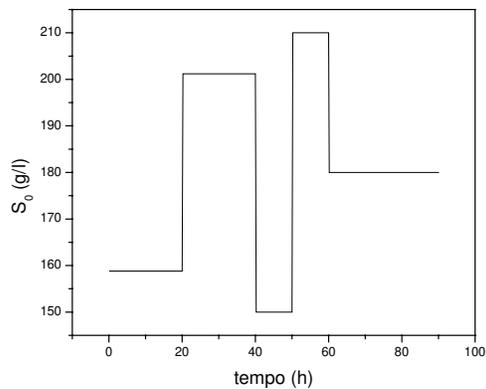


Figura 6.49: Perturbação em S_0

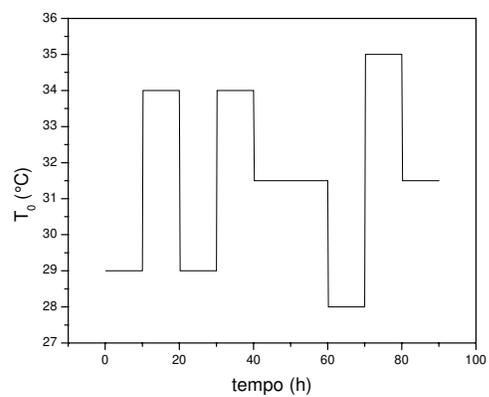


Figura 6.50: Perturbação em T_0

Os arquivos de dados de entrada e saída foram montados como já descrito anteriormente, com um intervalo de amostragem de 30 minutos como sugerido por MELEIRO (2002). As perturbações podem ser visualizadas pelas figura 6.49 e 6.50.

A função de ativação escolhida para esta rede também foi a função inversa pela facilidade de implementação, dada por:

$$f\left(\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(z)\right) = \frac{1}{\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(z)} \quad (6.6)$$

O vetor z escolhido pelo melhor desempenho para cada reator após vários testes estão definidos na tabela 6.12:

Tabela 6.12: Vetores de entrada da rede

Reator	Vetor Z
1	$z = \left[X^{3,02} \quad \frac{1}{S} \quad P^{4,92} \quad T^{0,59} \right]$
2	$z = \left[X^{2,7} \quad \frac{1}{S} \quad \frac{1}{P^{4,0}} \quad T^{0,6} \right]$
3	$z = \left[X^{3,0} \quad \frac{1}{S} \quad P^{4,90} \quad T \right]$
4	$z = \left[X \quad \frac{1}{S} \quad P \quad T^{0,4} \right]$
5	$z = \left[X^{1,25} \quad \frac{1}{S} \quad P \quad T^{0,59} \right]$

A tabela 6.13 mostra um resumo da estrutura considerada para treinamento.

Tabela 6.13: Estrutura obtida para o treinamento da rede sem controle de temperatura

Entrada da Rede	$x_e = \begin{bmatrix} X & S & P & T \end{bmatrix}$
Vetor Z	Tabela 6.10
Saída da Rede	$y(x_e) = [\mu]$
Função de Ativação	$f\left(\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(z)\right) = \frac{1}{\sum_{j=1}^M w_{ij} h_j(z)}$

6.2.3.3. Validação da Rede *Functional Link*

Para a validação da rede foi feita perturbação aleatória em S_0 e T_0 de 10 em 10 horas utilizando uma outra faixa de perturbação, que está dentro da faixa de treinamento, esta é dada por: $162 \text{ g/l} < S_0 < 198 \text{ g/l}$ e $28^\circ\text{C} < T_0 < 32^\circ\text{C}$. As figuras 6.51 e 6.52 mostram essas perturbações.

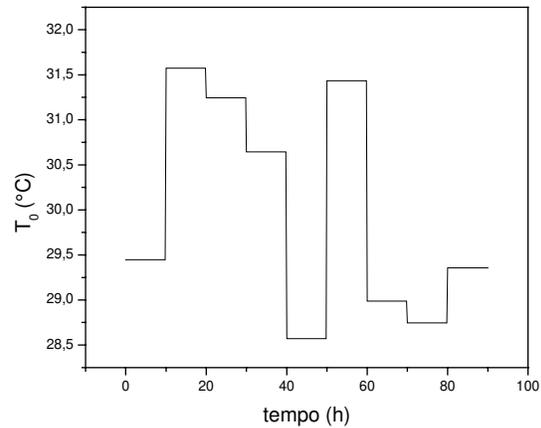
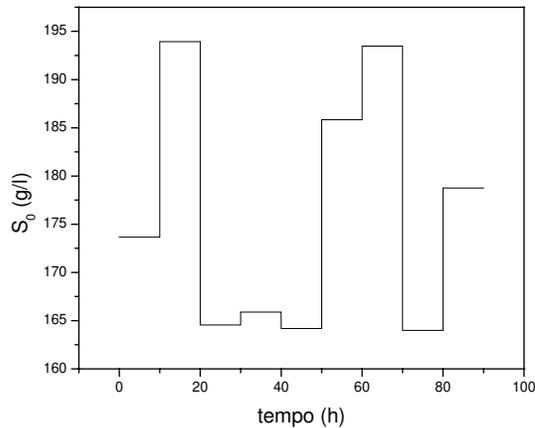


Figura 6.51: Perturbação aleatória em S_0

Figura 6.52: Perturbação aleatória em T_0

A capacidade de reprodução dos dados de simulação pelas redes foi avaliada segundo a relação de MILTON e ARNOLD (1990), pela equação (3.11).

Para os cinco reatores do processo, o melhor grau de monômio obtido foi cinco e o número de monômios gerados foram 126. O número de entradas auxiliares utilizado foram 4, obtendo-se, redes de grau 5 escolhida como padrão para o modelo híbrido uma vez que teve bom desempenho na descrição da cinética, gerando as seguintes equações:

Reator 1:

$$\mu_{FLN} = \frac{\frac{1}{-1,4295T^{1,18} + 1,1165x10^{-23} X^{6,04} \frac{1}{S} P^{9,84} + 6,8689x10^{-7} X^{6,04} P^{4,92} T^{1,18}}}{\frac{1}{-5,0705x10^{-13} X^{3,02} P^{4,92} T^{1,77} + 7,5585x10^{-7} X^{3,02} T^{2,36} - 5,104x10^{-24} \frac{1}{S} P^{14,76} T^{0,59}}}}{\frac{1}{+9,7211x10^{-10} P^{4,92} T^{2,36}}}}$$

Reator 2:

$$\mu_{FLN} = \frac{\frac{1}{-334,11 + 0,0060987X^{8,1} \frac{1}{P^{4,0}} + 1,1656x10^{-14} X^{10,8} \frac{1}{S} - 7,2676x10^{-7} X^{10,8} \frac{1}{P^{4,0}}}}}{\frac{1}{-4,5488x10^{-11} X^{8,1} \frac{1}{S^{2,0}} + 8,6769x10^{-9} X^{5,4} T^{1,8}}}}$$

Reator 3:

$$\mu_{FLN} = \frac{\frac{1}{9039,3 - 323,37T - 0,00033194 \frac{1}{S} P^{4,9} + 3,0911x10^{-5} \frac{1}{S} P^{4,9} T - 9,6048x10^{-7} \frac{1}{S} P^{4,9} T^2}}}{\frac{1}{-8,9072x10^{-11} P^{4,9} T^{3,0} - 5,2582x10^{-11} X^{6,0} T^{3,0} + 9,2656x10^{-8} X^{3,0} T^{4,0}}}}{\frac{1}{+2,7862x10^{-5} \frac{1}{S^{3,0}} T^{2,0} + 9,9624x10^{-9} \frac{1}{S} P^{4,9} T^{3,0} + 2,8483x10^{-12} P^{4,9} T^{4,0}}}}$$

Reator 4:

$$\mu_{FLN} = \frac{1}{-2899,6 - 0,53749X \frac{1}{S^{2,0}} P + 0,27431 \frac{1}{S^{2,0}} P^{2,0} - 0,017078 \frac{1}{S} P^{3,0} + 2,0252PT^{1,2}}$$

$$\frac{1}{-2,3187 \times 10^{-6} X \frac{1}{S^{4,0}} - 0,0053256X \frac{1}{S^{2,0}} P^{2,0} + 0,21679X \frac{1}{S^{2,0}} PT^{0,4}}$$

$$\frac{1}{-0,043293XPT^{1,2} + 1,6239 \times 10^{-9} \frac{1}{S^{5,0}} + 1,8985 \times 10^{-7} \frac{1}{S^{4,0}} P + 1,5343 \times 10^{-5} \frac{1}{S^{4,0}} T^{0,4}}$$

$$\frac{1}{-3,8448 \times 10^{-7} \frac{1}{S^{3,0}} P^{2,0} + 0,0010677 \frac{1}{S^{2,0}} P^{3,0} - 0,072847 \frac{1}{S^{2,0}} P^{2,0} T^{0,4}}$$

$$\frac{1}{-2,9298 \frac{1}{S^{2,0}} T^{1,2} + 2,3907 \times 10^{-5} \frac{1}{S} P^{4,0} + 0,0039741 \frac{1}{S} P^{3,0} T^{0,4}}$$

Reator 5:

$$\mu_{FLN} = \frac{1}{-7511,3 \frac{1}{S} - 0,0046055 \frac{1}{S^{2,0}} P + 10,992 \frac{1}{S} P^{2,0} + 13,016T^{1,77} - 9,8779 \times 10^{-9} \frac{1}{S^{4,0}}}$$

$$\frac{1}{-0,23645 \frac{1}{S} P^{3,0} - 0,00058067X^{3,75} \frac{1}{S^{2,0}} + 0,01669X^{2,5} \frac{1}{S^{2,0}} T^{0,59}}$$

$$\frac{1}{-0,15954X^{1,25} \frac{1}{S^{2,0}} T^{1,18} - 0,019771X^{1,25} T^{2,36} - 1,1657 \times 10^{-14} \frac{1}{S^{5,0}}}$$

$$\frac{1}{+1,3446 \times 10^{-9} \frac{1}{S^{4,0}} T^{0,59} + 5,2132 \times 10^{-9} \frac{1}{S^{3,0}} P^{2,0} - 7,4404 \times 10^{-8} \frac{1}{S^{3,0}} PT^{0,59}}$$

$$\frac{1}{+1,8348 \times 10^{-7} \frac{1}{S^{3,0}} T^{1,18} + 0,50787 \frac{1}{S^{2,0}} T^{1,77} + 0,0013531 \frac{1}{S} P^{4,0}}$$

$$\frac{1}{+0,00091873 \frac{1}{S} P^{3,0} T^{0,59}}$$

O número de termos da Rede e o desempenho medido pela relação dada por MILTON e ARNOLD (1990) podem ser observados também na tabela 6.14.

Tabela 6.14: Número de termos gerados na equação de μ_{FLN} em cada reator

Reator	Número de termos em μ_{FLN}	Desempenho (%)
1	7	99,6870
2	6	99,6868
3	11	99,9895
4	18	99,7873
5	18	96,6931

6.2.3.4. Modelo Híbrido Neuronal

Para a análise do modelo híbrido neuronal utilizou-se a mesma faixa de perturbação aleatória em S_0 e T_0 utilizada na validação do processo, também de 10 em 10 horas, com o intervalo dado por: $162 \text{ g/l} < S_0 < 198 \text{ g/l}$ e $25^\circ\text{C} < T_0 < 32^\circ\text{C}$. Uma comparação entre os intervalos das perturbações de S_0 e T_0 para o treinamento e o teste do modelo híbrido neuronal podem ser observados nas figuras 6.53 e 6.54.

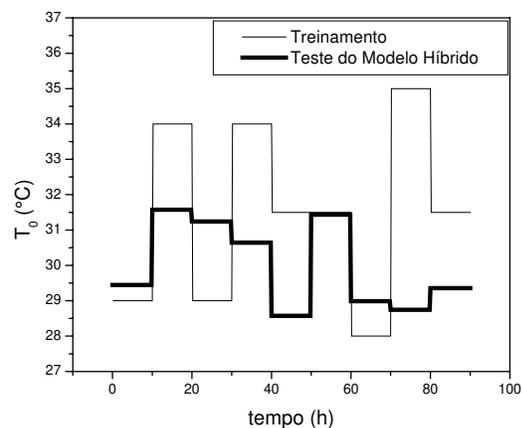
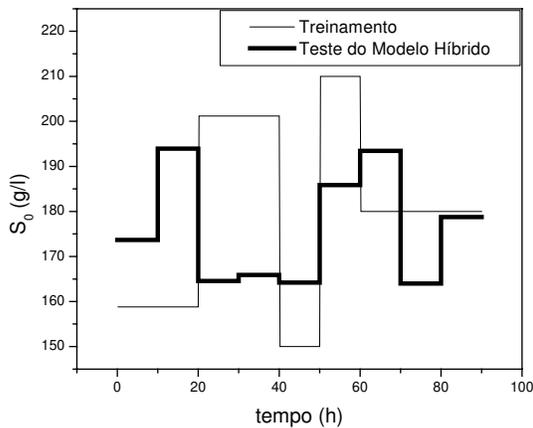


Figura 6.53: Perturbação aleatória em S_0

Figura 6.54: Perturbação aleatória em T_0

As figuras 6.55 à 6.79 mostram o perfil dado pelo modelo híbrido neuronal comparado ao modelo determinístico e o erro calculado pela equação 6.5, quando o processo é submetido as perturbações aleatórias dadas nas figuras 6.53 e 6.54.

