

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

Rauber Daniel Pereira

**Fermentação alcoólica: Desenvolvimento de metodologia para o cálculo de
eficiência e modelagem por redes neurais de unidade de fermentação
industrial**

**São Carlos
2019**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**Fermentação alcoólica: Desenvolvimento de metodologia para o cálculo de
eficiência e modelagem por redes neurais de unidade de fermentação
industrial**

Rauber Daniel Pereira

Prof. Dr. Antonio José Gonçalves da Cruz
Orientador - PPG-EQ/UFSCar

Prof. Dr. Alberto Colli Badino Júnior
Co-orientador - PPG-EQ/UFSCar

Dissertação de mestrado apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de **Mestre em Engenharia Química**, área de concentração em **Pesquisa e Desenvolvimento de Processos Químicos**.

**São Carlos
2019**

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE RAUBER DANIEL PEREIRA APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 21 DE FEVEREIRO DE 2019.

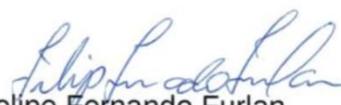
BANCA EXAMINADORA:



Antonio José Gonçalves da Cruz
Orientador, UFSCar



Alberto Colli Badino Júnior
Coorientador, UFSCar



Felipe Fernando Furlan
UFSCar



Jonas Contiero
UNESP

*Dedico esse trabalho aos meus pais, João e Ivânia,
sem os quais nada seria possível.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pelo dom da vida, do amor e da saúde. Por todas as condições necessárias que sempre me foram dadas por Ele, para que esse trabalho fosse realizado.

Aos meus pais João e Ivânia, pelo apoio, amor e confiança incondicionais, cujos esforços de toda uma vida foram essenciais para minha formação profissional e pessoal, e para a conclusão desse trabalho. Agradeço pelo exemplo de vida, que está perpetuado em meus pensamentos e guiará sempre minha conduta profissional e pessoal.

Ao meu irmão Duener, pela admiração e apoio em todos os meus projetos de vida.

À minha namorada Marina, pelo companheirismo permanente, pela compreensão de todos os momentos, pelo exemplo de trabalho, e pelos incentivos e confiança que, sempre presentes, ajudam-me a buscar o meu melhor.

Aos Professores Antonio e Alberto, pela amizade, toda paciência, dedicação e por terem me acolhido da melhor maneira possível. Sempre empenhados em meu desenvolvimento, foram determinantes nas minhas decisões, e exemplos profissional e pessoal que tive o privilégio de ter em meu caminho.

Aos professores do Departamento de Engenharia Química da UFSCar que auxiliaram em minha formação e que direta ou indiretamente fazem parte da conclusão desse trabalho.

Aos profissionais que acolheram nosso convite para comporem a banca examinadora desse trabalho, e contribuírem de maneira ímpar para o enriquecimento desse estudo.

Aos colegas de laboratório, especialmente Kaio e Jorge, pela amizade, pela ajuda prestada sempre que necessária, e que foram de grande importância nos resultados alcançados nesse trabalho.

Ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Química da UFSCar (PPGEQ) e a todos os profissionais que o compõem.

Agradeço também ao CNPq pelo apoio financeiro.

Por fim, agradeço a todo cidadão brasileiro, que de forma indireta contribuiu para a minha formação profissional e para a conclusão desse trabalho.

*“Se enxerguei mais longe, foi porque me apoiei
sobre os ombros de gigantes.”*

Isaac Newton

RESUMO

A busca por fontes alternativas aos combustíveis fósseis, que sejam ambiental e economicamente viáveis, vem crescendo nos últimos anos. O Brasil ocupa posição de destaque no pioneirismo e na escala de produção de etanol da cana-de-açúcar. Porém, estudos revelam que apesar da tecnologia ser considerada consolidada, há espaço para implementação de melhorias e inovações no processo industrial de produção do etanol, no que diz respeito à implantação de novas estratégias produtivas utilizadas pelo setor. Nesse sentido, o objetivo do trabalho aqui proposto é justificado. Em sua primeira etapa, foi desenvolvida uma nova metodologia baseada em balanços materiais para calcular com maior precisão a eficiência da fermentação operada em batelada alimentada. A metodologia proposta foi comparada com outras metodologias já utilizadas pelo setor produtivo, e validada com dados de fermentações realizadas em escala de bancada e industrial. Com a nova metodologia foi possível estimar com maior precisão a produção de etanol na unidade e inferir o quanto a mesma é superestimada com o uso das metodologias utilizadas pelo setor. A segunda etapa do trabalho consistiu no desenvolvimento de um modelo baseado em redes neurais para fermentação, utilizando os dados da unidade de fermentação industrial da usina. O objetivo foi desenvolver uma ferramenta capaz de prever a influência de variáveis industriais no processo de produção de etanol. Identificaram-se variáveis de entrada que impactam na eficiência do processo de fermentação, e implementou-se uma rede neural capaz de prever a concentração final de etanol nos biorreatores do processo industrial. Ao final do treinamento da rede, utilizou-se algoritmo de otimização estocástico baseado em populações (*Particle Swarm Optimization, PSO*) para estimar elevados teores de concentração de etanol no processo de fermentação a partir de valores ótimos de operação das variáveis de entrada do modelo. As etapas de treinamento, validação e teste da rede neural foram realizadas com 200 pontos de operação industrial. Após finalizados os ajustes de pesos na etapa de treinamento, o modelo baseado em redes neurais, previu a concentração de etanol para o conjunto de dados de validação obtendo um valor de 0,91 para o coeficiente de determinação (R^2) e um erro quadrático médio de 0,26. O modelo, quando avaliado com novos pontos experimentais, apresentou respostas com desvios relativos abaixo de 4%, o que evidencia a capacidade de previsão da rede neural para o processo de fermentação industrial. Na etapa de otimização das variáveis de entrada de um dia de operação, escolhido aleatoriamente, foi possível obter aumento de 1,0°GL na concentração de etanol do processo. Assim, há a possibilidade de aplicação no processo industrial do modelo obtido nesse estudo, com o objetivo de aumentar a produção de etanol na usina.

Palavras-Chave: Fermentação; Etanol; Eficiência de Fermentação; Modelagem em Redes Neurais.

ABSTRACT

The search for alternative sources of fuel, economically and environmentally viable, that could replace fossil fuels has increased in the last years. Brazil occupies a prominent position regarding the pioneering development and ethanol production from sugarcane in large scale. Despite the consolidated technology studies have shown that, there is room for improvement and innovation on the industrial ethanol production process, through the development of new production strategies. Thus, the objective of the present work is justified. In the first step it was developed a new methodology based on mass balances to calculate the ethanol fermentation efficiency of the process operated in fed-batch mode. The new methodology was compared to others that have already been used by the industrial sector. Data from fed-batch fermentations in bench and industrial scales were used. The new methodology allowed assessing with more precision the ethanol production of the industrial unit. It was also possible to calculate the quantity of overestimated ethanol when fermentation efficiency was calculated by the established methodologies. The second step of this work was to develop a model based on artificial neural networks for representing the fermentation process. Data of an industrial fermentation unit were used. The objective was to assess the effects of different industrial variables on the ethanol production. Important input variables that could influence the ethanol fermentation efficiency were identified. Then, it was set up an artificial neural network to estimate the final ethanol concentration in the industrial bioreactors. After the network was trained, it was used together with a stochastic optimization algorithm based on population (Particle Swarm Optimization – PSO) to estimate the increase of the ethanol concentration in the fermentation process by seeking optimum values for the input variables. The training, validation and test steps of the artificial neural network were performed using 200 points of the industrial data. After the update of the weights has been completed during the training step, the neural network model was tested using the validation data set and it predicted the ethanol concentration in the process reaching 0.91 for the determination coefficient (R^2) and a mean squared error of 0.26. The model was tested with new experimental data after the training, and it was obtained relative deviations below 4.0%. This fact illustrates the prediction potential of the artificial neural network model. In the optimization step of the input variables, it was possible to reach an increase of 1.0 °GL in the ethanol concentration at the end of the process. Therefore, there is a possibility to use this tool on the industrial process, aiming to increase the industrial ethanol production.

Keywords: Fermentation; Ethanol; Fermentation Efficiency; Artificial Neural Network Models

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1. Fluxograma simplificado da operação de uma dorna de fermentação industrial.	26
Figura 1.2. a) estrutura de um neurônio biológico; b) estrutura de um neurônio artificial.	30
Figura 1.3. Arquitetura de uma rede neural estruturada com duas camadas escondidas, modelada para previsão da produção de biocombustível.....	31
Figura 1.4. Dinâmica de funcionamento do PSO. Deslocamento das partículas até o ponto de mínimo global (sequência seguida de 1 a 4).....	39
Figura 2.1. Volume de controle (dorna de fermentação) para Metodologias 1A e 1B.	46
Figura 2.2. Volume de controle para Metodologia 2.....	49
Figura 2.3. Volume de controle para Metodologia 3.....	53
Figura 2.4. Volume de controle para Metodologia 4.....	56
Figura 2.5. Valores calculados de eficiência de fermentação para as cinco fermentações em batelada alimentada realizadas com diferentes composições de mosto. Metodologia 1A: balanço de volumes; Metodologia 2: subprodutos; Metodologia 4: nova.	59
Figura 2.6. Eficiência de fermentação em etanol calculada para 18 fermentações industriais em batelada alimentada (IF), utilizando a Metodologia 1A, Metodologia 1B e Metodologia 4.....	61
Figura 2.7. Valores de eficiência de fermentação em etanol calculados para três meses de operação industrial durante a safra de 2016, usando três diferentes metodologias para cálculo: Metodologia 1A, Metodologia 3 e Metodologia 4.	63
Figura 3.1. Fluxograma simplificado da unidade de fermentação estudada.	70
Figura 3.2. Gráficos de correlação cruzada entre as variáveis. (a) entre “Média do tempo de espera para centrifugar” e “Desvio padrão do tempo de espera para centrifugar”; (b) entre “Pureza do mosto” e “Média de temperatura de fermentação”.	74
Figura 3.3. Arquitetura da rede neural com as variáveis de entrada selecionadas.	76
Figura 3.4. Valor do MSE ao longo das etapas de treinamento e validação da rede A.....	77

Figura 3.5. Valor do MSE ao longo das etapas de treinamento e validação da rede B.....	78
Figura 3.6. Modelo linear obtido para a modelagem da rede A.	79
Figura 3.7. Modelo linear obtido para a modelagem da rede B.	79
Figura 3.8. Concentração de etanol no vinho (°GL) experimental e previsto pela rede e erro relativo durante os dias operação.....	80
Figura 3.9. Concentração de etanol no vinho (°GL) experimental e previsto pela rede e erro relativo para os novos dados de operação apresentados.....	82
Figura 3.10. Modelo linear obtido para a modelagem da rede A, inseridos os novos pontos experimentais para teste da capacidade de previsão da rede.	83
Figura 3.11. Gráfico de correlação entre os dados de Contaminação e Média Tempo de Tratamento. A região sombreada indica região de baixa densidade de pontos experimentais disponíveis.....	86

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1. Concentração de açúcares nos substratos utilizados para compor os diferentes mostos alimentados nas fermentações em escala de bancada.....	42
Tabela 2.2. Dados obtidos durante a safra 2015 para a indústria estudada.	65
Tabela 2.3. Estimativa do ganho financeiro devido ao aumento da eficiência de fermentação. ...	66
Tabela 3.1. Abreviações para identificação das variáveis utilizadas na modelagem da rede neural.	75
Tabela 3.2. Valores dos pesos das conexões entre as camadas de entrada e escondida ao final do treinamento.	84
Tabela 3.3. Valores dos pesos das conexões entre os neurônios da camada escondida e a camada de saída.	84
Tabela 3.4. Valores otimizados das variáveis de entrada para os diferentes cenários.	85
Tabela 3.5. Cenários otimizados em regiões de alta capacidade preditiva do modelo.....	87

SUMÁRIO

Capítulo 1 : Estado da Arte da Produção de Etanol e Objetivos da Dissertação.	14
1.1. INTRODUÇÃO	14
1.2. OBJETIVOS	18
1.3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
1.3.1. Histórico da Produção de Etanol no Brasil.....	18
1.3.2. Fermentação Alcoólica.....	21
1.3.3. Processo Industrial.....	24
1.3.4. Metodologias para Cálculo de Eficiência de Fermentação	27
1.3.5. Rede Neural Artificial (RNA)	29
1.3.6. RNA Aplicada aos Bioprocessos.....	34
1.3.7. RNA Aplicada à Produção de Etanol	36
1.3.8. Algoritmo de Otimização Particle Swarm Optimization (PSO).....	38
Capítulo 2 : Desenvolvimento de Nova Metodologia para Cálculo de Eficiência de Fermentação	41
2.1. MATERIAIS E MÉTODOS I: FERMENTAÇÕES BATELADA ALIMENTADA EM ESCALA DE BANCADA	41
2.1.1. Microrganismo e meio de cultura.....	41
2.1.2. Procedimento experimental	42
2.1.3. Métodos analíticos.....	43
2.2. MATERIAIS E MÉTODOS II: FERMENTAÇÕES BATELADA ALIMENTADA EM ESCALA INDUSTRIAL	43
2.3. MATERIAIS E MÉTODOS III: METODOLOGIAS PARA CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE FERMENTAÇÃO DE ETANOL (η)	45
2.3.1. Metodologia 1: Eficiência de fermentação em etanol por balanço de volume (η_{M1}).....	45
2.3.2. Metodologia 2: Eficiência de fermentação em etanol pela determinação de subprodutos (η_{M2}).....	48
2.3.3. Metodologia 3: Eficiência de fermentação em etanol por balanço global (η_{M3}).....	52

2.3.4. Metodologia 4: Eficiência da fermentação em etanol por balanço de massa, descontando o volume de células de levedura (η_{M4}).....	54
2.4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	58
2.5. CONCLUSÕES.....	66
Capítulo 3 : Desenvolvimento de Modelagem em Redes Neurais Artificiais para Processo de Fermentação Industrial.....	69
3.1. MATERIAIS E MÉTODOS	69
3.1.1. Banco de dados.....	69
3.1.2. Escolha das variáveis de entrada	70
3.1.3. Arquitetura da rede	71
3.1.4. Treinamento e validação.....	72
3.1.5. Otimização.....	73
3.2. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	74
3.2.1. Modelagem e treinamento da rede neural.....	74
3.2.2. Otimização das variáveis de entrada	84
3.3. CONCLUSÕES.....	88
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	90
ANEXO I: Linhas de código de implementação do algoritmo PSO em Matlab.....	96

Capítulo 1 : Estado da Arte da Produção de Etanol e Objetivos da Dissertação

1.1. INTRODUÇÃO

O etanol é o biocombustível mais consumido em escala mundial nos dias atuais (EIA, 2018), sendo o Brasil, o maior exportador e o segundo maior produtor de etanol do mundo (RFA, 2018). Com a implantação do Programa Nacional do Álcool (ProÁlcool) pelo governo brasileiro, a produção de etanol saltou de 600 milhões de litros na safra 1974/75 para cerca de 12 bilhões de litros em 1985/86, e na última safra (2017/18) foram produzidos 27,9 bilhões de litros de etanol (UNICA, 2018). Essa produção só é superada pelo etanol produzido pelos Estados Unidos, oriundo unicamente do milho (RFA, 2018). O etanol produzido a partir da cana-de-açúcar apresenta vantagens quando comparado ao etanol norte-americano, uma vez que toda a energia (vapor e eletricidade) utilizada no processo industrial é oriunda da queima de um subproduto (bagaço da cana-de-açúcar) nas caldeiras (de baixa e alta pressão) da unidade industrial, ao contrário do etanol de milho que utiliza combustíveis fósseis (BÖRJESSON, 2009).

O Brasil foi o país pioneiro no desenvolvimento de uma indústria voltada à produção do etanol combustível (BASSO; BASSO; ROCHA, 2011). Programas governamentais de incentivo ao consumo de etanol (como o “Proálcool” estabelecido na década de 1970) (AMORIM; LOPES, 2005), aliados ao desenvolvimento de automóveis com tecnologia “*flex-fuel*” (LOPES et al., 2016) possibilitaram que o Brasil estabelecesse um forte mercado interno de consumo do biocombustível oriundo da cana-de-açúcar. O desenvolvimento nos últimos anos de novas tecnologias para produção de etanol em território nacional, no que se refere à modernização de equipamentos e produtos (trocadores de calor, sistemas de bombeamento, colunas de destilação e sistemas de desidratação, desenvolvimento de novos antibióticos, nutrientes e antiespumantes), bem como novos métodos para avaliar sua produção (medidores de vazão de alta precisão para contabilização de entradas e saídas da unidade industrial), tem contribuído para a posição de destaque mundial que o Brasil ocupa no que se refere à produção de biocombustíveis.

Muitos estudos têm sido desenvolvidos a fim de se avaliar os benefícios ambientais e a viabilidade técnica da utilização do etanol como combustível (GOLDEMBERG, 2008). Há

resultados reportados na literatura que indicam que o etanol oriundo da cana-de-açúcar é capaz de diminuir em aproximadamente 86% a quantidade total, em massa, das emissões de carbono à atmosfera quando comparado à combustão de combustíveis fósseis (JAISWAL et al., 2017). Assim, evidencia-se a importância do estabelecimento de um mercado sólido e crescente de produção e venda de etanol, tendo em vista aspectos econômicos e ambientais, além de ser a alternativa mais viável para o cumprimento das metas de descarbonização assumidas pelo Brasil durante a 21ª Conferência do Clima (COP21), realizada em Paris em dezembro de 2015, que farão com que o país praticamente dobre sua produção de etanol total (anidro e hidratado) nos próximos dez anos (JONKER et al., 2015). Na safra 2017/2018 o Brasil movimentou cerca de US\$ 813 milhões, enquanto a importação foi de US\$ 812 milhões, sendo quase sua totalidade importada dos Estados Unidos (UNICA, 2018). No ano de 2018 em comparação com 2017, o consumo de etanol hidratado alcançou aumento de 42,1%, enquanto o PIB nacional registrou aumento de 1,1%. Levantamento referente ao ano de 2017 mostra que a cadeia ligada ao setor sucroenergético movimentou cerca de US\$ 100 bilhões, alcançando um PIB de aproximadamente US\$ 43 bilhões (2% do PIB brasileiro) (UNICA, 2018).

A sanção da Lei 13.576 – 2017 (MME, 2017) no Brasil, que regulamenta uma nova política de compra e venda de ações visando o estímulo da produção de biocombustíveis, chamada Renovabio, trará maior previsibilidade de produção e consumo do etanol, fato necessário para destravar investimentos no setor industrial, além de aumentar a margem de lucro para o produtor em relação ao biocombustível. Dessa forma, considerando a tendência mundial para estabelecimento de novas fontes de energia que não as fósseis, aliada às políticas regulamentadoras que viabilizem o aumento da margem de lucro para produção de etanol, tornar-se-á necessário o desenvolvimento tecnológico arrojado por parte do setor, no que diz respeito à precisão dos cálculos de produtividade, eficiência produtiva e às tecnologias de processo que auxiliarão no estabelecimento de novas estratégias de produção.

O cálculo de eficiência de fermentação é o principal parâmetro utilizado pelo setor industrial para avaliar o desempenho do processo produtivo de etanol. Esse valor é obtido a partir da razão entre o etanol produzido e o etanol teórico (ou estequiométrico) calculado a partir da conversão da massa total de açúcares alimentada ao processo fermentativo. Ao longo do desenvolvimento da indústria sucroalcooleira no país, diversas metodologias têm sido propostas para o cálculo da eficiência de fermentação. Contudo, estas metodologias apresentam aspectos

que limitam sua aplicabilidade a determinadas condições operacionais. Apesar da importância desse parâmetro, as metodologias atualmente utilizadas pelo setor não são robustas o suficiente para serem aplicadas em processos que são limitados quanto à quantidade de pontos de amostragem ou que apresentem baixa acuracidade nos valores das medidas realizadas nas amostras coletadas. Essas metodologias acabam por superestimar o efeito de variáveis que não possuem grande impacto no processo ou, negligenciam aquelas que são importantes no cálculo da eficiência da fermentação alcoólica.

É de conhecimento do setor industrial que a eficiência de fermentação das unidades produtoras pode alcançar valores máximos de 88 a 91%, valores estes estimados pelas metodologias atuais. Sabe-se também que há a presença de perdas indeterminadas no processo industrial (de 1 a 3%), que aumentam à medida que a eficiência de fermentação é superestimada. Assim, a determinação correta do valor de eficiência de fermentação está diretamente ligada à diminuição do valor das perdas indeterminadas da unidade e conseqüentemente ao melhor mapeamento das operações industriais, de forma a direcionar investimentos às operações menos eficientes da unidade de fabricação de etanol.

Dessa forma, o presente trabalho trata em seu primeiro capítulo da introdução e revisão da literatura acerca do etanol, das metodologias de cálculo da eficiência de fermentação e da modelagem do processo industrial de fermentação. No segundo capítulo desse trabalho, é apresentado o desenvolvimento de uma nova metodologia baseada nos fundamentos de balanço de massa para cálculo da eficiência de fermentação. Foram utilizados dados industriais da safra 2015/2016 de uma unidade produtora de açúcar e etanol do interior do estado de São Paulo. Para validar a nova metodologia, foram utilizados dados de escala de bancada, além de dados das bateladas alimentadas industriais, de forma a comparar os resultados calculados de eficiência de fermentação com aqueles obtidos pelas metodologias atuais do setor. Foi realizada uma análise econômica para verificar o retorno financeiro, caso os valores atuais de eficiência de fermentação apresentados pelo setor fossem realmente alcançados.

O trabalho aqui apresentado objetivou além do desenvolvimento de uma nova metodologia de cálculo de eficiência de fermentação (que contribui para o melhor mapeamento dos gargalos de processo da unidade industrial), também o desenvolvimento de uma modelagem matemática capaz de prever a produção de etanol da unidade. Existem diversas variáveis

presentes na fermentação alcoólica da usina, que são inerentes ao processo industrial, e sabe-se de maneira qualitativa que influenciam na produção final do biocombustível. Porém, não há até o momento trabalhos na literatura que quantifiquem a influência dessas variáveis no aumento ou redução de produção de etanol.

Há trabalhos na literatura que utilizaram modelos cinéticos e estequiométricos para modelagem da unidade de fermentação e do processo fermentativo para produção de etanol (FONSECA; COSTA; CRUZ, 2017; ROUBOS; VAN STRATEN; VAN BOXTEL, 1999). Porém, variáveis inerentes ao processo industrial, não são possíveis de serem contempladas nesses modelos, uma vez que seus efeitos são complexos e particulares para cada unidade. A contaminação bacteriana, por exemplo, pode influenciar na redução de produção de etanol em determinadas unidades e não apresentar nenhum efeito pronunciável em outras. Assim, a modelagem do processo industrial de fermentação alcoólica apresenta-se como um rico campo para estudos de modelagens estocásticas, dentre elas a aplicação dos modelos estruturados por redes neurais.

A modelagem empregando redes neurais tem sido amplamente utilizada em diversas áreas de conhecimento da engenharia química, inclusive em processos biotecnológicos apresentando alta capacidade de modelagem desses processos (PIRDASHTI et al., 2013). Para fermentação industrial, esse tipo de modelagem torna-se atrativa, uma vez que esses modelos necessitam apenas do acesso aos pontos experimentais (obtidos em grande quantidade pela indústria) suficientes para treinamento e validação da rede para fornecer previsões precisas acerca do processo em estudo. Nesse sentido, o setor produtivo poderia beneficiar-se da capacidade preditiva das redes neurais a fim de identificar pontos para melhoria de operações que possibilitem retornos financeiros ligados ao aumento de eficiência produtiva do etanol.

O terceiro capítulo tem por objetivo apresentar a modelagem matemática da unidade industrial de produção de etanol em estudo, operada no modo batelada alimentada, empregando a técnica das redes neurais. A novidade da análise aqui apresentada reside no fato de que as fermentações ocorreram em escala industrial, e as variáveis utilizadas na modelagem da rede neural compõem não só as dornas de fermentação, mas também toda a unidade de produção de etanol. A contaminação bacteriana do meio fermentativo e o tempo de tratamento das células no processo são variáveis que podem impactar na produção de etanol em escala industrial, porém

não estão presentes em ensaios conduzidos em laboratório. Acredita-se assim, que a modelagem por redes neurais tende a representar de maneira mais precisa o processo industrial, uma vez que pode utilizar variáveis industriais de processo que não são consideradas em modelos cinéticos e fenomenológicos. Como resposta do modelo, utilizou-se a concentração de etanol em base volumétrica no vinho bruto. Após o treinamento da rede, realizou-se a otimização das variáveis de entrada com o algoritmo PSO (*Particle Swarm Optimization*), com o objetivo de maximizar a produção de etanol de determinado dia de safra presente no banco de dados industrial utilizado no estudo. Analisaram-se as modificações necessárias nas variáveis de entrada da rede para se alcançar o teor alcoólico desejado, indicando assim estratégias que poderiam ser adotadas para a obtenção do retorno econômico gerado pelo aumento de produção de etanol na unidade.

1.2. OBJETIVOS

Desenvolver nova metodologia baseada em balanços de massa para cálculo da eficiência de fermentação em batelada alimentada e compará-la com as demais metodologias existentes utilizando dados de escala de bancada e industriais.

Realizar a modelagem da unidade de fermentação industrial com redes neurais artificiais para a previsão da concentração de etanol ao final do processo, utilizando dados de 200 dias de operação de safra de uma usina do interior do estado de São Paulo.

Realizar a otimização das variáveis de entrada da rede neural artificial a fim de se maximizar a concentração de etanol ao final do processo de fermentação.

1.3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

1.3.1. Histórico da Produção de Etanol no Brasil

A fermentação alcoólica é um processo antigo, que já vem sendo utilizado por diferentes povos no mundo para a produção de alimentos e bebidas. No Brasil, a fermentação do caldo oriundo da cana-de-açúcar deu origem à cachaça, uma das bebidas mais populares e presentes na cultura nacional. O estudo da fermentação alcoólica com viés de pesquisa e desenvolvimento para produção de etanol carburante no Brasil se fez presente apenas em 1925, com a realização do trajeto de 430 quilômetros entre Rio de Janeiro e São Paulo com um carro movido a etanol.

Considera-se essa a primeira experiência de engenharia em âmbito nacional acerca do etanol biocombustível (TÁVORA, 2011).

Já na década de 1930, o setor sucroalcooleiro registrou expressivo aumento na produção de etanol, apoiado por incentivos governamentais para o desenvolvimento da tecnologia dos motores movidos a álcool (AMORIM; LEÃO, 2005). Esse fato é comprovado pela fundação do Instituto do Açúcar e do Alcool (IAA) no ano de 1933, que tinha por principal objetivo incentivar e realizar o controle da produção de açúcar e álcool em todo o território nacional (SOBRINHO, 1946). Porém, a série de políticas de apoio à indústria produtora de etanol deu lugar aos incentivos de exploração e desenvolvimento da indústria nacional do petróleo e à fundação da Petrobras, em 1945.

A primeira crise mundial do petróleo culminou no ano de 1973, e o Brasil não possuía alternativas energéticas viáveis que o tornasse menos dependente dos preços do barril de petróleo que estavam sendo comercializados no mundo. Dessa forma, o governo nacional criou o Programa de Desenvolvimento do Alcool (Proálcool) em 1975, que fez com que os usineiros aumentassem a produção de etanol a fim de atender a demanda crescente do biocombustível, gerada pela política de incentivo estatal. Nos anos seguintes, regulamentou-se a adição de 4,5% de etanol anidro na gasolina em substituição ao chumbo tetraetila ($Pb(C_2H_5)_4$), que funcionava como elemento de aumento de octanagem da gasolina e anticorrosivo (TÁVORA, 2011).

