



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS**  
**FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**FELIPI LUIZ DE ASSUNÇÃO BEZERRA**

**DESENVOLVIMENTO DE UM CONTROLE  
PREDITIVO BASEADO EM MODELO DE REDE  
NEURAL ARTIFICIAL EM UM PROCESSO DE  
FERMENTAÇÃO CONTÍNUA DE SEGUNDA  
GERAÇÃO**

**CAMPINAS-SP**

**2017**

**FELIPI LUIZ DE ASSUNÇÃO BEZERRA**

**DESENVOLVIMENTO DE UM CONTROLE PREDITIVO BASEADO EM  
MODELO DE REDE NEURAL ARTIFICIAL EM UM PROCESSO DE  
FERMENTAÇÃO CONTÍNUA DE SEGUNDA GERAÇÃO**

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

**CAMPINAS-SP**

**2017**

**Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s):** CNPq, 131000/2015-2

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura  
Luciana Pietrosanto Milla - CRB 8/8129

B469d Bezerra, Felipi Luiz de Assunção, 1990-  
Desenvolvimento de um controle preditivo baseado em modelo de rede neural artificial em um processo de fermentação contínua / Felipi Luiz de Assunção Bezerra. – Campinas, SP : [s.n.], 2017.

Orientador: Rubens Maciel Filho.  
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Controle de processos químicos. 2. Etanol. 3. Fermentação. I. Filho, Rubens Maciel. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

**Título em outro idioma:** Development of an artificial neural network model based predictive control for a continuous fermentation process

**Palavras-chave em inglês:**

Control of chemical processes

Ethanol

Fermentation

**Área de concentração:** Engenharia de Processos

**Titulação:** Mestre em Engenharia Química

**Banca examinadora:**

Rubens Maciel Filho [Orientador]

Filho, Rubens Maciel

Daniel Ibraim Pires Atala

Adriano Pinto Mariano

**Data de defesa:** 22-02-2017

**Programa de Pós-Graduação:** Engenharia Química

Componentes da banca examinadora:

Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Prof. Dr. Daniel Ibraim Pires Atala – CTBE

Prof. Dr. Adriano Pinto Mariano - UNICAMP

Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontrase no processo de vida acadêmica do aluno

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço ao Professor Rubens Maciel Filho, por ter me apoiado e guiado com suas excelentes ideias e clareza no direcionamento.

Aos meus pais, Miriam e Bezerra, por ter me dado suporte em todos os sentidos durante o processo.

À minha irmã Mirtes por ser uma excelente profissional e me fazer querer ser igual.

Ao meu amigo de trabalho William, que me ajudou muito durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos amigos que fiz durante o mestrado como Saulo, Camila, Paulo, Gabriel e aos antigos, João, Seldis, Marcos, Raul, Leone, Janói, Jack, Marília, Dorgival e Renato.

A todo o corpo de professores da Engenharia Química que sempre estavam dispostos a sanar nossas dúvidas.

À professora Cristiane Holanda Sodr  da Universidade Federal de Alagoas, que me iniciou na  rea de estudo pela qual tenho o prazer em trabalhar.

Por fim, agradeço ao CNPQ pelo apoio financeiro concedido durante o mestrado.

## RESUMO

Nos últimos anos, tem-se verificado um crescente interesse em fontes alternativas limpas de combustíveis e na utilização das fontes de energia renováveis. Esse é o caso do processo de etanol celulósico que pode ser produzido a partir de resíduos da produção agrícola e madeiras entre outros tipos de biomassa. No Brasil, esse processo poderia aumentar a produção de etanol na indústria de cana-de-açúcar. No entanto, os processos de fermentação têm uma dificuldade inerente em medições em tempo real como etanol e concentrações de açúcares. A forma convencional de quantificá-los requer grandes quantidades de recursos, levando a diminuição na produtividade e rendimento no processo. Além disso, a falta de informação de variáveis do processo em tempo real limita a implementação de estratégias de controle avançado. Desta forma, este trabalho propõe uma abordagem alternativa, através de predições on-line por um sensor virtual baseado em rede neural artificial aplicado a um processo de fermentação contínua, com 4 fermentadores em série, de etanol de segunda geração. Neste estudo, foi determinada a concentração de etanol no quarto reator do processo usando as temperaturas no fermentadores 1 a 4 e o fluxo de massa de açúcares, provenientes da hidrólise enzimática, que entram no primeiro fermentador. Além disso, um controlador preditivo baseado em modelo neural foi implementado no processo em conjunto com o *soft-sensor* com a finalidade de comparar com formas convencionais de controle como PID. Os resultados mostraram que a técnica de sensores virtuais é uma solução factível com potencial de ser aplicada em processos industriais, apresentando um baixo erro acumulado entre a saída do processo fenomenológico e do estimado pelo *soft-sensor*, mesmo quando submetido a perturbações randômicas na vazão de alimentação de substrato durante 5000 horas de simulação. O controle MPC aplicado ao processo demonstrou uma oscilação reduzida e um tempo de acomodação significativamente menor se comparado com o controle PID quando submetidos a perturbações degrau.

**Palavras-chave:** controle de processos, controle avançado, etanol celulósico, sensor virtual.

## ABSTRACT

In the last years, it has been an increasing interest in clean alternative sources of fuels and the use of the renewable sources of energy. That is the case of the cellulosic ethanol process that could produce of waste of crops, woods or another kind of biomass. In Brazil, this process could increase the production of ethanol in the sugarcane industry. However, the fermentation processes have an inherent difficult in real time measurements as ethanol and sugar concentrations; the conventional way to measure these variables requires large amounts of resources and time making a significant delay in the process operational decisions decreasing the productivity and yield on the process. Additionally, this problem limits the implementation of advanced control strategies. In this way, this work proposes an alternative approach, basen on for on-line measurements, by a virtual sensor based on artificial neural network applied to a continuous fermentation process of the second generation. In this case study, it was determined the ethanol concentration in the fourth process fermentor, the last one, using the temperatures at the fermentor 1 to 4 and the mass flow of sugars that get into the first fermentor. In addition, a predictive controller based on neural model was implemented in the process together with the soft-sensor in order to compare with conventional control forms such as PID. The results showed that the technique of virtual sensors is a feasible solution with potential to be applied in industrial processes, presenting a low accumulated error between the phenomenological process and the estimated by the soft sensor, even when subjected to random perturbations in the flow of Substrate feed for 5000 hours of simulation. The MPC control applied to the process showed a reduced oscillation and a significantly shorter accommodation time when compared to the PID control when subjected to step disturbances.

**Keywords:** process control, advanced control, Cellulosic ethanol, software sensor.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Controle preditivo. Fonte: CAMACHO e BORDONS, 2012. ....	16
Figura 2: Estrutura de um controlador preditivo baseado em modelo. ....	17
Figura 3: Estrutura de um controlador preditivo baseado em modelo neural auto ajustável. .....	18
Figura 4: Estrutura de um neurônio artificial. Fonte: AGATONOVIC-KUSTRIN e BERESFORD, 2000. ....	21
Figura 5: Rede Feedforward. Fonte: AGATONOVIC-KUSTRIN e BERESFORD, 2000. ....	23
Figura 6: Rede Feedback. Fonte: AGATONOVIC-KUSTRIN e BERESFORD, 2000. ....	23
Figura 8: Processo de fermentação contínua com reciclo de células. ....	29
Figura 9: Reator processo de fermentação contínua. ....	32
Figura 10: Configuração da rede utilizada no sistema sensor. ....	33
Figura 11: Configuração da rede utilizada no modelo de predição. ....	36
Figura 12: Perturbação de +20% vazão alimentação $F_o$ .....	38
Figura 13: Perturbação de -20% vazão alimentação $F_o$ .....	38
Figura 14: Comparação entre as respostas dos reatores 3 e 4 mediante três perturbações degraus em $F_o$ a cada 10 horas na vazão de alimentação. ....	39
Figura 15: Perturbação de +10% na vazão de alimentação $F_o$ e de fluido refrigerante $F_{j1}$ .....	40
Figura 16: Perturbação de -10% na vazão de alimentação $F_o$ e de fluido refrigerante $F_{j1}$	41
Figura 17: Comparação entre as dinâmicas de duas fermentações com diferentes matérias primas. ....	42
Figura 18: SSE de teste para diferentes números de neurônios na camada intermediária. .....	43
Figura 19: Comparação entre a resposta do sensor virtual e a resposta da simulação fenomenológica para valores randômicos de $F_o$ a cada 50 horas (primeira simulação). ..	43
Figura 20: Erro entre a resposta do sensor virtual e a simulação fenomenológica (primeira simulação). ....	44
Figura 21: Comparação entre a resposta do sensor virtual e a resposta da simulação fenomenológica para valores randômicos de $F_o$ a cada 50 horas (segunda simulação). ..	44
Figura 22: Erro entre a resposta do sensor virtual e a simulação fenomenológica (segunda simulação). ....	45

# SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO 1</b> .....	<b>11</b>
<b>1. Introdução</b> .....	<b>11</b>
1.1 Relevância do trabalho.....	11
1.2 Objetivos .....	13
<b>CAPÍTULO 2</b> .....	<b>14</b>
<b>2. Revisão da literatura</b> .....	<b>14</b>
2.1 Controle Proporcional-Integral-Derivativo (PID) .....	14
2.2 Controle Preditivo Baseado em Modelo (MPC) .....	15
2.2.1 Contexto histórico .....	18
2.2.2 Controle Preditivo Baseado em Modelo não Linear (NMPC).....	19
2.3 Redes Neurais Artificiais (RNA).....	21
2.3.1 Rede Feedforward .....	22
2.3.2 Rede Feedback .....	23
2.3.3 Treinamento .....	24
2.3.4 Aplicações .....	24
2.4 Fermentação Contínua .....	25
<b>CAPÍTULO 3</b> .....	<b>28</b>
<b>3. Metodologia</b> .....	<b>28</b>
3.1. Processo .....	28
3.2. Simulação do Processo .....	29
3.3.1 Determinação de parâmetros.....	29
3.3.2 Modelo matemático do processo contínuo.....	30
3.3 Controle.....	32
3.3.1 Análise dinâmica do processo.....	33
3.3.2 Modelo neural para o sensor virtual .....	33
(Tabela 2). .....	33
Dados de entrada .....	34
Fo, T1, T2, T3, T4.....	34
Dados de referência.....	34
Concentração de etanol (P4) .....	34
Tempo de Simulação .....	34
5000 horas.....	34
Tempo de treino.....	34
4500 horas.....	34
Tempo de teste .....	34
500 horas .....	34

Função objetivo.....	34
Soma dos Quadrados dos Erros (SSE) .....	34
Função de ativação .....	34
Tangente hiperbólica.....	34
3.3.3 Controle PID .....	34
Tabela 4: Método de Ziegler-Nichols para ajuste do controle PID.....	35
3.3.4 Controle preditivo com modelo neural.....	35
Dados de entrada .....	36
Fo(k), P4(k).....	36
Dados de referência .....	36
P4(k+1).....	36
Tempo de Simulação .....	36
5000 horas.....	36
Tempo de Treino .....	36
4500 horas.....	36
Tempo de teste .....	36
500 horas .....	36
Função objetivo.....	36
SSE.....	36
Função de ativação .....	36
Tangente hiperbólica.....	36
<b>CAPÍTULO 4.....</b>	<b>38</b>
<b>4. Resultados.....</b>	<b>38</b>
4.1 Análise dinâmica do processo em malha aberta .....	38
4.1.1 Influência de diferentes tratamentos da matéria prima na dinâmica do processo.....	41
4.2 Soft-Sensor .....	42
4.3 Controle.....	45
<b>5. Conclusões.....</b>	<b>50</b>
<b>6. Sugestões de trabalhos futuros .....</b>	<b>51</b>

# CAPÍTULO 1

## 1. Introdução

### 1.1 Relevância do trabalho

Nas últimas décadas, a produção e o consumo mundial de biocombustíveis expandiram significativamente, alavancados pelas políticas de redução das emissões de gases com efeito de estufa e pela diminuição gradual das reservas de combustíveis fósseis (LAMERS et al., 2011). Vários países estão cada vez mais buscando usar recursos renováveis para substituir fontes de energia. O Brasil, em 2015, produziu aproximadamente 27 milhões de litros de etanol, ficando em segundo lugar no cenário mundial, atrás apenas dos Estados Unidos. Entre 2005 e 2015 a produção de etanol no mundo quase quadruplicou e indicadores já mostraram uma tendência de crescimento no setor (F. LICHTS, 2010), que se confirmou.

A produção de etanol no Brasil é feita principalmente da cana-de-açúcar. No processo produtivo, o excedente de bagaço de cana-de-açúcar rico em celulose, pode ser usado para a produção de biocombustíveis de segunda geração através da decomposição de celulose em açúcares fermentáveis. A implementação deste processo numa unidade de produção aumentaria o rendimento de etanol em 50% por hectare sem concorrência com a agricultura alimentar (PHILLIPS, 2016). Hoje, a tecnologia do etanol celulósico está recebendo muita atenção de centros de pesquisa e profissionais da área, o que já tinha sido observado à quase uma década atrás (SMITH, 2008), onde se busca o desenvolvimento de uma rota de processamento eficiente para que se torne um investimento viável.

Uma das principais dificuldades no processo de fermentação, que impactam na produtividade e no desempenho de todo o processo, é a medição confiável das variáveis do processo em tempo real com foco no monitoramento de variáveis analíticas, problema já detectado desde o início dos anos 90 (THIBAUT et al., 1990), e a implementação de estratégias de controle avançadas como o

Controle Preditivo Baseado em Modelo MPC (Model Predictive Control) (HATANAKA,2009) (LEE, J. H., 2011) (SANCHEZ,2013). A dinâmica altamente não-linear e as variáveis de difícil medição dos processos biológicos tornam a implementação de um controle eficiente uma tarefa difícil (JOHNSONF, 1987) (PETERSEN; JORGENSEN, 2014). Nos últimos anos diversas estratégias de controle vêm apresentando um impacto positivo no processos industriais, tais como o controle preditivo baseado em modelo de redes neurais artificiais e lógica Fuzzy: Lao et al. (2014) que desenvolveu um controle preditivo baseado em modelo econômico para um processo com reações de transporte; Tipiti (2015) que estudou a aplicação de um controle preditivo que permite a sua reconfiguração em uma possível mudança na sua topologia.

Os Sensores virtuais ou *soft-sensors* têm sido assunto de muitas pesquisas para o seu desenvolvimento, cujas variáveis disponíveis são utilizadas para estimar os parâmetros do processo (KURTANJEK,1998). No processo de fermentação, por exemplo, podem ser utilizadas variáveis mais fáceis de medir tais como a temperatura e a vazão de alimentação para estimar variáveis mais difíceis de medir tais como a concentração de glicose e etanol na saída do processo. Redes neurais podem ser utilizadas para este propósito. DE ASSIS (2000) estudou a aplicação de soft-sensors a partir de redes neurais artificiais para a estimativa on-line do estado de processo de biorreatores. RIVERA (2006) estudou diferentes modelos determinísticos para a caracterização, monitoramento e otimização do processo de fermentação contínua.

As redes neurais artificiais são inspiradas em redes neurais biológicas e são usadas para fins de engenharia, como estimativa de parâmetros e predição (GUPTA, 2013). Eles oferecem uma capacidade de aprender relações complexas sem exigir o conhecimento do modelo fenomenológico ou cinético (KURTANJEK,1998). A confiabilidade de uma RNA está diretamente associada a dados de treinamento, e se houver incerteza e ruído, a reprodução da rede não será precisa (THIBAULT, 1990) de modo que tanto as variáveis de entrada como as variáveis de saída devem reproduzir corretamente o sistema real com menor incerteza possível.