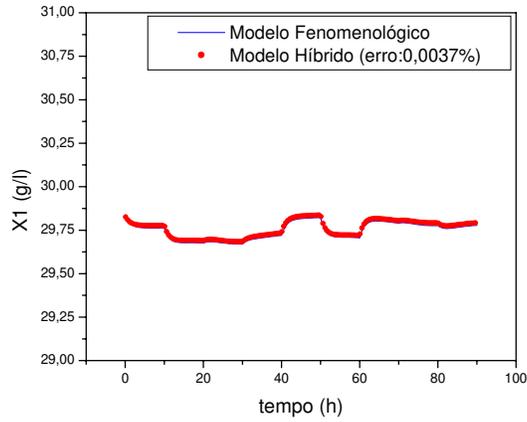


Figura 6.55: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1

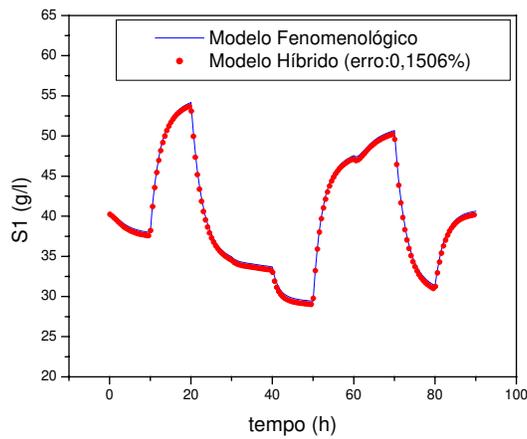


Figura 6.56: Perfil de Concentração de Substrato no reator, S_1

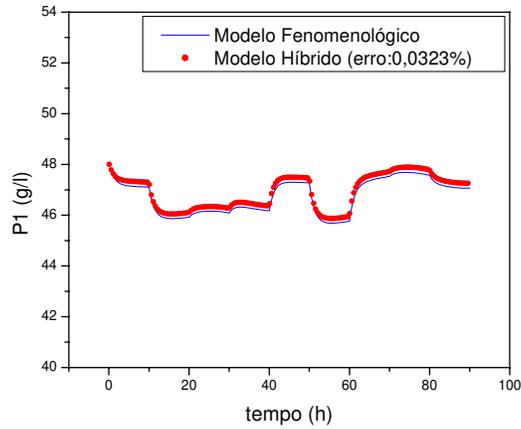


Figura 6.57: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1

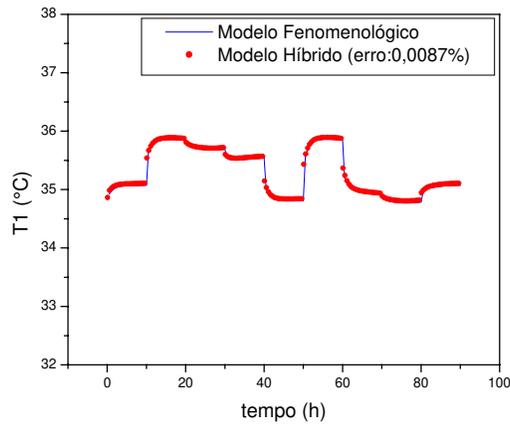


Figura 6.58: Perfil de Temperatura no reator 1, T_1

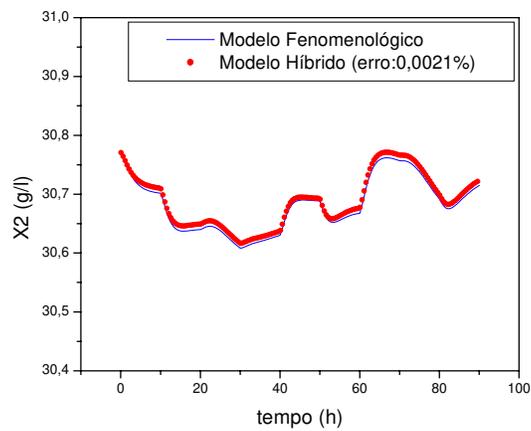


Figura 6.59: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2

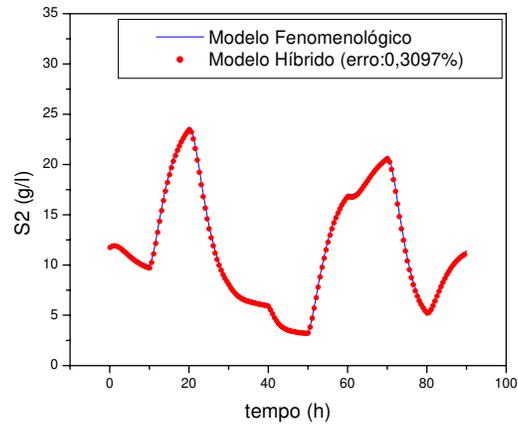


Figura 6.60: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2

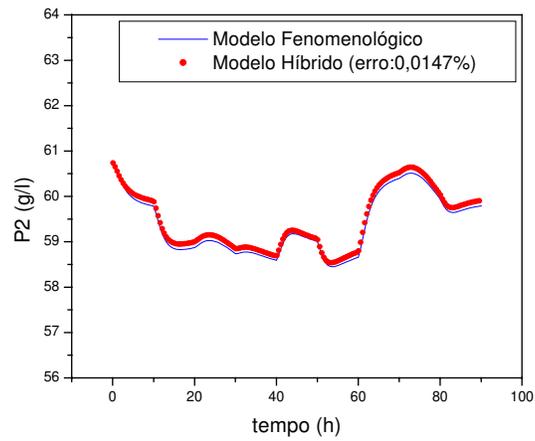


Figura 6.61: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2

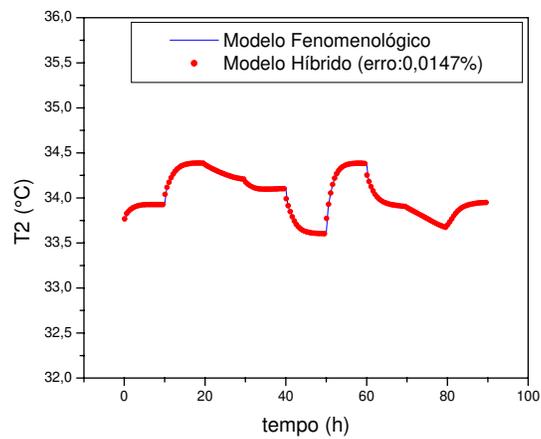


Figura 6.62: Perfil de Temperatura no reator 2, T_2

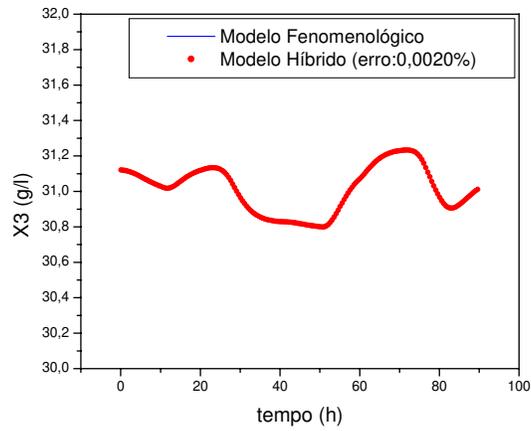


Figura 6.63: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3

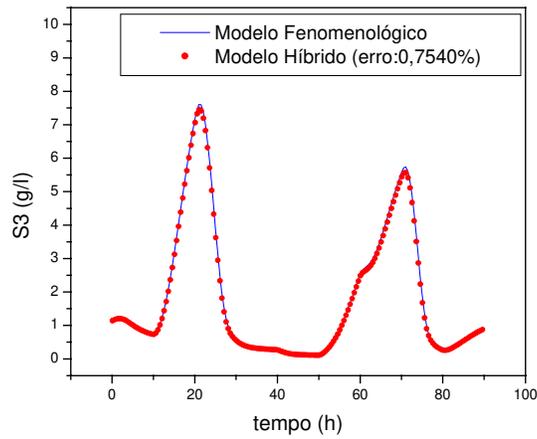


Figura 6.64: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3

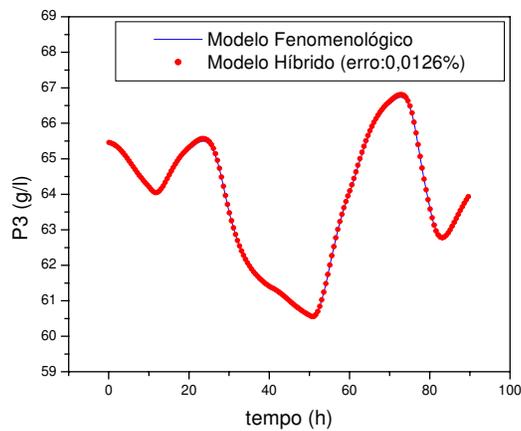


Figura 6.65: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3

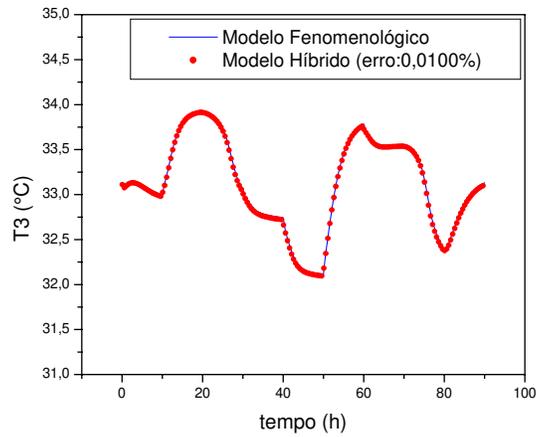


Figura 6.66: Perfil de Temperatura no reator 3, T_3

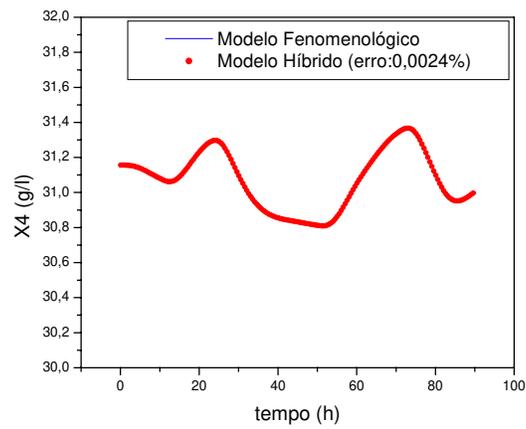


Figura 6.67: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 4, X_4

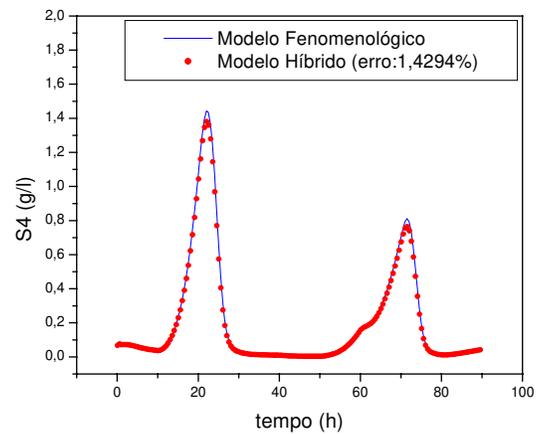


Figura 6.68: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4

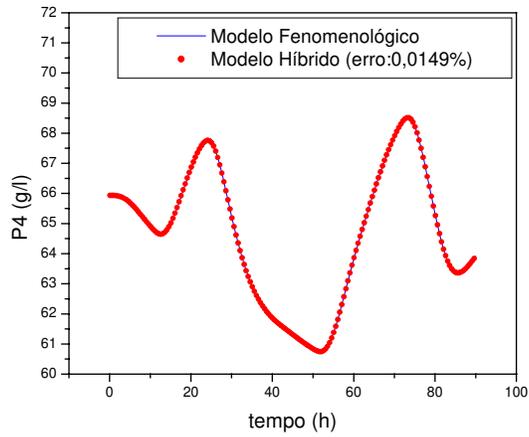


Figura 6.69: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4

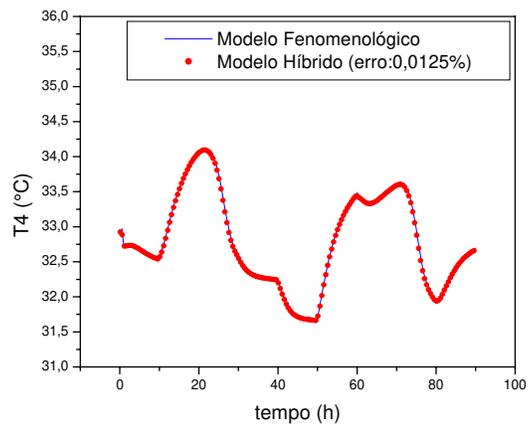


Figura 6.70: Perfil de Temperatura no reator 4, T_4

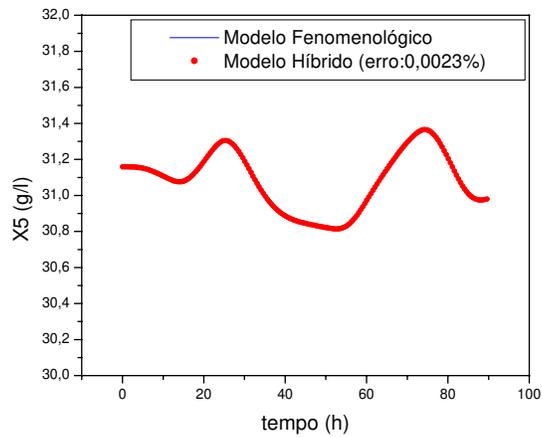


Figura 6.71: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 5, X_5

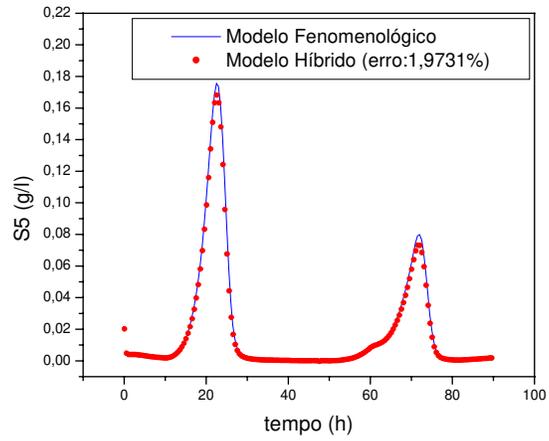


Figura 6.72: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5

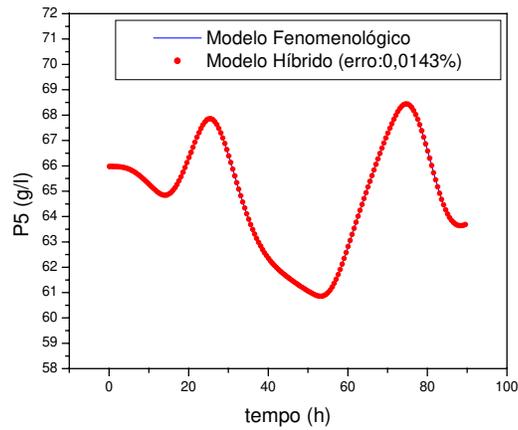


Figura 6.73: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5

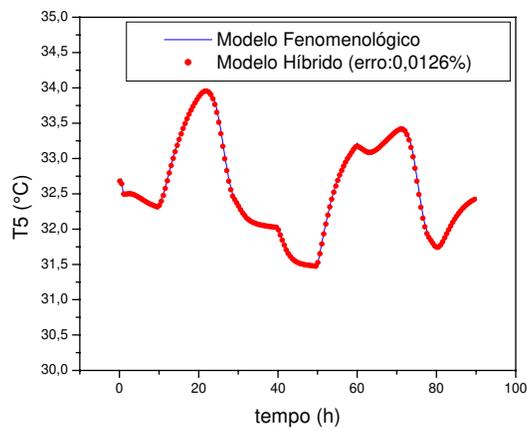


Figura 6.74: Perfil de Temperatura no reator 5, T_5

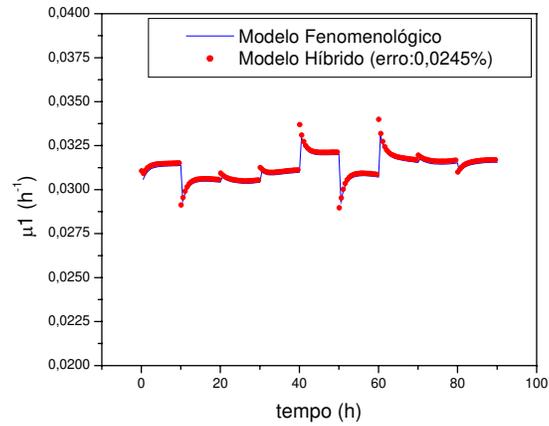


Figura 6.75: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 1, μ_1

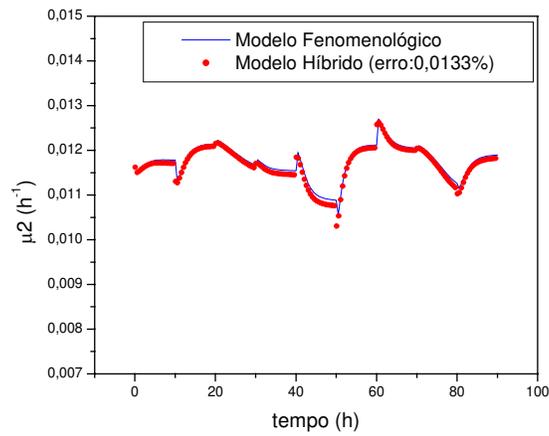


Figura 6.76: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 2, μ_2

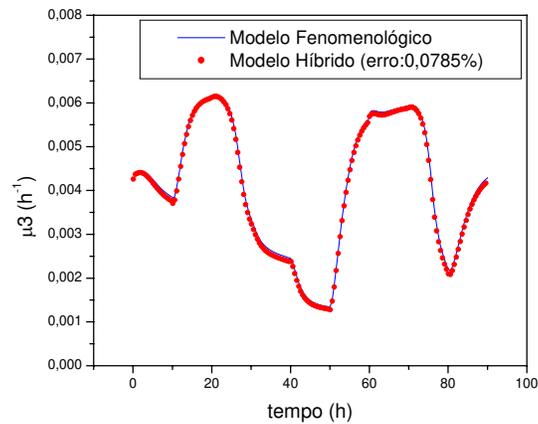


Figura 6.77: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 3, μ_3

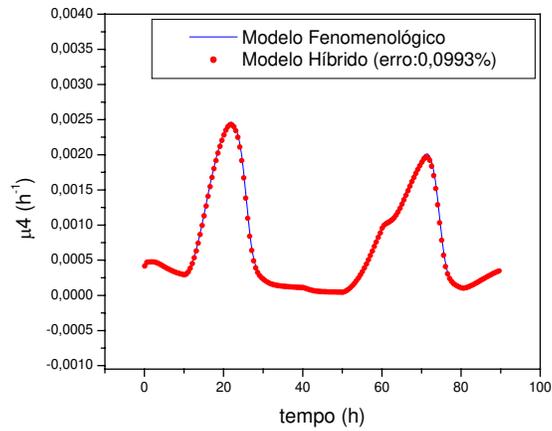


Figura 6.78: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 4, μ_4

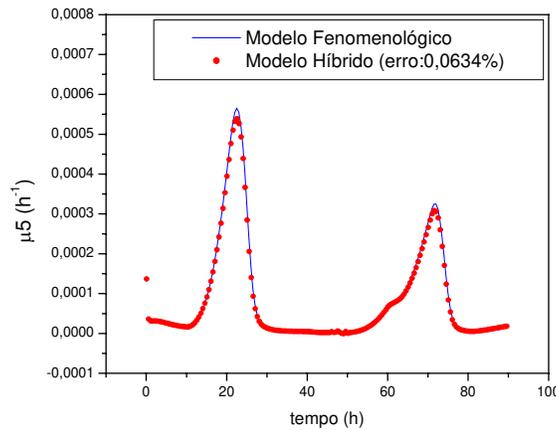


Figura 6.79: Perfil da Velocidade de Crescimento Específico no reator 5, μ_5

Os erros calculados pela equação 6.2 para a rede sem controle de temperatura podem ser melhor visualizados na tabela 6.15.

Tabela 6.15: DPR em porcentagem da média dos valores determinístico

Reator	Desvio Padrão Residual (%)				
	X	S	P	T	μ
1	0,0037	0,1506	0,0323	0,0087	0,0245
2	0,0021	0,3097	0,0147	0,0049	0,0133
3	0,0020	0,7540	0,0126	0,0100	0,0785
4	0,0024	1,4294	0,0149	0,0125	0,0993
5	0,0023	1,9731	0,0143	0,0126	0,0634

Os desvios obtidos pela rede sem controle de temperatura variam de 0,0020 à 1,9731 %, sendo eles aceitáveis (Atala *et al.*, 2001).

6.3. Conclusão

Um bom desempenho foi obtido pela rede neuronal *Functional Link*, pois valores pequenos foram obtidos no desvio padrão residual em forma de porcentagem da média dos valores calculados pelo modelo determinístico (DPR %). Os valores tão baixos se devem ao fato de se tratar de dados obtidos a partir de simulações, com dados experimentais os valores seriam certamente maiores, mas provavelmente ainda dentro da faixa aceitável.

A rede neuronal *Functional Link* pode ser utilizada para predizer o processo e para projeto de controladores de processo, pois além de ter obtido um bom desempenho na predição dos dados de simulação, seu treinamento é rápido e tem convergência garantida. Ainda possibilita a implementação de um esquema adaptativo onde os parâmetros podem ser reestimados freqüentemente dependendo das mudanças do processo.

7. MODELO ADAPTATIVO

7.1. Introdução

Embora os modelos fenomenológicos proporcionem um grande conhecimento a respeito do processo, estes não conseguem acompanhar as variações nas condições operacionais causadas pela adaptação microbiana ou mudanças no meio fermentativo, conseqüentemente os parâmetros do modelo cinético mudam, sendo necessário reestimá-los, mas esse procedimento não é simples e normalmente é demorado. Na verdade, para que o modelo cinético conseguisse acompanhar as mudanças do processo seria necessário um modelo com uma eficiente estimação *on-line* de parâmetros, mas a forte não linearidade presente no modelo matemático dificulta a estimação. O uso do modelo híbrido neuronal proposto no capítulo 6 resolve este problema. Como as taxas cinéticas são descritas por redes neuronais *Functional Link*, cujos pesos aparecem linearmente, torna-se simples propor um esquema de atualização, no qual os pesos são reestimados sempre que necessário. A reestimação *on-line* é fácil e rápida, a convergência é garantida e não requer grande esforço computacional (COSTA, 1998). Assim, mesmo depois que estas redes já foram treinadas com base em dados disponíveis anteriormente, seus pesos podem continuar sendo atualizados durante a aplicação em tempo real. O modelo híbrido neuronal é capaz, então, de se adaptar a possíveis desvios da informação contida no conjunto de treinamento original.