O incentivo à utilização de etanol no país se intensificou na segunda crise do petróleo que ocorreu em 1979, quando o governo firmou o Protocolo de Intensões com a Associação de Fabricantes de Veículo Automotivos (Anfavea), onde as montadoras se comprometeram à adaptar os automóveis para utilização do etanol como combustível (AMORIM; LEÃO, 2005). Nesse período estabeleceu-se a adição de 15% de etanol anidro na gasolina e carros movidos a etanol estavam presentes em todo o território nacional (NETTO, 2007). No ano de 1985, aproximadamente 91% dos carros vendidos no Brasil eram movidos a álcool e a porcentagem de mistura de etanol na gasolina alcançou o valor de 22%. Nesse ano o país produziu 11,3 bilhões de litros de etanol na safra.

Apesar da popularização do uso de automóveis movidos exclusivamente a etanol, a tecnologia desses carros ainda não alcançara seu nível de maturação. Ainda haveria a necessidade de adaptação de partes do carro com materiais anticorrosivos e do sistema auxiliar de injeção à

gasolina, para partida a frio (GRANER, 2009; TÁVORA, 2011). Esse fato aliado à queda do preço do barril do petróleo que ocorreu em 1988 (TÁVORA, 2011), fez com que a adesão do consumidor aos carros movidos a etanol diminuísse, bem como os incentivos governamentais ao programa de desenvolvimento de biocombustíveis.

A produção do etanol brasileiro, embora sem a política de incentivos do governo, voltou a ter destaque devido aos apelos ambientais que foram expressos nos anos de 1992 e 1997, na Conferência das Nações Unidas para o Meio Ambiente e Desenvolvimento (Rio de Janeiro) e na assinatura do Protocolo de Kyoto, respectivamente (WELTER; SHIKIDA, 2002). Aspectos ambientais e o desenvolvimento da tecnologia dos veículos *flex-fuel* (veículos que utilizam a mistura etanol e gasolina em qualquer proporção) no ano de 2002 fizeram com que as usinas voltassem a ter papel de destaque na matriz energética nacional de combustíveis. Estima-se que em 2008 aproximadamente 92% dos carros vendidos no Brasil eram bicombustíveis (ANFAVEA, 2009).

Apesar de ser uma tecnologia nacional e das pesquisas realizadas em torno da produção do etanol ao longo dos anos no país, a margem de lucro para produção de álcool nas usinas ainda pode ser melhorada. Em 2014 muitas usinas produtoras cessaram suas operações devido à crise econômica brasileira, ao alto estoque de açúcar mundial e às baixas margens de lucro da produção do etanol agravada pelo subsídio dado à gasolina pelo governo.

Com o objetivo de desenvolver o setor produtor de biocombustíveis o Ministério de Minas e Energia elaborou a Política Nacional de Biocombustíveis, o Renovabio, instituída pela Lei nº 13.576/2017. Essa nova política é baseada na emissão e compra de ativos financeiros negociáveis na bolsa, por parte dos produtores de biocombustíveis. Os produtores que comprovarem balanço positivo quanto à retirada de carbono da atmosfera durante seu processo produtivo emitirão ativos financeiros que serão comprados por distribuidoras e outros setores que não conseguirem alcançar as metas individuais de descarbonização (MME, 2017). Isso tornará o etanol (bem como os demais biocombustíveis) economicamente mais competitivo, ocasionando maior demanda de produção e maior previsibilidade de preços a médio e longo prazo – fator de importância para atrair investimentos em pesquisa e desenvolvimento de novas tecnologias para o setor.

Apesar do processo de produção de etanol no Brasil estar bem desenvolvido ainda existe a possibilidade de implementação de melhorias. A produção de etanol na safra 2017/2018 foi de 27,86 bilhões de litros (EPE, 2017), superada apenas pela norte-americana. Outros fatores como a alta porcentagem de mistura de etanol na gasolina, chegando ao atual valor de 27% mostram que o biocombustível produzido no Brasil continua atuante no setor energético nacional. Assim, a estruturação de uma política de desenvolvimento do setor de biocombustíveis no Brasil contribuirá para o desenvolvimento de tecnologias produtivas e para o atingimento das metas ambientais que o país se comprometeu durante a 21^a Conferência do Clima de Paris (COP21). Há a expectativa de que a produção nacional de etanol praticamente dobre nos próximos dez anos (JONKER et al., 2015).

1.3.2. Fermentação Alcoólica

Apesar do processo de fermentação alcoólica ser utilizado e conhecido desde a antiguidade, os estudos acerca dos mecanismos e reações que ocorrem nesse processo, só foram realizados nos tempos modernos. Em 1857, Pasteur pela primeira vez descreve a natureza microbiológica da fermentação alcoólica, como sendo um processo natural realizado para reprodução celular e manutenção da vida do microrganismo. No ano de 1861, Pasteur publica seu mais famoso trabalho no qual descreve os efeitos da presença e ausência de oxigênio no processo de fermentação alcoólica (BARNETT, 2000) e em seguida, 1863 estabelece as denominações aeróbia e anaeróbia para definir as diferentes rotas de fermentação utilizadas pelas leveduras.

A metabolização da glicose e/ou frutose em etanol e CO₂ ocorre a partir de 12 reações enzimáticas que ocorrem no citoplasma celular das leveduras. Essas reações são influenciadas por diversas condições internas e externas à célula, que podem auxiliar ou penalizar a eficiência do processo de fermentação. Vale ressaltar que a levedura *Saccharomyces cerevisiae* vêm sendo empregada em diversos processos de produção de alimentos e bebidas ao longo dos anos, e também no processo de produção de etanol combustível na indústria brasileira (LIMA et al., 2001). Esse microrganismo possui versatilidade na metabolização da glicose e frutose, uma vez que pode realizar a fermentação na presença ou ausência de oxigênio, tendo como produtos majoritários a massa celular, H₂O e CO₂ na primeira situação, e etanol e CO₂ na segunda. Devido à sua extensa aplicação na indústria e em processos de fermentação, a levedura *Saccharomyces*

cerevisiae tem sido objeto de estudos de diversos pesquisadores que, ao longo dos anos têm mapeado e descrito os processos reacionais que ocorrem no interior da célula desse microrganismo (SHULER; KARGI, 2001). Sua utilização em processos de produção de alimentos e bebidas se dá pela escolha das linhagens corretas para cada processo, de forma a apresentar os maiores valores de eficiência de fermentação para os processos aos quais se destinam.

Durante o processo de fermentação (em condições anaeróbias) a levedura prioriza a formação de ATP (adenosina trifosfato) que será utilizada para manutenção das funções fisiológicas da levedura e para a reprodução celular, sendo o etanol e o CO₂ gerados, exclusivamente compostos excretados pela célula. Há também a formação de compostos secundários no meio fermentativo, como o glicerol, os ácidos orgânicos, os álcoois superiores e a biomassa. Em condições controladas de operação em escala de bancada foram relatados valores de 95% de eficiência de fermentação, sendo os outros 5% utilizados na formação de compostos secundários (LIMA et al., 2001). No ambiente industrial, não são conhecidos valores acima de 90% de eficiência de fermentação, uma vez que há menos controle do processo e de variáveis que influenciam diretamente nesse valor, como contaminação bacteriana e a presença de outras linhagens de leveduras no processo que não fermentam da mesma forma que as cepas selecionadas (LIMA et al., 2001).

A sacarose presente no caldo da cana-de-açúcar é hidrolisada pela levedura pela ação da enzima invertase, gerando uma molécula de glicose e uma de frutose como pode ser mostrado na Equação 1.1.



Após esse processo a levedura irá metabolizar os açúcares presentes no meio segundo as condições de reação, produzindo etanol e CO₂ em condições de anaerobiose (Equação 1.2).



Diversos fatores podem influenciar na fermentação alcoólica como, por exemplo, o tipo de levedura utilizada. Com o desenvolvimento tecnológico foi possível o isolamento e comercialização de cepas de leveduras que se mostraram mais eficientes nas condições de processo industriais (LIMA et al., 2001). Porém, as leveduras selecionadas gradualmente são substituídas pelas chamadas “leveduras selvagens” que normalmente são mais resistentes às condições operacionais da região, porém nem sempre mais eficientes em relação à produção de etanol.

Outro fator de grande impacto na fermentação alcoólica industrial é a contaminação bacteriana que em determinados níveis pode prejudicar a eficiência de fermentação, ocorrendo a formação de ácidos, principalmente o lático e o fenômeno da floculação (SKINNER; LEATHERS, 2004). A adição de antibióticos no meio fermentativo é uma prática necessária, porém onerosa ao processo, e por isso aplicada em conjunto com o tratamento ácido do inóculo, que opera em pH na faixa de 2,0-3,0 nos tanques de tratamento de células, e auxiliam no combate à contaminação bacteriana (LIMA et al., 2001). Outra forma de controlar a contaminação bacteriana na fermentação é através do controle de temperatura do meio reacional. As leveduras são mesófilas, de forma que possuem temperatura ótima de fermentação entre 26 e 35°C. Quanto maior a temperatura, menor o tempo de fermentação para a metabolização dos açúcares, porém, maior a proliferação de bactérias e a sensibilidade da levedura à toxicidade do etanol (LIMA et al., 2001).

A concentração de açúcares no meio reacional é outro aspecto importante do processo. Maiores concentrações de açúcares são conhecidas por favorecerem a produção de etanol e a diminuição da taxa de crescimento celular. Porém, ultrapassados os limites máximos de concentração, há um aumento da pressão osmótica do meio fermentativo de forma a inibir a síntese de etanol por parte da levedura e favorecer a formação de glicerol o que leva a diminuição da eficiência de fermentação. Da mesma forma, a concentração de células no inóculo possui valores ótimos para a operação da fermentação. É relatado que maiores concentrações de células inibem a contaminação bacteriana, aumentam a velocidade de reação e a eficiência de fermentação, porém aumenta-se também a competição por nutrientes no meio reacional e o gasto energético para manutenção das células, de forma a prejudicar a viabilidade celular da fermentação (LIMA et al., 2001).

Vasconcelos (1993) relata que o tempo de alimentação do substrato às dornas de fermentação também influencia na eficiência do processo. Elevadas vazões de alimentação nas dornas pode causar inibição do microrganismo pelo substrato, além de risco de transbordamento para operações que ainda são manuais. A pureza do material que alimenta as dornas está diretamente ligada ao limite máximo de vazão de alimentação, uma vez que a mistura mel e caldo na composição do mosto pode determinar a maior tendência à inibição da levedura pela presença não só de açúcares como também de sais presentes principalmente no melaço.

1.3.3. Processo Industrial

A maioria das unidades industriais brasileiras de produção de etanol utiliza a cana-de-açúcar como matéria-prima (há poucas usinas na região centro-oeste do país que operam com milho) sendo a maior parte delas anexa à produção de açúcar (BASSO; BASSO; ROCHA, 2011). O caldo de cana-de-açúcar contém em sua composição a sacarose, que é hidrolisada para formar glicose e frutose (açúcares redutores), como mostrado anteriormente na Equação 1.1, e uma quantidade de glicose e frutose em sua forma livre. Essa massa total de açúcares (forma livre mais a potencial glicose e frutose oriunda da sacarose hidrolisada) é conhecida como açúcares redutores totais (ART). Todos os balanços de massa realizados na indústria sucroalcooleira são desenvolvidos pela quantificação de ART.

Parte do caldo da cana-de-açúcar e o mel concentrado obtido como subproduto da unidade de produção do açúcar cristal são bombeados para a unidade de produção de etanol da usina, onde serão misturados para se obter uma concentração de ART na faixa de 150 a 250 g.L⁻¹, dependendo do período de operação da safra. Essa mistura, conhecida como mosto, é alimentada aos tanques de fermentação e contém minerais e nutrientes orgânicos suficientes para se iniciar a fermentação (WHEALS et al., 1999).

No Brasil, o processo de produção de etanol pode ser realizado no modo batelada alimentada, ou no modo contínuo em ambos os casos com o reciclo de células (processo Melle-Boinot). Porém, a maioria das destilarias brasileiras tem adotado o modo batelada alimentada (BASSO; BASSO; ROCHA, 2011; DELLA-BIANCA et al., 2013) para as fermentações industriais, fato justificado por vantagens operacionais relacionadas ao maior controle que se obtém para correções de processo nesse modo de operação. Na unidade de fermentação, o mosto

é inicialmente bombeado para as dornas de fermentação contendo um volume de inóculo de leveduras *Saccharomyces cerevisiae* previamente tratado (composto por uma mistura de cepas de leveduras industriais selecionadas) oriundo de ciclos de fermentações já finalizados. O mosto é alimentado aos tanques de fermentação durante aproximadamente 6 h (BASSO; BASSO; ROCHA, 2011). Três ou quatro dornas de fermentação são alimentadas simultaneamente, com níveis de enchimento sequenciados. Durante a etapa de alimentação do mosto, a sacarose é rapidamente hidrolisada pela ação da enzima invertase produzida pela levedura, resultando em uma molécula de glicose e uma de frutose. Assim, as reações de fermentação passam a acontecer, sendo as hexoses (glicose e frutose) convertidas em etanol, dióxido de carbono (CO₂) e biomassa.

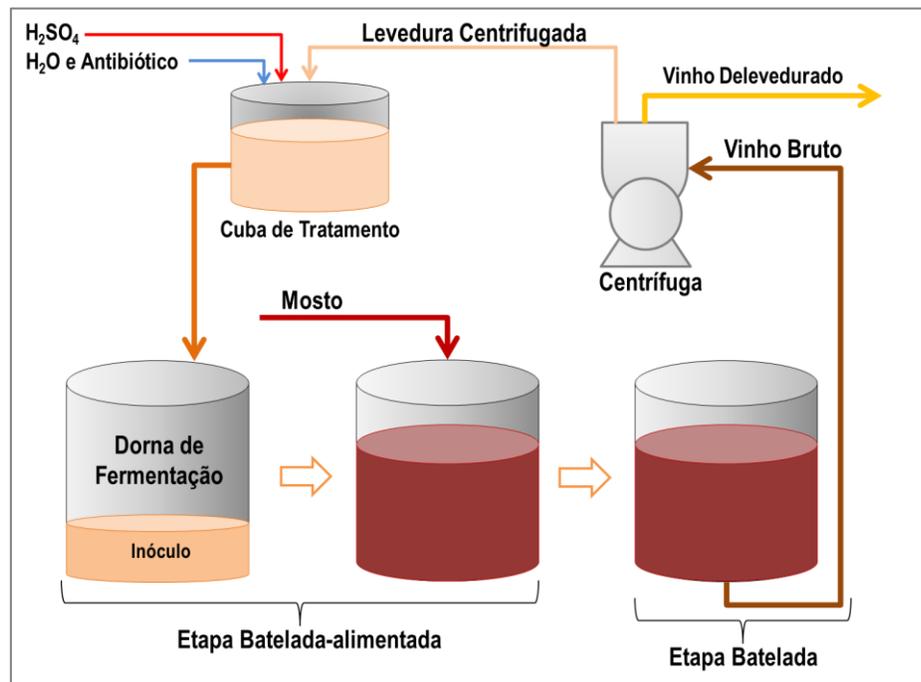
A alimentação de mosto é finalizada quando o máximo volume útil da dorna de fermentação é atingido (aproximadamente 80% do volume total). Após essa etapa, é requerido um período de 2 a 4 h para que as células possam terminar a metabolização de todos os açúcares redutores presentes no meio fermentativo. A mistura fermentada resultante desse processo é chamada de vinho bruto e composta em sua maior parte por água, células e etanol em concentrações que variam de 8,5 a 11% (em base volumétrica) (BASSO; BASSO; ROCHA, 2011). Ao final do processo fermentativo, a massa de células (levedura) alcança um aumento de cerca de 10% em relação à sua massa inicial, obtendo valores de concentração de 15% (% v/v). A temperatura do meio fermentativo é monitorada e controlada para a faixa de valores de 33-35°C (LALUCE, 1991; LIMA et al., 2001; WHEALS et al., 1999).

A unidade utilizada pelo setor para expressar a concentração é em base volumétrica (% v/v) ou °GL (grau Gay-Lussac). O vinho bruto é então centrifugado para separar as células de levedura que seguem para os tanques de tratamento do fermento, chamados de cubas de tratamento, para posterior reutilização das células em novos ciclos de fermentação da unidade. O levedo centrifugado recebe água tratada, adição de antibiótico e ácido sulfúrico nas cubas de tratamento, esses últimos para controle da contaminação bacteriana e correção do pH. O processo de tratamento do levedo pode ter duração de 1 a 3 h, dependendo do volume e *mix* de produção da usina. Devido à curta duração dos ciclos fermentativos industriais, a mesma carga de leveduras pode ser reciclada até três vezes no mesmo dia, durante os 200 dias de safra (WHEALS et al., 1999).

O vinho ausente de células (vinho delevedurado) é bombeado às colunas de destilação a fim de se obter o etanol hidratado (92,5 °INPM), e posteriormente, no caso da maioria das usinas, segue para as operações de desidratação para obtenção do etanol anidro (99,3 °INPM) (ANP, 2011).

A Figura 1.1 ilustra um fluxograma simplificado de um ciclo de fermentação industrial, utilizando apenas uma dorna para descrição do processo. A maioria das unidades industriais do setor são compostas por 4 ou 6 tanques de fermentação. Cada ciclo de fermentação tem duração de aproximadamente 10 a 12 h (4 a 6 h de batelada alimentada, seguida por 4 a 6 h da etapa de batelada para consumo dos açúcares presentes no meio). Após a finalização do ciclo, o vinho bruto é bombeado pra as centrífugas de fermento (aproximadamente 2 horas para completo esvaziamento da dorna). O chamado creme de levedura é então enviado aos tanques de tratamento de células de levedura e o vinho delevedurado para a unidade de destilação.

Figura 1.1. Fluxograma simplificado da operação de uma dorna de fermentação industrial.



Para cada etapa do processo industrial, da extração do caldo da cana-de-açúcar nas moendas até a destilação do vinho, as eficiências operacionais dos processos são calculadas

baseadas no balanço de massa de ART para cada uma delas. As perdas em ART são calculadas considerando as entradas e saídas de cada operação na usina (extração, tratamento do caldo, cristalização, fermentação e destilação). As perdas não identificadas de ART no processo, relativas ao total de ART que entra na usina pela cana-de-açúcar, são conhecidas como “perdas indeterminadas”. Nas usinas brasileiras, o valor destas perdas são estimadas entre 1,5 e 4,3 % (AMORIM, 2014). Assim, é de grande importância o desenvolvimento de metodologias que possibilitem o cálculo de maneira precisa, das eficiências de cada uma das etapas de produção do açúcar e do etanol, uma vez que a maior acuracidade na determinação das eficiências aumenta a possibilidade de minimizar o valor atribuído às perdas indeterminadas da indústria.

1.3.4. Metodologias para Cálculo de Eficiência de Fermentação

Apesar da grande importância para o setor sucroalcooleiro, há poucos trabalhos na literatura que tratam sobre as metodologias para o cálculo da eficiência de fermentação. Algumas metodologias foram propostas no passado e são utilizadas pela indústria até os dias atuais. A seguir é apresentada uma breve descrição das metodologias propostas até o momento para o cálculo da eficiência de fermentação, e que serão discutidas em detalhes no Capítulo 2 do presente trabalho.

A quantificação da eficiência de fermentação pela metodologia dos subprodutos foi inicialmente proposta e estudada por Finguerut et al. (1985) utilizando 150 amostras de vinhos de diversas usinas que operavam nos modos batelada alimentada e contínuo. O equacionamento deste método sofreu alterações e é descrito em detalhes por Fernandes (2011). Essa forma de cálculo quantifica os produtos secundários formados durante o processo fermentativo (CO_2 , biomassa, ácidos, glicerol, e outros compostos) e posteriormente os desconta de uma eficiência de 100%, a fim de se obter por medida indireta a produção de etanol e sua eficiência de produção. Essa metodologia necessita da análise de diversas variáveis de processo, com amostragens constantes em vários pontos da operação industrial. Por essa razão caiu em desuso com o tempo, de forma ainda a ser realizada em algumas unidades somente em caso excepcionais.

Fernandes (2011) descreve também em detalhes a metodologia mais utilizada pelo setor industrial nos dias atuais para o cálculo da eficiência de fermentação, baseada nos balanços volumétricos da unidade. A metodologia quantifica o volume de mosto e ART que é alimentado

às dornas de fermentação, e posteriormente o volume de etanol gerado pelo produto entre o volume de vinho bruto e o teor alcoólico do mesmo. Essa forma de calcular a eficiência de fermentação é adotada pela grande maioria das indústrias devido à simplicidade e velocidade de obtenção das variáveis de processo necessárias ao cálculo.

Raghavendran et al. (2017) tiveram por objetivo reproduzir as condições industriais de fermentação em escala laboratorial a partir de um *scale-down* de uma unidade fabril de fermentação. O processo foi concebido de forma a operar em condições próximas às encontradas na indústria, ou seja, condições não esterilizadas, utilizando mosto cedido por uma usina no interior do estado de São Paulo e linhagens de levedura isoladas e comercializadas para utilização no setor produtivo. Os autores realizaram o cálculo da eficiência de fermentação de maneira muito semelhante à utilizada pelo setor e descrita por Fernandes (2011), porém, descontando o volume correspondente à parcela de células que não contém etanol, para determinar o volume de álcool produzido. Os autores observaram que a concentração de etanol no vinho de levedurado era maior do que aquela apresentada pela parcela de leveduras centrifugadas e constataram que parte da massa celular centrifugada não deveria conter etanol, e, portanto seria razoável não considerá-la nos cálculos.

Borzani (2006) estudou a influência da concentração de células no cálculo do rendimento fermentativo em bateladas de fermentação de laboratório. O autor mostrou que a eficiência de fermentação depende do volume utilizado para o cálculo do etanol produzido. Considerando os volumes totais de inóculo e vinho bruto ao final do processo, o valor da eficiência de fermentação não sofre alteração independente da concentração de células no meio fermentativo. Porém, descontando o volume de leveduras para determinação do etanol produzido, o valor da eficiência de fermentação diminui com o aumento da concentração de células.

Andrietta et al. (2012) propuseram em seu trabalho uma forma alternativa de cálculo da eficiência de fermentação e comparou-a com os métodos de balanço volumétrico e de subprodutos. O autor considerou toda a unidade de fabricação de etanol como volume de controle - entrada do mosto na fermentação até a saída do produto. O volume de etanol produzido na fermentação é quantificado indiretamente pelo volume de etanol hidratado/anidro (na forma absoluta) ao final do processo antes dos tanques de armazenamento para venda do produto final. Andrietta et al. (2012) utilizaram dados industriais de duas safras de operação de uma unidade

industrial e concluiu que a metodologia de subprodutos foi incapaz de identificar a queda de eficiência de fermentação entre as safras. Porém, as metodologias de balanço volumétrico e a proposta pelo autor, denominada de “balanço global”, apresentaram diferentes valores de eficiência entre as safras analisadas. A metodologia proposta por Andrietta et al. (2012) apresentou os melhores resultados dentre as demais metodologias analisadas, pela acuracidade da medida do etanol produzido.

1.3.5. Rede Neural Artificial (RNA)

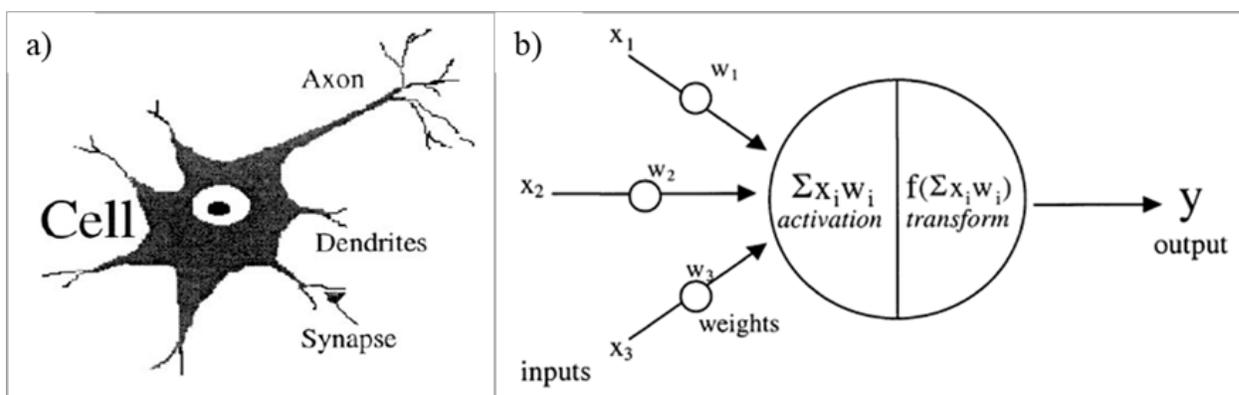
Devido à alta capacidade de modelagem de processos complexos, com alto grau de não linearidades, as redes neurais artificiais (RNAs) têm sido aplicadas aos mais diversos processos químicos no que diz respeito à análise de dados, detecção de falhas, identificação e mais recente controle de processos (HUSSAIN, 1999). O custo de modelagem de um processo químico pode se tornar elevado, e a capacidade de predição de modelos fenomenológicos nem sempre são satisfatórias para operações industriais. Apesar de seu desenvolvimento não ser recente, apenas nos últimos anos as RNAs têm sido amplamente utilizadas devido aos vários fatores que contribuíram para sua aplicação. O avanço da capacidade de processamento de máquinas, o desenvolvimento de softwares com funções de modelagem para construção de redes neurais e a satisfatória capacidade de reconhecimento de padrões por esse tipo de modelagem são fatores que contribuíram para sua utilização em diversos processos. Além disso, a versatilidade de modelagem, a facilidade de utilização e a alta capacidade de extrair dados de processos complexos fizeram com que as RNAs se tornassem importante ferramenta na simulação e modelagem (HUSSAIN, 1999).

As RNAs possuem vantagens em relação ao processamento de dados e à modelagem e otimização de bioprocessos quando comparadas às outras abordagens matemáticas existentes, o que inclui os modelos fenomenológicos. Possuem alta capacidade de processamento de dados ruidosos de processos com comportamento altamente não linear, além de habilidade de generalização e aprendizado sem necessidade de conhecimento prévio à cerca do processo em estudo (NAGATA; CHU, 2003; SEWSYNKER-SUKAI; FALOYE; KANA, 2017). As aplicações desse tipo de modelo são as mais diversas, desde controle de processos químicos até previsões do clima e do mercado financeiro, porém ainda, com tímida utilização na modelagem e

simulação de bioprocessos (SEWSYNKER-SUKAI; FALOYE; KANA, 2017). As não linearidades inerentes aos bioprocessos tornam essa área do conhecimento uma oportunidade para aplicação de modelos robustos com alta capacidade adaptativa e de aprendizado, como as redes neurais, o que tornaria possível vislumbrar o aumento de eficiência de processamento de bioprocessos já consolidados.

O funcionamento de um neurônio artificial, unidade que compõe a modelagem em RNA, é similar ao funcionamento da transmissão de sinais de um neurônio biológico. Esse último possui um corpo celular responsável por processar os sinais recebidos pelos dendritos e transmitir o sinal processado para outro neurônio através da estrutura do axônio (AGATONOVIC-KUSTRIN; BERESFORD, 2000). A Figura 1.2 ilustra a estrutura do neurônio biológico e de forma análoga apresenta a estrutura de um neurônio artificial. O neurônio artificial processa os sinais de entrada do modelo ponderado pelo valor dos pesos atribuídos a cada um deles. O somatório dos sinais de entrada ponderados pelos respectivos valores dos pesos é processado por uma função transferência, e assim gerado o sinal de saída (variável resposta do modelo) (AGATONOVIC-KUSTRIN; BERESFORD, 2000).

Figura 1.2. a) estrutura de um neurônio biológico; b) estrutura de um neurônio artificial.