Neste trabalho foi utilizada uma planta industrial de cana-de-açúcar que é composta por 4 fermentadores do tipo CSTR operando com reciclo de células, esquema proposto por (ANDRIETA, 1994). Neste trabalho são utilizados novos parâmetros cinéticos que representam um processo de segunda geração, onde no mosto foi utilizada uma mistura de melaço de cana-de-açúcar com hidrolisado enzimático para a obtenção das constantes cinéticas que representam o processo fermentativo, metodologia apresentada por HERRERA (2016). Neste contexto, este trabalho propõe implantar um *soft-sensor* para um processo de fermentação contínua, a fim de analisar suas vantagens sobre os métodos convencionais de medição em ambiente industrial. Além disso, esta pesquisa visa a implementação de um sistema de controle adaptativo preditivo baseado modelo de redes neurais artificiais (ANNMPC) para um processo de única variável de entrada e única variável de saída (SISO) com o objetivo de melhorar a dinâmica e o desempenho do processo, evitando assim eventuais perdas de especificação do produto.

## 1.2 Objetivos

Este trabalho de pesquisa tem como objetivo o desenvolvimento de um sensor virtual para uma configuração de fermentação industrial usando uma cinética que representa um processo de 2ª geração para produção de etanol e posterior implementação de um controlador preditivo e sua comparação com controlador convencional do tipo PID. O estudo do comportamento dinâmico do processo fermentativo é necessário para propor estratégias de controle e realizar as implementações e análises de desempenho dos controladores. O desenvolvimento do trabalho contempla a realização das seguintes etapas:

- Análise e implementação do modelo matemático do processo fermentativo.
- Tratamento dos dados experimentais.
- Implementação e validação do sensor virtual e avaliação de sua aplicabilidade.
- Aplicação do controle preditivo baseado em modelo (MPC).
- Análise da estratégia de controle proposta frente ao controle convencional PID.

# CAPÍTULO 2

## 2. Revisão da literatura

### 2.1 Controle Proporcional-Integral-Derivativo (PID)

Definindo  $P(t)$  como o sinal de saída, o controle PID pode ser expresso como:

$$P(t) = K_p e(t) + K_i \int_0^t e(\tau) d\tau + K_d \frac{d(e(t))}{dt} \quad (1)$$

onde  $K_p$  é o ganho proporcional,  $K_i$  o ganho integral e  $K_d$  o derivativo;  $e$  o erro entre o estado do processo no instante  $t$  e o *set-point*;  $\tau$  é o tempo de integração.

A ação proporcional produz um sinal de saída que é proporcional à amplitude do erro  $e(t)$ , sendo  $K_p$  a constante de proporcionalidade. Comparado com a ação liga-desliga, esse método possui a vantagem de eliminar as oscilações do sinal de saída. Para tal, o sistema permanece sempre ligado e o sinal de saída é diferente de zero. Tendo em vista que o sinal de saída é proporcional ao erro, um erro não nulo (conhecido por erro de *off-set*) é gerado. O valor do erro *off-set* é inversamente proporcional ao ganho e pode ser compensado adicionando-se um termo ao valor de referência ou pelo controle integral. Um ganho proporcional muito alto gera um alto sinal de saída, o que pode desestabilizar o sistema. Porém, se o ganho proporcional é muito baixo, o sistema falha em aplicar a ação necessária para corrigir a distúrbios (VISIOLI 2016).

A ação integral produz um sinal de saída que é proporcional à magnitude e à duração do erro, ou seja, ao erro acumulado. Isso fornece uma alternativa para corrigir o erro de *off-set* gerado pela ação integral e acelera a resposta do sistema, permitindo-o chegar ao valor de referência mais rapidamente. A ação integral corrige o valor da variável manipulada em intervalos regulares, chamado tempo integral. Esse tempo integral é definido como o inverso do ganho integral. Se o ganho integral é baixo, o sistema pode levar muito tempo para atingir o valor

de referência. No entanto, se o ganho integral for muito alto, o sistema pode tornar-se instável.

A ação derivativa produz um sinal de saída que é proporcional à velocidade de variação do erro. A ação derivativa fornece uma correção antecipada do erro, diminuindo o tempo de resposta e melhorando a estabilidade do sistema. A ação derivativa atua em intervalos regulares, o chamado tempo derivativo. Esse parâmetro é inversamente proporcional à velocidade de variação da variável controlada. Isso indica que a ação derivativa não deve ser utilizada em processos nos quais o sistema deve responder rapidamente a uma perturbação, nem em processos que apresentem muito ruído no sinal de medido, pois levaria o processo à instabilidade (VISIOLI 2016).

## **2.2 Controle Preditivo Baseado em Modelo (MPC)**

O controle preditivo baseado em modelo refere-se à classe de algoritmo de controle que utiliza um modelo do processo que prediz a resposta futura da planta. A cada intervalo o algoritmo tenta aperfeiçoar comportamento futuro da planta pelo cálculo de uma sequência de ajustes futuros na variável manipulada. A primeira entrada na sequência ótima é então enviada à planta e todo cálculo é repetido no intervalo seguinte, caracterizando o comportamento *feedback* ou retroalimentação, característico do algoritmo MPC. Inicialmente desenvolvida para atender às necessidades de controle em refinaria de petróleo, a tecnologia MPC pode agora ser encontrada em diversas áreas de aplicações incluindo processamento de alimentos, indústria automotiva e tecnologia aeroespacial (QIN; BADGWELL, 2003) (AFRAM, 2014).

O controle preditivo baseado em modelo apresenta algumas vantagens frente a outros tipos de métodos, dos quais podem ser citados:

- É atrativo ao operador com conhecimento limitado de controle, pois o conceito da sua sintonia é relativamente intuitivo.
- Pode ser usado para o controle de diversos tipos de processos, desde os processos mais simples até os com dinâmica complexa, incluindo sistemas com instabilidade ou com alto tempo de atraso.

- É especialmente útil quando aplicado à sistemas onde as referências desejadas são bem conhecidas como em robótica ou processos em batelada.
- Responde bem a processos com múltiplas entradas e saídas.

A metodologia de todos os controladores pertencentes à família MPC é caracterizada pela estratégia apresentada na Figura 1:

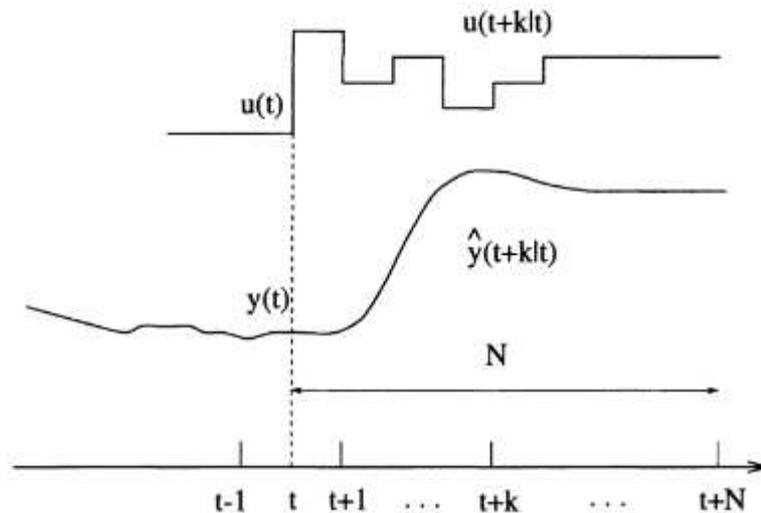


Figura 1: Controle preditivo. Fonte: CAMACHO e BORDONS, 2012.