7.2. Atualização dos Pesos da Rede

No esquema de atualização dos pesos proposto, a estrutura das redes neuronais é considerada definida durante a fase de treinamento, ou seja, a estrutura determinada na etapa de treinamento é mantida e os pesos da rede são reestimados usando o estimador ortogonal de BILLINGS *et al* (1989). Para isso, novos dados das variáveis de estado medidos são usados juntamente com alguns dos dados originais de treinamento.

Sempre que se disponha de medidas experimentais ou estimativas das variáveis *on-line*, e que se possa inferir o valor das taxas, pode-se implementar um esquema de reestimação, de forma que o perfil possa ser calculado *on-line*.

Neste trabalho, a taxa cinética (μ) é descrita pela rede neuronal do tipo *functional-link* modificada e um esquema adaptativo pode ser utilizado de maneira simples para a reestimação dos parâmetros a cada passo de amostragem.

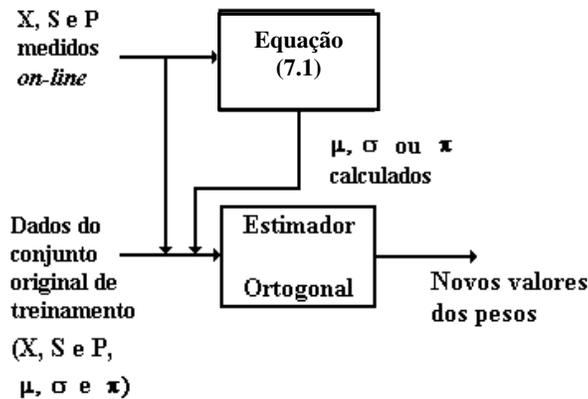


Figura 7.1: Esquema usado para reestimação dos pesos da rede (Costa, 1998)

A figura 7.1 mostra o esquema usado para a atualização dos pesos da rede utilizado por Costa (1998). A cada tempo de amostragem, os valores das variáveis de estado são usados para calcular um valor aproximado para a taxa cinética através da discretização da equação 4.17, equação do balanço da concentração de células no processo para cada reator. A equação 7.1 é a equação 4.17 discretizada.

$$\mu = \frac{X_{i(t+\Delta t)} - X_{i(t)}}{\Delta t X_i} - \frac{F_{i-1} X_{i-1}}{V_i X_i} + \frac{F_i}{V_i} \quad (7.1)$$

Os valores das variáveis de estado e taxa cinética aproximada são adicionados a um arquivo que contém alguns dos dados originais de treinamento e elimina-se deste arquivo uma linha contendo os dados das variáveis de estado e taxa cinética correspondente ao tempo mais antigo. O arquivo resultante é, então, usado para reestimar os pesos da rede. O número de dados do conjunto original de treinamento usado neste estágio define a importância atribuída aos valores medidos *on-line*. Quanto mais dados do conjunto original

de treinamento forem usados, menor a importância atribuída aos dados medidos (COSTA, 1998).

7.3. Modelo Adaptativo Considerando Processo Isotérmico

Utilizando as cinco redes obtidas para o processo isotérmico, foi gerado um esquema adaptativo considerando que a concentração de biomassa, substrato e produto estivessem disponíveis *on-line* a cada tempo de amostragem, gerados a partir da simulação da planta. O tempo de amostragem utilizado foi de 15 minutos, pois com tempos de amostragem maiores a estimação da taxa cinética discretizada, equação 7.1, não calcula bem o valor aproximado da taxa cinética causando erros na estimação dos parâmetros da rede e conseqüentemente, gerando um modelo ruim que não acompanha bem o comportamento da planta com perturbações.

Perturbações aleatórias foram feitas nos parâmetros do modelo cinético de LEE *et al.* (1983) para provocar mudanças no comportamento da planta e assim, verificar se o modelo adaptativo proposto acompanha essas perturbações. A tabela 7.1 mostra as perturbações utilizadas nesses parâmetros.

Tabela 7.1: Perturbação dos parâmetros cinéticos (condições 1 e 2)

Parâmetros Cinéticos	Modelo	Perturbação 1	Perturbação 2
K_S	1,6	1,8	1,4
$Y_{X/S}$	0,033	0,031	0,036
$Y_{P/S}$	0,445	0,44	0,47
N	3,0	2,5	2,8
M	0,9	1,0	0,7
$P_{MÁX}$	103,0	113,0	93,0
$X_{MÁX}$	100,0	80,0	90,0

O número de dados do arquivo original de treinamento é 181 para cada reator, mas de maneira a melhorar o desempenho da rede foram feitos vários testes. O melhor desempenho obtido foi dado pelo seguinte número de dados de treinamento: 44, 46, 48, 66 e 44 respectivamente para cada reator. A cada tempo de amostragem novas linhas contendo

as novas medidas são incorporadas a uma parte do arquivo original dos dados de treinamento e este perde uma linha (contendo os dados de entrada/saída mais antigos).

Utilizando as condições e testes descritos para perturbação 1, as figuras 7.2 a 7.16 mostram os resultados obtidos, onde: o modelo original se trata do modelo cinético e parâmetros utilizado no trabalho de ANDRIETTA (1998), rede original é a rede obtida a partir dos dados de treinamento gerados pelo modelo original, planta é o modelo com perturbações nos parâmetros cinéticos e a rede adaptativa é a rede que tem seus pesos reestimados de acordo com as mudanças nas variáveis de estado.

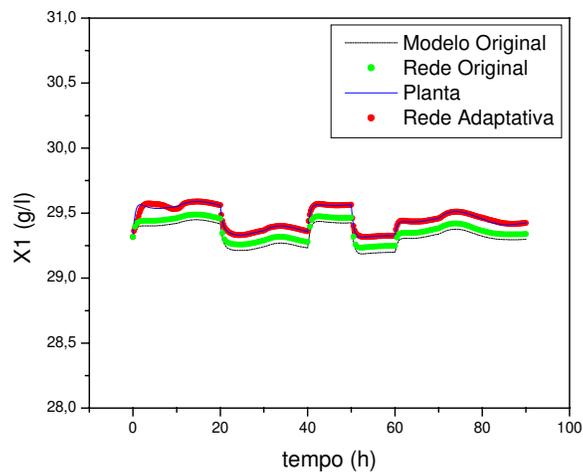


Figura 7.2: Perfil da Concentração de Microorganismos no reator 1, X1.