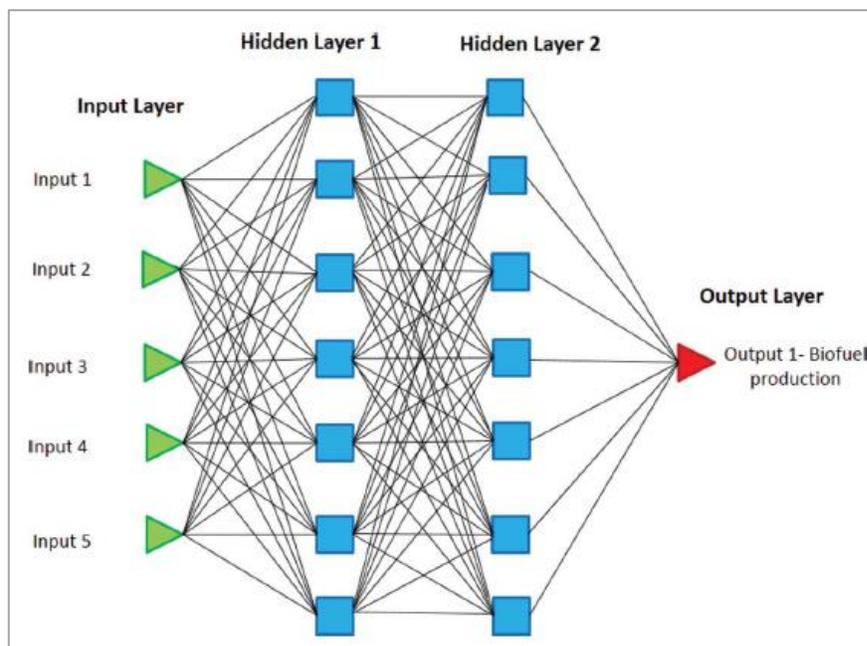


Fonte: Adaptado de Agatonovic-Kustrin et al., (2000).

A estrutura mais comumente utilizada para estruturar uma RNA é chamada de *feedforward neural network* (FNN), na qual a transmissão de dados ocorre em um único sentido, da camada de entrada até a saída da rede, sem que haja qualquer tipo de retroalimentação de

sinais (SCHMIDHUBER, 2015). O tipo de FNN mais utilizada nas modelagens de processo consiste na *Multilayer perceptron* (MLP), definida por sua estrutura de no mínimo três camadas. A primeira camada é chamada de *input layer*, onde se encontram as variáveis de entrada da rede. A segunda camada é denominada de *hidden layer*, ou camada escondida, e se define por alocar os neurônios que processarão os dados de entrada. Normalmente os neurônios da camada escondida possuem uma função transferência não linear, que gerará uma resposta a partir dos sinais de entrada ponderados pelos pesos atribuídos a cada um deles. E por fim, a terceira e última camada denomina-se por *output layer*, a qual tem a função de processar os sinais recebidos da camada escondida e gerar a saída da rede. As funções transferência empregadas na camada escondida e na camada de saída determinam o comportamento da rede neural (SILVA et al., 2000). Modelos mais complexos podem ter mais de uma camada escondida na estrutura da rede, como mostrado pela Figura 1.3 (SEWSYNKER-SUKAI; FALOYE; KANA, 2017), que possui duas camadas escondidas para processamento das variáveis de entrada a fim de se obter a produção de biocombustível como resposta do modelo.

Figura 1.3. Arquitetura de uma rede neural estruturada com duas camadas escondidas, modelada para previsão da produção de biocombustível.



Fonte: Sewsynker-Sukai; Faloye; Kana (2017).

Silva et al. (2000) realizaram o estudo de produção do antibiótico Cefalosporina C, utilizando duas redes neurais do tipo FNN que tinham por objetivo a estimativa das taxas específicas de crescimento celular e de formação de produto. As redes neurais foram então utilizadas na entrada de um modelo fenomenológico para predição das concentrações de substrato, células e produto no reator. Esse tipo de abordagem caracteriza uma modelagem denominada *grey-box*, pois acopla um modelo estocástico (RNA) com um modelo fenomenológico.

Thibault et al. (1990) realizaram a modelagem de uma fermentação a fim de analisar a dinâmica de processo e realizar a estimativa da concentração de células e substrato, para diferentes taxas de diluição. O reator modelado foi um fermentador tipo CSTR e a RNA desenvolvida foi estruturada na forma de uma FNN. As simulações do modelo em RNA foram satisfatórias e apresentaram alto grau de imunidade em relação aos ruídos do sistema. O bom desempenho das redes neurais na modelagem desses processos encorajaram demais estudos de modelagem utilizando RNAs.

Di Massimo et al. (1992) e Willis et al. (1992) arquitetaram redes neurais para produção de Penicilina G, a fim de aprimorarem as operações industriais de produção do antibiótico. Ambos utilizaram a modelagem com FNN e obtiveram boas estimativas na predição realizada pelo modelo. Di Massimo et al. (1992) utilizaram as RNAs para inferir informações de ensaios *off-line* (variáveis do processo primário, como concentração celular e de produtos) com medições *on-line* disponíveis. Willis et al. (1992) desenvolveram uma modelagem capaz de operar com um *soft sensor* no processo de fabricação de Penicilina G, e mostrou o potencial de aplicações das redes neurais artificiais.

Cruz et al. (1998) estudaram a modelagem fenomenológica e com redes neurais para desenvolver um modelo matemático capaz de descrever o processo de produção do Cefalosporina C. Duas redes neurais do tipo FNN com uma camada escondida foram empregadas. Ensaios experimentais foram realizados, e em toda a duração dos experimentos (144-166 h) foram acompanhadas as concentrações de células, Cefalosporina C, e o consumo de sacarose e glicose. Os resultados obtidos para ambos modelos foram satisfatórios, e pôde-se constatar que as redes neurais possuem alta capacidade de contornar o atraso de resposta na determinação das concentrações de células e produto no meio reacional.

A resposta da modelagem utilizando RNA deve ser testada e avaliada para diferentes quantidades de neurônios na camada escondida. Segundo Nandi et al. (2001), o número de neurônios da camada escondida deve ser o menor possível, de forma que não haja quantidade excessiva de parâmetros a serem ajustados durante a etapa de aprendizagem da rede.

Após a estruturação da RNA, há a necessidade de treiná-la com os dados experimentais que se dispõe determinado processo. Um dos métodos mais usados no treinamento supervisionado das redes neurais é o *Backpropagation*, utilizado para calcular o gradiente, a fim de realizar a atualização dos valores dos pesos das conexões entre os neurônios, as entradas e saídas (GOODFELLOW et al., 2016). Os erros entre a resposta do modelo e os dados experimentais da variável resposta são computados, para que o ajuste no valor dos pesos ocorra da camada de saída em direção às primeiras camadas da rede (DEEPAI).

Marchitan et al. (2010) estudaram a otimização da extração reativa para purificação do ácido tartárico presente em solução aquosa oriunda do processo de produção de vinhos de uva. Utilizaram nos experimentos Amberlite LA-2 como agente extrator. Os autores modelaram uma rede neural artificial para previsão da eficiência de extração utilizando as concentrações de ácido tartárico, amina e pH do meio como entradas do modelo. A RNA utilizada foi do tipo FNN e utilizou-se o método *Backpropagation* para realizar o treinamento da rede, como o algoritmo Levenberg-Marquardt para atualização do valor dos pesos durante o treinamento. O Algoritmo Genético foi utilizado para otimização das condições de operação a fim de se obter a maior eficiência possível do processo. O resultado experimental alcançado para as condições ótimas de operação foi de 96% de eficiência, com 10% de desvio em relação à resposta do modelo, o que evidencia o potencial da utilização das redes neurais e da arquitetura utilizada na previsão do processo.

Grahovac et al. (2016) modelaram o processo de produção de etanol a partir do açúcar de beterraba. Várias redes foram modeladas, alterando o número de variáveis de entrada e a combinação entre elas. Utilizaram basicamente o tempo de fermentação, a concentração e os tipos de açúcares na entrada da rede, e definiram diferentes RNAs para cada tipo de variável resposta: concentração de etanol, de células e açúcares residuais. As RNAs modeladas continham apenas uma camada escondida com diferentes números de neurônios testados (1-12). Os autores utilizaram tentativa e erro para determinar o número ideal de neurônios para cada rede. As redes

utilizadas foram do tipo FNN com o método *Backpropagation* para treinamento e o algoritmo Levenberg-Marquardt para atualização dos pesos. Foram obtidos coeficientes de correlação (R^2) com valores acima de 0,90 para as condições otimizadas de número de neurônios. Os resultados foram satisfatórios e mostraram o potencial de predição das redes neurais quando modeladas com as variáveis de entrada e saída mais adequadas. Os experimentos para levantamento dos dados foram conduzidos em escala de laboratório.

1.3.6. RNA Aplicada aos Bioprocessos

Os bioprocessos têm ganhado cada vez mais importância no âmbito científico e impactado diretamente na vida da sociedade moderna. O advento de biocombustíveis bem como o desenvolvimento da indústria alimentícia são apenas alguns exemplos que utilizam de bioprocessos para a fabricação de produtos de interesse da sociedade e das atividades de pesquisa. Fatores como a redução dos custos e desenvolvimento de novas estratégias produtivas têm sido de fundamental importância no âmbito da engenharia química e bioquímica. Têm-se buscado otimizar as variáveis que regem a produção de bioprodutos, porém devido à complexidade das operações que utilizam microrganismos e à grande quantidade de variáveis envolvidas que não são contempladas em modelos cinéticos e fundamentais, a modelagem dos bioprocessos permanece um desafio (FRANCO-LARA; LINK; WEUSTER-BOTZ, 2006).

As vantagens ambientais ligadas à redução da emissão de gases de efeito estufa proporcionadas pela produção do etanol oriunda da cana-de-açúcar no Brasil (BÖRJESSON, 2009) potencializa o desenvolvimento de novas tecnologias produtivas que aumentem a eficiência de produção desse biocombustível e o tornem ambiental e economicamente competitivo quando comparado aos combustíveis fósseis.

Franco-Lara; Link; Weuster-Botz, (2006) desenvolveram modelagem em redes neurais artificiais com a utilização de algoritmo genético para obter a maximização simultânea da concentração de biomassa e conversão de pentafluoroacetofenona (PFAP) com *Synechococcus* PCC 7942.

Ahmadian-Moghadam; Elegado; Nayve, (2013) realizaram ensaios de fermentação em laboratório, utilizando mosto da cana-de-açúcar e cepa de levedura *Saccharomyces cerevisiae* para modelar uma estrutura em rede neural a fim de prever a concentração de etanol do

processo (variável resposta do modelo). Os experimentos foram realizados em batelada, e utilizou-se a concentração de açúcares redutores totais e de células de levedura mortas e vivas como dados de entrada da rede. Os autores obtiveram o valor de 0,92 para o coeficiente de regressão que mostra significativa acurácia da rede na previsão da concentração de etanol para o sistema de fermentação realizado.

Como mencionado anteriormente, a arquitetura *Multilayer Perceptron* (MLP) é a mais utilizada para modelagem de redes neurais artificiais do tipo FNN (NANDI et al., 2001). Gueguim Kana et al., (2012) estudaram a produção de biogás a partir da modelagem de uma rede MLP com um vetor de cinco entradas (composição da matéria-prima) e com uma saída (performance de produção), utilizando o método *Backpropagation* para treinamento da rede e o algoritmo Levenberg-Marquardt para o ajuste dos pesos.

Apenas uma camada escondida possui capacidade suficiente de processamento para modelagem de qualquer função contínua que apresente não linearidades (HORNIK; STINCHCOMBE; WHITE, 1989). Nagata; Chu (2003) modelaram o processo de fermentação para produção da enzima hydantoinase pelo microrganismo *Agrobacterium radiobacter* utilizando redes neurais do tipo MLP, sendo a entrada composta pelas diferentes composições do meio de fermentação e a saída sendo a concentração celular ao final do processo.

A modelagem em redes neurais estruturadas na forma de MLP foi também utilizada para previsão da produção de biohidrogênio a partir do mosto oriundo da cana de açúcar (WHITEMAN; GUEGUIM KANA, 2014). Os autores compararam a modelagem em redes neurais artificiais (RNA) com o resultado obtido a Metodologia de Superfície de Resposta (MSR). A predição utilizando RNA apresentou desvio entre os dados experimentais e os modelados cerca de dez vezes menor do que o alcançado pela metodologia RSM. Utilizou-se o algoritmo *Backpropagation* para ajuste dos pesos e o algoritmo Levenberg-Marquardt para treinamento da mesma.

1.3.7. RNA Aplicada à Produção de Etanol

Ainda são escassos os trabalhos envolvendo o emprego de redes neurais artificiais como ferramenta para modelagem e predição do processo de produção do bioetanol. Porém, há amplo espaço para desenvolvimento de trabalhos acerca desse assunto, uma vez que o setor produtivo industrial nacional necessita de ferramentas que auxiliem no aumento de eficiência e redução do custo de produção do etanol, fatores hoje que comprometem a sua competitividade no mercado quando comparado à gasolina (SEWSYNKER-SUKAI; FALOYE; KANA, 2017).

O custo de produção do bioetanol pode ser diminuído a partir da otimização das variáveis que impactam diretamente a fermentação, o que torna o estudo da modelagem do processo bem como a definição de condições ótimas de operação que maximizem a eficiência do processo, um tema de grande interesse industrial (ESFAHANIAN et al., 2013). Esfahanian et al. (2013) estudaram a modelagem em redes neurais para a produção de bioetanol e biomassa, utilizando bateladas de fermentação em laboratório com o microrganismo *Saccharomyces cerevisiae* a partir da metabolização de glicose. Utilizaram como variáveis de entrada da rede o pH, a concentração de glicose e a temperatura de fermentação. A arquitetura usada para modelagem da rede neural foi a MLP com *Backpropagation* e o algoritmo Levenberg-Marquardt para treinamento da mesma. Foi possível obter ajustes satisfatórios dos dados estimados com os experimentais, com R^2 apresentado acima de 0,99 para estimativa de concentração de etanol e células.

Grahovac et al. (2016) modelaram o processo de fabricação de etanol a partir de açúcares da beterraba, como mencionado anteriormente. Apesar da similaridade entre aspectos em comum com a produção de etanol brasileira oriunda da cana-de-açúcar, vale ressaltar que a concentração de células utilizadas nos experimentos foi cerca de 10 vezes menor do que a do processo industrial nacional, o que impacta nas diferenças dos tempos de fermentação. As usinas no Brasil fermentam em cerca de 12 h cada ciclo completo, enquanto os experimentos do trabalho de Grahovac et al. (2016) necessitaram de 48 h. O trabalho possui grande relevância no que diz respeito à aplicação de redes neurais na modelagem de produção de etanol, porém em condições diferentes àquelas apresentadas no setor industrial de cana-de-açúcar.

Da mesma forma, como supracitado, Ahmadian-Moghadam; Elegado; Nayve (2013) mostraram como as redes neurais podem ser úteis na predição da concentração de etanol ao final de um processo de fermentação. Apesar de maiores similaridades com o processo brasileiro, os

ensaios experimentais conduzidos pelos pesquisadores foram em escala de laboratório e utilizaram variáveis que apesar de importantes para a fermentação, são insuficientes para a modelagem de um processo em escala industrial. Contaminação bacteriana do meio reacional e pureza do mosto de alimentação são, por exemplo, variáveis presentes apenas no ambiente industrial que influenciam na produção do etanol.

Sebayang et al. (2017) realizaram a modelagem de duas redes neurais, sendo a primeira para modelar o processo de hidrólise enzimática do amido de sorgo e gerar como saída a concentração de açúcares redutores, que experimentalmente foram utilizados na posterior etapa de fermentação para geração de etanol, essa última modelada pela segunda rede neural. Foram utilizadas a concentração de células, a temperatura e a velocidade de agitação como variáveis de entrada da rede do processo de fermentação. Ambas as RNAs foram do tipo MLP e utilizaram os algoritmos *Backpropagation* e Levenberg-Marquardt para treinamento e atualização dos pesos da rede. A função transferência utilizada na modelagem das redes foi a tangente hiperbólica sigmoide na camada oculta, e a linear na camada de saída. Os ensaios foram conduzidos em escala de laboratório e obtiveram alto coeficiente de determinação para as redes ($R^2=0,987$ para a RNA do processo de fermentação). Após a estruturação da rede neural, os pesquisadores realizaram a otimização das variáveis de entrada dos processos de hidrólise e fermentação, a fim de maximizar a produção de açúcares redutores e etanol, respectivamente, utilizando o algoritmo *Ant Colony Optimization* (ACO). Os resultados otimizados obtidos apresentaram desvios relativos de 0,94 e 0,72 % para a concentração de açúcares redutores e etanol, respectivamente, o que comprova a eficácia do modelo.

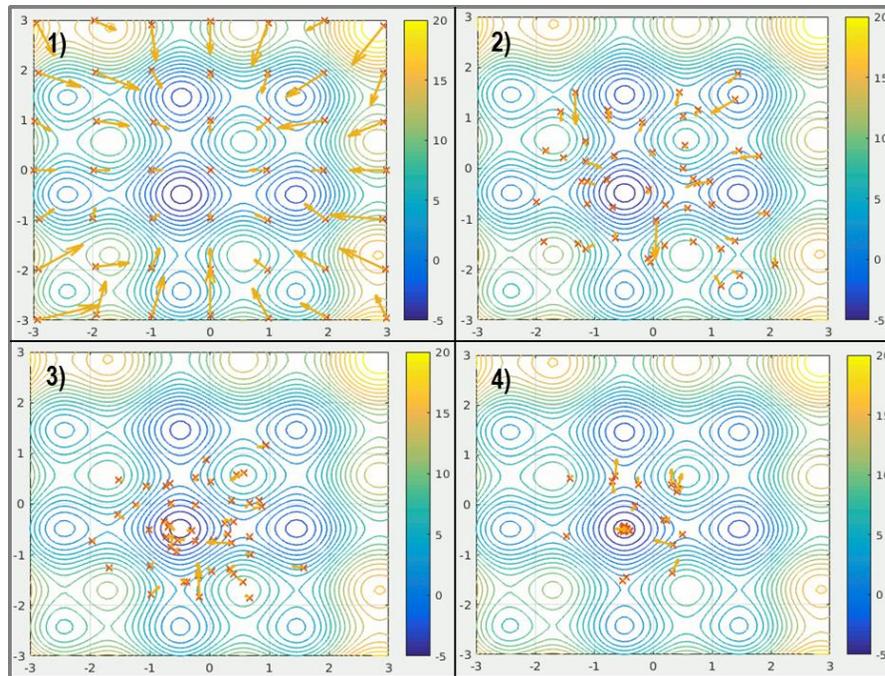
Talebnia et al. (2015) estudaram a produção de etanol a partir da palha de colza, devido ao baixo custo da matéria-prima. Foram realizados experimentos em laboratório para levantamento de dados da explosão a vapor e hidrólise enzimática e posteriormente realizadas as etapas de sacarificação e fermentação. Os processos foram posteriormente modelados com a utilização de redes neurais. Para o processo de hidrólise foi utilizada uma rede MLP e para a sacarificação e fermentação uma rede FNN híbrida com retroalimentação da concentração de glicose – que compõe uma das saídas da rede. Vale ressaltar que o algoritmo de treinamento utilizado foi o *Backpropagation* e a função transferência da camada escondida de ambas as redes foi a tangente hiperbólica sigmoide. Os coeficientes de determinação calculados alcançaram

valores acima de 0,97, o que mostra o alto potencial de aplicação das redes neurais até mesmo para problemas mais complexos (maior número de variáveis de entrada e saída).

1.3.8. Algoritmo de Otimização Particle Swarm Optimization (PSO)

O algoritmo *Particle Swarm Optimization (PSO)* é um método computacional de otimização baseado na distribuição de várias partículas no campo amostral de uma função (normalmente multivariável) que caminham em direção ao ponto ótimo da função (buscando o mínimo alcançado pelo enxame de partículas). A atualização da posição e da velocidade de deslocamento de cada partícula se dá na direção do mínimo alcançado naquela iteração pelo enxame de partículas (EBERHART; SHI, 2001). Diversas são as possíveis aplicações do PSO, facilitadas pelo fato do algoritmo necessitar do ajuste de poucos parâmetros na realização de suas aplicações. São reportadas aplicações do algoritmo PSO em conjunto com as redes neurais artificiais em diversos problemas de engenharia e modelagem de processos (EBERHART; SHI, 2001). A Figura 1.4 exemplifica a dinâmica de funcionamento do algoritmo, mostrando o deslocamento das partículas no sentido do mínimo global da função.

Figura 1.4. Dinâmica de funcionamento do PSO. Deslocamento das partículas até o ponto de mínimo global (sequência seguida de 1 a 4).



Disponível em: <https://en.wikipedia.org/PSO>

Khaouane et al. (2012) otimizaram as variáveis de produção da Pleuromutilina obtida do *Pleurotus Mutilus*. A modelagem do processo foi realizada com a utilização de redes neurais em conjunto com o algoritmo PSO, que foi utilizado na etapa de treinamento da rede, substituindo o algoritmo *Backpropagation*, e em um segundo momento na otimização das variáveis de entrada do modelo – velocidade de agitação, pH e temperatura. A resposta do modelo foi satisfatória, e a aplicação do PSO mostrou-se vantajosa comparada às demais apresentadas no trabalho, uma vez que há diversas partículas compartilhando informações quanto suas posições simultaneamente.

No trabalho de Rocha et al. (2014) foram comparados diversos algoritmos com o PSO, em quatro diferentes casos de estudos. Os autores fizeram uma comparação entre todos os métodos apresentados no trabalho. O algoritmo PSO apresentou os melhores resultados dentre os demais métodos para metade dos estudos de caso apresentados: otimização da fermentação batelada alimentada utilizando *E. coli* recombinante e na produção de proteínas por bactérias.

Como pode ser observado, muitos trabalhos têm sido propostos com o objetivo de se estudar as rotas de produção de etanol, e melhorar os processos de fermentação. A elevada quantidade de trabalhos evidencia a importância do tema, tanto no âmbito científico, quanto no tecnológico, uma vez que o etanol combustível mostra-se uma alternativa ambiental e econômica à sociedade. Tratando-se dos métodos de cálculo para determinação da eficiência de fermentação, observam-se poucos trabalhos publicados acerca do assunto e métodos que necessitam ser aperfeiçoados para as condições industriais de operação das usinas brasileiras. Essa demanda de desenvolvimento de uma nova metodologia, que seja robusta e de alta precisão, para o cálculo da eficiência de fermentação industrial justifica o primeiro capítulo do presente trabalho. Já a modelagem do processo de fermentação industrial tem sido um desafio para industriais e pesquisadores que buscam uma forma assertiva de mapear e prever o processo de fermentação das usinas. Muitos trabalhos são propostos nessa área e alguns com a utilização de redes neurais, porém com dados de escala de bancada, em condições bem controladas de operação, que não representam a realidade industrial. O terceiro capítulo do trabalho aqui apresentado trata da modelagem em redes neurais de um processo de fermentação com um banco de dados industrial. Além disso, traz a otimização das variáveis de entrada do processo, visando à aplicação da ferramenta desenvolvida para auxílio direto no aumento de produção de etanol na indústria.

Capítulo 2 : Desenvolvimento de Nova Metodologia para Cálculo de Eficiência de Fermentação

2.1.MATERIAIS E MÉTODOS I: FERMENTAÇÕES BATELADA ALIMENTADA EM ESCALA DE BANCADA

2.1.1. Microrganismo e meio de cultura

A levedura liofilizada industrial *Saccharomyces cerevisiae* Y904 (AB Brasil Indústria e Comércio de Alimentos Ltda, Pederneiras, SP, Brasil) foi usada nas fermentações em escala de bancada (BSF). Cinco fermentações em modo batelada alimentada foram planejadas e realizadas. As composições do mosto utilizado em cada fermentação foram as seguintes: (BS1) caldo de cana-de-açúcar concentrado, (BS2) caldo de sorgo concentrado, (BS3) melaço de cana-de-açúcar diluída em água, (BS4) melaço diluído em caldo de cana-de-açúcar (38% m/m do ART do melaço e 62% m/m do ART do caldo), (BS5) melaço diluído em caldo de sorgo (42% m/m do ART do melaço e 58% m/m do ART do caldo). Em todos os mostos preparados, a concentração de ART foi ajustada para cerca de 240 g.L⁻¹. O melaço e o caldo de cana-de-açúcar foram doados por uma usina localizada no interior do estado de São Paulo. O caldo de sorgo foi fornecido pela Universidade Federal de São Carlos (campus Lagoa do Sino). As composições de açúcares de cada um dos mostos citados são mostradas na Tabela 2.1. Os mostos foram suplementados com (em g.L⁻¹): extrato de levedura (6,8), KH₂PO₄ (5,6), MgSO₄.7H₂O (1,4) e ureia (5,32), com o objetivo de imitar a composição nutricional do mosto industrial. Os valores iniciais de pH do meio de cultura foram ajustados para 4,6 adicionando solução 1,0 molar de HCl. Nas fermentações com caldo de cana-de-açúcar e sorgo (BS1 e BS2), os mostos foram concentrados por evaporação para serem alcançados os valores desejados de concentração de ART (~240 g.L⁻¹).

Tabela 2.1. Concentração de açúcares nos substratos utilizados para compor os diferentes mostos alimentados nas fermentações em escala de bancada.

Substrato	Sacarose (g.L⁻¹)	Glicose (g.L⁻¹)	Frutose (g.L⁻¹)	ART (g.L⁻¹)
Caldo de cana-de-açúcar	187,2	5,3	3,7	206,1
Melaço de cana-de-açúcar	705,5	33,2	48,3	822,5
Caldo doce de sorgo	132,8	23,8	16,2	179,9

2.1.2. Procedimento experimental

Os experimentos foram realizados em um biorreator pneumático do tipo coluna de bolhas com 2 L de volume útil. As fermentações operadas em modo batelada alimentada foram realizadas com o intuito de reproduzir a operação de uma destilaria industrial, considerando o tempo total de fermentação industrial (8-12 h). A levedura (30 g, em base seca) foi previamente hidratada em 0,6 L de água destilada (inóculo correspondente a 30% do volume total), por 10 minutos, sob agitação mecânica de 800 rpm. O mosto (1,4 L, com ~240 g.L⁻¹ de ART) foi então alimentado por 5 h a vazão volumétrica constante de 280 ml.h⁻¹, usando uma bomba peristáltica (Modelo 120U, Watson-Marlow, Santana de Parnaíba, SP, Brasil), resultando em um volume total de 2 L e concentração de ART de aproximadamente 170 g.L⁻¹. A homogeneização do caldo de fermentação foi realizada pela recirculação do meio reacional do reator empregando vazão volumétrica constante de 0,8 L.min⁻¹, usando uma bomba peristáltica (Modelo BVP, Ismatec, Presidente Prudente, SP, Brasil). A temperatura foi mantida em 34°C pela recirculação de água entre um banho com temperatura controlada (termostato) e a jaqueta do biorreator. Agente antiespumante comercial (Qualifoam, diluído na proporção 1:10) foi adicionado quando necessário, com o objetivo de evitar/minimizar a formação de espuma. As fermentações foram realizadas até o esgotamento de substrato (8-11 h). Amostras de 2 ml do inóculo, do mosto e do vinho bruto (ao final do processo) foram retiradas para análise das concentrações de sacarose, glicose, frutose, etanol, glicerol e células de levedura. Todas as fermentações foram realizadas em duplicata. A média e desvio padrão da eficiência de fermentação foram calculados para todas as fermentações.