O horizonte de predição são as saídas futuras  $y(t+k)$  do processo em um tempo futuro  $N$  dividido em  $k$  intervalos, tais saídas são estimadas a cada instante  $t$  tendo como base o modelo do processo e dependem dos valores conhecidos das entradas e saídas no instante  $t$  e dos sinais futuros de controle  $u(t+k)$ . O conjunto de futuros sinais de controle é calculado pela otimização de um determinado critério de forma a manter o processo tão próximo quanto possível da trajetória de referência. O sinal de controle escolhido no processo de otimização no instante atual  $t$  é então enviado ao processo para executar sua ação, enquanto os outros sinais do controlador para  $t+1, \dots, t+N$  não serão utilizados, pois têm-se novos valores de entradas e saídas, começando assim toda a operação novamente com novos valores.

Sendo assim, o sinal de entrada do controlador será diferente a cada instante de tempo, devida à mudança nos valores atuais, obedecendo assim o

conceito de horizonte de reenvio. A Figura 2 ilustra a estrutura básica de um MPC:

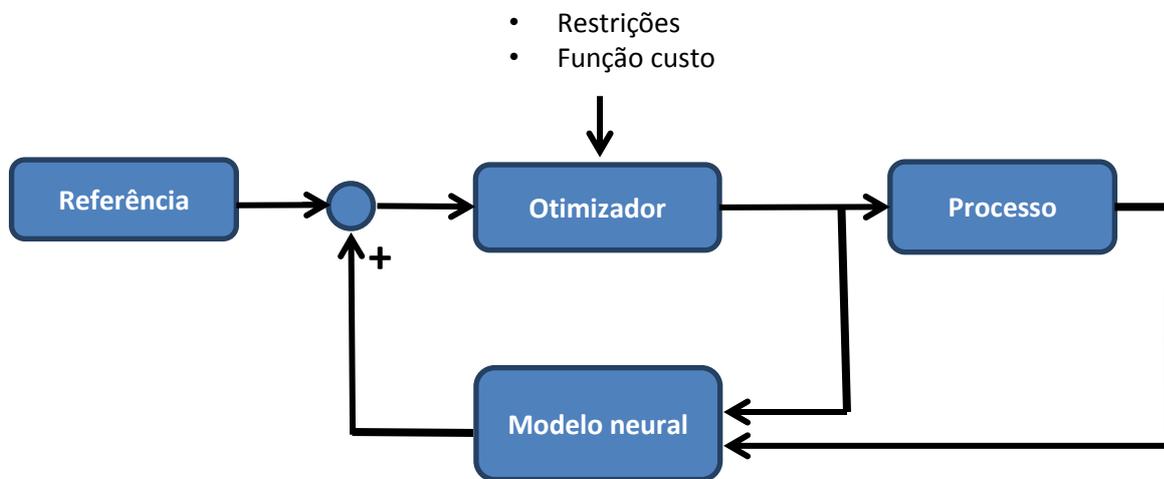


Figura 2: Estrutura de um controlador preditivo baseado em modelo.

Como o modelo de previsão utilizado influencia diretamente na resposta de controle, faz-se necessária um modelo que represente de forma acurada as modificações na variável de entrada do processo.

Apesar da sua eficiência, o modelo neural não apresenta resultados precisos quando se tem mudança na cinética da reação (NAGY, 2007). Para aumentar a robustez do controlador, pode-se acrescentar uma rotina de treinamento *on-line*, onde enquanto um modelo neural está em operação, o outro está sendo treinado em paralelo. Ao se verificar que o modelo atual não mais está com a precisão adequada, este será substituído pelo novo, começando assim um novo treinamento de uma nova rede (Figura 3).

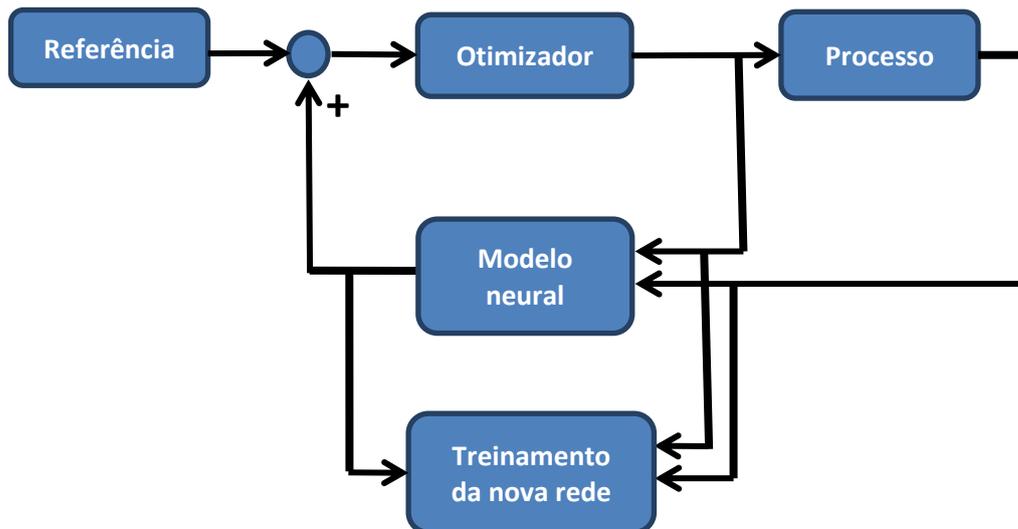


Figura 3: Estrutura de um controlador preditivo baseado em modelo neural auto ajustável.

### 2.2.1 Contexto histórico

O corrente interesse da indústria de processamento no MPC pode ser justificado por um conjunto de artigos científicos publicados nos anos oitenta. Em RICHLET. *et al.* (1978) são descritas aplicações bem sucedidas do Controle Heurístico Preditivo baseado em modelo e em 1979 Charlie Cutler desenvolveu o Controle baseado em Matriz Dinâmica (DMC) e relatou algumas aplicações para um processo de craqueamento catalítico (Cutler, 1979). Em ambos os algoritmos um modelo explícito é utilizado para prever os efeitos de ações futuras das variáveis manipuladas sobre a saída. Os movimentos futuros da variável manipulada são determinados por otimização, tendo como funções objetivo a minimização do erro predito; tais movimentos podem estar sujeitos a limites operacionais. Motivados por essas publicações e a relativa baixa dificuldade de implementação, o uso do controle baseado em modelo se difundiu rapidamente nas refinarias e plantas petroquímicas.

Durante os anos 80, pesquisadores começaram a perceber que o emprego de um modelo estado-espaco poderia ser benéfico de para sistemas integrados se comparados com as, até então utilizadas, dados de resposta em etapas. Então, pesquisas sobre MPC começaram a adotar um padrão para a formulação da literatura, conforme sintetizado a seguir.

Considere o seguinte sistema estado-espaco para sistemas lineares:

$$x(i + 1) = Ax(i) + Bu(i) \quad (2)$$

A cada tempo de amostragem, a entrada do controlador é determinada pela solução da seguinte otimização com estado inicial  $x_0$  igual ao valor de estado medido:

$$\min \sum_{i=0}^{p-1} \left[ x'^T(i)Qx(i) + u'^T(i)Ru(i) \right] + x'^T(p)Q_p x'(p) \quad (3)$$

Com as restrições:

$$x(i + 1) = Ax(i) + Bu(i), \quad x(0) = x_0 \quad (4)$$

e  $i = 0, \dots, p-1$

onde  $x$  e  $u'$  representam o estado predito e a entrada calculada e  $x$  e  $u$  representam o estado atual e a entrada implementada respectivamente.

Muitos resultados relatados nesta época mostraram a resposta em relação à estabilidade dos MPC's, entretanto, estes resultados eram de certa forma fragmentados e faltava um ou outro componente chave para o MPC: Eles eram desenvolvidos sobre suposições em diferentes contextos, com ou sem restrições, linear ou não linear, variante com o tempo ou não. Durante os anos 90 estes resultados foram unificados em uma definição clara de um algoritmo MPC. As formulações estudadas na literatura tornaram-se mais padronizadas e as propriedades matemáticas como estabilidade foram bem estabelecidas (GARRIGA; SOROUGH, 2010).