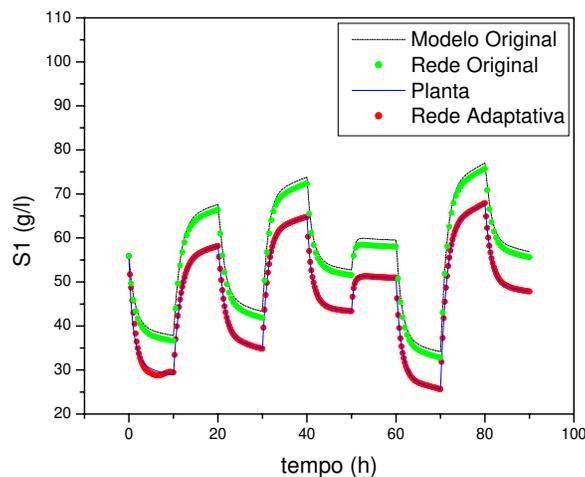


Figura 7.3: Perfil da Concentração de Substrato no reator 1, S1

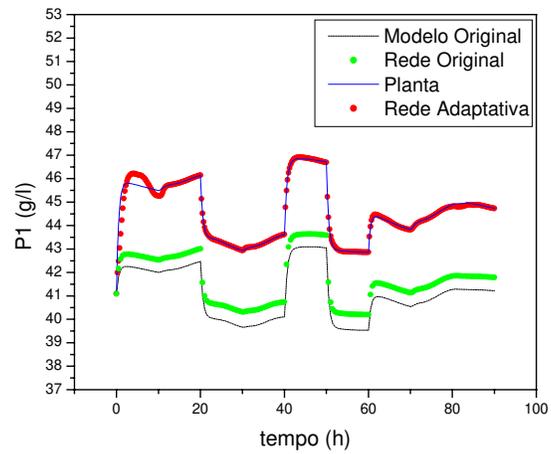


Figura 7.4: Perfil da Concentração de Produto no reator 1, P1

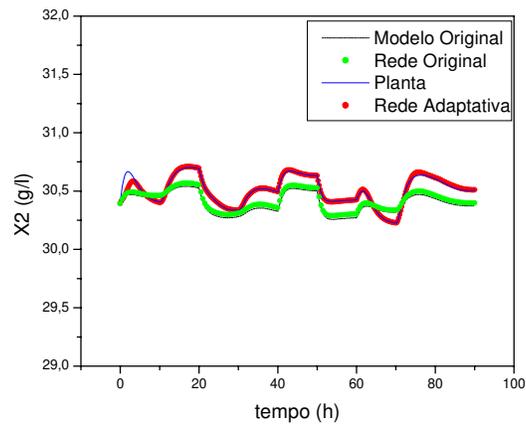


Figura 7.5: Perfil da Concentração de Microorganismos no reator 2, X2

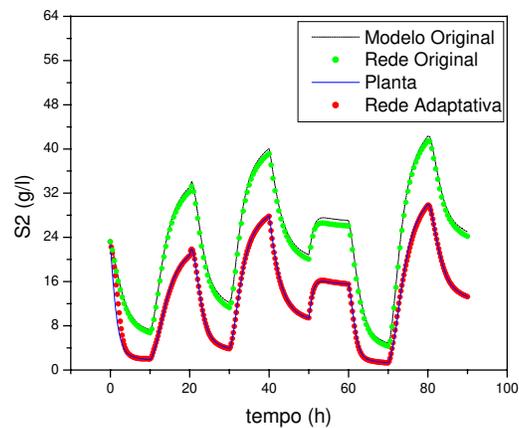


Figura 7.6: Perfil da Concentração de Substrato no reator 2, S2

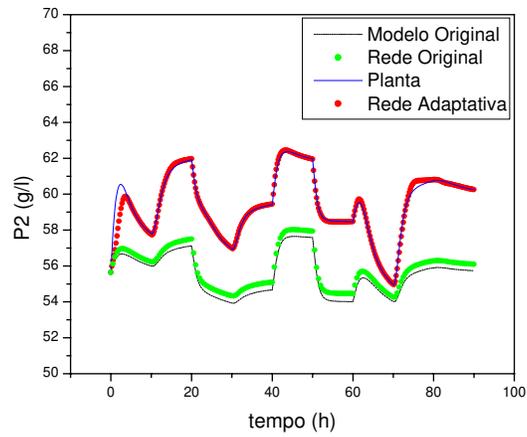


Figura 7.7: Perfil da Concentração de Produto no reator 2, P2

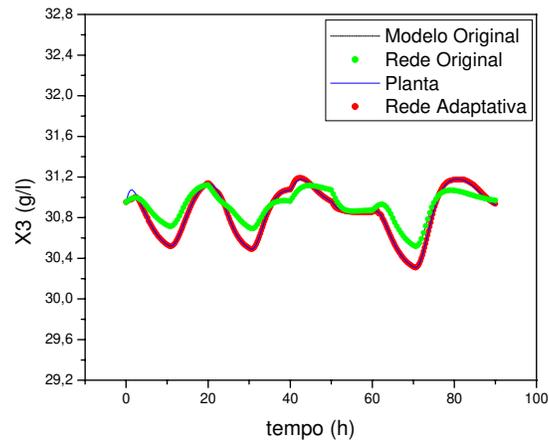


Figura 7.8: Perfil da Concentração de Microorganismos no reator 3, X3

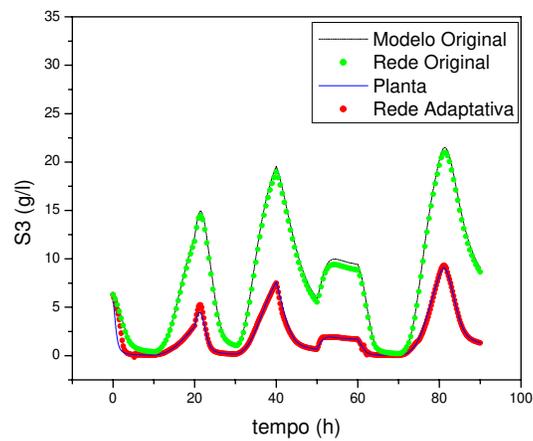


Figura 7.9: Perfil da Concentração de Substrato no reator 3, S3

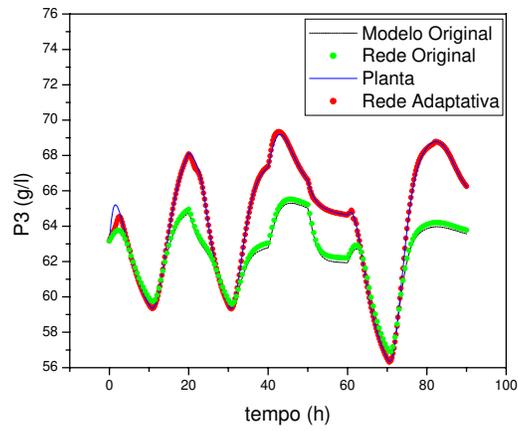


Figura 7.10: Perfil da Concentração de Produto no reator 3, P3

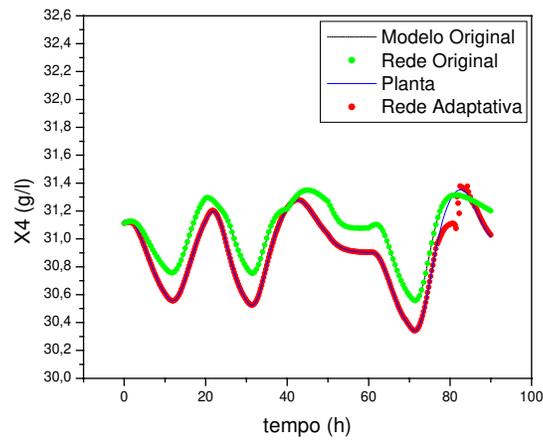


Figura 7.11: Perfil da Concentração de Microorganismos no reator 4, X4

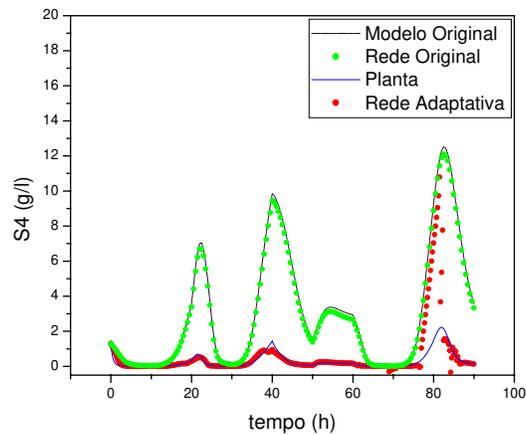


Figura 7.12: Perfil da Concentração de Substrato no reator 4, S4

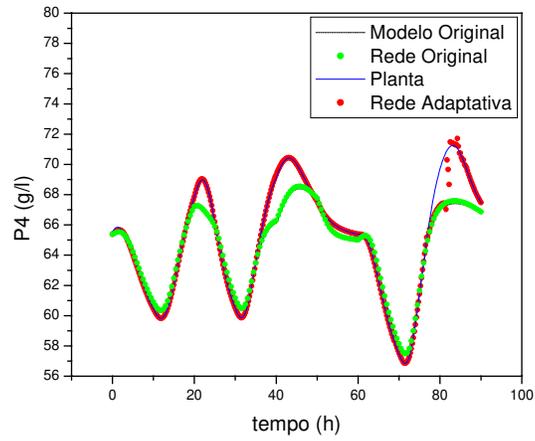


Figura 7.13: Perfil da Concentração de Produto no reator 4, P4

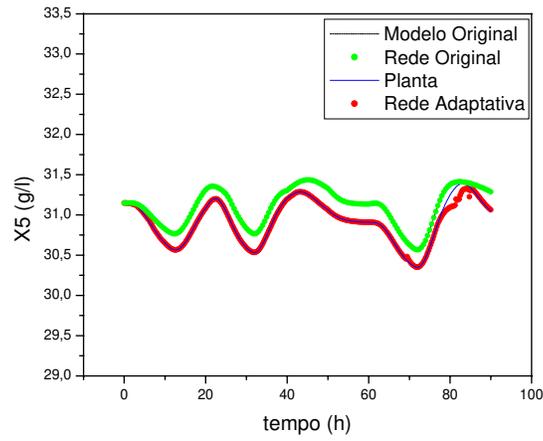


Figura 7.14: Perfil da Concentração de Microorganismos no reator 5, X5

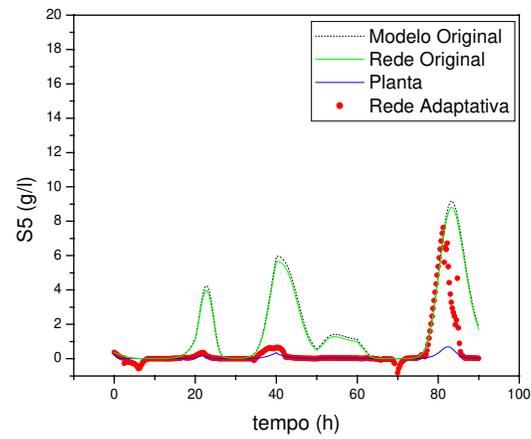


Figura 7.15: Perfil da Concentração de Substrato no reator 5, S5

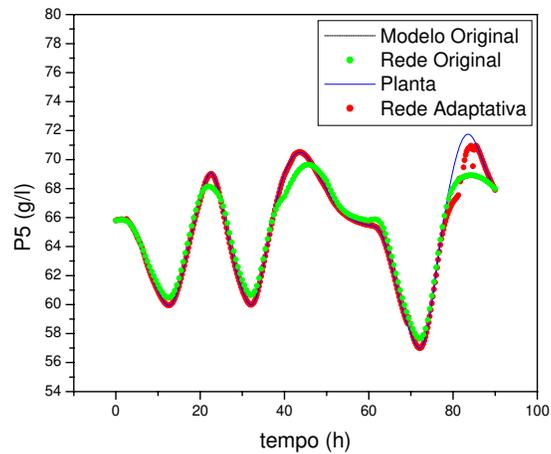


Figura 7.16: Perfil da Concentração de Produto no reator 5, P5

Os erros observados nos dois últimos reatores são dados devido à pequena variação no valor da taxa cinética.

Para que esse modelo pudesse ser aplicado no processo real, seria necessário um tempo de amostragem maior visto que na indústria seria inviável obter dados da planta de 15 em 15 min. Mas um tempo maior causa problemas na estimação dos parâmetros, pois a equação discretizada 7.1 não consegue estimar bem a taxa cinética para um tempo de amostragem grande.

A perturbação 2 foi feita para esse mesmo número de dados utilizado anteriormente cujos resultados podem ser observados nas figuras 7.17-7.31.