2.1.3. Métodos analíticos

As amostras foram centrifugadas a $3720\times g$ (4°C por 10 minutos). O precipitado foi lavado duas vezes com água destilada, seguida por secagem a 80°C por 24 h para se obter a concentração de células em massa seca. As concentrações de sacarose, glicose, frutose e etanol no sobrenadante foram determinadas por cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE), usando cromatógrafo (Waters, Milford, MA, USA) equipado com detector de índice de refração e a coluna Sugar-Pak I ($300 \times 6,5\text{mm}$, $10 \mu\text{m}$, Waters) mantida a 80°C . O eluente foi água ultrapura na vazão de $0,5 \text{ ml}\cdot\text{min}^{-1}$. Os padrões utilizados foram sacarose, glicose, frutose e soluções de etanol em concentrações entre $0,1$ e $8,0 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$.

2.2.MATERIAIS E MÉTODOS II: FERMENTAÇÕES BATELADA ALIMENTADA EM ESCALA INDUSTRIAL

As fermentações industriais (IF) foram realizadas em tanques de 700 m^3 (650 m^3 de volume útil). A unidade de fermentação em estudo pertence a uma usina produtora de açúcar e etanol localizada no interior do estado de São Paulo (Brasil). A unidade industrial era composta por um conjunto de seis dornas de fermentação, com produção de cerca de 500 m^3 de etanol anidro por dia, resultando em uma produção de 100.000 m^3 por safra da cana-de-açúcar.

Foi necessário determinar os volumes de mosto adicionado na dorna, bem como de inóculo de leveduras e vinho bruto final, em praticamente todas as metodologias utilizadas para calcular a eficiência de fermentação em etanol. Em uma planta industrial, volumes precisos são normalmente determinados como o produto entre a vazão volumétrica, medida com medidores de vazão, e o tempo total de enchimento dos tanques. Uma vez que a destilaria onde as fermentações industriais ocorreram era desprovida de medidores de vazão, e considerando que as dornas de fermentação eram abertas para atmosfera, as medidas dos volumes de fermentação foram realizadas pela aferição visual do nível de enchimento de cada um dos tanques.

Ao início do processo de fermentação, após a transferência do creme de levedura (inóculo) das cubas de tratamento do levedo (tanques de tratamento) para os tanques de fermentação, o espaço vazio nas dornas era aferido usando uma trena eletrônica a laser. Essa

medida possibilitou o cálculo do volume de inóculo baseado no volume total do tanque. Para cada fermentação em batelada alimentada realizada, uma amostra do inóculo que foi transferida para dorna de fermentação era coletada para realização das análises de concentração de etanol e de células. Após esse procedimento, iniciava-se a etapa de alimentação dos tanques com mosto. Amostras eram coletadas em tempos programados durante todo o período de alimentação por um equipamento de coleta e estocagem de amostras, para posterior análise da concentração de ART na amostra alimentada (amostragem composta).

Diferente das bateladas alimentadas realizadas em escala de bancada, no processo industrial não foi possível fixar uma concentração de ART no mosto de alimentação das dornas uma vez que os componentes de mistura para composição do mesmo (caldo de cana-de-açúcar, melaço e água) variaram devido às oscilações de processo. Por isso, a faixa de composições do mosto alimentado industrialmente e analisados durante esse processo, variou entre 106 e 245 g.L⁻¹, resultado das instabilidades de processo da unidade industrial. A duração do tempo de alimentação de mosto variou de 4 a 8 h, também devido às constantes oscilações do processo industrial, principalmente relacionadas à moagem e à queda de pressão de vapor. A temperatura do meio de fermentação foi mantida na faixa de 30-35°C em todas as bateladas alimentadas, enquanto a concentração de células na cuba de tratamento do levedo variou de 20 a 30% (% v/v em base úmida). Ao final das fermentações, a concentração de células no vinho bruto foi de aproximadamente 12% (% v/v em base úmida) e a concentração de etanol variou na faixa de 50-85 g.L⁻¹. As análises das fermentações industriais em batelada alimentada foram realizadas seguindo o procedimento descrito no item 2.1.3.

As fermentações industriais (IF) não foram realizadas em duplicata. Por essa razão, a incerteza padrão da eficiência de fermentação de etanol foi calculada baseada na propagação das incertezas padrão dos equipamentos utilizados para as medições das variáveis usadas nos cálculos das metodologias apresentadas nesse trabalho (KU, 1966), com nível de confiança de 68%. O resultado obtido para a propagação individual das incertezas representa a incerteza no valor de eficiência de fermentação para produção de etanol para cada metodologia discutida nesse trabalho.

2.3.MATERIAIS E MÉTODOS III: METODOLOGIAS PARA CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE FERMENTAÇÃO DE ETANOL (η)

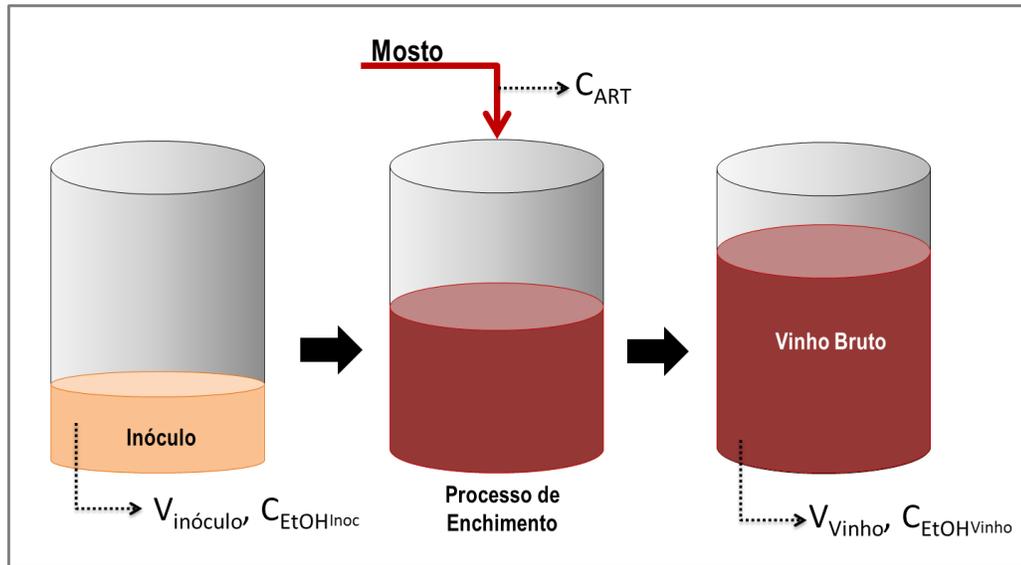
Essa sessão apresenta quatro metodologias já reportadas na literatura (itens 2.3.1, 2.3.2 e 2.3.3) e a metodologia proposta nesse trabalho (item 2.3.4) para obtenção da eficiência de fermentação em etanol (η) nas fermentações em batelada alimentada.

2.3.1. Metodologia 1: Eficiência de fermentação em etanol por balanço de volume (η_{MI})

Eficiência de fermentação em etanol por balanço de volumes considerando os volumes totais de vinho e inóculo (η_{MIA})

A metodologia mais popular e atualmente utilizada pelas destilarias brasileiras no cálculo de eficiência de fermentação (η_{MIA}) considera os volumes de vinho e inóculo (leveduras) para determinar os volumes de mosto alimentado às dornas e etanol produzido (FERNANDES, 2011). O volume de controle utilizado para o balanço é a dorna de fermentação em três momentos distintos: transferência do inóculo, alimentação, e finalização do enchimento. A Figura 2.1 mostra o volume de controle e as variáveis utilizadas pelo método.

Figura 2.1. Volume de controle (dorna de fermentação) para Metodologias 1A e 1B.



O volume de mosto é determinado utilizando a diferença entre o volume final de vinho, exatamente antes do início da centrifugação, e o volume de inóculo no início do ciclo de fermentação, como mostrado na Equação 2.1.

$$V_{Mosto} = V_{Vinho} - V_{Inóculo} \quad (2.1)$$

onde V_{Mosto} (m^3) é o volume de mosto, V_{Vinho} (m^3) é o volume de vinho bruto, e $V_{Inóculo}$ (m^3) é o volume de inóculo.

A massa total de açúcares redutores totais (glicose e frutose livres mais o potencial de açúcares resultante da hidrólise da sacarose) adicionada na dorna de fermentação é determinada pela multiplicação de V_{Mosto} pela concentração de ART (C_{ART} , em $kg.m^{-3}$). O volume estequiométrico de etanol ($V_{EtOHEteq}$), que seria produzido se toda a massa de ART fosse convertida a etanol, é calculado usando o fator de conversão de 0,6480 L de etanol por kg de ART (FERNANDES, 2011), como mostrado na Equação 2.2.

$$V_{EtOH_{Estq}} = V_{mosto} \cdot C_{ART} \cdot 0.6480/1000 \quad (2.2)$$

É necessário determinar o volume de etanol produzido no processo (V_{EtOH}) para se calcular o valor de eficiência de fermentação. A Equação 2.3. mostra como a metodologia de balanço de volumes é utilizada para se obter o volume de etanol produzido. Essa equação utiliza os volumes de inóculo ($V_{Inóculo}$) e de vinho bruto ao final da fermentação (V_{Vinho}), multiplicados pelas respectivas concentrações de etanol de cada amostra (C_{EtOH} , em % v/v ou °GL).

$$V_{EtOH} = V_{Vinho} \cdot (C_{EtOH_{Vinho}}/100) - V_{Inóculo} \cdot (C_{EtOH_{Inoc.}}/100) \quad (2.3)$$

A eficiência de fermentação em etanol (η_{M1A}) pode ser calculada utilizando a Equação 2.4.

$$\eta_{M1A}(\%) = \left(V_{EtOH} / V_{EtOH_{Esteq}} \right) \cdot 100 \quad (2.4)$$

Essa metodologia utiliza os volumes de vinho bruto e inóculo para determinar o volume de mosto, mas não considera as mudanças de densidade que ocorrem durante o processo de fermentação. Adicionado a esse fato, os volumes de vinho e inóculo são utilizados para determinar o volume de etanol produzido, sem descontar o volume de células presente nas amostras.

Eficiência de fermentação em etanol por balanço de volumes descontando o volume de levedura (massa seca) na determinação dos volumes de vinho e inóculo (η_{M1B})

Esta metodologia foi proposta por Raghavendran et al. (2017). No trabalho publicado, os autores descrevem o processo brasileiro de produção de etanol (apesar de voltado para operação em pequena escala). Essa metodologia considera a exclusão do volume que teoricamente não contém etanol – massa de levedura não composta por líquidos (massa seca), para cálculo da

eficiência de fermentação. Apesar da similaridade com a Metodologia 1A (mesmo volume de controle, como mostrado na Figura 2.1), esse método subtrai o volume ocupado pela parte seca das células dos volumes de vinho bruto e de inóculo a fim de determinar o volume total de etanol produzido. Como pode ser observado na Equação 2.5, o volume de etanol produzido é calculado em duas frações (parte líquida do volume de células somada ao etanol extracelular). A eficiência de fermentação baseada nessa metodologia é calculada pela Equação 2.5.

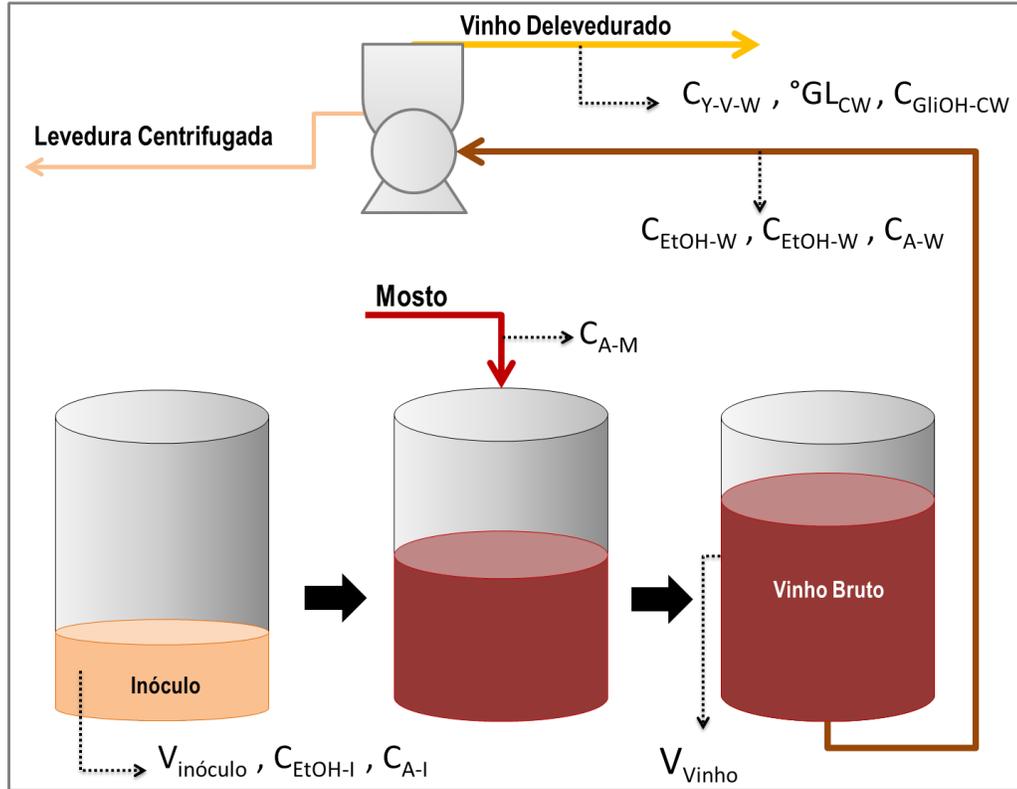
$$\eta_{M1B}(\%) = \frac{10.000 \times [(V_{\text{vinho}} + 0,7 \times P) \times C_{\text{EtOH}_{\text{vinho}}} - (V_{\text{Inoc}} + 0,7 \times P_P) \times C_{\text{EtOH}_{\text{Inoc}}}]}{64,75 \times V_{\text{mosto}} \times C_{\text{ART}}} \cdot 100 \quad (2.5)$$

onde 0,7 é a fração de volume líquido da biomassa, P é a biomassa peletizada (corpo de fundo) (kg) oriunda do vinho bruto e P_P é a biomassa peletizada do inóculo (kg). As unidades utilizadas nas variáveis para calcular a eficiência de fermentação por esse método foram adaptadas para que fosse possível usá-las com os dados industriais disponíveis e compará-las com as demais metodologias descritas nesse trabalho.

2.3.2. Metodologia 2: Eficiência de fermentação em etanol pela determinação de subprodutos (η_{M2})

Esta metodologia calcula a eficiência de fermentação pela determinação de subprodutos gerados no processo. Ela foi amplamente utilizada nas destilarias brasileiras até meados dos anos 2000. Este método foi formalmente proposto por Finguerut et al. (1985) e é descrito por Fernandes (2011). A metodologia apresentada aqui considera que a massa de ART no mosto alimentado à fermentação ($M_{ART_{in}}$) é totalmente consumida durante o processo fermentativo ($M_{ART_{cons}}$) para gerar etanol ($EtOH$), dióxido de carbono (CO_2), células de levedura (Y), glicerol ($GliOH$), e ácidos (A). O balanço de massa de ART para a unidade de fermentação é dado pela Equação 2.6 e segue o volume de controle mostrado na Figura 2.2.

Figura 2.2. Volume de controle para Metodologia 2.



$$M_{\text{ART}_{\text{In}}} = M_{\text{ART}_{\text{Cons}}} = M_{\text{EtOH}} + M_{\text{CO}_2} + M_{\text{Y}} + M_{\text{GliOH}} + M_{\text{A}} \quad (2.6)$$

Dividindo a Equação 2.6 por $M_{\text{ART}_{\text{Cons}}}$ resulta na Equação 2.7.

$$\frac{M_{\text{ART}_{\text{Cons}}}}{M_{\text{ART}_{\text{Cons}}}} = 1 = \frac{M_{\text{EtOH}} + M_{\text{CO}_2} + M_{\text{Y}} + M_{\text{GliOH}} + M_{\text{A}}}{M_{\text{ART}_{\text{Cons}}}} \quad (2.7)$$

É possível substituir os termos da Equação 2.7 pelos coeficientes de rendimento para conversão de substrato (ART) em etanol ($Y_{\text{EtOH/ART}}$) e nos subprodutos dióxido de carbono ($Y_{\text{CO}_2/\text{ART}}$), células de levedura ($Y_{\text{Y/ART}}$), glicerol ($Y_{\text{GliOH/ART}}$), e ácidos ($Y_{\text{A/ART}}$), resultando na Equação 2.8.

$$1 = Y_{EtOH/ART} + Y_{CO_2/ART} + Y_{Y/ART} + Y_{GliOH/ART} + Y_{A/ART} \quad (2.8)$$

Os coeficientes de rendimento relacionam as massa de etanol produzido (ΔM_{EtOH}) e dos subprodutos gerados com a massa total de ART consumido ($M_{ART_{Cons}}$). A modificação na Equação 2.8, considerando as razões entre as massas de subprodutos e etanol, juntamente com o rendimento em etanol ($Y_{EtOH/ART}$), resulta na Equação 2.9.

$$1 = Y_{EtOH/ART} + \frac{\Delta m_{CO_2}}{\Delta m_{EtOH}} Y_{EtOH/ART} + \frac{\Delta m_Y}{\Delta m_{EtOH}} Y_{EtOH/ART} + \frac{\Delta m_{GliOH}}{\Delta m_{EtOH}} Y_{EtOH/ART} + \frac{\Delta m_A}{\Delta m_{EtOH}} Y_{EtOH/ART} \quad (2.9)$$

Rearranjando a Equação 2.9, com o isolamento do termo de $Y_{EtOH/ART}$, obtém-se a Equação 2.10.

$$Y_{EtOH/ART} = \frac{1}{1 + \frac{\Delta m_{CO_2}}{\Delta m_{EtOH}} + \frac{\Delta m_Y}{\Delta m_{EtOH}} + \frac{\Delta m_{GliOH}}{\Delta m_{EtOH}} + \frac{\Delta m_A}{\Delta m_{EtOH}}} \quad (2.10)$$

A eficiência de fermentação em etanol (η) é definida pela razão entre os coeficientes de rendimento em etanol observado ($Y_{EtOH/ART}$) e o estequiométrico ($Y_{Esteq} = 0,511 \text{ kg}_{EtOH} \cdot \text{kg}_{ART}^{-1}$) (Equação 2.11).

$$\eta(\%) = \frac{Y_{EtOH/ART}}{0.511} \cdot 100 \quad (2.11)$$

Substituindo $Y_{EtOH/ART}$ da Equação 2.10 na Equação 2.11 resulta na Equação 2.12.

$$\eta_{M2}(\%) = \frac{100}{0.511 \cdot (1 + K_{CO_2} + K_Y + K_{GliOH} + K_A)} \quad (2.12)$$

onde as constantes K_{CO_2} , K_Y , K_{GliOH} , e K_A são relacionadas com as massas de subprodutos geradas e a massa de etanol produzida.

Devido à dificuldade de medição do CO_2 produzido durante a fermentação alcoólica industrial, uma relação entre o crescimento de células e a produção de CO_2 foi obtida experimentalmente em escala de planta piloto pelo Centro de Tecnologia Canavieira, CTC (2011) (Equação 2.13).

$$K_{CO_2} = 0.955 + 1.33 \cdot K_Y \quad (2.13)$$

Substituindo a Equação 2.13 na Equação 2.12, tem-se a Equação 2.14.

$$\eta_{M2}(\%) = \frac{100}{1 + 1.19 \cdot K_Y + 0.511 \cdot K_{GliOH} + 0.511 \cdot K_A} \quad (2.14)$$

Os coeficientes da Equação 2.14 podem ser determinados pelas equações que seguem, propostas por Fernandes (2011).

$$K_Y = \frac{0.33 \cdot C_{Y-V-W}}{0.7893 \cdot \text{°GL}_{CW}} \quad (2.15)$$

$$K_{GliOH} = \frac{C_{GliOH-CW}}{0.7893 \cdot \text{°GL}_{CW}} \quad (2.16)$$

$$K_A = \frac{C_{A-W} \cdot V_{\text{vinho}} - C_{A-I} \cdot V_{\text{Inóculo}} - C_{A-M} \cdot V_{\text{Mosto}}}{789.3 \cdot \left(\frac{C_{\text{EtOH-W}}}{100} \cdot V_{\text{vinho}} - \frac{C_{\text{EtOH-I}}}{100} \cdot V_{\text{Inóculo}} \right)} \cdot 1.837 \quad (2.17)$$

onde C_{Y-V-W} é a fração de células no vinho centrifugado ($\% v_Y \cdot v_W^{-1}$), °GL_{CW} é o teor alcoólico no vinho centrifugado ($\% v_{\text{EtOH}} \cdot v_W^{-1}$), $C_{GliOH-CW}$ é a fração mássica de glicerol no vinho

centrifugado ($\% M_{\text{GliOH}} \cdot M_{\text{W}}^{-1}$), $C_{\text{EtOH-I}}$ é o teor de etanol no inóculo ($\% v_{\text{EtOH}} \cdot V_{\text{Inóculo}}^{-1}$), $C_{\text{EtOH-W}}$ é o teor de etanol no vinho bruto ($\% v_{\text{EtOH}} \cdot v_{\text{Vinho}}^{-1}$), $C_{\text{A-W}}$ é a acidez do vinho bruto, ou concentração de ácidos ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$), $C_{\text{A-I}}$ é a acidez do inóculo de levedura ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$), $C_{\text{A-M}}$ é a acidez do mosto ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$), V_{vinho} é o volume de vinho bruto ao final da fermentação (m^3), $V_{\text{Inóculo}}$ é o volume de inóculo (m^3), e V_{Mosto} é o volume de mosto (m^3). As variáveis v_{Y} e v_{w} e M_{w} são referentes ao volume de células (corpo de fundo), o volume de vinho centrifugado e a massa de vinho centrifugado, respectivamente.

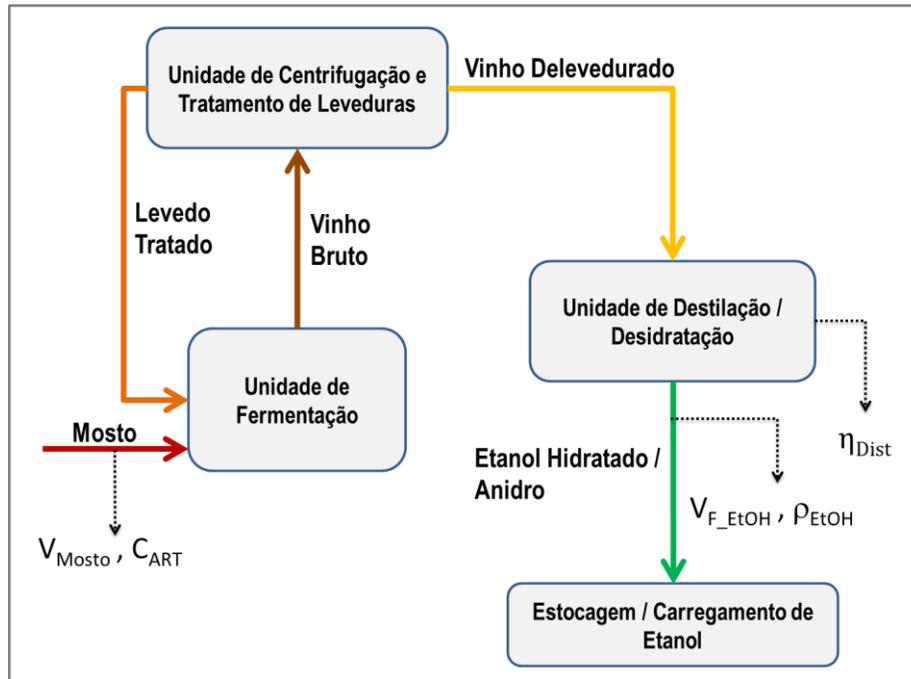
2.3.3. Metodologia 3: Eficiência de fermentação em etanol por balanço global (η_{M3})

Essa metodologia alternativa para cálculo da eficiência de fermentação em etanol nas plantas industriais brasileiras foi proposta por Andrietta et al. (2012). O método utiliza o valor do volume de mosto totalizado (V_{Mosto} , em m^3) alimentado à unidade de fermentação durante um dia completo de operação industrial para determinar a massa total de ART processada na unidade. Além dessa medida, utiliza também o volume de etanol absoluto produzido nesse mesmo período, totalizado por um medidor de vazão instalado ao final do processo de destilação/desidratação, na tubulação que segue para os tanques de estocagem de etanol, que tem por objetivo totalizar a produção diária da unidade.

Na Figura 2.3 é mostrado o volume de controle utilizado para aplicação da metodologia descrita. Similar à metodologia baseada no balanço de volumes (η_{M1A} : Metodologia 1A), a Equação 2.18 é utilizada para calcular a massa de ART (M_{ART} , em kg) alimentada durante o processo de fermentação, considerando o volume de mosto (V_{Mosto} , em m^3) obtido usando medidores de vazão, ou por medidas dos volumes inicial e final das dornas de fermentação, e a concentração de ART no mosto (C_{ART} , em $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$).

$$M_{\text{ART}} = V_{\text{Mosto}} \cdot C_{\text{ART}} \quad (2.18)$$

Figura 2.3. Volume de controle para Metodologia 3.



O volume final da produção de etanol diária é obtido por meio de um medidor de vazão ao final do processo. Esse medidor é calibrado e certificado por agências regulatórias, como política para comercialização do etanol. A metodologia por balanço global necessita da medição da eficiência de purificação das colunas de destilação para que seja possível realizar a conversão do etanol ao final do processo para etanol produzido na fermentação. A queda de eficiência de destilação está relacionada com as perdas de etanol na vinhaça e flegmaça. A massa de etanol produzido nas dornas de fermentação (M_{EtOH}) é calculada usando a Equação 2.19, onde $V_{F_{EtOH}}$ (m^3) é o volume total de etanol (anidro ou hidratado) medido pelo medidor de vazão instalado no final do processo, ρ_{EtOH} ($kg \cdot m^{-3}$) é a massa específica de etanol, e η_{Dist} é a eficiência de destilação (%).

$$M_{EtOH} = \frac{V_{F_{EtOH}} \cdot \rho_{EtOH}}{\eta_{Dist}} \cdot 100 \quad (2.19)$$

Nesta metodologia, a eficiência de fermentação em etanol (η_{M3}) é calculada utilizando a Equação 2.20, similar à determinação da eficiência de fermentação usando o método do balanço de volumes (η_{M1A} : Metodologia 1A).

$$\eta_{M3}(\%) = \frac{M_{EtOH}/M_{ART}}{0.511} \cdot 100 \quad (2.20)$$

2.3.4. Metodologia 4: Eficiência da fermentação em etanol por balanço de massa, descontando o volume de células de levedura (η_{M4})

A metodologia proposta nesse trabalho para calcular a eficiência de fermentação de etanol (η_{M4}) difere das demais pelo fato de subtrair dos volumes de vinho bruto e inóculo, o volume ocupado pelas células de levedura. A massa de etanol na dorna de fermentação é determinada de maneira precisa a qualquer instante de tempo pela multiplicação da concentração de etanol (C_{EtOH}) pelo volume livre de células do meio fermentativo, no inóculo e no vinho bruto. Baseado em resultados experimentais obtidos em fermentações em batelada realizadas em frasco agitados, Borzani (2006) demonstrou que existe uma correlação entre a eficiência de fermentação em etanol (η) e o volume de células no meio reacional (V_Y), quando esse volume é considerado no cálculo de η . Ressalta-se que a eficiência de fermentação em discussão no presente trabalho refere-se ao etanol que foi recuperado para se tornar produto final da usina, e não necessariamente ao etanol total produzido pela célula de levedura. Assim, a eficiência de fermentação refere-se à eficiência “aparente” do processo.