### 2.2.2 Controle Preditivo Baseado em Modelo não Linear (NMPC)

O NMPC destaca-se pelo fato de que grande parte dos processos na natureza acontecerem de forma não linear. Comparado com o MPC linear, onde os problemas são solucionados a cada tempo de amostragem, o MPC não linear necessita de um critério de convergência previamente especificado, o que pode levar a atrasos na realimentação, além disso, o processo iterativo pode parar antes de se atingir uma solução satisfatória ao se chegar a um tempo

computacional previamente especificado. Felizmente grandes avanços têm sido feitos das últimas décadas no sentido de reduzir os atrasos computacionais e os erros de aproximação, como foi observado por (ZAVALA; BIEGLER, 2009) que descreve soluções do tipo Newton para soluções *online* de problemas de controle preditivo baseado em modelo não linear.

Para descrever de forma geral um sistema não linear, considera-se um sistema contínuo qualquer. O vetor de estado é dado por  $x_t$  e o vetor da entrada do controlador é dado por  $u_t$ . A equação de estado e suas restrições são dadas por:

$$x'_t = f(x_t, u_t), \quad C(x_t, u_t) = 0 \quad (5)$$

O problema de NMPC é solucionado, assim como o MPC, a cada instante de tempo  $t$  para minimizar o indicador de desempenho com o estado inicial dado pelo valor atual de  $x_t$ .

$$F = W(x_{t+N}) + \int_t^{t+T} L(x_{t'}, u_{t'}) dt' \quad (6)$$

De um valor atual de  $t$  para um futuro finito  $t + N$ , têm-se o horizonte definido por  $[t, t + N]$ . O controle ótimo  $u^*(t'; t, x_t)$  minimizando  $F$  é calculado sobre um valor de  $t'$  que pertence ao intervalo  $[t, t + N]$  e apenas o seu valor inicial em  $u^*(t; t, x_t)$  é usado como uma entrada atual no sistema de controle  $u_t$ . Essencialmente, o problema de NMPC é composto para o um conjunto de problemas de controle ótimo sobre horizonte finito ao longo de um tempo fictício  $T$ :

$$\min F = W(x_{t+N}) + \int_t^{t+T} L(x_{t'}, u_{t'}) dt' \quad (7)$$

Sujeito às restrições:

$$x^*_T(T, t) = f(x^*(T, t), u^*(T, t)), \quad x^*(0, t) = x(t) \quad (8)$$

$$C(x^*(T, t), u^*(T, t)) = 0$$

O novo vetor de estado  $x^*(T, t)$  representa a trajetória ao longo do eixo  $T$  partindo de  $x_t$  à  $T = 0$ . A entrada ótima de Controle  $u^*(T, t)$  é determinada sobre o eixo  $T$  como a solução do problema de controle ótimo é horizonte finito para cada instante de tempo  $t$  e entrada de controle atual é uma função das entradas ótimas de controle quando  $T = 0, u_t = u^*(0, t)$ . OHTSUKAOZAKI (2009) destacam alguns algoritmos para a solução do problema de NMPC descrito acima para processos em tempo real.

### 2.3 Redes Neurais Artificiais (RNA)

O controle preditivo baseado em modelo é, a quase 10 anos, uma ferramenta fundamental em boa parte das refinarias ao redor do mundo e sua aplicação continua crescendo do meio industrial (HATANAKA 2009). Entretanto, o modelo de previsão, que é fundamental para a execução deste tipo de controle, não é fácil de ser obtido. As redes neurais artificiais se apresentam como uma ferramenta útil para a aplicação rápida em sistemas complexos através da implementação heurística de um sistema que apenas necessita de dados experimentais para a sua execução.

As RNA's são modelos computacionais com o objetivo de reproduzir a forma que o cérebro humano processa informações e são treinadas para aprender a reproduzir informações através de exemplares pré-existent (AGATONOVIC-KUSTRIN; BERESFORD, 2000), conforme esquematizado na Figura 4.

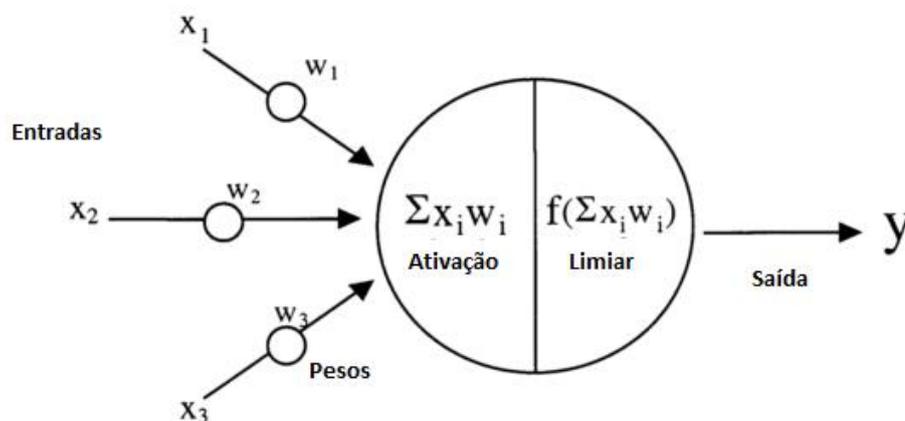


Figura 4: Estrutura de um neurônio artificial. Fonte: AGATONOVIC-KUSTRIN e BERESFORD, 2000.

As redes neurais artificiais são compostas basicamente de elementos de cálculos chamados neurônios que interagem localmente através de conexões e é dividida em três camadas: camada de entrada, camada intermediária e camada de saída. A arquitetura destes modelos é determinada pela topologia da rede, pelo algoritmo de aprendizagem e pelas características destes neurônios. Os elementos de cálculo são processadores que são compostos por uma função que possui  $n$  entradas e apenas uma saída. Cada neurônio necessita de uma regra que indica a influência em cada entrada  $x$  na sua saída  $y$ ; tais regras são chamadas de pesos  $w$  e podem se definidos como a memória de aprendizado da rede.

Os neurônios necessitam de uma função de saída que mapeia o estado corrente de ativação para um sinal de saída. A função de saída utilizada é uma função limiar na qual só existirá sinal de saída apenas se for atingido um valor mínimo para esta função (HOSKINS; HIMMELBLAU, 1988). Então, mesmo com a função de ativação receber sinais de entrada, este sinal precisa ser maior que um mínimo estipulado na função limiar. Dentre os vários tipos de arquitetura de rede, destacam-se:

### *2.3.1 Rede Feedforward*

Usualmente, o algoritmo de treino para este tipo de rede envolve o erro da saída de rede com a saída desejada conhecida. O treinamento ocorre apenas em um único sentido (Figura 5). Isto é, a saída de cada camada se relaciona, exclusivamente, com a camada subsequente e nunca com a cama anterior, por isso o nome retroalimentação (DE CASTRO et al., 2001).

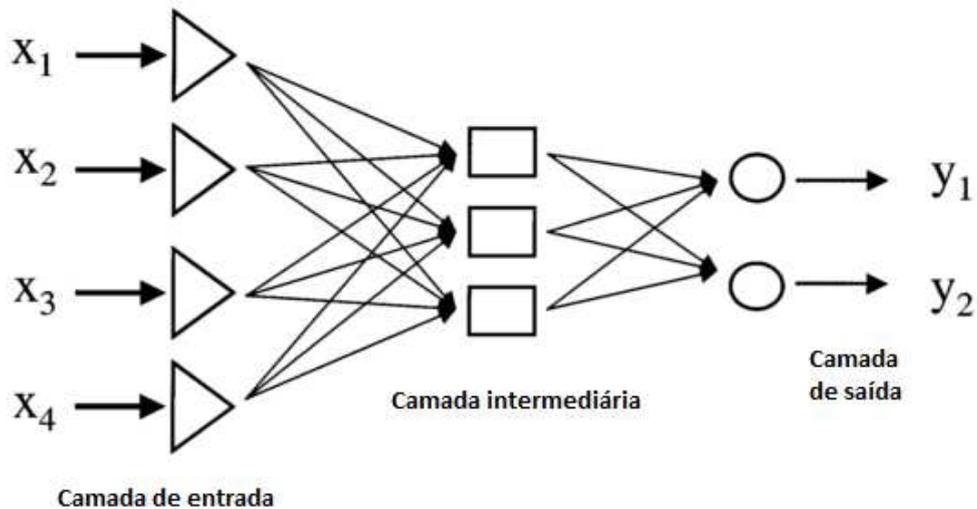


Figura 5: Rede Feedforward. Fonte: AGATONOVIC-KUSTRIN e BERESFORD, 2000.