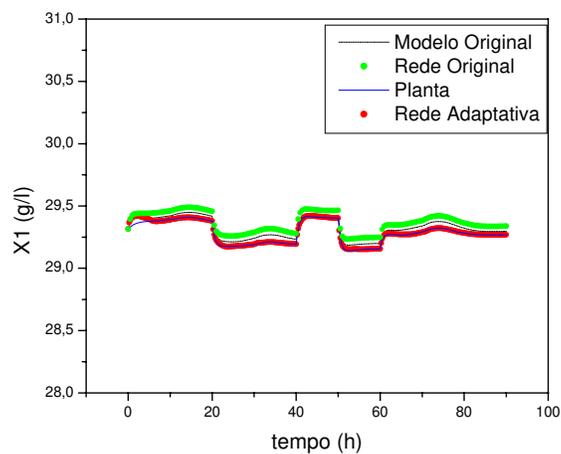


Figura 7.17: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 1, X_1

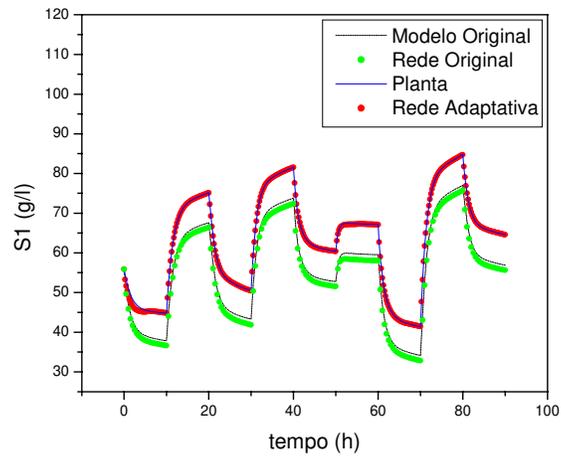


Figura 7.18: Perfil de Concentração de Substrato no reator 1, S_1

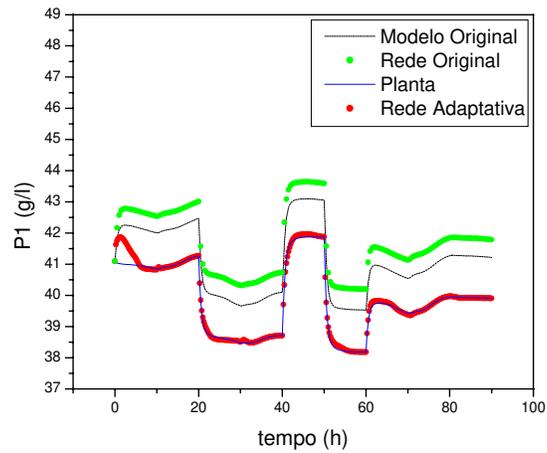


Figura 7.19: Perfil de Concentração de Produto no reator 1, P_1

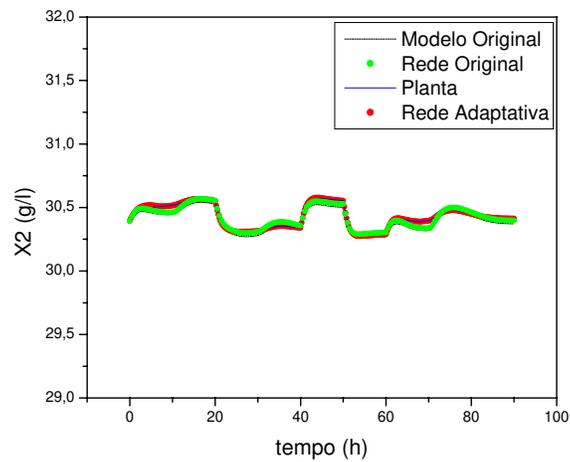


Figura 7.20: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 2, X_2

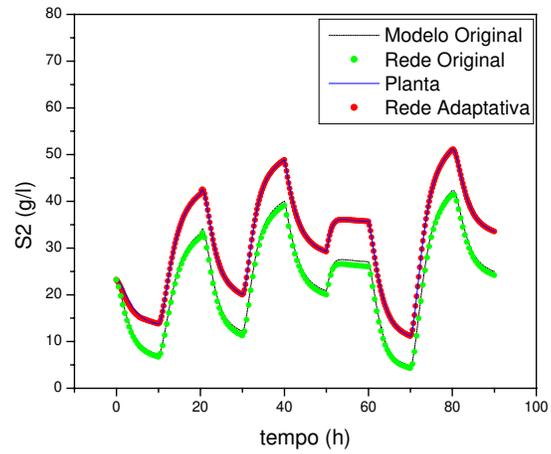


Figura 7.21: Perfil de Concentração de Substrato no reator 2, S_2

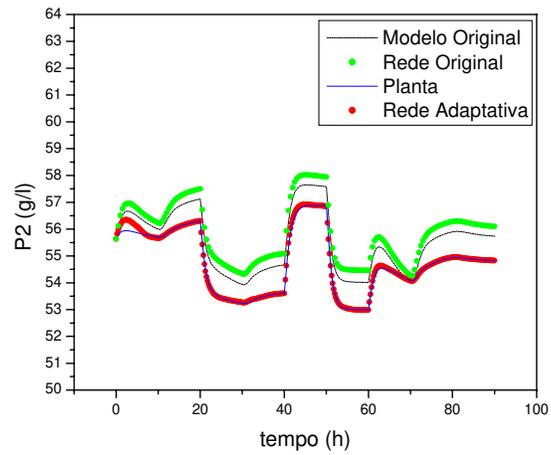


Figura 7.22: Perfil de Concentração de Produto no reator 2, P_2

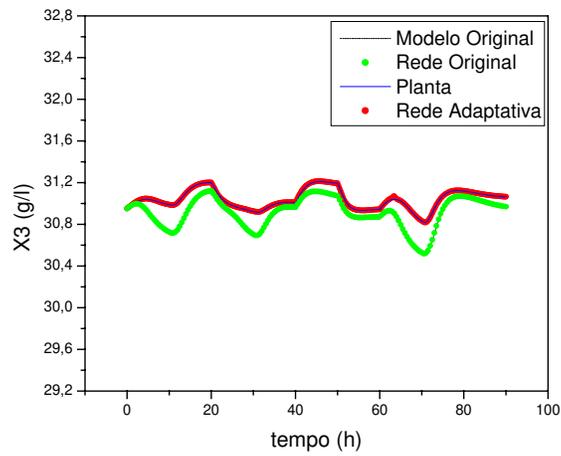


Figura 7.23: Perfil de Concentração de Microrganismos no reator 3, X_3

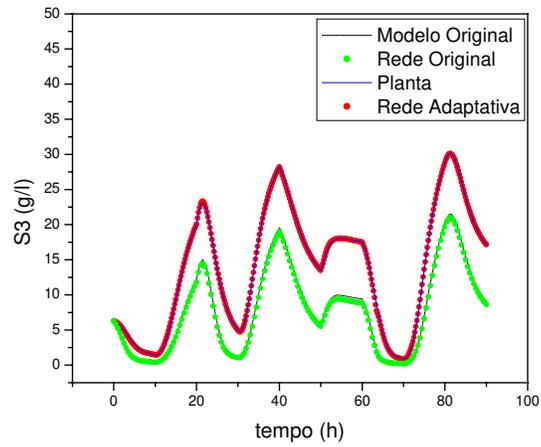


Figura 7.24: Perfil de Concentração de Substrato no reator 3, S_3

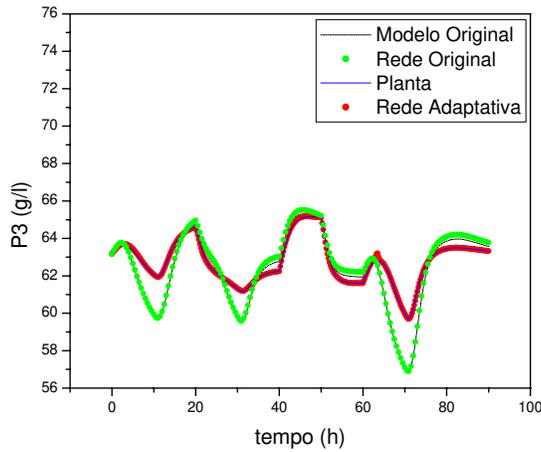


Figura 7.25: Perfil de Concentração de Produto no reator 3, P_3

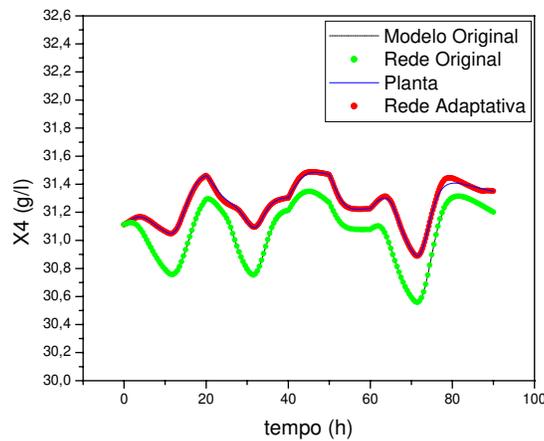


Figura 7.26: Perfil de Concentração de Microorganismos no reator 4, X_4

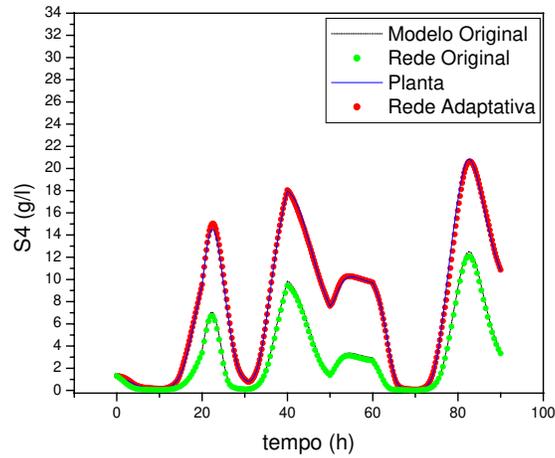


Figura 7.27: Perfil de Concentração de Substrato no reator 4, S_4

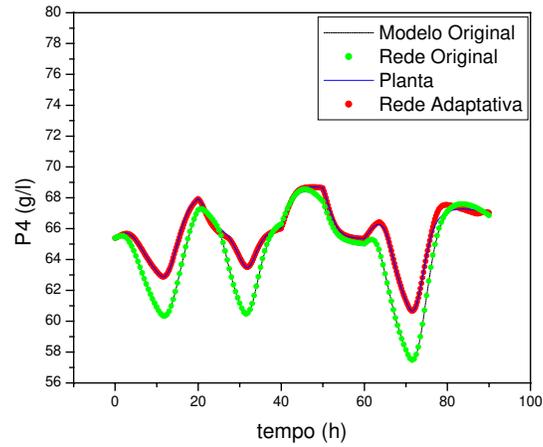


Figura 7.28: Perfil de Concentração de Produto no reator 4, P_4

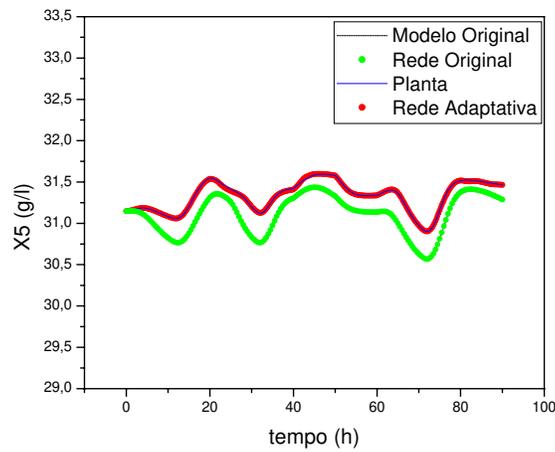


Figura 7.29: Perfil de Concentração de Microorganismos no reator 5, X_5

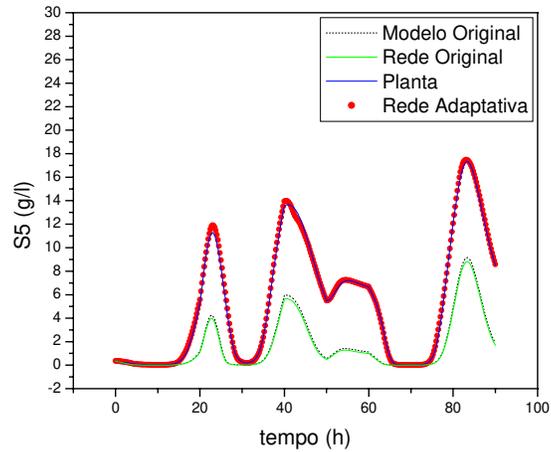


Figura 7.30: Perfil de Concentração de Substrato no reator 5, S_5

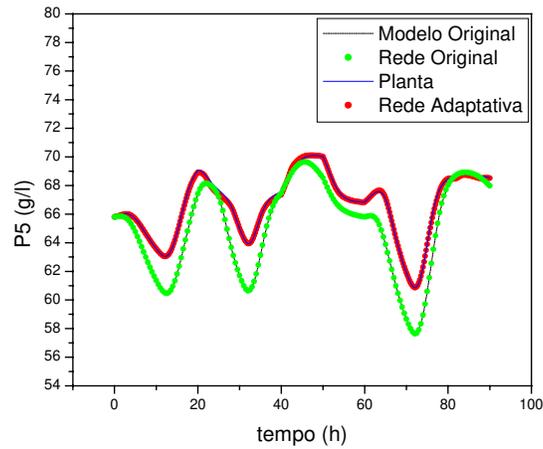


Figura 7.31: Perfil de Concentração de Produto no reator 5, P_5

7.4. Modelo Adaptativo Considerando Processo Não-Isotérmico

Como feito para as redes obtidas para o processo isotérmico também para o processo não-isotérmico, foi gerado um esquema adaptativo considerando que estão disponíveis *on-line* a concentração de biomassa, substrato e produto a cada tempo de amostragem. Os dados foram gerados a partir da simulação da planta e o tempo de amostragem utilizado foi de 15 minutos cuja estimativa da taxa cinética foi obtida através da equação 7.1.

Para verificar o desempenho do modelo adaptativo diante das mudanças que ocorrem na planta, perturbações aleatórias foram feitas nos parâmetros da equação da taxa cinética. A tabela 7.2 mostra as perturbações utilizadas nesses parâmetros.

Tabela 7.2: Perturbação dos parâmetros cinéticos (condição 3)

Parâmetros Cinéticos	Modelo	Perturbação 3
K_S	1,6	1,8
$Y_{X/S}$	0,033	0,036
$Y_{P/S}$	0,445	0,47
N	3,0	2,7
M	0,9	1,1
$P_{MÁX}$	103,0	93,0
$X_{MÁX}$	100,0	90,0

O número de dados do arquivo original de treinamento é 181 para cada reator. Para o processo não-isotérmico considerado a diminuição do número de dados originais não provocou muitas mudanças no desempenho da rede, após alguns testes optou-se em utilizar o seguinte número de dados de treinamento: 181, 181, 181, 161 e 116 respectivamente para cada reator.

O desempenho desse esquema adaptativo utilizando as condições e testes descritos anteriormente é mostrado nas figuras 7.32 a 7.51.