A principal diferença entre a metodologia proposta aqui e aquela utilizada pela maioria das destilarias brasileiras (η_{M1A} : Metodologia 1A) é o fato de que ela desconta o volume de células na determinação do etanol produzido no processo de fermentação. Essa metodologia considera apenas o etanol extracelular como produto final do processo fermentativo. É conhecido que existe etanol intracelular produzido durante a fermentação e que sua concentração está em equilíbrio com o meio reacional (JONES, 1988). Porém, não é possível recuperar o etanol contido no interior das células como produto final (etanol hidratado/anidro), nas configurações atuais dos processos das destilarias brasileiras. Por essa razão, o etanol intracelular é descontado do cálculo para determinar o etanol efetivamente produzido na unidade de fermentação. O procedimento

para se determinar os volumes isentos de células (parte do meio fermentativo que contém etanol que pode ser purificado) do inóculo e do vinho bruto foi descrito por Borzani (2006) e pode ser expresso pelas Equações 2.21 e 2.22.

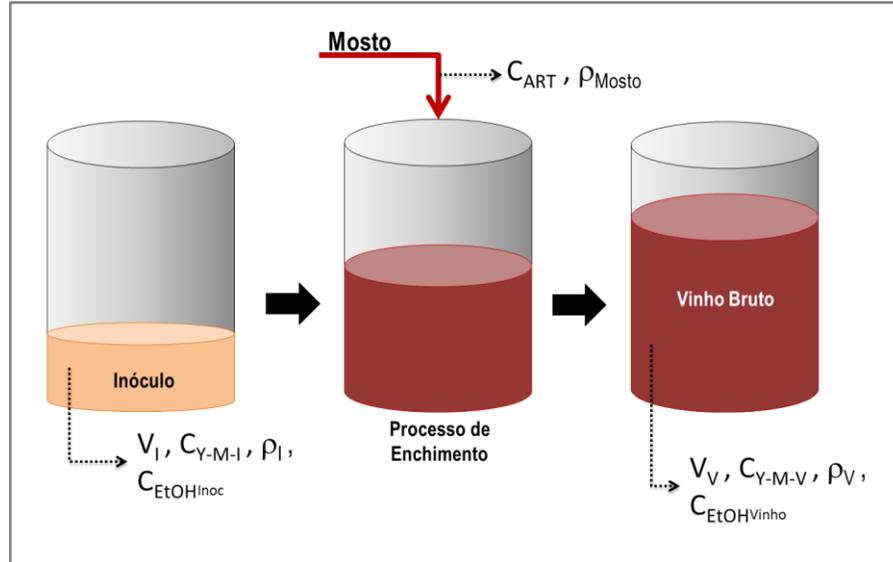
$$V_{L-I} = V_I \cdot \left(1 - \frac{C_{Y-M-I}}{\rho_Y \cdot \sigma} \cdot \rho_I\right) \quad (2.21)$$

$$V_{L-V} = V_V \cdot \left(1 - \frac{C_{Y-M-V}}{\rho_Y \cdot \sigma} \cdot \rho_V\right) \quad (2.22)$$

onde V_{L-I} é o volume isento de células do inóculo de leveduras (m^3), V_{L-V} é o volume isento de células de vinho bruto (m^3), V_I é o volume total de inóculo (m^3), V_V é o volume total de vinho bruto (m^3), C_{Y-M-I} é a concentração de células de levedura (base seca) no inóculo ($\text{kg} \cdot \text{kg}_I^{-1}$), C_{Y-M-V} é a concentração de células (base seca) no vinho bruto ($\text{kg} \cdot \text{kg}_V^{-1}$), ρ_Y é a densidade de células de leveduras ($1100 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$), σ é o conteúdo de massa seca em células de levedura ($0.30 \text{ kg} \cdot \text{kg}^{-1}$), ρ_I é a densidade do inóculo ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$), e ρ_V é a massa específica de vinho ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$), sendo tanto ρ_I quanto ρ_V função do teor de etanol nas amostras.

O volume de controle utilizado para a aplicação da metodologia proposta no presente trabalho é mostrada na Figura 2.4.

Figura 2.4. Volume de controle para Metodologia 4.



A massa total de etanol produzida no processo de fermentação (M_{EtOH}) é dada pela Equação 2.23.

$$M_{EtOH} = V_{L-V} \cdot C_{EtOHVinho} - V_{L-I} \cdot C_{EtOHInoc} \quad (2.23)$$

onde $C_{EtOHVinho}$ é a concentração de etanol no volume líquido de vinho ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$) e $C_{EtOHInoc}$ é a concentração de etanol no volume isento de células de inóculo ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$).

A massa de ART (M_{ART} , em kg) alimentada na dorna de fermentação é obtida utilizando a Equação 2.24.

$$M_{ART} = C_{ART} \cdot \frac{M_{Mosto}}{\rho_{Mosto}} \quad (2.24)$$

Para destilarias que não possuem medidores de vazão de mosto, faz-se necessário desenvolver uma maneira alternativa para determinar a massa de mosto alimentada ao processo

(M_{Mosto}). O balanço de massa para uma dorna de fermentação operada no modo batelada alimentada deve seguir uma sequência de operações. Primeiramente, o inóculo contendo células de leveduras é transferido da cuba de tratamento para a dorna de fermentação. Após essa transferência, o mosto é alimentado na dorna por aproximadamente 6 h, tempo no qual ocorre a formação de CO_2 (liberado para atmosfera, uma vez que as dornas da unidade industrial em estudo eram abertas) e de etanol. A expressão estequiométrica para formação de etanol e CO_2 a partir do consumo de hexoses, já apresentada no presente documento de dissertação, é retomada e mostrada na Equação 2.25.



Durante a etapa final, caracterizada pela fermentação em batelada, a alimentação de mosto à dorna é interrompida e a produção de etanol e CO_2 continuam até que todo ART presente no meio reacional seja totalmente consumido pelas leveduras. Após o final da fermentação, o volume final de vinho bruto formado é enviado para a etapa de centrifugação. O balanço de massa global na dorna de fermentação, considerando o ciclo completo de fermentação é expresso pela Equação 2.26.

$$M_{\text{Mosto}} = M_V + M_{\text{CO}_2} - M_I \quad (2.26)$$

onde M_I é a massa de inóculo (kg), M_{Mosto} é a massa de mosto (kg), M_V é a massa de vinho bruto (kg), e M_{CO_2} é a massa de CO_2 (kg).

As massas de vinho bruto (M_V) e inóculo (M_I) foram determinadas considerando os volumes totais e a massa específica de cada amostra. As densidades de inóculo (ρ_I) e de vinho bruto (ρ_V) são funções das concentrações de células e de etanol no meio, sendo calculadas pela divisão da massa pelo volume das amostras coletadas. Foi observado que durante a operação industrial das fermentações em batelada alimentada, realizadas durante a safra, ocorreram variações pequenas nos valores de ρ_I and ρ_V , menores do que 2% para os diferentes valores de

concentrações de células e etanol para as diversas fermentações observadas. Assim, por simplicidade, os valores médios de densidade que seguem, foram utilizados nos cálculos do presente trabalho: $\rho_I = 1014 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ and $\rho_V = 1001 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$.

Considerando a relação estequiométrica entre o etanol e o CO_2 formado (Equação 2.25) juntamente com a relação entre a formação de CO_2 e o crescimento de células (Equação 2.13), a massa de CO_2 formada durante o processo de fermentação pode ser calculada pela Equação 2.27.

$$M_{CO_2} = \left(0,955 + 1,33 \cdot \frac{0,33 \cdot C_{Y-V-W}}{0,7893 \cdot ^\circ GL_{CW}} \right) \cdot M_{EtOH} \quad (2.27)$$

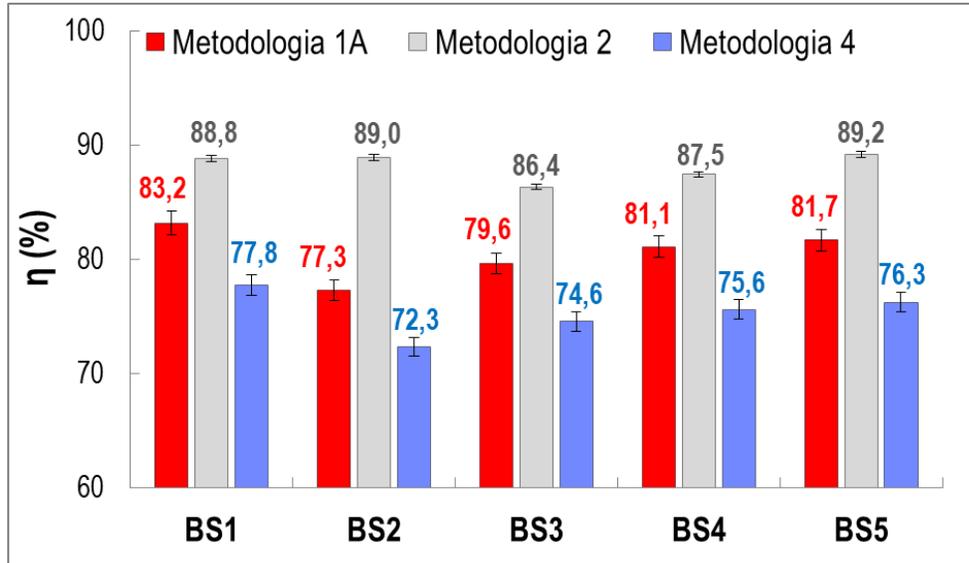
Assim, a eficiência de fermentação em etanol calculada pela nova metodologia que desconsidera o volume de células nos volumes de processo (η_{M4}), pode ser calculada segundo a Equação 2.28.

$$\eta_{M4}(\%) = \frac{M_{EtOH}/M_{ART}}{0,511} \cdot 100 \quad (2.28)$$

2.4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Cinco fermentações do tipo batelada alimentada foram realizadas em escala de bancada, utilizando diferentes composições de mosto como matéria-prima: caldo de cana-de-açúcar concentrado (BS1), caldo concentrado doce de sorgo (BS2), melação de cana-de-açúcar diluído em água (BS3), melação diluído em caldo de cana-de-açúcar (BS4) e melação diluído em caldo doce de sorgo (BS5). Para cada fermentação, a eficiência de fermentação em etanol foi calculada de acordo com as seguintes metodologias: balanço de volumes (η_{M1A} : Metodologia 1A), subprodutos (η_{M2} : Metodologia 2), e a nova metodologia proposta (η_{M4} : Metodologia 4). A Figura 2.5 exhibe os resultados obtidos para as cinco fermentações em batelada alimentada.

Figura 2.5. Valores calculados de eficiência de fermentação para as cinco fermentações em batelada alimentada realizadas com diferentes composições de mosto. Metodologia 1A: balanço de volumes; Metodologia 2: subprodutos; Metodologia 4: nova.



Pode ser observado pela Figura 2.5 que os valores de eficiência de fermentação calculados usando os subprodutos Metodologia (η_{M2} : Metodologia 2), com um desvio padrão médio máximo de 0,30%, foram muito maiores do que aqueles obtidos pelas outras duas metodologias (η_{M1A} e η_{M4} , com máximo desvio padrão de 1,21 e 1,18%, respectivamente). A Metodologia 3 não foi utilizada na comparação das fermentações realizadas em escala de bancada, porque (como mencionado na sessão 2.3.3) a metodologia foi desenvolvida para aplicação em operações de fermentação industrial.

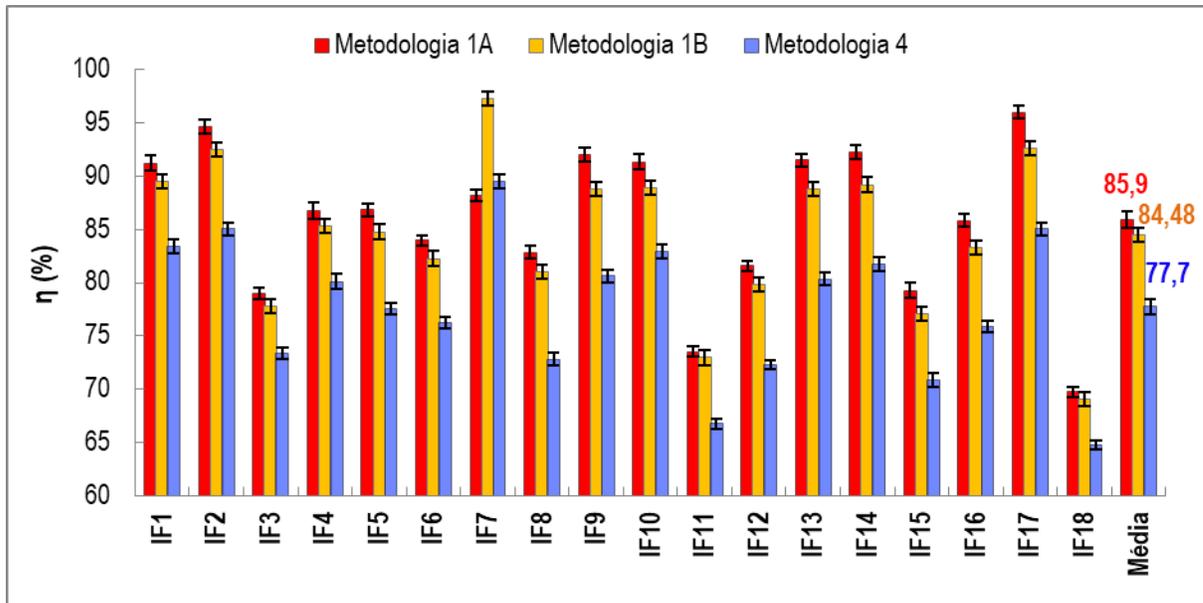
Andrietta (2012) demonstrou que quando a Metodologia de subprodutos foi utilizada para calcular a eficiência de fermentação, a mesma não foi robusta o suficiente para detectar as variações de processo causadas por variáveis que têm maiores impactos na fermentação. Essa metodologia é baseada em balanços de mássicos e no desconto da massa de subprodutos formada de uma eficiência de 100%, o que se caracteriza como uma vantagem do método, uma vez que a eficiência calculada nunca excede o valor máximo de 100%. Porém, o fato dessa metodologia não ser baseada nas quantidades de matéria-prima alimentadas ao processo, e no produto final de saída, a mesma se torna excessivamente sensível aos desvios que possam conter as amostras

coletadas ao longo do processo. Os equipamentos disponíveis na indústria para realizar a coleta de amostras não são suficientemente confiáveis para contornar esses desvios. Adicionada à dificuldade em se coletar amostras representativas do processo de fermentação, as análises subsequentes no laboratório para determinação das concentrações de ácidos, glicerol, células e açúcares residuais nas várias amostras necessárias para aplicação dessa metodologia, requerem uma grande quantidade de técnicos de laboratório exclusivamente dedicados para realização dessas análises, condição que não pode ser oferecida nos dias atuais pelo setor produtivo. Apesar de haver alta acuracidade e controle das variáveis de fermentação em escala de bancada, a metodologia baseada em subprodutos (η_{M2} : Metodologia 2) pode ter subestimado a eficiência de fermentação para as cinco bateladas alimentadas realizadas, como pode ser observado na Figura 2.5.

Para todos os experimentos, o uso da Metodologia 4 (η_{M4}) resultou em valores de eficiência de fermentação menores do que aqueles obtidos por balanço de volumes (η_{M1A} : Metodologia 1A), uma vez que o volume de células de levedura gerado durante a fermentação foi subtraído do volume de vinho bruto, utilizado no cálculo do etanol produzido, diferentemente da Metodologia 1A.

Comportamento similar foi observado para as 18 fermentações (IF1 a IF18) realizadas na destilaria industrial desse estudo, no período de Junho a Outubro da safra de 2015. A Figura 2.6 mostra as eficiências de fermentação obtidas utilizando a metodologia de balanço de volumes, amplamente usada nas destilarias nacionais (η_{M1A} : Metodologia 1A, com incerteza padrão máxima de 0,91%), a metodologia de balanço de volumes que desconta o volume da parte seca de células de levedura (η_{M1B} : Metodologia 1B, com incerteza padrão máxima de 0,79%) e a nova metodologia (η_{M4} : Metodologia 4, com incerteza padrão máxima de 0,95%). Não foi possível calcular a eficiência de fermentação em etanol utilizando o método de subprodutos (Metodologia 2), devido à falta de análises de laboratório referentes às fermentações e necessárias para o cálculo do método. O método de balanço global (Metodologia 3) não foi utilizado, uma vez que o mesmo foi desenvolvido para analisar a eficiência de fermentação em etanol por dia de produção, não podendo ser aplicado às fermentações em batelada alimentada separadamente. Todas as fermentações industriais em batelada alimentada apresentaram valores mais baixos para a nova metodologia (Metodologia 4: η_{M4}) quando comparadas aos demais métodos.

Figura 2.6. Eficiência de fermentação em etanol calculada para 18 fermentações industriais em batelada alimentada (IF), utilizando a Metodologia 1A, Metodologia 1B e Metodologia 4.



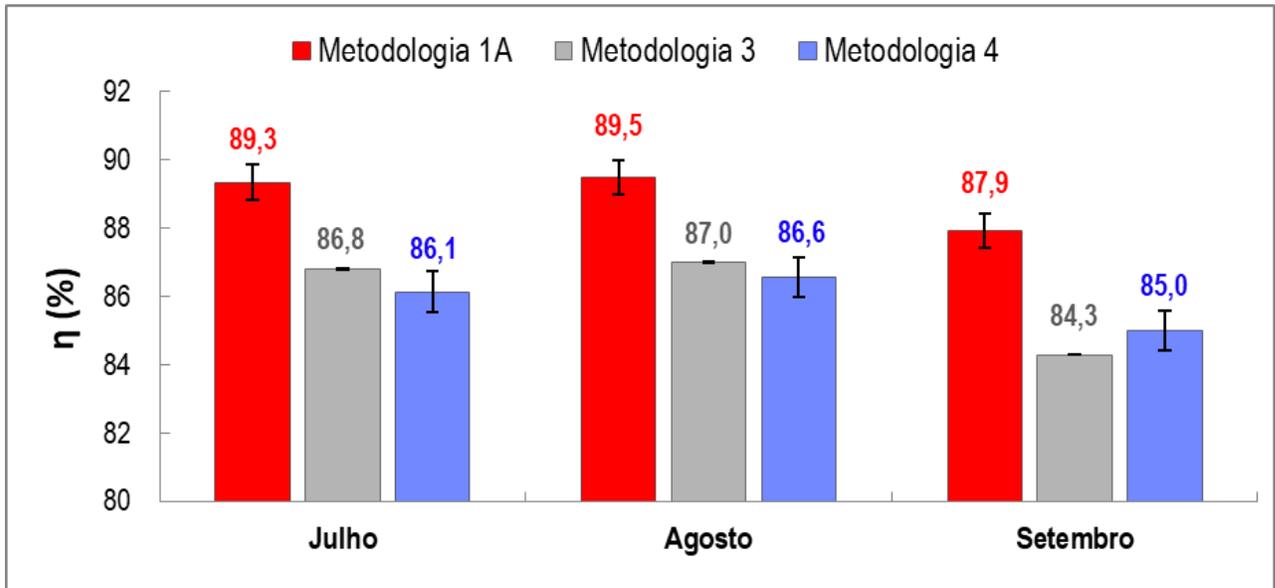
O valor da média de eficiência de fermentação em etanol calculada usando a Metodologia 4 (η_{M4}) foi cerca de 8% menor que o valor obtido utilizando a Metodologia 1A (η_{M1A}) ($77,74 \pm 0,91\%$ e $85,91 \pm 0,95\%$, respectivamente). Essa diferença foi maior que aquela observada nas fermentações em escala de bancada (Figura 2.5). No processo industrial de fermentação no modo batelada alimentada, há menor controle das variáveis que diretamente impactam no valor de eficiência de fermentação (η). Uma dessas variáveis é o volume de células de levedura ao final do processo, que por ser considerada no cálculo da Metodologia 4 (η_{M4}), faz com que a mesma apresente valores mais baixos de η , quando comparada às outras metodologias que não são afetadas pelo volume de células. A comparação entre a Metodologia 1B com as demais, mostra que, uma vez que esse método desconta parte do volume de células, (volume ocupado pelo volume de massa seca das leveduras), ela resulta em valores de eficiência de fermentação levemente abaixo dos valores calculados pela Metodologia 1A. Esse resultado era esperado, uma vez que a fração de massa seca nas células de levedura é reportada em aproximadamente 0,3 kg de massa seca por 1 kg de biomassa. Ou seja, o volume de etanol formado é menor considerando a Metodologia 1B. Comparando os resultados obtidos pela Metodologia 4 com a Metodologia

1B, a diferença apesar de menor do que comparada com a Metodologia 1A, ainda é significativa ($77,74 \pm 0,91\%$, e $84,48 \pm 0,78\%$, respectivamente).

Uma terceira análise comparativa realizada no presente trabalho considerou as variáveis do processo de fermentação industrial totalizadas para meses inteiros de operação (total de massa em ART entrada – kg, e total de massa de etanol produzido - kg), de Julho a Setembro da safra de 2016, para a mesma destilaria onde as fermentações industriais analisadas na Figura 2.6 foram realizadas. Cada mês de operação incluiu cerca de 360 fermentações em batelada alimentada. A eficiência de fermentação para cada mês foi calculada para as diferentes metodologias propostas nesse trabalho. Utilizaram-se para esses cálculos, além dos volumes totalizados de matéria-prima e produto, as médias das concentrações de etanol, células e ART dos meses analisados.

Essa comparação entre as metodologias para um longo período de tempo possibilitou a validação da acuracidade da nova metodologia proposta, uma vez que a média mensal das variáveis auxiliou na minimização dos erros de medição que por ventura possam ter ocorrido nas fermentações individuais. Os valores de eficiência de fermentação foram calculados utilizando o método de balanço de volumes (η_{M1A} : Metodologia 1A), balanço global (η_{M3} : Metodologia 3), e o novo método (η_{M4} : Metodologia 4), com as máximas incertezas padrão de 0,59, 0,01 e 0,71%, respectivamente. A comparação gráfica dos resultados obtidos é mostrada na Figura 2.7.

Figura 2.7. Valores de eficiência de fermentação em etanol calculados para três meses de operação industrial durante a safra de 2016, usando três diferentes metodologias para cálculo: Metodologia 1A, Metodologia 3 e Metodologia 4.



Para todos os meses analisados, a eficiência de fermentação em etanol calculada utilizando a Metodologia 4 (η_{M4}) foram menores do que as obtidas pela Metodologia 1A e bem similares às obtidas pela Metodologia 3. A alta precisão das medidas de volume de etanol produzido ao final do processo industrial, totalizado por medidor de vazão confirmam a acuracidade da Metodologia 3 (comprovada pela baixa incerteza padrão do método). Por outro lado, essa metodologia só pode ser aplicada a longos períodos de tempo (vários dias de operação industrial) a fim de minimizar as oscilações causadas pelas variações do volume de etanol em processo, impossibilitando sua aplicação para análise de fermentações individuais. Essa desvantagem apresentada pela Metodologia 3 ocasiona atraso nas ações operacionais a serem tomadas para correção do processo, caso os valores de eficiência de fermentação estejam baixos e haja a necessidade de intervenção operacional. A utilização da Metodologia 4 oferece vantagens já apresentadas por outras metodologias, no que diz respeito à sua aplicabilidade tanto em ciclos individuais de fermentação (por não sofrer influência do volume de etanol em processo) quanto

em longos períodos de operação, mas também apresenta precisão na medida de etanol produzido, comparando-se à Metodologia 3, fato que pôde ser comprovado pela análise da Figura 2.7.

Além dos benefícios intrínsecos à produção de etanol, as perdas indeterminadas da unidade industrial tendem a diminuir quando se dispõe de métodos precisos para determinação da eficiência de fermentação, uma vez que é indicada a produção real de etanol na unidade. A Equação 2.29 mostra a relação entre a eficiência de fermentação e a perda de massa total de ART no processo (FERNANDES, 2011).

$$ART_{P-F} = \frac{E_{PROD}}{0,6480} \times \left(\frac{100}{\eta} - 1 \right) \quad (2.29)$$

onde ART_{P-F} é a massa total de ART perdida na unidade de fermentação industrial (kg), E_{PROD} é o volume total de etanol produzido (L) e η é a eficiência de fermentação (%).

A massa total de ART perdida nos diversos processos industriais é calculada pela Equação 2.30.

$$ART_{P-TD} = ART_{P-LC} + ART_{P-B} + ART_{P-TF} + ART_{P-F} + ART_{P-D} \quad (2.30)$$

onde ART_{P-TD} é a massa total de ART perdida nos processos industriais (kg), ART_{P-LC} , ART_{P-B} , ART_{P-TF} , ART_{P-F} e ART_{P-D} são as massas de ART perdidas na lavagem de cana, no bagaço, na torta de filtro, na fermentação e destilação respectivamente.

Assim, a massa total de ART perdida e indeterminada (não se conhece onde as perdas ocorreram) é calculada pela Equação 2.31.

$$ART_I = ART_{CP} - ART_{PROD} - ART_{P-TD} \quad (2.31)$$

onde ART_I é a massa total indeterminada de ART perdida na indústria (kg), ART_{CP} é a massa de ART na cana-de-açúcar processada (kg) e ART_{PROD} é a massa total de ART na forma de produtos finais da usina (açúcar cristalizado e etanol) (kg).

Por exemplo, se a Metodologia 4 tivesse sido utilizada para determinar a eficiência de fermentação da indústria no mês de Setembro (Figura 2.7), ambos os valores de eficiência de fermentação e perdas indeterminadas iriam diminuir, como mostrado na Tabela 2.2. Esse fato indica que parte das perdas indeterminadas está localizada no processo de fermentação, e uma vez mapeada, possibilita que ações sejam tomadas a fim de melhorar as operações industriais da unidade para aumento da eficiência de fermentação. Para comparação, os valores de perdas indeterminadas são mostrados na Tabela 2.2, e foram obtidos considerando o balanço de massa de todo o processo industrial, com os valores de eficiência de fermentação calculados primeiramente pela Metodologia 1A (88,0%) e depois pela Metodologia 4 (85%).

Tabela 2.2. Dados obtidos durante a safra 2015 para a indústria estudada.

Eficiência de fermentação e perdas indeterminadas para Setembro, 2015.		
η_{M1A} (Metodologia 1A – atualmente usada pelo setor industrial)	88,0	%
Perdas indeterminadas calculadas pela Metodologia 1^a	1,68	%
η_{M4} (Metodologia 4 - nova Metodologia)	85,0	%
Novo valor de perdas indeterminadas (baseada na eficiência de fermentação calculada pela Metodologia 4)	0,46	%
Produção de etanol superestimada	2.589	m ³

O valor de 85,0% de eficiência de fermentação calculado utilizando a Metodologia 4, indica que existe expressiva quantidade de etanol intracelular formado durante o processo de fermentação. Esse etanol contido nas células será perdido na purga de leveduras realizada na maior parte das usinas. A diferença entre os valores de eficiência calculados pela Metodologia 1A e a Metodologia 4 (88 e 85%, respectivamente) indica a massa de etanol que poderia ser recuperada a fim de se aumentar a produção de etanol da unidade. Essa conclusão mostra que há espaço para melhorias na unidade industrial. Por exemplo, a implantação de uma unidade de

secagem de leveduras com posterior recuperação do etanol intracelular pode ser justificada a partir do retorno em receita devido ao aumento de produção de etanol. A Tabela 2.3 mostra o potencial retorno financeiro que seria gerado pela venda do etanol adicional produzido, caso a eficiência de fermentação aumentasse de 85% (valor real, calculado pela Metodologia 4) para 88%, através de investimentos de melhorias de operação na unidade. A estimativa considerou o aumento de produção para toda a safra da usina (cerca de sete meses ou 200 dias de operação) e os preços atuais de venda do etanol. Pode ser observado que a implementação de melhorias no processo, ocasionando aumento de eficiência, produção e receita para usina, retornaria cerca de 8 milhões de dólares ao final da safra de produção. Esse fato claramente demonstra a importância de se utilizar uma metodologia de alta precisão e acurácia, e que ao mesmo tempo seja robusta, para determinar os valores de eficiência de fermentação na indústria. Os resultados obtidos pela Metodologia 4 mostram o valor real de eficiência de fermentação da unidade, e possibilitam a diminuição das perdas indeterminadas e um melhor acompanhamento e mapeamento do processo de fermentação das destilarias brasileiras. O valor confiável de eficiência de fermentação é o primeiro passo para indicar onde os investimentos devem ser realizados e o tempo de retorno dos mesmos.