### 2.3.2 Rede Feedback

Diferente da rede *Feedforward*, a arquitetura *Feedback* permite a comunicação entre a saída e entrada na mesma camada, cada neurônio tem um peso adicional como entrada que irá permitir um grau de liberdade adicional quando o erro de treinamento for minimizado (AGATONOVIC-KUSTRIN; BERESFORD, 2000). A vantagem aqui é que, quando a rede for treinada ela não dependerá apenas dos dados de entrada, mas também do estado anterior da rede.

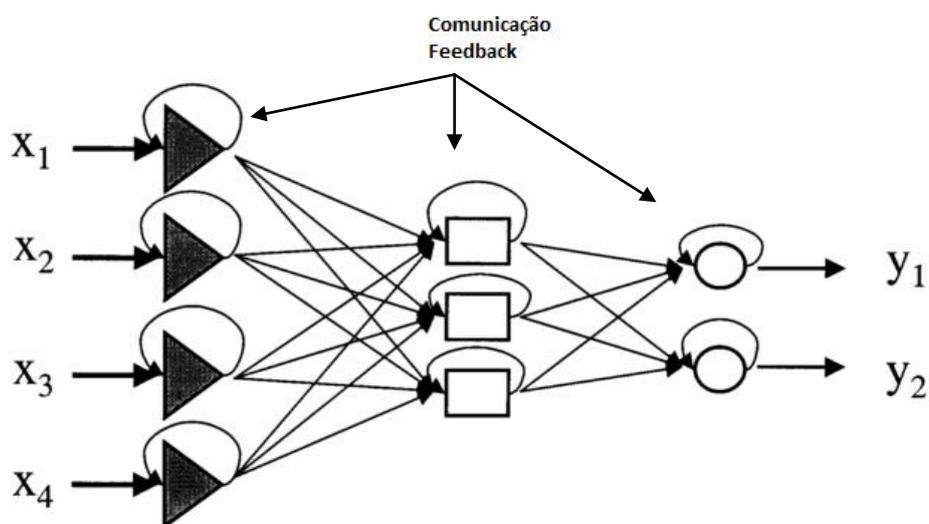


Figura 6: Rede Feedback. Fonte: AGATONOVIC-KUSTRIN e BERESFORD, 2000.

### 2.3.3 Treinamento

As Redes Neurais Artificiais são treinadas usando aprendizagem supervisionada, com um conjunto de treinamento de entradas  $p$  e alvos  $t$ . A função objetivo é minimizar a soma dos erros quadráticos (SSE):

$$F = E = \sum_{i=1}^n (t_i - r_i)^2 \quad (9)$$

onde está a resposta de ANN, o algoritmo de Levenberg-Marquardt atualiza o peso devido a minimizar o SSE para os dados de treinamento. Além do SSE, o erro Mean-Squared também pode ser usado como um critério de desempenho, o que evita a soma cumulativa de erros para um grande conjunto de dados pela divisão para o número de amostras:

$$F = E = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (t_i - r_i)^2 \quad (10)$$

A Regularização Bayesiana pode ser adicionada à função objetivo:

$$F = \alpha E + \beta W \quad (11)$$

$W$  representa a soma dos quadrados dos pesos da rede. Com um valor elevado de  $\beta$ , a rede tende a minimizar o valor dos pesos, resultando numa resposta mais suave. Se  $\alpha$  é alta, então a resposta de rede tende a minimizar o erro [20] e sem penalização de tamanho do peso  $\beta$  o treinamento pode gerar uma rede com uma resposta com sobre-ajuste indesejável.

### 2.3.4 Aplicações

As redes neurais artificiais vêm desempenhando um importante papel na caracterização, simulação e controle de processos. Seu principal atrativo é a possibilidade de reproduzir sistemas de alta complexidade apenas com a utilização de dados experimentais e sem a necessidade do conhecimento fenomenológico do sistema. Além disso, RNA's também tem sua aplicabilidade bem-sucedida em áreas como: Controle de tráfego aéreo, previsão do tempo, reconhecimento de voz, entre outros (RAZBANI; ASSADI, 2014).

## 2.4 Fermentação Contínua

Apesar da fermentação em batelada alimentada ainda ser muito utilizada, quando se tem a necessidade de uma maior produtividade com a redução de matéria prima a operação em regime contínuo faz-se necessária (HENSON; SEBORG, 1992). Neste tipo fermentação contínuo inicia-se em regime batelada até que o crescimento exponencial é atingido, então alimenta-se o substrato e a taxa de retirada do produto é igual à de entrada de matéria prima, mantendo assim o volume constante no reator. A fermentação contínuo aumenta significativamente o rendimento dos processos fermentativos, entretanto, para evitar a inibição de células, o regime contínuo em multi-estágio é aplicado (MARIANO; EZEJI; QURESHI, 2015).

Dois tipos básicos de reatores contínuos podem ser empregados: o reator contínuo de mistura perfeita (CSTR) e o reator de fluxo tubular (PFR). Em um CSTR ideal, a composição no reator é homogênea e idêntica ao fluxo de saída. Já em um PFR ideal, os reagentes são transportados ao longo da extensão do reator (tubo) com velocidade uniforme onde a concentração de produto é diferente ao longo do reator. Conseqüentemente, a operação em PFR implica na alimentação constante de inóculo para processos fermentativos. Vários CSTR em série apresentam um comportamento similar ao PFR (BRETHAUER; WYMAN, 2010).

No Brasil, a produção de etanol é feita principalmente de cana-de-açúcar, onde tanto o seu caldo como o melaço possuem minerais e nutrientes suficientes para a fermentação por *Saccharomyces cerevisiae* em etanol. No Brasil, entre 70 e 80% das destilarias utilizam o processo de batelada alimentada com fermentadores com capacidade de produção de 400 a 2000 m<sup>3</sup>/dia (GODOY *et al.*, 2008). Entretanto, o potencial de melhoria no rendimento do processo, reduzindo o consumo de matéria prima e minimizando o custo operacional vem com a aplicação do processo contínuo. Uma importante característica dos processos contínuos no estado da arte é a utilização de múltiplos estágios (BRETHAUER; WYMAN, 2010). O substrato contendo açúcar é alimentado no topo do primeiro reator juntamente com o reciclo de células. Cada reator possui, tipicamente, um trocador de calor individual para o resfriamento do meio reacional. As células produzidas são separadas do vinho por um processo de

centrifugação, formando um creme de leveduras, o qual é enviado para o tratamento ácido para ser reciclado ao primeiro fermentador (ZANIN *et al.*, 2000).

Devido à complexidade inerente destes processos e da necessidade de manter o estado estacionário no processo contínuo, diversos estudos nos últimos anos reportaram técnicas de controle para este tipo de operação. (NAGY, 2007) desenvolveu um modelo de um biorreator utilizando redes neurais artificiais para a aplicação de um controle preditivo baseado em modelo (MPC) e o comparou com o controle PID bem como o controle preditivo baseado em modelo linear (LMPC), destacando a vantagem de utilizar redes neurais pelo fato de dispensar modelos analíticos do processo. (ACEVES-LARA; LATRILLE; STEYER, 2010) aplicaram o MPC a um processo de digestão anaeróbica anaeróbia contínua. RAHMAN, SPURGEON e YAN (2011) fizeram uma estimativa e controle de parâmetros não lineares no processo de fermentação contínua. DUARTE (2007) desenvolveu uma estratégia de controle preditivo baseado em modelo neural com treinamento on-line e comparou com o controle por matriz dinâmica (DMC).