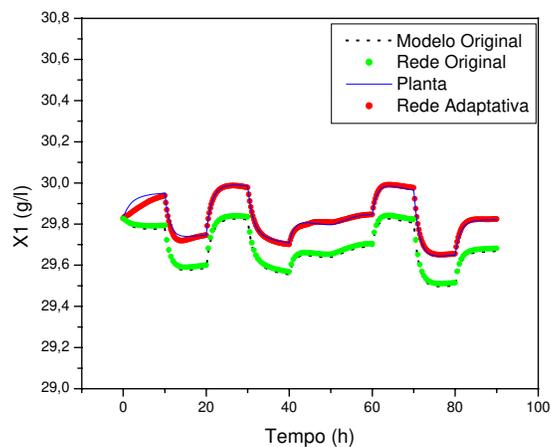


Figura 7.32: Perfil da Concentração de Microorganismo no reator 1, X1

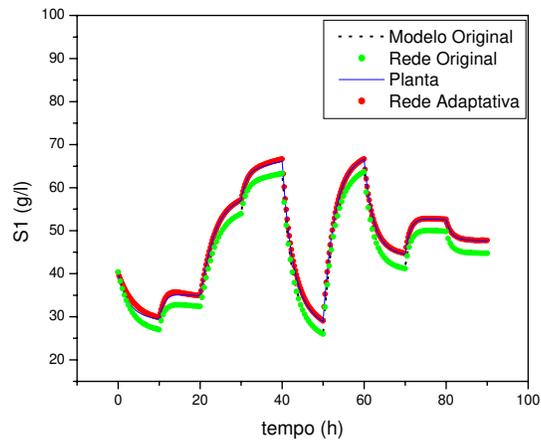


Figura 7.33: Perfil da Concentração de Substrato no reator 1, S1

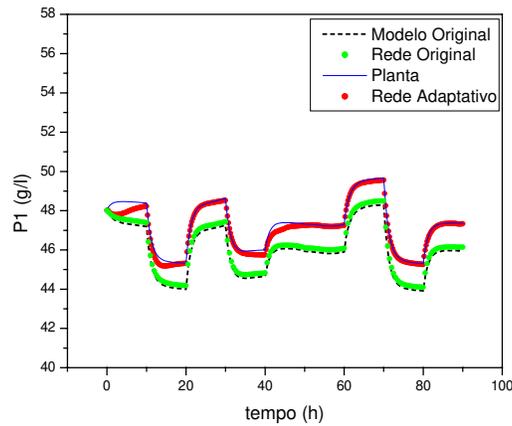


Figura 7.34: Perfil da Concentração de Produto no reator 1, P1

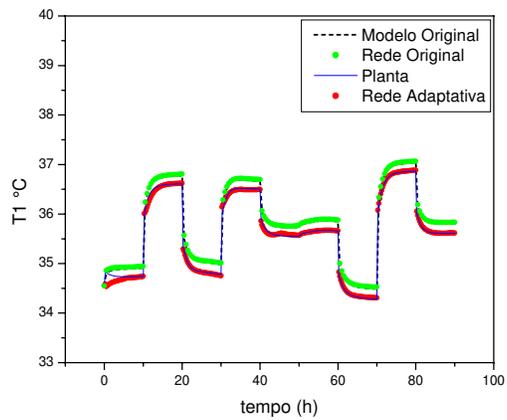


Figura 7.35: Perfil da Concentração de Temperatura no reator 1, T1

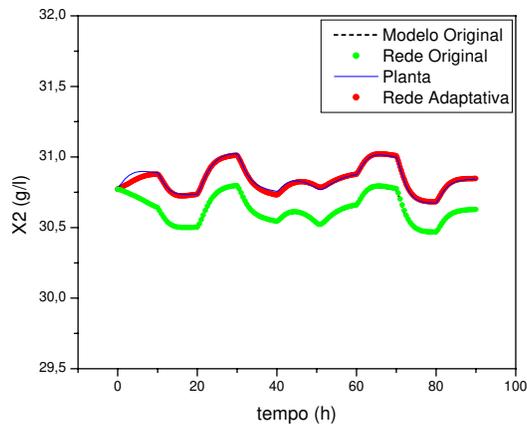


Figura 7.36: Perfil da Concentração de Microorganismo no reator 2, X2

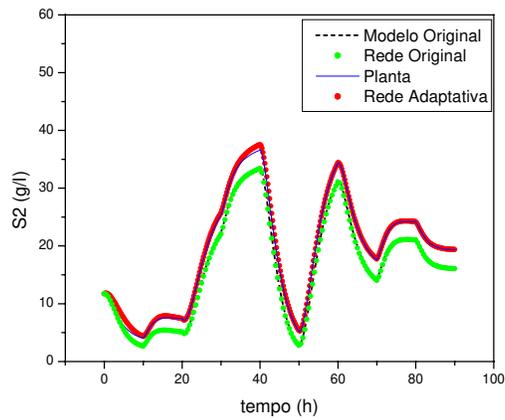


Figura 7.37: Perfil da Concentração de Substrato no reator 2, S2

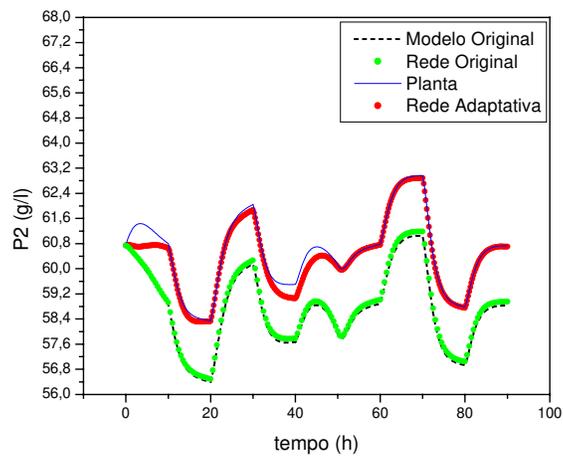


Figura 7.38: Perfil da Concentração de Produto no reator 2, P2

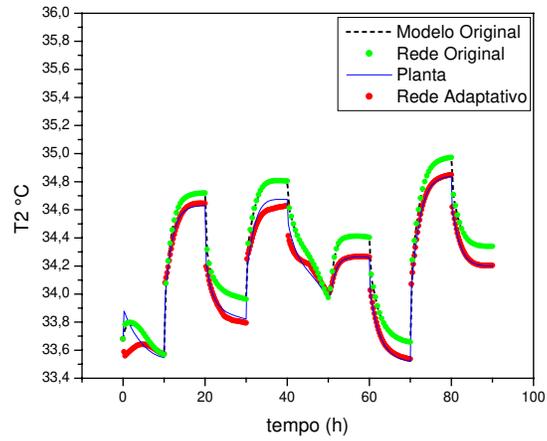


Figura 7.39: Perfil da Concentração de Temperatura no reator 2, T2

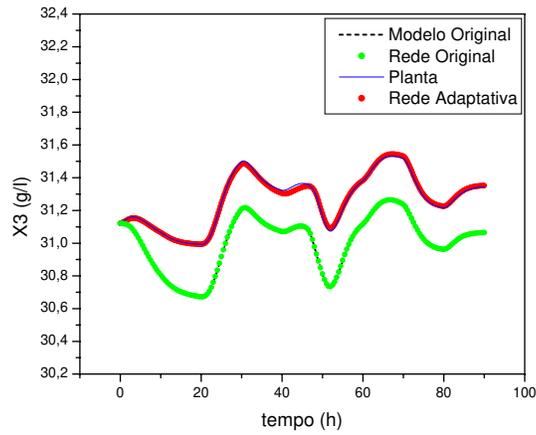


Figura 7.40: Perfil da Concentração de Microorganismo no reator 3, X3

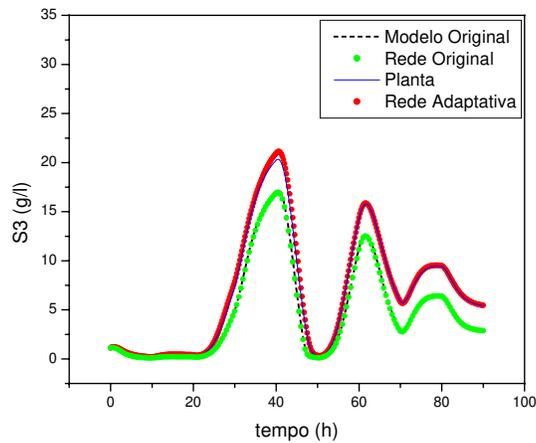


Figura 7.41: Perfil da Concentração de Substrato no reator 3, S3

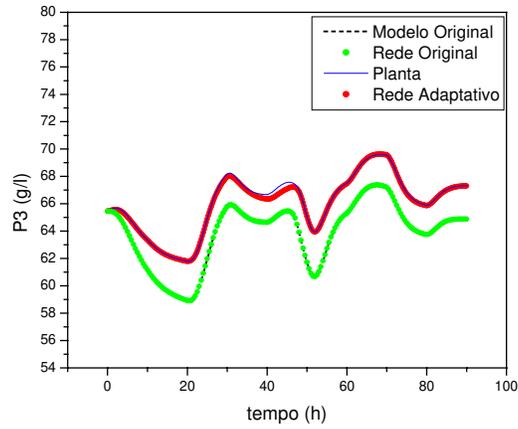


Figura 7.42: Perfil da Concentração de Produto no reator 3, P3

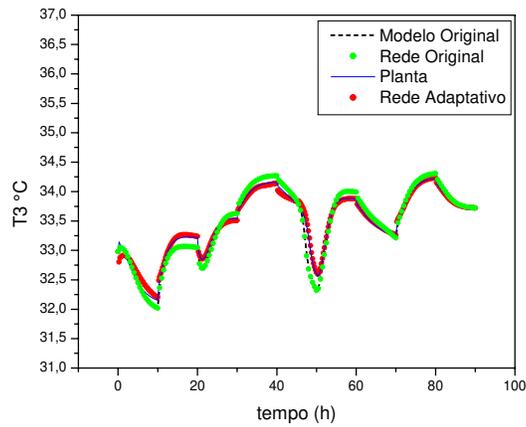


Figura 7.43: Perfil da Concentração de Temperatura no reator 3, T3

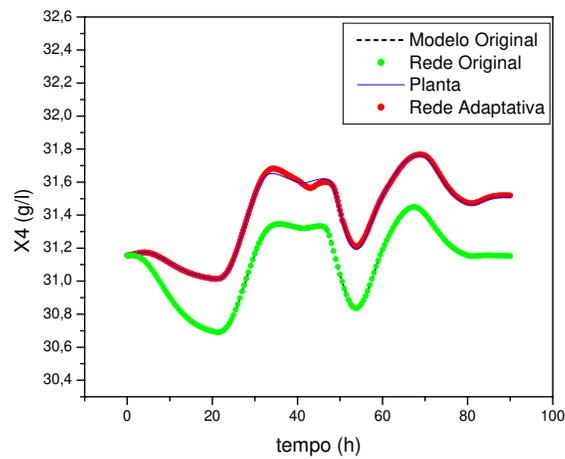


Figura 7.44: Perfil da Concentração de Microorganismo no reator 4, X4

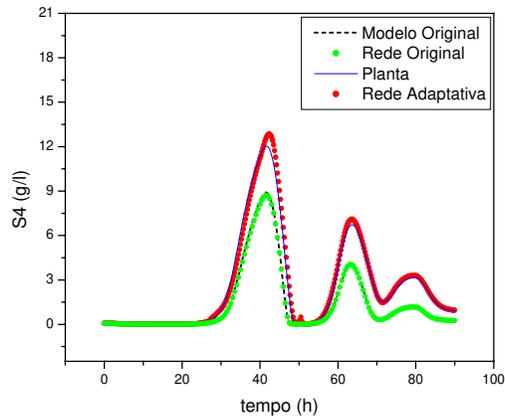


Figura 7.45: Perfil da Concentração de Substrato no reator 4, S4

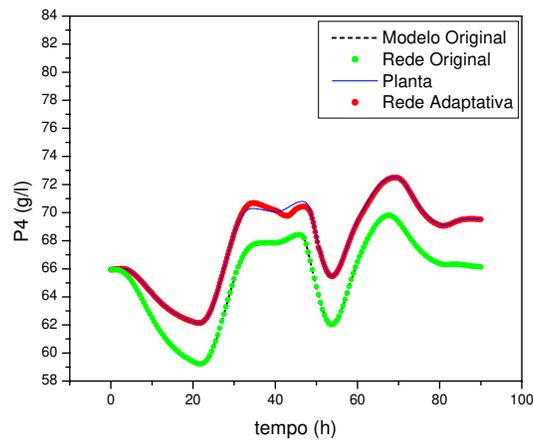


Figura 7.46: Perfil da Concentração de Produto no reator 4, P4

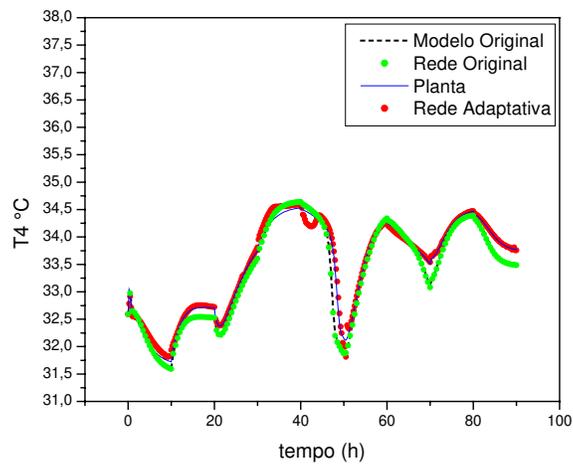


Figura 7.47: Perfil da Concentração de Temperatura no reator 4, T4

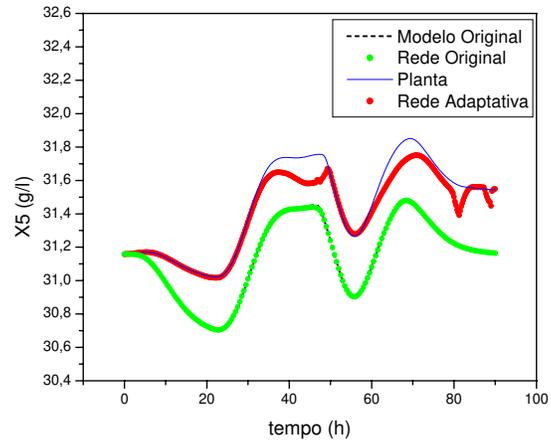


Figura 7.48: Perfil da Concentração de Microorganismo no reator 5, X5

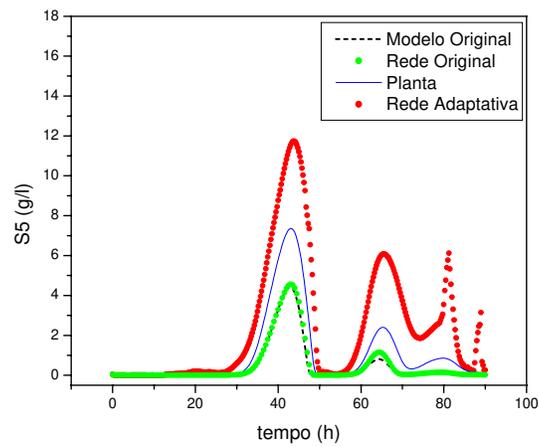


Figura 7.49: Perfil da Concentração de Substrato no reator 5, S5

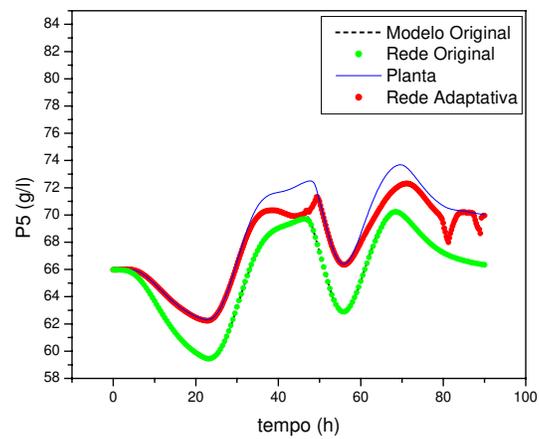


Figura 7.50: Perfil da Concentração de Produto no reator 5, P5

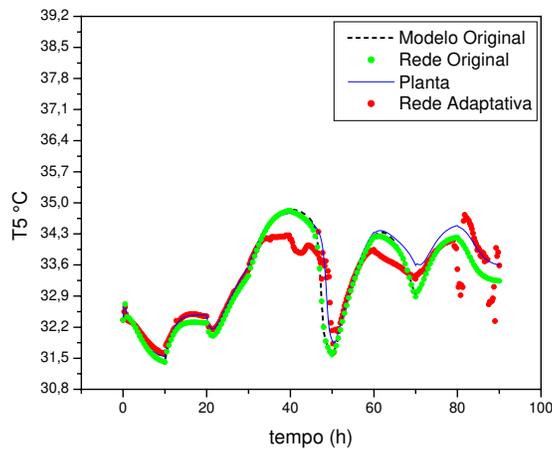


Figura 7.51: Perfil da Concentração de Temperatura no reator 5, T5

Como observado no modelo adaptativo anterior, para o processo não-isotérmico o último reator também apresenta desvios maiores no comportamento quando comparado com os demais reatores, e essas diferenças podem ser explicadas devido à pequena variação dos valores da taxa cinética do processo no último reator.

Um tempo de amostragem maior não foi possível utilizar neste trabalho, pois a estimação da taxa cinética não apresentou bons resultados. Mas um tempo de amostragem de quinze minutos pode ser suficiente dependendo dos equipamentos e métodos de análise utilizados (MAUGERI, 2005). A estimação da taxa cinética para de tempos de amostragem maiores pode ser melhorada através de outras formas, a partir de dados medidos da planta, pois a rede apresenta bom desempenho na estimação dos novos parâmetros do modelo se a taxa cinética estiver bem estimada, principalmente pelo fato de que a variação da taxa cinética diante das perturbações é muito pequena e isso dificulta a estimação dos parâmetros. Por isso é importante que a taxa cinética esteja bem estimada a partir das variáveis de estado obtidos na planta.

7.5. Conclusão

Um modelo simples foi obtido utilizando a FLN, facilitando a implementação de um modelo adaptativo. A FLN tem algumas vantagens porque a estimação dos pesos é linear, o que torna a estimação dos pesos um processo fácil e rápido.

A estrutura da rede definida durante a fase de treinamento foi mantida e novos dados obtidos da planta foram usados junto com os dados originais. O tempo de amostragem utilizado foi de 15 min, não sendo possível aumentar esse tempo devido à dificuldade de se estimar a taxa cinética (μ) a partir das variáveis de estado medidas da planta.

A partir do esquema adaptativo proposto pode-se verificar a facilidade de se implementar a re-estimação *on-line* dos pesos da rede utilizando uma FLN. O modelo híbrido adaptativo teve um bom desempenho diante das perturbações da planta, acompanhando bem o comportamento da planta diante dessas perturbações. Foi observado que os últimos reatores apresentam um desvio maior no comportamento, mas que podem ser justificados devido à pequena variação da taxa cinética neste.

E ainda, foi verificada a importância de se obter medidas precisas e bem estimadas como no caso da taxa cinética para se obter bons resultados no desempenho do modelo adaptativo.

8. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Muitos estudos têm investigado formas de manter o alto rendimento e aumentar a produtividade dos processos relacionados à produção de etanol, o interesse é grande tanto do mercado brasileiro como do mercado mundial, principalmente após os vários incentivos com relação a cota de dióxido de carbono que poderá ser emitida pelos países mais desenvolvidos segundo o tratado de Kyoto. Estratégias e projetos de controle são definidos de maneira a obter os melhores resultados desses processos, mas são muitas vezes comprometidos pelo comportamento dinâmico complexo desses sistemas.

No processo em estudo, inicialmente composto por quatro reatores em série, o número de reatores passou a ser cinco aumentando a produção de etanol e conseqüentemente aumentando a complexidade do processo que passou ter um número maior de variáveis e parâmetros no processo.

A análise de sensibilidade permitiu observar que a maior parte dos parâmetros cinéticos influencia na taxa de crescimento específico, ou seja, qualquer mudança nesses parâmetros pode provocar uma grande mudança no comportamento dinâmico devido a grande influencia da cinética no processo. Por isso, a determinação precisa destes parâmetros é importante para uma boa representação da cinética.