Tabela 2.3. Estimativa do ganho financeiro devido ao aumento da eficiência de fermentação.

Ganho financeiro		
Aumento na produção de etanol	17.261,87	m ³ /safra
Preço de venda do etanol (UDOP, 2018)	456,10	US\$/m ³
Aumento da receita de produção de etanol	7.873.141,18	US\$/safra

2.5. CONCLUSÕES

A eficiência de fermentação em etanol é o parâmetro mais importante a ser analisado no processo de fermentação. Ela pode indicar o nível de performance das operações e propiciar o direcionamento para as melhorias que podem ser realizadas no processo industrial. Dada a

importância de aquisições de dados que sejam confiáveis e rápidos de serem obtidos, a metodologia utilizada para calcular a eficiência de fermentação em etanol deve ser o mais robusta e precisa possível.

Apesar de ser robusta, a metodologia baseada no balanço de volumes (η_{M1A} : Metodologia 1A) considera o volume de células no cálculo do etanol produzido, consequentemente superestimando a eficiência de fermentação, como mostrado em todos os gráficos desse estudo. Já a metodologia baseada no balanço de volumes que desconta o volume seco de células (η_{M1B} : Metodologia 1B), considera que o volume de parte das leveduras deve ser descontado, uma vez que não há etanol em 30% de sua composição. Essa consideração, apesar de verdadeira, ainda não representa o processo industrial. A metodologia baseada na quantificação de subprodutos (η_{M2} : Metodologia 2) oferece um procedimento teórico de quantificação altamente preciso, porém necessita de acuracidade e baixos desvios nas coletas e análises das amostras de processo, uma vez que é extremamente sensível às oscilações de processo.

A Metodologia baseada no balanço global (Metodologia 3) para obtenção da eficiência de fermentação (η_{M3}) possui a vantagem de utilizar uma medida muito precisa na determinação do etanol produzido. Porém, ela necessita de vários dias de operação para atingir confiabilidade de seus valores (como mostrado na Figura 2.7), uma vez que é necessário minimizar os efeitos das oscilações dos volumes de etanol no processo. Essa restrição limita sua aplicabilidade, não podendo ser utilizada para a avaliação de ciclos de fermentações individuais.

A nova metodologia proposta nesse trabalho (Metodologia 4) obteve os valores reais de eficiência de fermentação em etanol (η_{M4}) com base na produção efetiva de etanol. Os valores obtidos e ilustrados nas Figuras 2.5 e 2.6 são validados pelo resultado da Figura 2.7, que embasa a afirmação de que a nova metodologia é a forma mais assertiva e versátil até o momento de se determinar a eficiência de fermentação em etanol, em escalas de bancada ou industrial, ou ainda para dados mensais de produção. O fato da Metodologia 4 não considerar o volume ocupado pelas células como etanol produzido no processo, reflete a realidade da fermentação industrial, uma vez que o etanol intracelular não é recuperado e não se torna produto final da usina na forma de etanol hidratado/anidro. Isso é mostrado pela comparação com a Metodologia 3 (Figura 2.7) na qual o medidor de vazão de alta precisão é utilizado para determinação do volume de etanol

produzido a ser vendido. A vantagem da Metodologia 4 é que pode ser utilizada para avaliação do desempenho de ciclos de fermentações individuais, diferente da Metodologia 3.

A Metodologia 4 proporciona uma alta acuracidade na determinação da eficiência de fermentação em etanol da unidade industrial, comparada com as metodologias que vêm sendo utilizadas pelo setor nos últimos anos, e possibilitando ainda, a diminuição do valor das perdas indeterminadas na indústria. A presença de um medidor de vazão calibrado na linha de alimentação de mosto às dornas de fermentação evitaria a necessidade da realização de balanço de massa para calcular a massa de mosto no processo. Isso diminuiria a incerteza padrão associada à eficiência de fermentação calculada pela metodologia, e a tornaria ainda mais confiável para aplicação no processo industrial.

Capítulo 3 : Desenvolvimento de Modelagem em Redes Neurais Artificiais para Processo de Fermentação Industrial

3.1. MATERIAIS E MÉTODOS

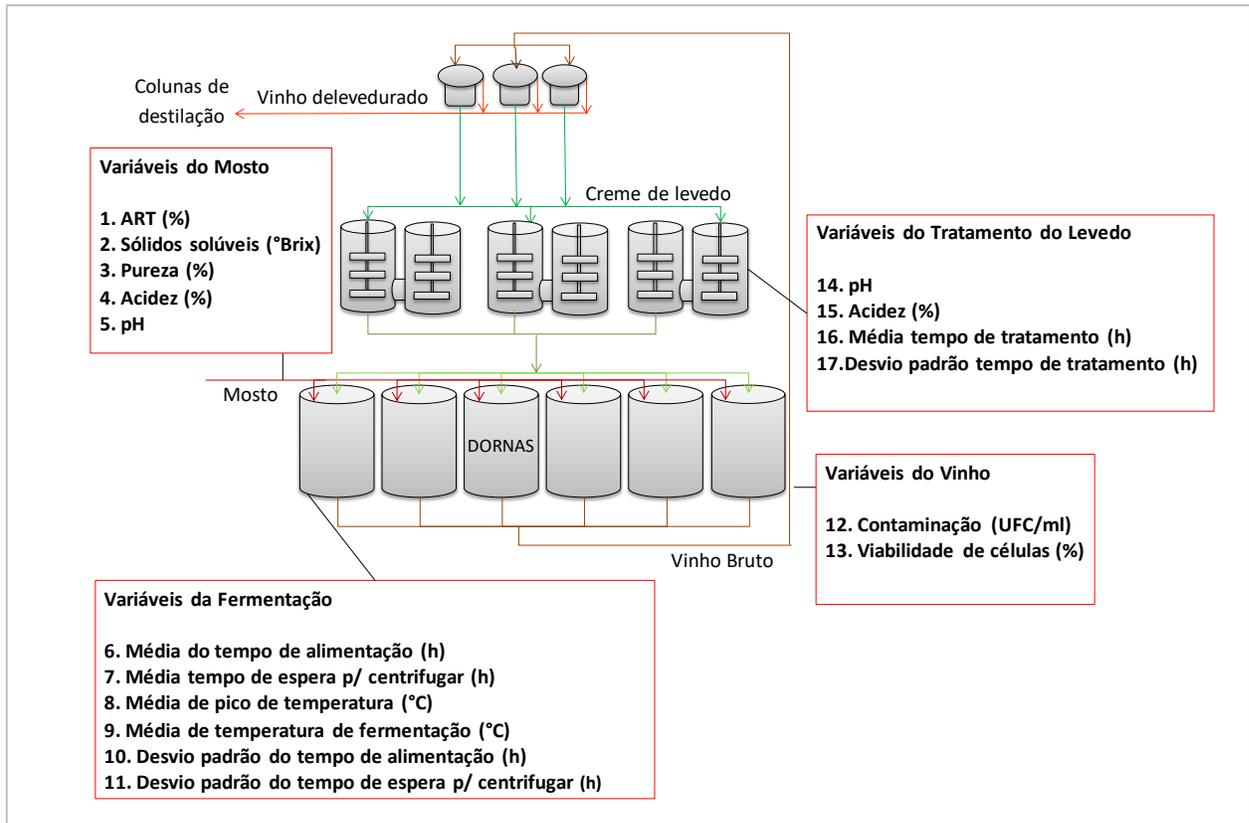
3.1.1. Banco de dados

Os dados utilizados para modelagem da rede neural foram disponibilizados por uma usina de produção de açúcar e álcool do interior do estado de São Paulo. Os dados foram compostos pelo total de 17 variáveis distribuídas por toda a unidade de fermentação, do preparo de matéria-prima (mosto) até a centrifugação do produto final (vinho bruto), monitoradas diariamente ao longo de 200 dias de safra no ano de 2015.

As variáveis disponíveis para a modelagem da rede neural foram agrupadas e numeradas nos seguintes grupos: **Variáveis do mosto:** (1-açúcares redutores totais-ART (%); 2-concentração de sólidos solúveis (°Brix); 3-pureza (%) (medida da porcentagem de sacarose nos sólidos solúveis); 4-acidez (%); 5-pH)), **Variáveis da fermentação:** (6-média do tempo de alimentação (h); 7-média do tempo de espera para centrifugar (h); 8-média de pico de temperatura (°C), 9-média de temperatura de fermentação (°C); 10-desvio padrão do tempo de alimentação (h); 11-desvio padrão do tempo de espera para centrifugar (h)), **Variáveis do vinho:** (12-contaminação bacteriana (UFC/ml); 13-viabilidade de células (%)),e **Variáveis do tratamento do levedo:** (14-pH; 15-acidez (%); 16-média do tempo de tratamento (h); 17-desvio padrão do tempo de tratamento (h)).

A variável resposta utilizada como saída da rede foi a concentração de etanol em base volumétrica no vinho bruto. A distribuição das variáveis pela unidade de fermentação é mostrada na Figura 3.1. A unidade de fabricação de etanol em estudo é composta por seis dornas de fermentação (650 m³ de volume útil), seis pré-fermentadores (100 m³ de volume útil) e três centrífugas (100m³/h de vazão de operação) com capacidade total de produção diária de 700 m³ de etanol.

Figura 3.1. Fluxograma simplificado da unidade de fermentação estudada.



3.1.2. Escolha das variáveis de entrada

É necessário que haja conhecimento prévio das variáveis que podem ter influência na resposta da rede neural, uma vez que, normalmente, há uma grande quantidade de variáveis disponíveis que podem ser utilizadas no modelo (SOVANN; NALLAGOWNDEN; BAHARUDIN, 2014). Um dos critérios utilizados nesse tipo de modelagem para selecionar as variáveis pertinentes ao processo é a determinação de quais delas estão relacionadas entre si. Assim, dentre um grupo de variáveis que possuem dependência de efeito, utiliza-se apenas uma delas no modelo, já que seu efeito será conhecido nas demais. Para essa tarefa, utilizou-se a técnica de correlação cruzada (NELLES, 2013) para determinar quais dentre as 17 variáveis disponíveis deveriam ser utilizadas na modelagem da rede neural. Essa técnica analisa o efeito delas aos pares, e a partir do cálculo da média de cada uma, gera um valor numérico, cuja ordem de grandeza indica quão relacionadas estão as variáveis.

Foi utilizado o pacote Neural Network ToolboxTM do *software* Matlab (versão R2017a) para identificação da correlação entre as variáveis de processo. A metodologia utilizada pelo *software* analisa a correlação em linha temporal, ou seja, para o conjunto de 200 dias de safra, as 17 variáveis foram também comparadas com amostras tomadas em diferentes períodos (*delays* ou *lags* positivos e negativos). Pôde-se então, determinar quais variáveis apresentaram alta correlação e descartá-las do conjunto de entradas da rede neural. Como critério de exclusão de variáveis com duplicidade de efeito do modelo, optou-se por desconsiderar aquelas cujas medidas em campo durante o processo industrial são mais demoradas ou onerosas.

3.1.3. Arquitetura da rede

Utilizou-se o pacote Neural Network ToolboxTM do *software* Matlab para todas as etapas de estruturação, treinamento e validação da rede neural. Optou-se nesse estudo por empregar uma rede MLP (*Multilayer Perceptron*) do tipo *feedforward neural network* (FNN), com uma camada escondida possuindo sete neurônios de processamento de sinais, e um neurônio na camada de saída. As redes tipo FNN são as mais empregadas na modelagem de processos da engenharia química e da engenharia de bioprocessos (NANDI et al., 2001; SILVA et al., 2000; THIBAUT; VAN BREUSEGEM; CHÉRUY, 1990). A resposta satisfatória dos modelos com o uso de FNN encorajou diversos autores a utilizarem essa mesma arquitetura na modelagem de seus estudos (CRUZ et al., 1998; DI MASSIMO et al., 1992; WILLIS et al., 1992).

A quantidade de camadas escondidas e de neurônios deve ser a menor possível, para que o modelo utilize apenas a estrutura necessária para a previsão da variável resposta e evite o fenômeno de *overfitting* da rede. Apenas uma camada escondida possui capacidade suficiente de processamento para modelagem de qualquer função contínua que apresente não linearidades (HORNIK; STINCHCOMBE; WHITE, 1989). A função log-sigmoide foi utilizada como função transferência nos neurônios da camada escondida e a função linear no neurônio de saída da rede.

3.1.4. Treinamento e validação

Empregou-se o algoritmo *Backpropagation* para cálculo dos gradientes para a atualização dos pesos da rede durante a etapa de treinamento, que é o mais comumente utilizado nas modelagens de redes neurais do tipo FNN (HUSSAIN, 1999; NUCCI et al., 2007; ROSENBLATT; NONR-, 1958; VANE, 2004). O treinamento da rede neural foi realizado com a utilização da função “trainlm” do pacote Neural Network Toolbox™ do *software* Matlab, que atualiza os valores dos pesos segundo o algoritmo de otimização Levenberg-Marquardt (ESFAHANIAN et al., 2013; NUCCI et al., 2007; SILVA et al., 2008).

Os valores de cada variável de entrada e saída utilizadas para modelagem da rede foram normalizados (entre -1 e 1) e divididos randomicamente em três grupos: treinamento, validação e teste, na proporção de 45, 45 e 10% dos dados para cada grupo, respectivamente. Essa divisão faz-se necessária no treinamento de redes neurais, pois há a necessidade de validar a resposta da rede após o treinamento com o objetivo de analisar a capacidade de previsão do modelo. O presente trabalho consistiu no treinamento de duas redes neurais (A e B) de igual arquitetura, de forma que os grupos de dados utilizados para treinamento e validação da rede A foram invertidos e utilizados para validação e treinamento na rede B, respectivamente. Esse procedimento foi realizado a fim de se verificar se houve satisfatória distribuição dos dados entre os grupos de treinamento e validação de forma a garantir a capacidade de previsão dos modelos.

A etapa de treinamento foi realizada de forma batelada, de maneira que todo o conjunto de dados (variáveis de entrada e saída de cada dia de operação) foi apresentado à rede antes da primeira atualização do valor dos pesos. Após a apresentação de todos os dados, os pesos das conexões foram atualizados e então se apresentou à rede o conjunto de dados de validação para o cálculo da média do quadrado dos erros (MSE) entre a resposta do modelo e os dados experimentais. A cada repetição do processo descrito, finaliza-se uma “época” de treinamento. A rede foi considerada treinada na “época” em que o valor de MSE passou a aumentar durante a etapa de validação.

O procedimento de validação cruzada evita que ocorra o fenômeno de *overfitting* que se caracteriza pela resposta “condicionada” aos dados apresentados, o que faz a rede perder a capacidade de previsão para novos dados (BEALE; HAGAN; DEMUTH, 2017). A avaliação do desempenho da rede já treinada é dada pelo valor de MSE ao final da apresentação de todos os

pontos do banco de dados e do valor do coeficiente de determinação (R^2) gerado pela comparação da resposta da rede e o valor amostrado em campo da variável de saída do conjunto de validação.

As etapas de treinamento das redes (que se iniciam com divisão dos dados nos grupos de treinamento, validação e teste) realizadas no estudo foram reiniciadas 21.000 vezes, uma vez que para diferentes inicializações obtêm-se diferentes valores otimizados dos pesos das conexões do modelo. Dentre as inicializações citadas, foi gravada a configuração da rede que alcançou o menor valor de MSE e o maior valor de coeficiente de determinação (R^2) na etapa de validação.

3.1.5. Otimização

A configuração de variáveis de entrada escolhidas para o modelo, que apresentou ajuste aos pontos experimentais com maior valor de R^2 foram otimizadas a fim de se obter as condições de operação industriais mais favoráveis para se alcançar valores elevados de concentração de etanol no vinho bruto (saída do modelo) ao final do processo. Utilizou-se o algoritmo *Particle Swarm Optimization*, PSO (EBERHART; SHI, 2001) implementado no *software* Matlab para realização da otimização.

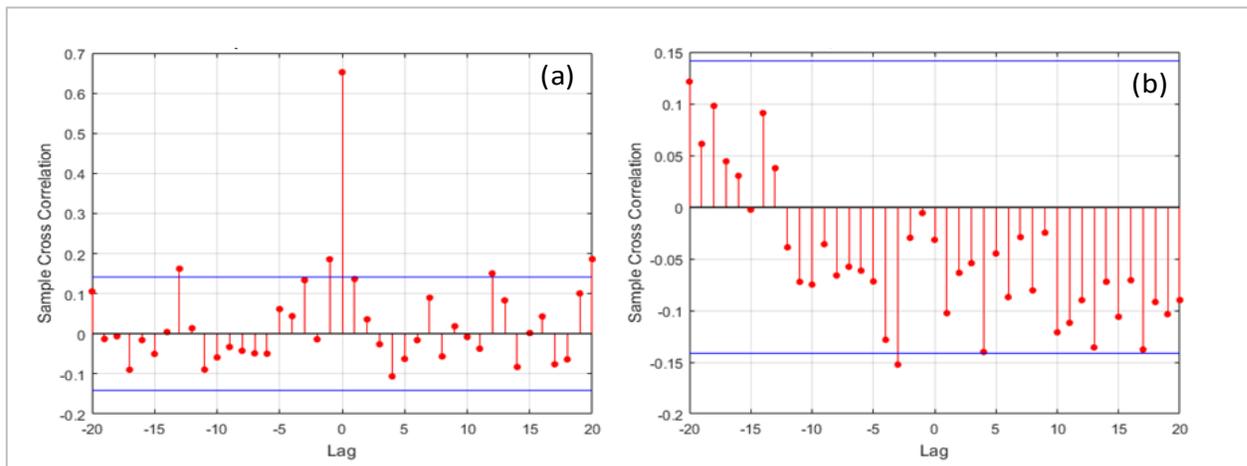
Buscou-se aumentar o valor da variável de saída da rede (concentração de etanol no vinho bruto) a partir da otimização das variáveis de entrada obtidas de um dia de operação da unidade industrial amostradas do banco de dados, com exceção da “concentração de sólidos solúveis no mosto (°Brix)” que foi mantida fixa. Estudaram-se os diferentes cenários obtidos pelo algoritmo para se alcançar o aumento da concentração de etanol no vinho bruto. Analisou-se também a factibilidade de cada uma das condições encontradas, a partir da utilização da matriz de correlação entre as variáveis utilizadas, de forma a certificar que as condições operacionais se encontravam em regiões em que o modelo possuía capacidade de previsão.

3.2. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.2.1. Modelagem e treinamento da rede neural

A primeira etapa para modelagem do processo de fermentação a partir das redes neurais foi a escolha das variáveis de entrada do modelo. Realizou-se a análise de correlação cruzada entre as 17 variáveis disponíveis, amostradas durante os 200 dias de safra, para que se excluíssem da modelagem aquelas com efeitos dependentes. A Figura 3.2 mostra os gráficos gerados pelo software para análise de correlação cruzada entre (a) as variáveis que apresentaram correlação e (b) variáveis não correlacionadas.

Figura 3.2. Gráficos de correlação cruzada entre as variáveis. (a) entre “Média do tempo de espera para centrifugar” e “Desvio padrão do tempo de espera para centrifugar”; (b) entre “Pureza do mosto” e “Média de temperatura de fermentação”.



O eixo das ordenadas dos gráficos apresentados na Figura 3.2 representa o valor numérico da correlação entre os pares de variáveis comparados. O eixo das abcissas (*lag*) indica o deslocamento no tempo da média de um dos elementos envolvidos na análise em relação ao seu par. As variáveis que tiveram correlação confirmada (Figura 3.2 (a)), apresentaram no *lag* de “0”, ou seja, a dependência entre elas só existe para os mesmos dias de operação industrial. Para

as variáveis com efeitos independentes, o valor numérico de correlação cruzada não ultrapassa os limites de confiança dos gráficos, como mostrado na Figura 3.2 (b).

Totalizaram-se sete variáveis selecionadas para a modelagem da rede neural: concentração de sólidos solúveis (°Brix), pureza (%), e acidez (%), referentes ao mosto; contaminação bacteriana (UFC/ml) e viabilidade de células (%), no vinho bruto; média de temperatura de fermentação (°C) e por fim a média do tempo de tratamento (h), referente ao tratamento do levedo, com a resposta da rede sendo a concentração volumétrica de etanol no vinho bruto (°GL). Para facilitar a leitura e compreensão do trabalho, nomeou-se cada uma das variáveis selecionadas para a modelagem com as abreviações mostradas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1. Abreviações para identificação das variáveis utilizadas na modelagem da rede neural.

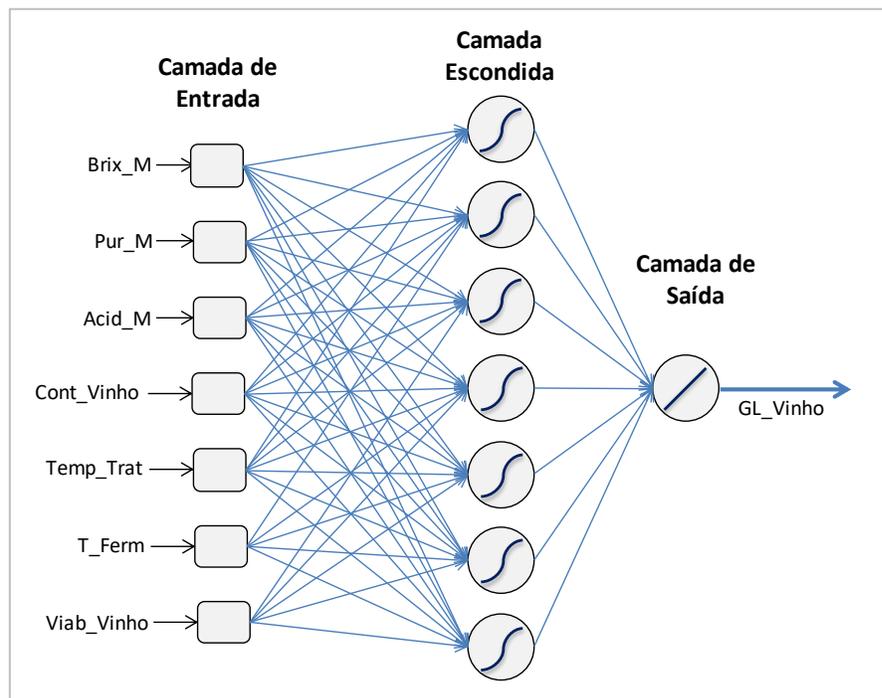
DESCRIÇÃO DA VARIÁVEL	ABREVIÇÃO	UNIDADE
Concentração de sólidos solúveis no mosto	Brix_M	(°Brix)
Pureza do mosto	Pur_M	(%)
Acidez do mosto	Acid_M	(%)
Contaminação no vinho bruto	Cont_Vinho	(UFC/ml)
Média do tempo de tratamento	Temp_Trat	(h)
Média de temperatura de fermentação	T_Ferm	(°C)
Viabilidade de células no vinho bruto	Viab_Vinho	(%)
Concentração de etanol no vinho bruto	GL_Vinho	(°GL)

As variáveis selecionadas para a entrada da rede neural influenciam na concentração de etanol ao final do processo (variável resposta, GL_Vinho), sendo a maioria delas presente apenas em operações industriais, e ausentes em processos de fermentação em escala de bancada. Ressalta-se a utilização da variável Brix_M, que apesar de quantificar demais sólidos em solução que não apenas os açúcares redutores totais (ART), é proporcional à concentração de ART e pode ser mensurada de forma *on line* na linha de alimentação de mosto.

A proporção de sacarose em relação aos demais açúcares (glicose e frutose) presentes na mistura de alimentação pode também ter influência na produção final de etanol, fato que justifica

a presença da variável Pur_M na modelagem da rede. As variáveis Acid_M e Cont_Vinho são indicadoras da contaminação bacteriana no mosto e no vinho, respectivamente. A presença de bactérias no meio fermentativo em determinadas condições pode ocasionar competição com as leveduras para metabolização dos açúcares, reduzindo assim a concentração de etanol no vinho bruto. Já a variável Temp_Trat tem impacto na recuperação das atividades metabólicas das leveduras enquanto a Viab_Vinho mede diretamente a quantidade de células saudáveis presentes no meio fermentativo. A arquitetura da rede a ser treinada com as variáveis selecionadas compondo a camada de entrada é mostrada na Figura 3.3.

Figura 3.3. Arquitetura da rede neural com as variáveis de entrada selecionadas.



A avaliação da qualidade do treinamento da rede neural foi realizada pela análise do valor da média do quadrado dos erros (MSE) e do gráfico de regressão linear entre os dados de campo e a resposta da rede, para a variável de saída GL_Vinho. As Figuras 3.4 e 3.5 mostram o comportamento dos erros de treinamento, validação e teste das redes A e B, respectivamente, obtidas para a melhor configuração de pesos dentre as 21.000 inicializações de treinamento realizadas. Obtiveram-se os valores de 0,26 e 0,23 para o MSE das redes A e B, com finalização

do treinamento nas épocas (“epochs”) 16 e 15, respectivamente. Os gráficos mostram resultados similares obtidos para as duas redes, fato que indica que a distribuição dos dados entre treinamento e validação foi realizada de maneira satisfatória.

Figura 3.4. Valor do MSE ao longo das etapas de treinamento e validação da rede A.

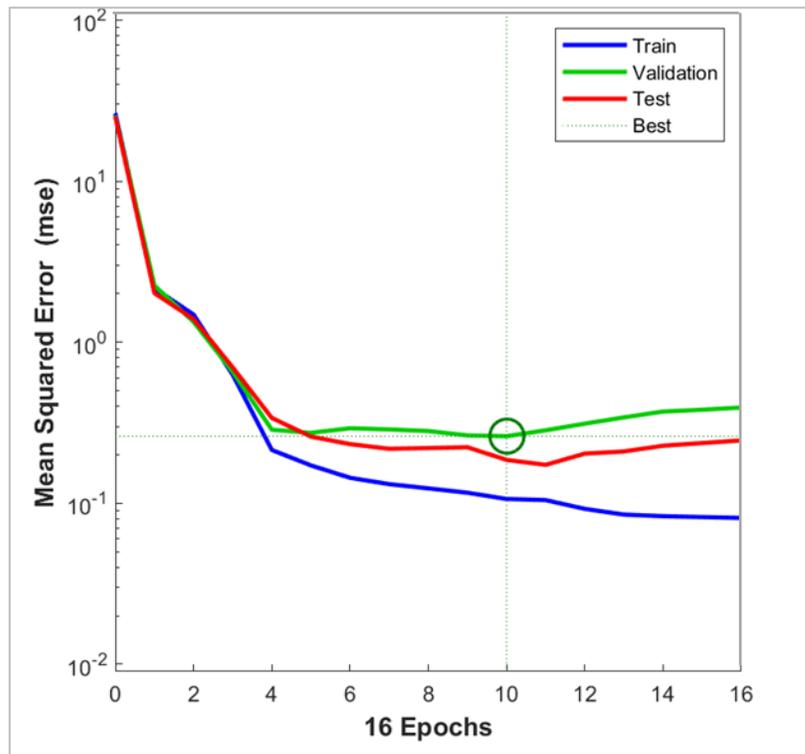
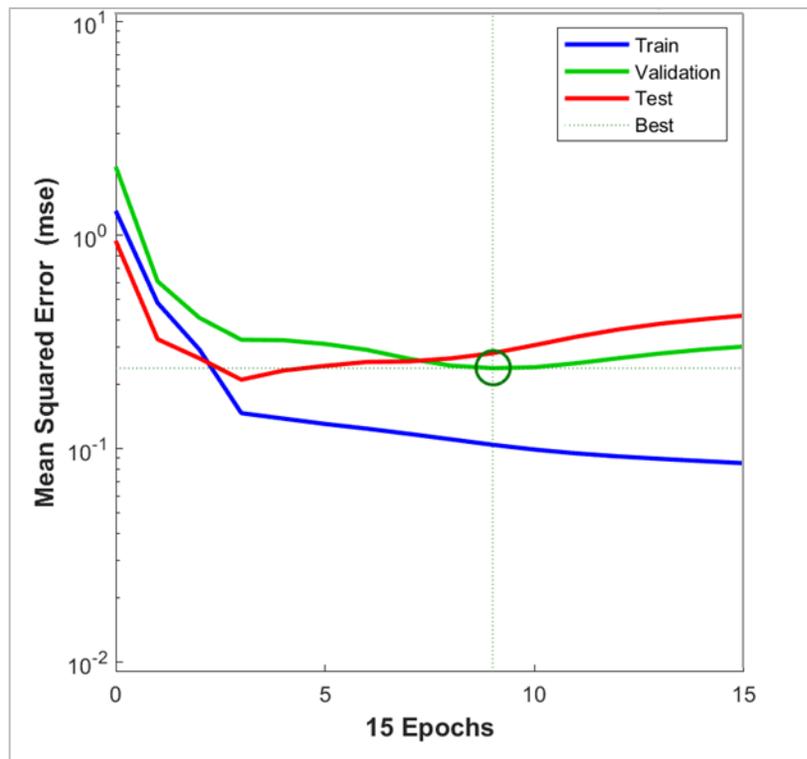


Figura 3.5. Valor do MSE ao longo das etapas de treinamento e validação da rede B.