Etanol feio por fermentação fonte de biomassa é amplamente reconhecida como o único combustível de meios de transporte com potencial econômico e ambiental. O etanol de primeira geração, que utiliza milho, cana-de-açúcar ou beterraba tem sua produtividade bem estabelecida (Farrell *et al.*, 2006). Entretanto, essas matérias primas são insuficientes para a demanda crescente de etanol, além da competição com a produção de alimentos leva ao aumento dos preços destes. Como alternativa, o etanol pode ser produzido por materiais lignocelulósicos tais como resíduos da agricultura, madeira, papel e bagaço de cana-de-açúcar (BRETHAUER; WYMAN, 2010). Em geral, a composição lignocelulósica nessas fontes estão em torno de 13 a 39% de hemicelulose 36 a 61% de celulose e 6 a 29% de lignina (OLSSON, 1996). A celulose é um polímero formado por glicose, hemicelulose é composta por heteroplímeros lineares de pentoses e hexoses. Lignina é um polímero que consistem em três diferentes unidades de fenilpropano.

Com a finalidade de produzir açúcares fermentáveis, a celulose e a hemicelulose são hidrolisadas quimicamente, enzimaticamente, ou pela combinação das duas formas (BRETHAUER; WYMAN, 2010). A fermentação dos

açúcares pode ser feita em batelada, batelada alimentada ou contínua. O regime de processo a ser escolhido irá depender das propriedades cinéticas do micro-organismo e do fator econômico da operação (OLSSON, 1996). Os materiais lignocelulósicos podem ser hidrolisados quimicamente pela adição de ácido sulfúrico. Entretanto, com a necessidade de alto consumo de ácido e o alto custo energético envolvido na recuperação deste produto é elevada (BRETHAUER; WYMAN, 2010).

A obtenção de açúcares pode ser feita através de enzimas celulazes, entretanto, com o rendimento desta operação pode ser afetado pela concentração de glicose, é preferível um processamento combinando a hidrólise enzimática e a fermentação, mantendo assim a concentração de açúcares baixa e aumentando o rendimento da hidrólise (BRETHAUER; WYMAN, 2010).

A fermentação das hexoses derivadas da hidrólise enzimática geralmente não apresentam dificuldades já que a concentração de inibição é muito baixa elevada (BRETHAUER; WYMAN, 2010). Entretanto, comparado com a fermentação provenientes da cana de açúcar, a concentração de açúcares é muitas vezes baixa, em torno de 70 g/L. Esta baixa concentração de açúcares pode ser justificada pela dificuldade na alimentação de concentração de sólidos maior que 10% em massa para fermentadores e pela inibição de produto pela enzima celulase. Portanto, uma etapa de evaporação a vácuo pode ser necessária para se conseguir maiores concentrações (MAIORELLA *et al.*, 1984).

# CAPÍTULO 3

## 3. Metodologia

Este trabalho trata do estudo de um processo fermentativo a partir de açúcares provenientes do processo de segunda geração. Esta desenvolveu um sensor virtual (*Soft-Sensor*) para o um modelo de fermentação contínua previamente validado. Além disso, este trabalho propõe uma estratégia de controle preditivo baseado em modelo de redes neurais.

### 3.1. Processo

O processo a ser estudado é a fermentação contínua com quatro biorreatores em série. A simulação dinâmica do processo foi implementada em ambiente MATLAB e foi validada por experimentos, para o ajuste de parâmetros utilizou-se de algoritmos genéticos para obter o modelo do processo. Neste estudo, considerou-se uma mistura de açúcar proveniente da hidrólise da celulose do bagaço da cana de açúcar com o caldo de cana de açúcar. A conversão em etanol foi conduzida pela levedura *Sacharomyces cerevisiae*. Um conjunto de centrífugas divide o mosto fermentado em duas fases: a fase leve é enviada para a destilação e a fase pesada é submetida à tratamento ácido e diluída em água e reciclada para o primeiro fermentador. O sistema escolhido foi baseado em um esquema típico de fermentadores em escala industrial proposto por (ANDRIETA, 1994) (Fig. 7).

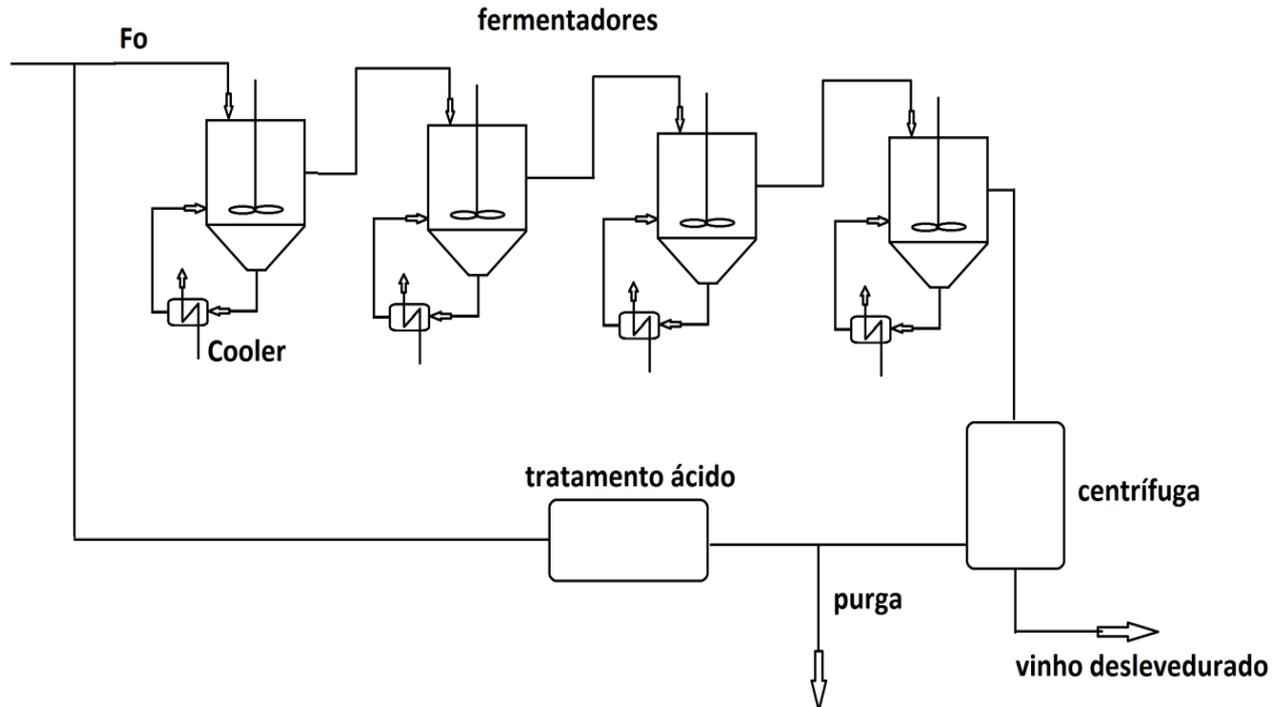


Figura 7: Processo de fermentação contínua com reciclo de células.