Um bom desempenho foi obtido pela rede neuronal *Functional Link*, pois valores pequenos foram obtidos no desvio padrão residual em forma de porcentagem da média dos valores calculados pelo modelo determinístico (DPR %).

A rede neuronal *Functional Link* pode ser utilizada para predizer o processo e para projeto de controladores de processo, pois além de ter obtido um bom desempenho na predição dos dados de simulação, seu treinamento é rápido, e, ainda, possibilita a implementação de um esquema adaptativo onde os parâmetros podem ser re-estimados freqüentemente dependendo das mudanças do processo.

No esquema adaptativo implementado, novos dados obtidos da planta foram usados junto com os dados originais, estrutura da rede definida durante a fase de treinamento.

O modelo híbrido adaptativo teve um bom desempenho diante das perturbações da planta, acompanhando bem o comportamento da planta diante dessas perturbações nos

parâmetros cinéticos para um tempo de amostragem de 15 min. A pequena variação da taxa cinética no último reator pode justificar um desvio maior de comportamento do modelo adaptativo em relação à planta no último reator.

Foi verificada a importância de se obter medidas precisas e bem estimadas como no caso da taxa cinética para se obter bons resultados no desempenho do modelo adaptativo.

Para casos em que se requer um tempo de amostragem maior será necessário estudos para melhorar a forma de estimar a taxa cinética (μ) a partir das variáveis de estado medidas da planta que podem ser feitos em trabalhos futuros.

Como sugestão para trabalhos futuros: pode-se testar dados adimensionalizados verificando se este melhoraria os resultados, podendo até aumentar o tempo de amostragem a ser utilizado pelas redes; pode-se testar as redes obtidas neste trabalho como soft-sensors; pode-se testar o treinamento da rede utilizando dados reais obtidos diretamente da indústria e tentar implementar o esquema adaptativo verificando quais seriam os resultados; e ainda, pode-se obter redes utilizando modelos cinéticos fenomenológicos que consideram a presença de substratos diferentes (glicose e frutose), já que a glicose é consumida preferencialmente pelos microorganismos em relação a frutose.

9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFIAS

ACUÑA, G.; LATRILLE, E.; BÉAL, C. E.; CORRIEU, G. Static and Dynamic Neural Network Models for Estimating Biomass Concentration During Thermophilic Lactic Acid Bacteri Batch Cultures. *Journal of Fermentation and Bioengineering*, v. 85, n° 6, p. 615-622, 1998.

ANDRIETTA, S.R. *Modelagem, Simulação e Controle de Fermentação Alcoólica Contínua em Escala Industrial*. 1994. Tese de Doutorado, FEA/UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

ANDRIETTA, S. R.; MAUGERI, F. Optimum design of a contínuos fermentation unit of na industrial plant alcohol production. *Advances in Bioprocess Engineering*, p. 47-52, 1994.

ANDRIETTA, S. R. 2005. Comunicação pessoal.

ATALA, D.I.P.; COSTA, A. C.; Maciel Filho, R.; Maugeri Filho, F. Kinetics of Ethanol Fermentation with High Biomass Concentration Considering the Effect of Temperature”, *Applied Biochemistry and Biotechnology* , v. 91-3, 353-365, 2001.

AZEVEDO, S. F.; DAHM, B.; OLIVEIRA, F. R. Hybrid Modelling of Biochemical Process: A Comparison with the Conventional Approach. *Computers and Chemical Engineering*, v. 21, S751-S756,1997.

BARRERO, M. A. V.; PEREIRA, J. T. V.; MIRANDA, E. E. An Environmental Management Method for Sugar Cane Alcohol Production in Brazil. *Biomass & Bioenergy*, v. 25, p. 287-299, 2003.

BARROS NETO, B., SCAMINIO, I. S., BRUNS, R. E. *Planejamento e Otimização de Experimentos*. 2 ed. Editora da UNICAMP. 1996.

BHAT, N.; McAVOY, T. J. Use of Neural Nets for Dynamic Modeling and Control of Chemical Process Systems. *Computers and Chemical Engineering*, v. 14, n° 4/5, p. 573-583, 1990.

BILLINGS, S.A.; CHEN, S.; KORENBERG, M.J. Identification of MIMO Non-Linear Systems Using a Forward-Regression Orthogonal Estimator. *Int. J. Control*, v 49, p. 2157-2189, 1989.

BROWN, M.; HARRIS, C. *Neurofuzzy Adaptative Modelling and Control*. Prentice Hall, 1994.

CHEN, S.; BILLINGS, S. A. Neural Networks for Nonlinear Dynamic System Modelling and Identification. *International Journal of Control*, v. 56, n° 2, p. 319-346, 1992.

CHEN, H. C. Optimizing the Concentration of Carbons, Nitrogen and Phosphorus in a Citric Acid Fermentation with Response Surface Method. *Food Biotechnology*, v.10, 13-27, 1996.

CLERAN, Y.; THIBAUT, J., CHERUY, A.; CORRIEU, G. Comparison of Prediction Performances Between Models Obtained by the Group Method of Data Handling and Neural Networks for the Alcoholic Fermentation Rate in Enology. *Journal of Fermentation and Bioengineering*, v. 71, n° 5, p. 356-362, 1991.

- COSTA, A. C. *Controle Ótimo Adaptativo em Processos Fermentativos*. 1998. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro-RJ.
- COSTA, A. C.; ALVES, T. L. M.; HENRIQUES, A. S. W.; MACIEL FILHO, R.; LIMA, E. L. An Adaptative optimal control scheme based on hybrid neural modelling. *Computers and Chemical Engineering*, v.16, n° 1, 53-63, 1998.
- COSTA, A. C., HENRIQUES, A. S. W., ALVES, T. L. M., MACIEL FILHO, R. e LIMA, E. L., A Hybrid Neural Model for Optimization of Fed-Batch Fermentation. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v.16, n° 1, 53-63, 1999.
- COSTA, A. C.; MELEIRO, L.A.C., MACIEL FILHO, R. Non-Linear Predictive Control of an Extractive Alcoholic Fermentation Process. *Process Biochemistry*, v. 38/5, p.743-750, 2002.
- DECHECHI, E. C. *Controle “DMC” de um Processo de Fermentação Alcoólica Contínuo em Escala Industrial*. 1996. Dissertação de Mestrado - Faculdade de Engenharia Química, DPQ, UNICAMP. Campinas.
- DECHECHI, E. C. *Controle avançado preditivo adaptativo “DMC” multivariável adaptativo*. 1998. Tese de Doutorado - Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP. Campinas.
- GLASSEY, J.; MONTAGUE, G. A.; WARD, A. C.; KARA, B. V. Artificial Neural Network Based Experimental Design Procedures for Enhancing Fermentation Development. *Biotechnology and bioengineering*, v. 44, p. 397-405, 1994.
- GOLDEMBERG, J.; COELHO, S. T.; LUCON, O. How Adequate Policies Can Push Renewables. *Energy Policy*, v. 32, p. 1141-1146, 2004.

GONTARSKI, C., A., U. *Avaliação da Utilização da Redes Neurais Aplicadas a Processos Químicos*. 2000. Dissertação de Doutorado - Faculdade de Engenharia Química, DPQ, UNICAMP. Campinas.

GOUVEIA, V. L. R. *Modelagem Dinâmica de Bioprocessos por Modelos Híbridos*. 2000. Dissertação de Mestrado - Faculdade de Engenharia Química, DPB, UNICAMP. Campinas.

GURNEY, K. *An Introduction to Neural Networks*. UCL Press, London. 1996.

HARADA, L. H. P., COSTA, A. C., MACIEL FILHO, R. Hybrid Neural Modeling of Bioprocesses using Functional Link Networks. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, v. 98-1-3, p. 1009-1024, 2002.

HAYKIN, S. *Redes Neurais: Princípios e Prática*. 2ed. Tradução: Paulo Martins Engel. Porto Alegre: Bookman, 2001.

HEBB, D. O. *The Organization of Behaviour*, Wiley, 1949.

HENRIQUE, H. M. 1999. Comunicação Pessoal.

HIMMELBLAU, D. M.; KARJALA, T. W. Rectification of Data in a Dynamic Process using Artificial Neural Networks. *Computers and Chemical Engineering*, v. 20, n°6/7, p. 805-812, 1996.

- HOSKINS, J. C.; HIMMELBLAU, D. M.; Process Control via Artificial Neural Networks and Reinforced Learning. *Computers and Chemical Engineering*, v. 16, n° 4, p. 241-251, 1992.
- HOPFILELD, J. J. Neural Networks and Physical System with Emergent Collective Computational Abilities. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, v. 79, p. 2554-2558, 1982.
- HUSSAIN, M. A. Review of the Applications of Neural Networks in Chemical Process Control-Simulation and Online Implementation. *Artificial Intelligence in Engineering*, v. 13, p. 55-68, 1999.
- IORDACHE, O.; CORRIOU, J. P.; GARRIDO-SANCHEZ, L.; FONTEIX, C.; TONDEUR, D. Neural Network Frames: Application to biochemical kinetic diagnosis. *Computers and Chemical Engineering*, v. 17, n° 11, p. 1101-1113, 1993.
- KALIL, S. J.; MAUGERI, F.; RODRIGUES, M. I. Response Surface Analysis and Simulation as a Tool for Bioprocess Design and Optimization. *Process Biochemistry*, v. 35, 539-550, 2000.
- LEE, J. M.; PALLARD, J. P.; COULMAN, G. A. Ethanol fermentation with cell recycling: computer simulation. *Biotechnology and Bioengineering*, New York, v.25, n° 2, p.497-511, Feb. 1983.
- LIMA, U. A., AQUARONE, E., BORZANI, W., SCHMIDELL, W. *Biotecnologia Industrial: Fundamentos*. 1 ed. São Paulo – SP, Editora Edgard Blucher, 2001a. v. 1.
- LIMA, U. A., AQUARONE, E., BORZANI, W., SCHMIDELL, W. *Biotecnologia Industrial: Processos Fermentativos e Enzimáticos*. 1 ed. São Paulo – SP, Editora Edgard Blucher, 2001b. v. 3.

LINKO, P.; ZHU, Y. H. Neural Network Programming in Bioprocess Variable Estimation and State Prediction. *Journal of Biotechnology*, v. 21, n° 3, p. 253-269, 1991.

LINKO, S.; LUOPA, J.; ZHU, Y. H. Neural Networks as 'Software Sensors' in Enzyme Production. *Journal of Biotechnology*, v. 52, n° 3, p. 257-266, 1997.

MAUGERI, F. 2005. Comunicação pessoal.

Mc CULLOCH, W. S.; PITTS, W. A Logical Calculus if Ideas Immanent in Nervous Activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, v. 5, p. 115-133, 1943.

MELEIRO, L. A. C.; MACIEL FILHO, R. A Self-tuning Adaptive Control Applied to an Industrial Large Scale Ethanol Production. *Computers & Chemical Engineering*, v. 24, p. 925-930, 2000.

MELEIRO, L. A. C. *Projeto e Aplicação de Controladores Baseados em Modelos Lineares, Neurais e Nebulosos*. 2002. Tese de Doutorado - Engenharia Química, DPQ, UNICAMP. Campinas.

MOREIRA, J. R.; GOLDEMBERG, J. The Alcohol Program. *Energy Policy*, v.27, p. 229-245, 1999.

MILTON, J.S., ARNOLD, J.C., *Introduction to Probability and Statistics*. New York: McGraw Hill, 1990.

MINSKY, M., PAPPERT, S. *Perceptron*. Cambridge: MA: MIT Press, 1969.

- NAGATA, Y.; CHU, K. H. Optimization of a Fermentation Medium Using Neural Networks and Genetic Algorithms. *Biotechnology Letters*, v. 25, n°21, p. 1837-1842, 2003.
- PAO, Y. H. Adaptive Pattern Recognition and Neural Networks. *Addison-Wesley Publishing Company, Inc.* 1989.
- PATNAIK, P. R. An Integrated Hybrid Neural System for Noise Filtering, Simulation and Control of a Fed-Batch Recombinant Fermentation. *Biochemical Engineering Journal*, v. 15, p. 165-175, 2003.
- PHAM, D. T. An Introduction to Artificial Neural Networks. In: *BULSARI, A. B. Neural Networks for Chemical Engineers*, v. 6, p. 1-19, 1995.
- PSICHOGIOS, D. C.; UNGAR, L. H. A Hybrid Neural Network-first Principles Approach to Process Modeling. *AICHE Journal*, v. 38, n° 10, p. 1499-1511, 1992.
- RADKE, E., COSTA, A.C.; MACIEL FILHO, R. Two Hybrid Neural Models for Batch Alcoholic Fermentation. submetido a *Process Biochemistry*, 2002.
- ROSENBLATT, F. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychology Review*, v. 65, p. 386-408, 1958.
- RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning Internal Representations by Error Propagation. *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructures of Cognition*. MIT Press: Cambridge:MA: 1986a.

- RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning Representations by Back-propagation Errors. *Nature*, v. 323, p. 533-536, 1986b.
- SAVKOVIC-STEVANOVIC, J. Neural Network for Process Analysis Optimization: Modeling and Applications. *Computers and Chemical Engineering*, v. 18, n° 11/12, p. 1149-1155, 1994.
- SAXÉN, B.; SAXÉN, H. A Neural Network Based Model of Bioreaction Kinetics. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 74, p. 124-131, 1996.
- SHENE, C.; DIEZ, C.; BRAVO, S. Neural Networks for Prediction of State of *Zymomonas Mobilis* CP4 Batch Fermentations. *Computers and Chemical Engineering*, v. 23, p. 1097-1108, 1999.
- SILVA, F. L. H., RODRIGUES, M. I., MAUGERI, F. Dynamic Modelling, Simulation and Optimization of an Extractive Continuous Alcoholic Fermentation. *J. Chem. Tech. Biotechnol.*, v. 74, p. 176-182, 1999.
- SILVA, L. N. C. *Análise e Síntese de Estratégias de Aprendizado para Redes Neurais Artificiais*. 1998. Dissertação de Mestrado - Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, UNICAMP, Campinas.
- SYU, M.; TSAO, G. T. Neural Network Modeling of Batch Cell Growth Pattern. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 42, p. 376-380, 1993.
- SZKLO, A. S.; SCHAEFFER, R.; SCHULLER, M. E.; CHANDLER, W. Brazilian Energy Policies Side-effects on CO₂ Emissions Reduction. *Energy Policy*, v. 33, p. 349-364, 2005.