Os valores dos coeficientes de determinação (R^2) alcançados para as redes A e B foram de 0,91 e 0,87, respectivamente. Esse resultado considera apenas os dados de validação utilizados para cada uma das redes e mostra-se satisfatório para uma modelagem realizada a partir de dados industriais. Considerando a proximidade dos dois valores obtidos, pôde-se concluir também que a distribuição dos dados para a modelagem de ambas as redes foi satisfatória, não havendo comportamento tendencioso ou ruídos pronunciáveis nos pontos experimentais utilizados.

As Figuras 3.6 e 3.7 mostram as modelagens das redes A e B, respectivamente, testadas com os dados de validação do banco de dados. Realizou-se a construção das curvas dos limites superior e inferior do modelo utilizando o intervalo de confiança de 95% segundo descrito por MONTGOMERY e RUNGER (2003). Os limites de confiança foram traçados a partir do cálculo das incertezas associadas aos valores dos coeficientes angular e linear dos modelos das redes A e B, baseando-se na determinação das variâncias na predição de um novo valor da variável resposta. Para as análises estatísticas foi utilizada a função “LINEST” presente no *software* Microsoft Office Excel®, 2010.

Figura 3.6. Modelo linear obtido para a modelagem da rede A.

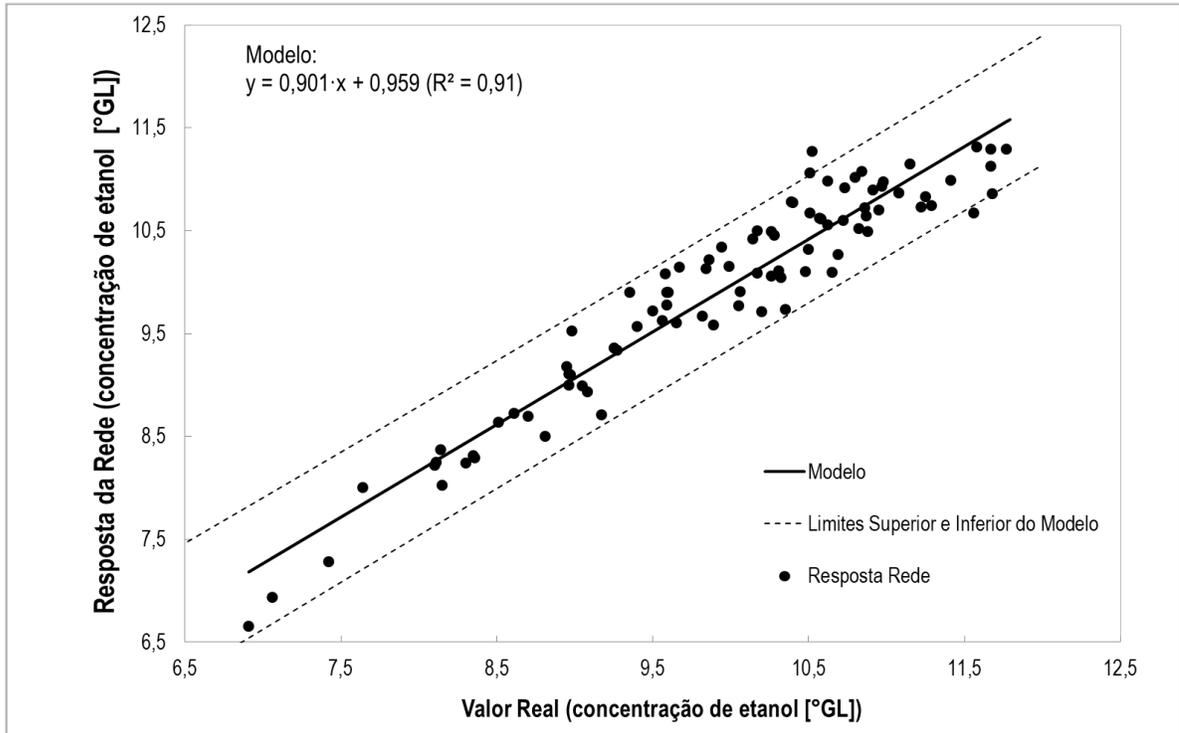
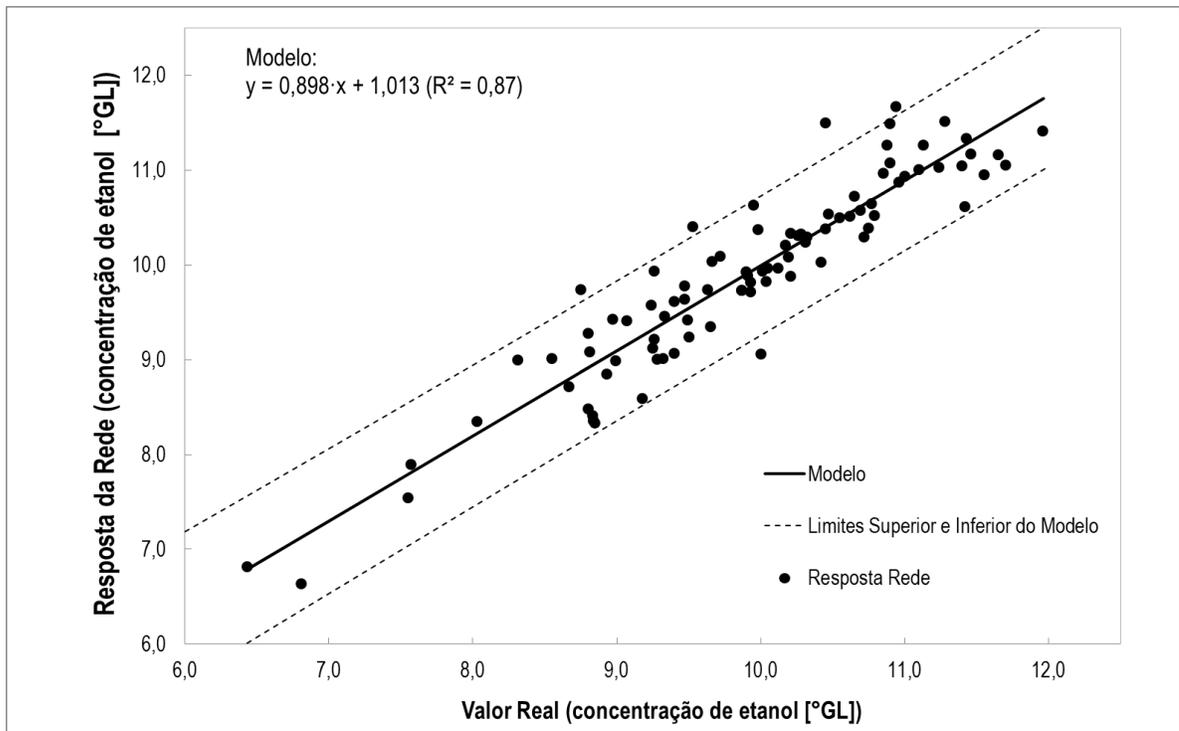


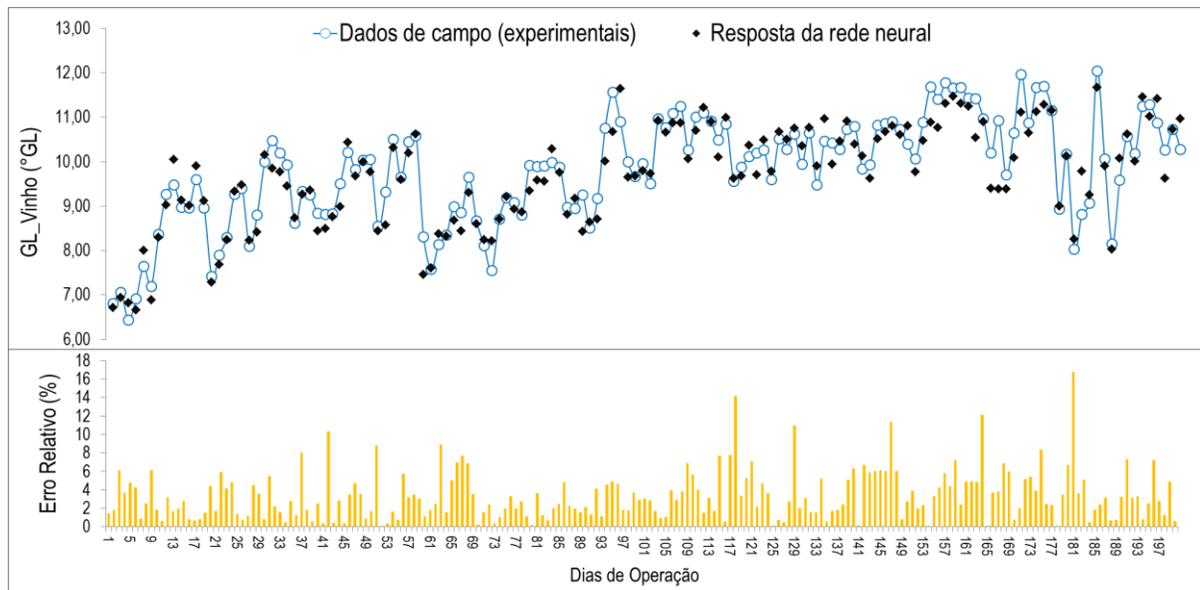
Figura 3.7. Modelo linear obtido para a modelagem da rede B.



Vale ressaltar que devido às limitações do processo industrial, não houve um planejamento experimental para coleta dos dados. Nesse cenário, a escolha das variáveis, bem como a arquitetura e os algoritmos de treinamento utilizados na modelagem da rede mostraram-se adequados mediante os resultados apresentados pelas Figuras 3.4 a 3.7. Ambas as redes A e B apresentaram valores satisfatórios de coeficiente de correlação para os dados de validação. Porém, para as etapas seguintes desse estudo, optou-se por utilizar a rede A, que apresentou ligeiramente um maior valor de R^2 e menor valor de MSE quando comparada à rede B.

A fim de se analisar quais pontos do banco de dados que apresentaram maiores desvios em relação à resposta da rede neural, construiu-se o gráfico da Figura 3.8, que representa os pontos de operação coletados em campo e estimados pela rede treinada, distribuídos em ordem temporal, referentes aos 200 dias de operação.

Figura 3.8. Concentração de etanol no vinho ($^{\circ}\text{GL}$) experimental e previsto pela rede e erro relativo durante os dias operação.



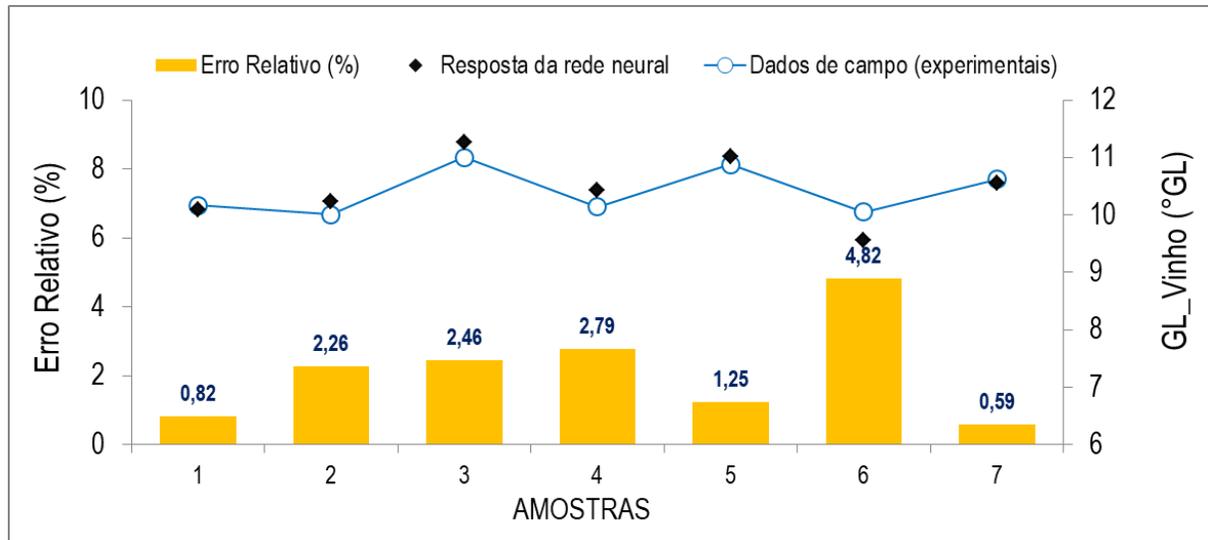
O erro relativo médio de todas as observações utilizadas na rede foi de 3,33%. Observa-se que os maiores valores de erros relativos (acima de 6%) entre a resposta do modelo e os dados experimentais ocorreram no início e do meio para o final de safra, ou seja, antes do 70 $^{\circ}$ e após o

120° dia de operação. Os períodos iniciais de safra correspondem aos meses de Março, Abril e Maio, nos quais houve constantes paradas de operação industrial devido à presença de chuvas. Já a partir do 120° dia, observou-se pontos específicos com altos desvios relativos entre a resposta da rede e os valores de campo. Esses desvios corresponderam aos dias em que ocorreram paradas de operação da planta devido às constantes quebras de equipamentos, principalmente aqueles relacionados às operações de moagem e produção de vapor. Essas quebras se deram principalmente à fadiga dos equipamentos relacionada ao desgaste natural que ocorre ao longo da safra.

Essas paradas industriais ocasionaram perda de representatividade na coleta das amostras em campo, uma vez que o sistema de amostragem foi desenvolvido para operações em processos contínuos. Assim, os períodos que compreenderam paradas e retomadas de operação ocasionaram erros nos valores das variáveis que são utilizadas no modelo. Esse fato comprova que para condições normais (contínuas) de operação industrial, a modelagem proposta possui satisfatória capacidade de previsão, sendo capaz de, quando em situações adversas de operação (paradas e retomadas de processo), reconhecer a presença de desvios nas variáveis de entrada do modelo pela estimativa incorreta da variável resposta. Os demais pontos que corresponderam ao meio de safra, e por consequência operações mais estáveis, apresentaram erro relativo na ordem inferior a 4%, o que mostra a capacidade da rede treinada em prever o valor da variável resposta do processo. A presença dos erros relativos como mostrado na Figura 3.8 indica que não houve *overfitting* da rede.

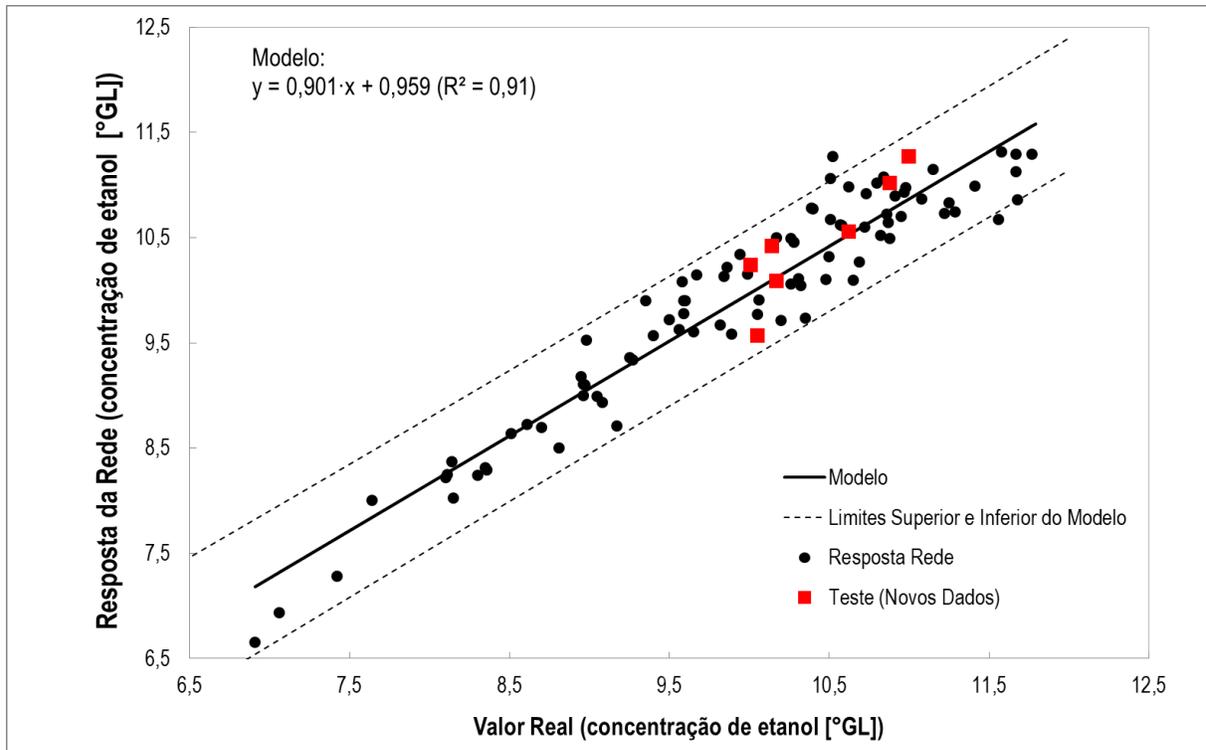
Com o intuito de testar o modelo para dados ainda não utilizados, foram apresentados à rede sete novos pontos da safra em estudo. Os valores de erro relativo em relação à variável de saída GL_Vinho, experimental e estimada pelo modelo, podem ser observados na Figura 3.9. Constatou-se que a amostra 6 foi a única a apresentar erro relativo de valor numérico maior que 4%, mantendo para as demais, erros relativos abaixo da média daqueles apresentados na Figura 3.8. Essa análise mostra que a rede neural treinada foi capaz de prever com acuracidade o valor de GL_Vinho para novos dados apresentados, o que comprova a não ocorrência do fenômeno de *overfitting*.

Figura 3.9. Concentração de etanol no vinho (°GL) experimental e previsto pela rede e erro relativo para os novos dados de operação apresentados.



Foram plotados no gráfico apresentado pela Figura 3.9 os valores estimados dos sete novos pontos apresentado à rede, de forma a verificar se os pontos gerados pela rede estão localizados dentro do intervalo de confiança estatístico calculado para modelo. O resultado pode ser observado na Figura 3.10, que mostra os novos pontos plotados no gráfico, onde o eixo das abcissas corresponde ao valor observado e o eixo das ordenadas a resposta da rede neural (modelo da rede A).

Figura 3.10. Modelo linear obtido para a modelagem da rede A, inseridos os novos pontos experimentais para teste da capacidade de previsão da rede.



Os sete novos pontos apresentados se localizam entre os limites superior e inferior de confiança e estão bem distribuídos ao redor da linha do modelo. Esse fato corrobora a alta capacidade de previsão da rede modelada para o processo de fermentação industrial da unidade em estudo.

São mostrados na Tabela 3.2 os valores dos pesos atribuídos nas conexões entre as variáveis de entrada e os neurônios da camada escondida da rede treinada, que definem a estrutura da rede neural modelada nesse estudo, juntamente com a Tabela 3.3 que mostra os valores dos pesos entre os neurônios da camada escondida e a camada de saída.

Tabela 3.2. Valores dos pesos das conexões entre as camadas de entrada e escondida ao final do treinamento.

N° Variável	0	1	2	3	4	5	6	7
N° Neurônio	Bias	Brix_M	Pur_M	Acid_M	Cont_Vinho	Temp_Trat	T_Ferm	Viab_Vinho
1	-3,0077	-0,9704	1,1451	-1,6571	-0,2880	-0,0809	2,0829	0,4552
2	-1,2280	0,9075	-0,5545	-0,0290	0,8324	0,7127	0,2104	1,2870
3	-1,4547	2,2715	-0,7576	0,4946	-1,0523	-1,8094	0,3291	-0,6571
4	1,2856	-0,9427	0,3706	2,2323	0,5338	-1,5953	-0,6746	-1,0914
5	0,8253	0,8782	-3,7259	0,0768	0,2105	-1,0056	-0,4241	-0,2098
6	1,1618	1,7025	-0,5202	-0,7237	-0,2181	-0,6111	0,0225	-0,1584
7	2,2699	0,8437	0,7888	-0,7120	0,0445	-1,6819	-0,0780	0,9022

Tabela 3.3. Valores dos pesos das conexões entre os neurônios da camada escondida e a camada de saída.

Neurônios Camada Escondida								
Bias	1	2	3	4	5	6	7	
0,1617	-0,2195	1,2796	0,3033	0,1418	-0,4164	0,7164	0,1459	

3.2.2. Otimização das variáveis de entrada

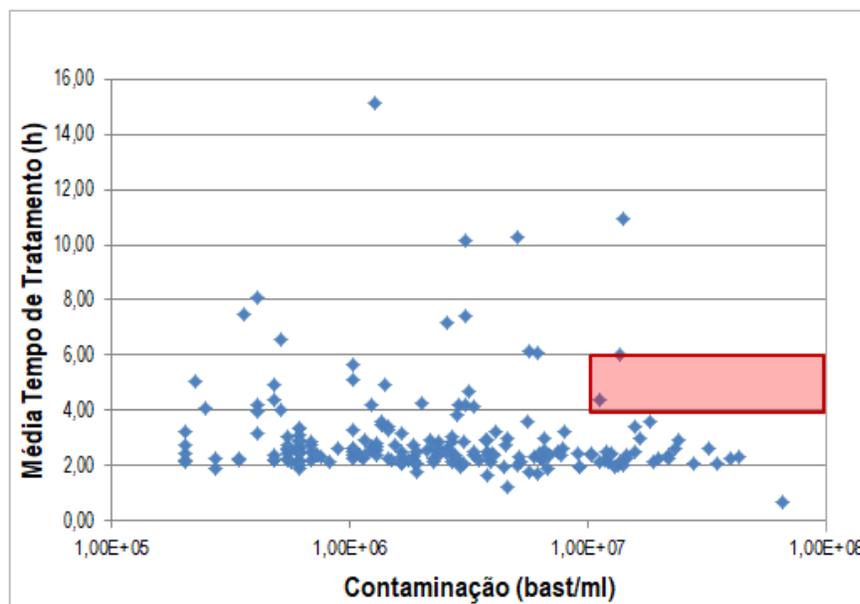
Uma vez realizado o treinamento da rede neural e verificada a capacidade de previsão da mesma para pontos que ainda não haviam sido apresentados, objetivou-se a otimização dos valores das variáveis de entrada da rede a fim de se obter o maior valor possível de GL_Vinho no processo. As variáveis de processo utilizadas na entrada da rede são controladas por ações operacionais, de forma que, diferentes cenários de operação são possíveis de serem alcançados.

As variáveis do mosto são controladas pela proporção de caldo, mel e água que é utilizada para sua composição. Essa proporção é definida segundo estratégias operacionais firmadas por decisões gerenciais da empresa, e por essa razão, passíveis de mudança. Variáveis do vinho e da fermentação são controladas facilmente por alteração dos parâmetros de operação de equipamentos na planta. Assim sendo, escolheu-se um valor aleatório do banco de dados utilizado nesse trabalho, a fim de aumentar a concentração de etanol do dia de operação

Depois de otimizadas as condições de entrada, houve a necessidade de se verificar se os valores das variáveis para cada um dos cenários se encontram em regiões de operação que foram aprendidas pela rede neural durante o treinamento. Esse tipo de análise é realizada plotando todas as variáveis do modelo aos pares, em gráficos de correlação, utilizando os dados de treinamento da rede (200 dias de operação), formando assim uma matriz de correlação das variáveis de entrada. Analisa-se então se as condições otimizadas se encontram em regiões de alta densidade de pontos experimentais, fato que valida a assertividade da previsão da rede, podendo assim ser aplicada na unidade de operação industrial.

Os cenários 1, 3, 4, 5 e 7 (apresentados na Tabela 3.4) não se encontram em regiões nas quais o modelo da rede neural possui capacidade de previsão, uma vez que não há alta densidade de pontos experimentais que validem as condições obtidas de “Contaminação” e “Média Tempo de Tratamento” como mostrado na Figura 3.11. Para que haja assertividade no estabelecimento de condições operacionais factíveis, há a necessidade de se realizar ensaios para coleta de pontos experimentais nas regiões de baixa densidade de dados.

Figura 3.11. Gráfico de correlação entre os dados de Contaminação e Média Tempo de Tratamento. A região sombreada indica região de baixa densidade de pontos experimentais disponíveis.



Dentre os sete cenários otimizados, dois deles (cenários 2 e 6) se localizaram em regiões com alta densidade de pontos operacionais nos quais a rede possui alta capacidade de previsão. Essas regiões se verificaram para todos os gráficos da matriz de correlação de dados. Os cenários otimizados e comprovadamente factíveis pela previsão do modelo são mostrados na Tabela 3.5.

Tabela 3.5. Cenários otimizados em regiões de alta capacidade preditiva do modelo.

Cenário Real		Cenários Otimizados	
Variáveis	Valores Reais	2	6
Brix_M	23,00	23,00	23,00
Pur_M	65,09	76,23	75,72
Acid_M	2,40	0,91	3,02
Cont_Vinho	$1,2 \cdot 10^7$	$1,8 \cdot 10^6$	$1,2 \cdot 10^6$
Temp_Trat	2,52	3,02	3,24
T_Ferm	32,21	31,92	30,98
Viab_Vinho	0,90	0,90	0,90
GL_Vinho	8,51	9,50	9,50

Mostra-se pela análise da Tabela 3.5 que para ocorrer o aumento desejado da graduação alcoólica do vinho bruto de $8,5^\circ\text{GL}$ para $9,5^\circ\text{GL}$ é necessário o aumento do teor de sacarose no mosto, representado pela variável “Pureza”, em ambos os cenários 2 e 6. Além disso, observa-se também para ambos os cenários otimizados que houve uma redução pronunciável da contaminação bacteriana. Esses fatos mostram que uma estratégia para o aumento da graduação alcoólica do vinho e consequente aumento da eficiência de fermentação seria o aumento do teor de sacarose no mosto, aliado ao controle da contaminação bacteriana abaixo de $2,0 \cdot 10^5$ bast.ml⁻¹. O gasto com antibióticos e medidas preventivas de controle da contaminação no vinho bruto pode ser analisado pelo aspecto econômico de forma a avaliar se o ganho com o aumento de produção de etanol justifica o aumento de gastos com o controle da contaminação.