- THIBAUT, J.; VAN BREUSEGEM, V.; CHÉRU, A. On-line Prediction Fermentation Variables Using Neural Networks. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 36, p. 1041-1048, 1990.
- TSAPTINOS, D. Backpropagation and its Variations. In: *BULSARI, A. B. Neural Networks for Chemical Engineers*, v. 6, p. 33-75, 1995.
- UDOP - Usinas e Destilarias do Oeste Paulista. *Álcool: História de um combustível sustentável*. Disponível em: www.udop.com.br/index.php?cod=38495&tipo=clipping
Consulta: 16/01/2006.
- WHEALS, A. E.; BASSO, L. .; ALVES, D. M. G.; AMORIM H. V. Fuel Ethanol after 25 Years. *Focus*, v. 17, p. 482-487, 1999.
- WIDROW, B.; HOFF, M. E. Adaptive Switching Circuits. *IRE WESCON Convention Record*, p. 96-104, 1960.
- WILAMOWSKI, B. M. Neural Network Architectures and Learnig. *IEEE Auburn Univerity*, USA, 2003. (http://164.8.231.2/ICIT03/tech_prog/Tutorial_Wilamowski.pdf)
- YDSTIE, B. E. Forecasting and Control Using Adaptative Connectionist Networks. *Computers Chemical and Engineering*, v. 14, n° 4/5, p. 583-599, 1990.
- ZHU, Y. H.; RAJALAHTI, T.; LINKO, S. Application of Neural Networks to Lysine Production. *The Chemical Engineering Journal*, v. 62, n°3, p. 207-214, 1996.

ZORZETTO, L. F. M.; MACIEL FILHO, R.; WOLF-MACIEL, M. R. Process Modelling Development Through Artificial Neural Networks and Hybrid Models. *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, p. 1355-1360, 2000.

APÊNDICE A

A.1. Fermentação Alcoólica - O Metabolismo no Interior da Célula

O açúcar predominante na cana-de-açúcar é a sacarose. Os açúcares redutores compõem-se primordialmente de glicose e frutose, esses aparecem em quantidades quase iguais nas canas verdes. À medida que amadurecem, diminuem seus teores, podendo desaparecer nas canas completamente maduras. O teor de frutose diminui primeiro (LIMA *et al.*, 2001b). No Brasil, de abril a junho a cana-de-açúcar está verde, ela está crescendo e a pureza do caldo é baixa. A partir de junho começa o inverno, período de seca, a cana-de-açúcar começa a amadurecer, ela pára de crescer e começa a formar reserva, a pureza aumenta, isso ocorre durante junho, julho, agosto e setembro. Em outubro volta a chover e a cana-de-açúcar começa a brotar e diminuir novamente a pureza (ANDRIETTA, 2005). Por influência dos fatores que influem na composição da matéria-prima, a cana-de-açúcar pode conter 74,5% de água, 14% de açúcares (12,5 de sacarose, 0,9 de dextrose e 0,6 de frutose) 10% de fibras e o restante dividido entre matérias minerais, compostos nitrogenados, ceras, pectinas e ácidos.

O caldo obtido pela moagem da cana-de-açúcar encerra entre 78-86% de água, 10 a 20 % sacarose, 0,1 e 2% açúcares redutores, 0,3 e 0,5% cinzas e entre 0,5 e 1,0% de compostos nitrogenados. O pH do caldo varia entre 5,2 e 6,8 (LIMA *et al.*, 2001b).

A cana-de-açúcar no Brasil produz de acordo com a região, entre 50 e 100 toneladas por hectare, em grandes culturas e em condições normais (LIMA *et al.*, 2001b). A proporção de caldo produzido pela moagem é, em litros, de 50 a 100% do peso de cana, isto é tonelada pode dar de 500 a 1000 litros de caldo. Admite-se uma média de 850 litros para usinas de açúcar reduzindo-se nas fábricas de aguardente e álcool. A proporção, entretanto, depende da instalação esmagadora e da embebição (LIMA *et al.*, 2001b).

APÊNDICE B

B.1. Produtos Secundários da Fermentação

A transformação do açúcar (glicose) em etanol e gás carbônico envolve 12 reações em seqüência ordenada, cada qual catalisada por uma enzima específica. Tal aparato enzimático está confinado no citoplasma celular, sendo, portanto nessa região da célula que a fermentação alcoólica se processa como é verificado na figura A.1. Essas enzimas, referidas como glicolíticas, sofrem ações de diversos fatores (nutrientes, minerais, vitaminas, inibidores, substâncias do próprio metabolismo, pH, temperatura e outros), alguns que estimulam e outros que reprimem a ação enzimática, afetando o desempenho do processo fermentativo conduzido pela levedura (LIMA *et al.*, 2001b).

Convém ressaltar que a levedura *Saccharomyces* é um aeróbio facultativo, ou seja, tem a habilidade de se ajustar metabolicamente, tanto em condições de aerobiose como de anaerobiose. Os produtos finais da metabolização do açúcar irão depender de condições ambientais em que a levedura se encontra. Assim, enquanto uma porção de açúcar é transformada em biomassa, gás carbônico e água em aerobiose, a maior parte é convertida em etanol e gás carbônico em anaerobiose, processo denominado de fermentação alcoólica. Os carboidratos considerados substratos para fermentação, tanto podem ser endógenos (constituintes da levedura, como glicogênio e trealose) como exógenos (sacarose, glicose, frutose e outros), estes últimos fornecidos à levedura (LIMA *et al.*, 2001b).

O objetivo principal da levedura, ao metabolizar anaerobicamente o açúcar, é gerar uma forma de energia (ATP, adenosina trifosfato) que é empregada na realização dos diversos trabalhos fisiológicos (absorção, excreção e outros) e biossínteses, necessárias à manutenção da vida, crescimento e multiplicação, para perpetuar a espécie. O etanol e o gás carbônico resultantes se constituem, tão somente, de produtos de excreção, sem utilidade metabólica para a célula em anaerobiose. Entretanto, o etanol, bem como outros produtos de excreção (como glicerol e ácidos orgânicos) podem ser oxidados metabolicamente, gerando mais ATP e biomassa, mas apenas em condições de anaerobiose (LIMA *et al.*, 2001b).

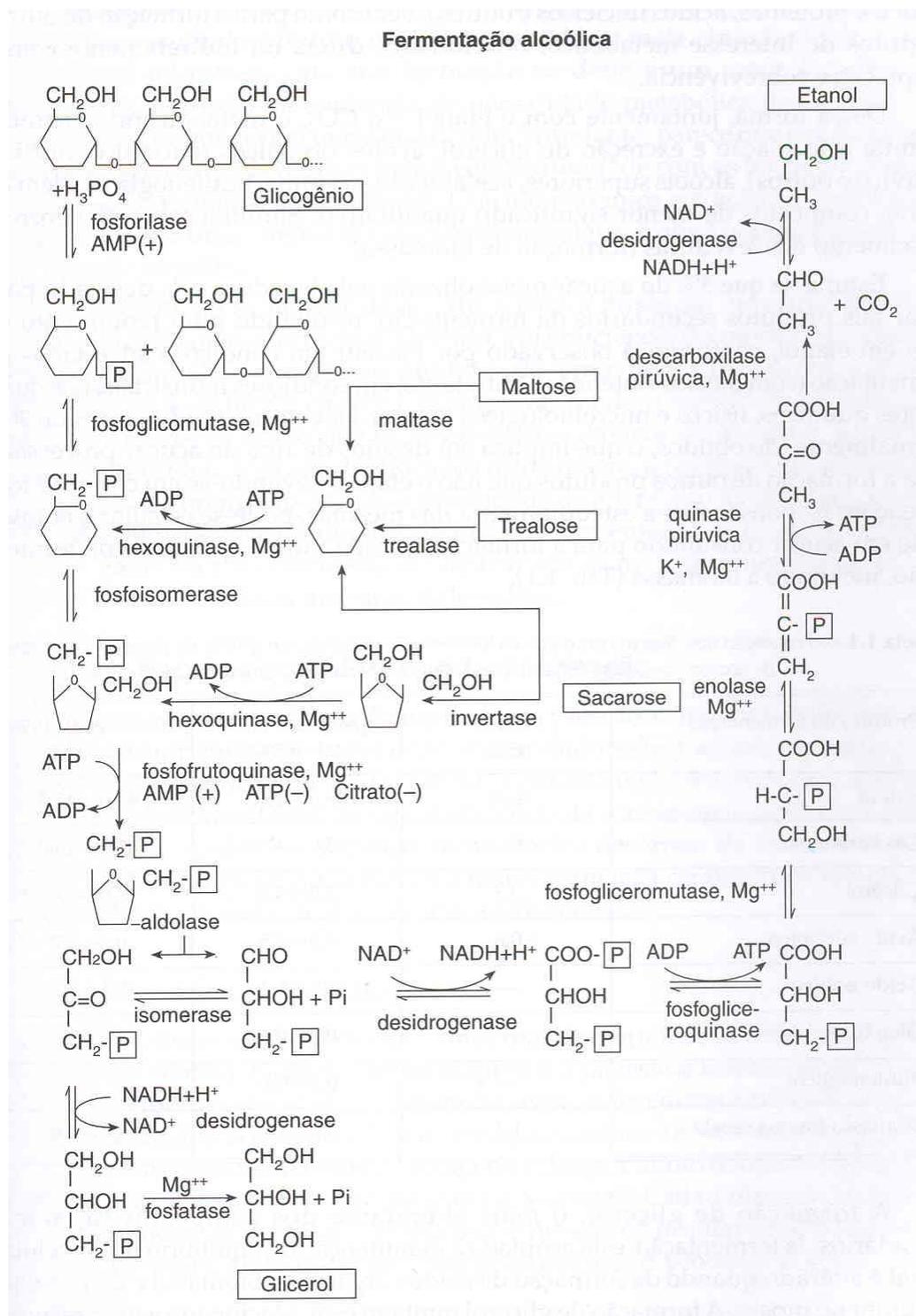


Figura B.1: Sequência das reações enzimáticas pela fermentação alcoólica de carboidratos endógenos (glicogênio e trealose) ou exógenos (sacarose e maltose), conduzida por *Saccharomyces*. Adaptada de LIMA *et al.* (2001b)

B.2. Produtos secundários da fermentação

Na seqüência de reações enzimáticas de produção de ATP, e intrínsecas à formação de etanol, rotas metabólicas alternativas aparecem para propiciar a formação de materiais necessários à constituição da biomassa (polissacarídeos, lipídeos, proteínas, ácidos nucléicos e outros), bem como para a formação de outros produtos de interesse metabólico, relacionados diretamente ou indiretamente com a adaptação e sobrevivência (LIMA *et al.*, 2001b).

Dessa forma, juntamente com o etanol e o CO₂, o metabolismo anaeróbico permite a formação e excreção de glicerol, ácidos orgânicos (succínico, acético, pirúvico e outros), álcoois superiores, acetaldeído, acetoína, butilenoglicol, além de outros compostos de menor significado quantitativo. Simultaneamente ocorre o crescimento das leveduras (formação de biomassa) (LIMA *et al.*, 2001b).

Estima-se que 5% do açúcar metabolizado pela levedura sejam desviados para gerar tais produtos secundários da fermentação, resultando num rendimento de 95% em etanol, conforme já observado por Pasteur em condições adequadas de fermentação (com mostos sintéticos). Entretanto, em condições industriais, nas quais fatores químicos, físicos e microbiológicos afetam a levedura, rendimento de 90% normalmente são obtidos, o que implica em desvios de 10% do açúcar processado para a formação de outros produtos que não o etanol. Levando-se em consideração as reações responsáveis e a estequiometria das mesmas, pode-se calcular o equivalente em açúcar consumido para a formação de cada um dos produtos da fermentação, incluindo a biomassa, tabela A.1 (LIMA *et al.*, 2001b).

Tabela B.1: Proporção dos diversos produtos da fermentação alcoólica, em g/100g de glicose metabolizada, de acordo com várias fontes e para diferentes eficiências fermentativas. Adaptada de LIMA *et al.*(2001b)

Produto da Fermentação	Pasteur 95%	Jackman, 1987 90 - 95%	Basso et al. 1996 85 - 92%
Etanol	48,5	45,0 - 49,0	43,0 - 47,0
Gás Carbônico	46,4	43,0 - 47,0	41,0 - 45,0
Glicerol	3,3	2,0 - 5,0	3,0 - 6,0
Ácido Succínico	0,6	0,5 - 1,5	0,3 - 1,2
Ácido Acético	-----	0,0 - 1,4	0,1 - 0,7
Óleo Fúsel	-----	0,2 - 0,6	-----
Butilenoglicol	-----	0,2 - 0,6	-----
Biomassa (massa seca)	1,2	0,7 - 1,7	1,0 - 2,0

A formação de glicerol, composto orgânico mais abundante dos compostos secundários da fermentação, está acoplada à manutenção do equilíbrio redox celular, o qual é alterado quando da formação de ácidos orgânicos, biomassa e da presença de sulfito no mosto. A formação de glicerol também está relacionada a uma resposta ao estresse osmótico, quando de concentrações elevadas de açúcares ou de sais no mosto (LIMA *et al.*, 2001b).

Já as razões fisiológicas que levam a levedura a produzir e excretar o ácido succínico (segundo produto orgânico secundário mais abundante) ainda não são discutíveis; admite-se que sua formação se deve a um meio fermentativo inadequado, pois não há evidência de necessidade metabólica desse ácido pela levedura, na proporção em que é produzido. Entretanto, parece que sua formação e excreção conferem às leveduras maior competitividade com as bactérias contaminadas, numa fermentação industrial. O ácido succínico em ação sinérgica com o etanol, exerceria uma intensa atividade antibacteriana, o que é notado durante uma fermentação alcoólica (LIMA *et al.*, 2001b).

O homem, ao se utilizar da levedura para a produção industrial de etanol, elegeu o álcool como o principal produto, cuja eficiência da produção é comprometida pela formação dos demais produtos de fermentação. Entretanto, o objetivo primordial da

levedura é crescer e multiplicar, sendo o etanol um produto a ser rejeitado. Percebe-se então que os objetivos metabólicos da levedura, à primeira vista, não coincidem com aqueles traçados pelo homem, ao explorar industrialmente tal organismo. Porém, explorando a capacidade de adaptação da levedura, pode-se alterar as condições físico-químicas do meio de fermentação, para, em benefício do homem, favorecer a conversão do açúcar em etanol, sem negligenciar das necessidades metabólicas mínimas da levedura (LIMA *et al.*, 2001b).

EFEITO PASTEUR: em meio anaeróbio ocorre decréscimo na produção de etanol e redução do consumo de açúcar. A explicação mais aceita é dada pela atividade da fosfofrutoquinase, enzima alostérica da glicose, que é inibida por ATP e citrato (presentes em maior quantidade no meio aeróbio) e ativada por AMP, ADP e fosfato inorgânico (LIMA *et al.*, 2001a).

EFEITO CRABTREE: para algumas leveduras, altas concentrações de açúcares inibem a atividade de enzimas respiratórias e a formação de mitocôndrias, ocorrendo portanto produção de etanol, mesmo em meio aeróbio (LIMA *et al.*, 2001a).

FORMAÇÃO DE GLICEROL: durante a fermentação alcoólica cerca de 5% do açúcar consumido pode ser convertido em glicerol a partir de um desvio da fosfodiidroxiaçetona da glicólise (LIMA *et al.*, 2001a).

FORMAÇÃO DE ÁLCOOIS SUPERIORES: durante o processo de biossíntese de alguns aminoácidos como valina, treonina, leucina e isoleucina são produzidos cetoácidos intermediários. Ocorre a descarboxilação e redução desses ácidos pela descarboxilase pirúvica e desidrogenase alcoólica com produção dos álcoois (LIMA *et al.*, 2001a).

FORMAÇÃO DE ÁCIDO SUCCÍNICO: o ácido succínico é formado durante a fermentação alcoólica, através da fase oxidativa do ciclo de Krebs (LIMA *et al.*, 2001a).