Observou-se que para o cenário otimizado 6 houve diminuição da temperatura média de fermentação com ligeiro aumento do teor de acidez do mosto, quando comparados ao dado industrial. A acidez do mosto é um indicativo de contaminação na matéria-prima, e como forma de minimização de seus efeitos danosos na fermentação o modelo buscou a redução na

temperatura de fermentação. Temperaturas mais baixas de fermentação desfavorecem a proliferação de bactérias no meio fermentativo, fato esse comprovado pela previsão do modelo.

Por fim, realizou-se um teste com o cenário otimizado 6 aumentando o valor de contaminação bacteriana para $1,24 \cdot 10^7$ bast.ml⁻¹ e mantendo os demais valores das variáveis de entrada fixos. Obteve-se uma concentração de 9,10°GL na saída da rede, de forma a comprovar que para aumentos na contaminação bacteriana, prejudica-se de maneira direta a eficiência de fermentação industrial. Em um segundo teste, o mesmo cenário teve o valor da variável “Acidez” referente ao mosto alterado de 3,02 para 4,00% e a graduação alcóolica do vinho bruto ao final do processo foi calculada em 9,14% pela rede neural. Essa análise mostra o impacto da contaminação da matéria-prima na produção de etanol.

Os resultados obtidos mostraram que a utilização de uma rede neural treinada com dados industriais pode se tornar uma importante ferramenta de operação industrial, mesmo que sem a possibilidade da realização de ensaios experimentais que validem a maior faixa possível das variáveis de entrada do modelo. A modelagem do processo industrial utilizando redes neurais pode trazer de antemão a possibilidade de guiar decisões gerenciais no ambiente industrial, de forma que a operação seja direcionada para o aumento da produção de etanol e conseqüentemente da eficiência da etapa de fermentação na usina.

3.3. CONCLUSÕES

A modelagem matemática utilizando redes neurais tem sido empregada amplamente em bioprocessos, principalmente em escala de bancada. A aplicação dessa modelagem para o processo industrial de fermentação mostrou-se satisfatória, uma vez que conseguiu prever com acuracidade a variável de interesse em condições normais de operação industrial, inclusive quando apresentados dados novos de operação.

Vale ressaltar que se utilizou apenas 200 pontos experimentais para treinamento e validação da rede, e apesar da baixa quantidade de dados disponíveis, a rede atingiu satisfatória capacidade de previsão da variável resposta com valores médios de erro relativo abaixo de 4%.

A otimização das condições de entrada da rede também se mostrou satisfatória e coerente com a realidade industrial, uma vez que apontou a influência de variáveis industriais no processo de fermentação, que até o presente momento não era possível de quantificar em termos de queda de produção de etanol. Assim, a modelagem com redes neurais pode se tornar uma importante ferramenta de otimização de eficiência da fermentação alcoólica em escala industrial, considerando variáveis que não compõem modelos cinéticos e fenomenológicos, porém influenciam diretamente na produção de etanol. A possibilidade de quantificar os efeitos de variáveis importantes ao processo de fermentação possibilita ainda o estudo da viabilidade econômica de ações a serem tomadas no processo industrial baseadas no retorno financeiro gerado pelo aumento de produção de etanol. Ressalta-se, porém, a não exclusão da importância do conhecimento do processo antes de se iniciar a modelagem da rede neural, uma vez que diferentes configurações de operação podem acarretar na consideração de diferentes variáveis na modelagem.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANFAVEA, **Estatísticas - 2009**. Disponível em: <<http://www.anfavea.com.br/tabelas.html>>. Acesso em: 7 dez. 2018.
- AGATONOVIC-KUSTRIN, S.; BERESFORD, R. Basic concepts of artificial neural network (ANN) modeling and its application in pharmaceutical research. **Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis**, v. 22, n. 5, p. 717–727, 2000.
- AHMADIAN-MOGHADAM, H.; ELEGADO, F.; NAYVE, R. Prediction of Ethanol Concentration in Biofuel Production Using Artificial Neural Networks. **American Journal of Modeling and Optimization**, v. 1, n. 3, p. 31–35, 2013.
- AMORIM, H. V. DE; LEÃO, R. M. Fermentação alcoólica: ciência e tecnologia. **Piracicaba: Fermentec**, v. 448, 2005.
- AMORIM, H. V. Eficiência é fundamental. **15º SBA, A usina da sobrevivência. Anais**. Piracicaba: STAB, 2014
- AMORIM, B. H. V; LOPES, M. L. Ethanol Production in a Petroleum Dependent World : The Brazilian Experience. **Sugar Journal**, p. 11–14, 2005.
- ANDRIETTA, S. R.; ANDRIETTA, M. G. S.; BICUDO, M. H. P. Comparação do Rendimento Fermentativo Utilizando Diferentes Metodologias de Cálculo para Avaliação do Desempenho de um Processo Industrial. **STAB: Piracicaba, SP, Brasil**, p. 41–49, 2012.
- BARNETT, J. A. A history of research on yeasts 2: Louis Pasteur and his contemporaries, 1850-1880. **Yeast**, v. 16, n. 8, p. 755–771, 2000.
- BASSO, L.; BASSO, T.; ROCHA, S. Ethanol production in Brazil: the industrial process and its impact on yeast fermentation. **Biofuel production—Recent Developments and Prospects ...**, v. 1530, 2011.
- BEALE, M. H.; HAGAN, M. T.; DEMUTH, H. B. Neural Network Toolbox™ User's Guide. **Matlab, Mathworks, R2017b**, 2017.
- BIOCOMBUSTÍVEIS, **Resolução ANP Nº 7, de 9.2.2011 - DOU 10.2.2011 – Retificada DOU 14.4.2011**, 2011. Disponível em: <<http://legislacao.anp.gov.br/?path=legislacao-anp/resol-anp/2011/fevereiro&item=ranp-7--2011>>
- BÖRJESSON, P. Good or bad bioethanol from a greenhouse gas perspective - What determines this? **Applied Energy**, v. 86, n. 5, p. 589–594, 2009.
- BORZANI, W. Batch ethanol fermentation: The correlation between the fermentation efficiency and the biomass initial concentration depends on what is considered as produced ethanol. **Brazilian Journal of Microbiology**, v. 37, p. 87–89, 2006.
- CENTRO DE TECNOLOGIA CANAVIEIRA (CTC). **Manual de métodos analíticos controle químico da fermentação**. Piracicaba, 2011.

CRUZ, A. J. G.; ARAUJO, M. L.; GIORDANO, R. C.; HOKKA, C. O. Phenomenological and neural-network modeling of cephalosporin C production bioprocess. **Applied biochemistry and biotechnology**, v. 70–72, p. 579–592, 1998.

DEEPAI. **What is Backpropagation?** Disponível em: <deepai.org>. Acesso em: 4 dez. 2018.

DELLA-BIANCA, B. E.; BASSO, T. O.; STAMBUK, B. U.; BASSO, L. C.; GOMBERT, A. K. What do we know about the yeast strains from the Brazilian fuel ethanol industry? **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 97, n. 3, p. 979–991, 2013.

DI MASSIMO, C.; MONTAGUE, G. A.; WILLIS, M. J.; THAM, M. T.; MORRIS, A. J. et al. Towards improved penicillin fermentation via artificial neural networks. **Computers and Chemical Engineering**, v. 16, n. 4, p. 283–291, 1992.

EBERHART, R. C.; SHI, Y. Particle Swarm Optimization: Developments, Applications and Resources. **In evolutionary computation, 2001. Proceedings of the 2001 Congress on**, vol. 1, pp. 81-86. IEEE, 2001.

EIA - U. S. Energy Information Administration. Monthly energy review: renewable energy. Total Energy Data (Tables 10.3 and 10.4), 2018a. Disponível em: <https://www.eia.gov/totalenergy/data/monthly/index.php>. Acesso em : 15 jan. 2019.

EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA. **Plano Decenal de Expansão de Energia 2026**. [s.l.: s.n.]. Disponível em: <<http://www.epe.gov.br>>.

ESFAHANIAN, M.; NIKZAD, M.; NAJAFPOUR, G.; GHOREYSHI, A. A. Modeling and optimization of ethanol fermentation using *Saccharomyces cerevisiae*: Response surface methodology and artificial neural network. **Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly**, v. 19, n. 2, p. 241–252, 2013.

FERNANDES, A. C. Cálculos na agroindústria da cana-de-açúcar. **STAB: Piracicaba, SP, Brasil**, 2011.

FINGUERUT, J.; LUCREDI, H. A.; LEIMER K. H.; ROSSELL, C. E. V. Estequiometria da fermentação alcoólica a partir do caldo da cana. **Boletim Técnico Copersucar**, p. 45–48, 1985.

FONSECA, G. C.; COSTA, C. B. B.; CRUZ, A. J. G. Comparing a dynamic fed-batch and a continuous steady-state simulation of ethanol fermentation in a distillery to a stoichiometric conversion simulation. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 34, n. 4, p. 1121–1131, 2017.

FRANCO-LARA, E.; LINK, H.; WEUSTER-BOTZ, D. Evaluation of artificial neural networks for modelling and optimization of medium composition with a genetic algorithm. **Process Biochemistry**, v. 41, n. 10, p. 2200–2206, 2006.

GOLDEMBERG, J. The Brazilian biofuels industry. **Biotechnology for Biofuels**, v. 7, p. 1–7, 2008.

GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. **Deep learning**. [s.l.] MIT press Cambridge, 2016. v. 1

GRAHOVAC, J.; JOKIC, A.; DODIC, J.; VUCUROVIC, D.; DODIC, S.. Modelling and prediction of bioethanol production from intermediates and byproduct of sugar beet processing using neural networks. **Renewable Energy**, v. 85, p. 953–958, 2016.

GRANER, L. **A Indústria Automobilística e os Biocombustíveis**. Brasília, Senado Federal, , 2009. Disponível em: <http://www.senado.leg.br/atividade/comissoes/CI/gt_biocombustiveis/>

GUEGUIM KANA, E. B.; OLOKE, J. K.; LATEEF, A.; ADESIYAN, M. O. Modeling and optimization of biogas production on saw dust and other co-substrates using Artificial Neural network and Genetic Algorithm. **Renewable Energy**, v. 46, p. 276–281, 2012.

HORNIK, K.; STINCHCOMBE, M.; WHITE, H. Multilayer feedforward networks are universal approximators. **Neural Networks**, v. 2, n. 5, p. 359–366, 1989.

HUSSAIN, M. A. Review of the applications of neural networks in chemical process control D simulation and online implementation. v. 13, 1999.

JAISWAL, D.; DE SOUZA, A. P.; LARSEN, S.; LEBAUER, D. S.; MIGUEZ, F. E.; SPAROVEK, G.; BOLLERO, G.; BUCKERIDGE, M. S.; LONG, S. P. Brazilian sugarcane ethanol as an expandable green alternative to crude oil use. n. October, 2017.

JONES, R. P. Intracellular ethanol - accumulation and exit from yeast and other cells. **FEMS Microbiology Letters**, v. 54, n. 3, p. 239–258, 1988.

JONKER, J. G. G.; VAN DER HILST, F.; JUNGINGER, H. M.; CAVALETT, O.; CHAGAS, M. F.; FAAIJ, A. P. C. Outlook for ethanol production costs in Brazil up to 2030, for different biomass crops and industrial technologies. **Applied Energy**, v. 147, p. 593–610, 2015.

KHAOUANE, L.; KHAOUANE, L.; SI-MOUSSA, C.; HANINI, S.; BENKORTBI, O. Optimization of culture conditions for the production of pleuromutilin from pleurotus mutilus using a hybrid method based on central composite design, neural network, and particle swarm optimization. **Biotechnology and Bioprocess Engineering**, v. 17, n. 5, p. 1048–1054, 2012.

KU, H. H. Notes on the use of propagation of error formulas. **Journal of Research of the National Bureau of Standards. National Bureau of Standards**, p. 262, 1966.

LALUCE, C. Current aspects of fuel ethanol production in Brazil. **Critical Reviews in Biotechnology**, v. 11, n. 2, p. 149–161, 1991.

LIMA, U. DE A.; AQUARONE, E.; BORZANI, W.; SCHMIDELL, W. **Biotecnologia Industrial Vol. 3**, Editora Edgard Bluncher, 2001.

LOPES, M. L. et al. Biotechnology and Industry Microbiology Ethanol production in Brazil : a bridge between science and industry. **Brazilian Journal of Microbiology**, v. 47, p. 64–76, 2016.

MARCHITAN, N.; COJOCARU, C.; MEREUTA, A.; DUCA, G.; CRETESCU, I.; GONTA, M. Modeling and optimization of tartaric acid reactive extraction from aqueous solutions: A comparison between response surface methodology and artificial neural network. **Separation and Purification Technology**, v. 75, n. 3, p. 273–285, 2010.

MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA. LEI Nº 13.576, DE 26.12.2017 - DOU 27.12.2017. **Dispõe sobre a Política Nacional de Biocombustíveis (RenovaBio) e dá outras providências.** Disponível em: <<http://legislacao.anp.gov.br/?path=legislacao-federal/leis/2017&item=lei-13.576--2017>>. Acesso em: 20 dez. 2018.

MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. **Applied Statistics and Probability for Engineers**, 3 ed., John Wiley & Sons, Inc., 2003.

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.

NANDI, S.; GHOSH, S.; TAMBE, S. S.; KULKARNI, B. D. Artificial neural-network-assisted stochastic process optimization strategies. **AIChE Journal**, v. 47, n. 1, 2001.

NELLES, O. **Nonlinear system identification: from classical approaches to neural networks and fuzzy models**. Springer Science & Business Media, 2013.

NETTO, J. N. **A saga do álcool: fatos e verdades sobre os 100 anos de história do álcool combustível em nosso país**. Novo Século, 2007.

NUCCI, E. R.; SILVA, R. G.; SOUZA, V. R.; GIORDANO, R. L.; GIORDANO, R. C.; CRUZA, A. J. Comparing the performance of multilayer perceptrons networks and neuro-fuzzy systems for on-line inference of *Bacillus megaterium* cellular concentrations. **Bioprocess and Biosystems Engineering**, v. 30, n. 6, p. 429–438, 15 out. 2007.

PIRDASHTI, M.; CURTEANU, S.; KAMANGAR, M. H.; HASSIM, M. H.; KHATAMI, M. A. Artificial neural networks: applications in chemical engineering. **Reviews in Chemical Engineering**, v. 29, n. 4, p. 205–239, 2013.

RAGHAVENDRAN, V.; BASSO, T. P.; SILVA, J. B.; BASSO, L. C.; GOMBERT, A. K. A simple scaled down system to mimic the industrial production of first generation fuel ethanol in Brazil. **Antonie van Leeuwenhoek, International Journal of General and Molecular Microbiology**, v. 110, n. 7, p. 971–983, 2017.

RFA - Renewable Fuels Association. **Statistics**, 2018. World Fuel Ethanol Production. Disponível em: <https://ethanolrfa.org/resources/industry/statistics/#1549569130196-da23898a-53d8>. Acesso em: 15 jan. 2019.

ROCHA, M.; MENDES, R.; ROCHA, O.; ROCHA, I.; FERREIRA, E. C. Optimization of fed-batch fermentation processes with bio-inspired algorithms. **Expert Systems with Applications**, v. 41, n. 5, p. 2186–2195, 2014.

ROSENBLATT, F.; NONN, C. The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization. **Psychological Review**, v. 65, n. 6, p. 386–408, 1958.

ROUBOS, J. A.; VAN STRATEN, G.; VAN BOXTEL, A. J. B. An evolutionary strategy for fed-batch bioreactor optimization; concepts and performance. **Journal of Biotechnology**, v. 67, n. 2–3, p. 173–187, 1999.

SEBAYANG, A. H. et al. Optimization of bioethanol production from sorghum grains using

artificial neural networks integrated with ant colony. **Industrial Crops and Products**, v. 97, p. 146–155, 2017.

SEWSYNKER-SUKAI, Y.; FALOYE, F.; KANA, E. B. G. Artificial neural networks: an efficient tool for modelling and optimization of biofuel production (a mini review). **Biotechnology & Biotechnological Equipment**, v. 31, n. 2, p. 221–235, 2017.

SCHMIDHUBER, J. Deep learning in neural networks– An overview. **Neural Networks**, v. 61, p. 85–117, 2015.

SHULER, M. L.; KARGI, F. **Bioprocess Engineering Basic Concepts**. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 1992.

SILVA, R. G.; CRUZ, A. J. G.; HOKKA, C. O.; GIORDANO, R. L. C.; GIORDANO, R. C. A hybrid feedforward neural network model for the cephalosporin C production process. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 17, n. 4–7, p. 587–598, dez. 2000.

SILVA, R. G.; PINOTTI, L. M.; CRUZ, A. J.; GIORDANO, R. L.; GIORDANO, R. C. Artificial neural networks to infer biomass and product concentration during the production of penicillin G acylase from *Bacillus megaterium*. **Journal of Chemical Technology & Biotechnology: International Research in Process, Environmental & Clean Technology**, v. 749, p. 739–749, 2008.

SKINNER, K. A.; LEATHERS, T. D. Bacterial contaminants of fuel ethanol production. **Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology**, v. 31, n. 9, p. 401–408, 2004.

SOBRINHO, B. L. **A ação do Instituto do Açúcar e do Alcool**. Rio de Janeiro, 1946.

SOVANN, N.; NALLAGOWNDEN, P.; BAHARUDIN, Z. A method to determine the input variable for the neural network model of the electrical system. **Intelligent and Advanced Systems (ICIAS), 2014 5th International Conference on. Anais. IEEE**, 2014

TALEBNIA, F.; MIGHANI, M.; RAHIMNEJAD, M.; ANGELIDAKI, I. Ethanol production from steam exploded rapeseed straw and the process simulation using artificial neural networks. **Biotechnology and Bioprocess Engineering**, v. 20, n. 1, p. 139–147, 2015.

TÁVORA, F. L. História e economia dos biocombustíveis no Brasil. **Brasília, DF: Senado Federal**, 2011.

THIBAUT, J.; VAN BREUSEGEM, V.; CHÉRUY, A. On-line prediction of fermentation variables using neural networks. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 36, n. 10, p. 1041–1048, 1990.

UDOP. **Indicadores de Mercado**. Disponível em: <www.udop.com.br>. Acesso em: 10 jul. 2018.

UNICA. **Histórico de Produção**. Disponível em: <<http://www.unicadata.com.br>>. Acesso em 10 jul. 2018.

UNICA. **Fotografia do setor sucroenergético no Brasil e os benefícios econômicos**,

ambientais e sociais gerados. Disponível em: www.unica.com.br/download.php?idSecao=17&id=35831777. Acesso em 07 fev. 2019.

VANEK, M.; HRNCIRIK, P.; VOVSIK, J.; NAHLIK, J. On-line estimation of biomass concentration using a neural network and information about metabolic state. **Bioprocess Biosystem Engineering**, p. 9–15, 2004.

VASCONCELOS, J. N. Influência do Perfil de Alimentação de Substrato sobre o Processo de Fermentação Alcoólica. **Álcool Açúcar**, p. 14–17, 1993.

WELTER, E. F.; SHIKIDA, P. F. A. Evolução dos setores indústria do açúcar e álcool no Brasil em 1975, 1980, 1985, 1992 e 1995: uma análise a partir do instrumental insumo-produto. **Revista Econômica do Nordeste**, p. 791–816, 2002.

WHEALS, A. E.; BASSO, L. C.; ALVES, D. M. G.; AMORIM, H. V. Fuel ethanol after 25 years. **Tibtech**, December, v. 17, p. 482–487, 1999.

WHITEMAN, J. K.; GUEGUIM KANA, E. B. Comparative Assessment of the Artificial Neural Network and Response Surface Modelling Efficiencies for Biohydrogen Production on Sugar Cane Molasses. **Bioenergy Research**, v. 7, n. 1, p. 295–305, 2014.

WILLIS, M. J.; MONTAGUE, G. A.; DI MASSIMO, C.; THAM, M. T.; MORRIS, A. J. Artificial neural networks in process estimation and control. **Automatica**, v. 28, n. 6, p. 1181–1187, 1992.

ANEXO I: Linhas de código de implementação do algoritmo PSO em Matlab.

```

%%PSO.m
clc;
clear;
close all;

%%Problem Definition

CostFunction= @(x) MinDeltaGL(x);    %Cost Function
nVar=7;                               %Number of Unknown (design) variables
VarSize=[1 nVar];                    %Matrix size of the decision variables

%%Chute Inicial de Inputs

x1=23;

VarMin1=x1;                           %Lower Bound of decision variables
VarMax1=x1;                           %Upper Bound of decision variables

VarMin2=60;
VarMax2=82;

VarMin3=0.23;
VarMax3=3.80;

VarMin4=2E5;
VarMax4=5E6;

VarMin5=1;
VarMax5=5.00;

VarMin6=30.31;
VarMax6=34.94;

VarMin7=0.80;
VarMax7=0.90;

%%Parameters of PSO

%Constriction Coefficients
kappa=1;
phi1=2.05;
phi2=2.05;
phi=phi1+phi2;
chi=2*kappa/abs(2-phi-sqrt(phi^2-4*phi));
wdamp=1;

```

```

%Parameters
w=chi;           %Inertia Coefficient
c1=chi*phi1;    %Personal Acceleration Coefficient
c2=chi*phi2;    %Social Acceleration Coefficient
MaxIt=50;       %Maximum Number of Iterations
nPop=70;        %Population size (Swarm size)

MaxVelocity1=0.14*(VarMax1-VarMin1); %Upper Limit to velocity
MinVelocity1=-MaxVelocity1;         %Lower limit to velocity

MaxVelocity2=0.14*(VarMax2-VarMin2);
MinVelocity2=-MaxVelocity2;

MaxVelocity3=0.14*(VarMax3-VarMin3);
MinVelocity3=-MaxVelocity3;

MaxVelocity4=0.14*(VarMax4-VarMin4);
MinVelocity4=-MaxVelocity4;

MaxVelocity5=0.14*(VarMax5-VarMin5);
MinVelocity5=-MaxVelocity5;

MaxVelocity6=0.14*(VarMax6-VarMin6);
MinVelocity6=-MaxVelocity6;

MaxVelocity7=0.14*(VarMax7-VarMin7);
MinVelocity7=-MaxVelocity7;

%%Iniciatlization

%The particle template
empty_particle.Position=[];
empty_particle.Velocity=[];
empty_particle.Cost=[];
empty_particle.BestPosition=[];
empty_particle.BestCost=[];

%Create population array

particle= repmat(empty_particle, nPop, 1);

%Initialize Global Best
GlobalBest.Cost=inf;

%Initialize Population Members
for i=1:nPop

    %Generate Random Solution

```

```

%particle(i).Position=Input;

particle(i).Position(1)=unifrnd(VarMin1,VarMax1);
particle(i).Position(2)=unifrnd(VarMin2,VarMax2);
particle(i).Position(3)=unifrnd(VarMin3,VarMax3);
particle(i).Position(4)=unifrnd(VarMin4,0.5*VarMax4);
particle(i).Position(5)=unifrnd(VarMin5,VarMax5);
particle(i).Position(6)=unifrnd(VarMin6,VarMax6);
particle(i).Position(7)=unifrnd(VarMin7,VarMax7);

%Initialize Velocity
particle(i).Velocity=zeros(VarSize);

%Evaluation
particle(i).Cost=CostFunction(particle(i).Position');

%Update the Personal Best

particle(i).Best.Position=particle(i).Position;
particle(i).Best.Cost=particle(i).Cost;

%Update Global Best

    if particle(i).Best.Cost<GlobalBest.Cost
        GlobalBest=particle(i).Best;
    end

end

%Array to Hold Best Cost Value on Each Iteration
BestCosts=zeros(MaxIt,1);

%%Main Loop of PSO

for it=1:MaxIt
    for i=1:nPop

        %Update Velocity
        particle(i).Velocity=w*particle(i).Velocity...
            +c1*rand(VarSize).*(particle(i).Best.Position-particle(i).Position)...
            +c2*rand(VarSize).*(GlobalBest.Position-particle(i).Position);

        %Apply Velocity Limits
        particle(i).Velocity(1)=max(particle(i).Velocity(1),MinVelocity1);
        particle(i).Velocity(1)=min(particle(i).Velocity(1),MaxVelocity1);
    end
end

```

```
particle(i).Velocity(2)=max(particle(i).Velocity(2),MinVelocity2);  
particle(i).Velocity(2)=min(particle(i).Velocity(2),MaxVelocity2);
```

```
particle(i).Velocity(3)=max(particle(i).Velocity(3),MinVelocity3);  
particle(i).Velocity(3)=min(particle(i).Velocity(3),MaxVelocity3);
```

```
particle(i).Velocity(4)=max(particle(i).Velocity(4),MinVelocity4);  
particle(i).Velocity(4)=min(particle(i).Velocity(4),MaxVelocity4);
```

```
particle(i).Velocity(5)=max(particle(i).Velocity(5),MinVelocity5);  
particle(i).Velocity(5)=min(particle(i).Velocity(5),MaxVelocity5);
```

```
particle(i).Velocity(6)=max(particle(i).Velocity(6),MinVelocity6);  
particle(i).Velocity(6)=min(particle(i).Velocity(6),MaxVelocity6);
```

```
particle(i).Velocity(7)=max(particle(i).Velocity(7),MinVelocity7);  
particle(i).Velocity(7)=min(particle(i).Velocity(7),MaxVelocity7);
```

```
%Update Position
```

```
particle(i).Position=particle(i).Position+particle(i).Velocity;
```

```
%Apply Lower and Upper Bound Limits
```

```
particle(i).Position(1)=max(particle(i).Position(1),VarMin1);  
particle(i).Position(1)=min(particle(i).Position(1),VarMax1);
```

```
particle(i).Position(2)=max(particle(i).Position(2),VarMin2);  
particle(i).Position(2)=min(particle(i).Position(2),VarMax2);
```

```
particle(i).Position(3)=max(particle(i).Position(3),VarMin3);  
particle(i).Position(3)=min(particle(i).Position(3),VarMax3);
```

```
particle(i).Position(4)=max(particle(i).Position(4),VarMin4);  
particle(i).Position(4)=min(particle(i).Position(4),VarMax4);
```

```
particle(i).Position(5)=max(particle(i).Position(5),VarMin5);  
particle(i).Position(5)=min(particle(i).Position(5),VarMax5);
```

```
particle(i).Position(6)=max(particle(i).Position(6),VarMin6);  
particle(i).Position(6)=min(particle(i).Position(6),VarMax6);
```

```
particle(i).Position(7)=max(particle(i).Position(7),VarMin7);  
particle(i).Position(7)=min(particle(i).Position(7),VarMax7);
```

```
%Evaluation
```

```
particle(i).Cost=CostFunction(particle(i).Position');
```

```
%Update Personal Best

if particle(i).Cost<particle(i).Best.Cost
particle(i).Best.Position=particle(i).Position;
particle(i).Best.Cost=particle(i).Cost;
end

    %Update Global Best

    if particle(i).Best.Cost<GlobalBest.Cost
    GlobalBest=particle(i).Best;
    end
end

%Store the Best Cost Value
BestCosts(it)=GlobalBest.Cost;

%Display Iteration Information
disp(['Iteration' num2str(it) ':Best Cost= ' num2str(BestCosts(it))]);

%Damping Inertia Coefficient
w=w*wdamp;
end

%%Results

figure;
%plot(BestCosts, 'LineWidth',2);
semilogy(BestCosts);
xlabel('Iteration');
ylabel('BestCost');
grid on;
```