## 3.2. Simulação do Processo

### 3.3.1 Determinação de parâmetros

Para o modelo matemático, estudou-se o comportamento dinâmico do processo fermentativo com matéria-prima proveniente do processo de primeira e segunda geração. Considerou-se a cinética dependente da temperatura. O modelo considera também, a inibição do crescimento celular pela alta concentração de substrato e de produto para um reator em batelada:

$$r_x = u_{max} \frac{S}{K_s + S + \frac{S^2}{K_I}} \left(1 - \frac{P}{P_{max}}\right)^r \left(1 - \frac{X}{X_{max}}\right) X \quad (13)$$

$$r_s = \frac{r_x}{y_X/s} \quad (14)$$

$$r_p = \frac{r_x}{y_{X/P}} \quad (15)$$

onde  $r_x$ ,  $r_s$  e  $r_p$  representam a taxa de crescimento celular, a taxa de consumo de substrato e a produção de etanol respectivamente. Os parâmetros  $k_s$ ,  $u_{max}$ ,  $K_l$ ,  $P_{max}$ ,  $X_{max}$ ,  $r$  são estimados utilizando a equação 16 e os parâmetros  $y_{X/S}$  e  $y_{X/P}$  são representados pela equação 17 (HERRERA et al., 2016).

$$M(T) = e^A \cdot e^{BT} \cdot e^{\frac{C}{T}} \quad (16)$$

$$N(T) = e^D \cdot e^{ET^3} \cdot e^{F \cdot e^T} \quad (17)$$

A Tabela 1 mostra o resultado do ajuste dos parâmetros A, B, C, E e F, dependentes da temperatura, para cada um dos parâmetros do modelo:

Equação	Parâmetro	exp(A)	B	C	exp(D)	E	F
M	$\mu_{max}$	26.732	-0.4139	-454.437	-	-	-
M	$K_s$	42.500	-0.5291	-735.026	-	-	-
M	$K_l$	34.436	-0.4743	-468.766	-	-	-
M	$r$	3.2319	-0.0751	-29.331	-	-	-
M	$P_{max}$	25.089	-0.3136	-337.121	-	-	-
M	$X_{max}$	18.501	-0.1913	-257.809	-	-	-
N	$Y_{x/s}$	-	-	-	-2.71221	-1.5E-05	-8.09E-18
N	$Y_{x/p}$	-	-	-	-2.22914	-5.24E-06	-6.54E-17

Tabela 1: Parâmetros do modelo do processo fermentativo de segunda geração (HERRERA et al., 2016).

### 3.3.2 Modelo matemático do processo contínuo

Os volumes dos fermentadores  $V_1 = 210.374 \text{ m}^3$ ,  $V_2 = 268.037 \text{ m}^3$ ,  $V_3 = 316.663 \text{ m}^3$ ,  $V_4 = 208.208 \text{ m}^3$ , operando com uma taxa de reciclo de células de 0.3, uma concentração de substrato de  $180 \text{ Kg/m}^3$  com uma vazão de alimentação de  $100 \text{ m}^3/\text{h}$ . A temperatura de operação de cada reator foi de

33.5°C. A Tabela 2 mostra os valores das constantes referentes ao cálculo do balanço energético do processo.

Calor da reação	-157.57 Kcal/h
Densidade do fluido refrigerante	950 Kg/m <sup>3</sup>
Capacidade térmica do fluido refrigerante	1 cal/g.°C
Coeficiente global de troca térmica	3500 Kcal/h.°C.m <sup>2</sup>
Densidade do fluido refrigerante	1000 Kg/m <sup>3</sup>
Capacidade térmica do fluido refrigerante	1 cal/g.°C

Tabela 2: Constantes do balanço energético.

Para este modelo do processo, considerou-se a o balanço de massa e energia para cada um os quatro reatores contínuos, descritos abaixo:

- Balanço de massa e componente

$$\frac{dV_i}{dt} = F_{i-1} - F_i \quad (18)$$

$$\frac{d(V_i S_i)}{dt} = F_{i-1} S_{i-1} - F_i S_i + \frac{V_i X_i}{Y_{x/s}} u_i \quad (19)$$

$$\frac{d(V_i P_i)}{dt} = F_{i-1} P_{i-1} - F_i P_i + \frac{Y_{p/s}}{Y_{x/s}} V_i X_i u_i \quad (20)$$

$$\frac{d(V_i X_i)}{dt} = F_{i-1} X_{i-1} - F_i X_i + V_i X_i u_i \quad (21)$$

- Balanço de energia

$$\frac{d(V_i T_i)}{dt} = F_{i-1} T_{i-1} - F_i T_i + F c_i (T c_i - T_i) + \frac{V_i \Delta H X_i}{\rho C_p Y_{x/s}} u_i \quad (22)$$

$$\frac{d(T c_i)}{dt} = \frac{F c_i}{V c_i} (T_i - T c_i) - \left( \frac{U A_i}{V c_i \rho C_p} \right) L M D T_i \quad (23)$$

$$\frac{d(T_{j_i})}{dt} = \frac{F_{j_i}}{V_{j_i}}(T_{j_e} - T_{j_i}) - \left(\frac{UA_i}{V_{j_i}\rho_j C_{p_j}}\right)LMDT_i \quad (24)$$

onde  $i$  representa cada um dos quatro estágios,  $j$  e  $j_e$  representam a água que chega e sai do trocador de calor respectivamente;  $c$  é a constante reativa no cooler (fig. 8);  $V$  é o volume do reator,  $T$  é a temperatura,  $P$  é o fluxo volumétrico;  $S$ ,  $X$  e  $P$  são as concentrações do substrato, de células e de etanol respectivamente;  $\rho$ ,  $C_p$  e  $\Delta H$  são parâmetros físicos do meio: densidade, calor específico e entalpia da reação respectivamente;  $Y_{x/s}$  e  $Y_{p/s}$  são parâmetros cinéticos da reação (MELEIRO; FILHO, 2000).

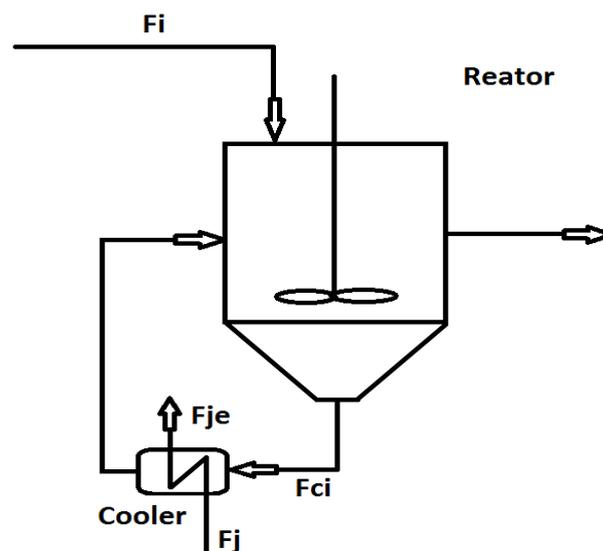


Figura 8: Reator processo de fermentação contínua.

### 3.3 Controle

Para o sistema de controle do processo fermentativo apresentado, treinou-se uma rede neural de forma a obter, com maior facilidade, os dados de conversão da reação, tendo como dado de entrada a vazão de alimentação de substrato e a temperatura de cada reator. Posteriormente será implementado um controle Proporcional Integral Derivativo (PID), bem como um sistema de controle preditivo baseado do modelo neural.

### 3.3.1 Análise dinâmica do processo

Para o estudo do comportamento do processo, foram feitas perturbações na vazão de alimentação e na temperatura dos reatores. Uma análise de sensibilidade será feita a fim de determinar a sensibilidade do processo com estas variáveis.

### 3.3.2 Modelo neural para o sensor virtual

Para o treinamento da rede neural, utilizou-se uma rede *feedforward* com algoritmo de treinamento Levenberg-Marquardt em conjunto com a regularização Bayesiana e Backpropagation. A Tabela 2 mostra a configuração da rede neural do conjunto de dados. Para geração de dados foram utilizados distúrbios aleatórios em  $F_0$  a cada 50 horas durante 5000 horas de simulação, obtendo-se as temperaturas de cada reator (T1, T2, T3, T4) e a concentração de etanol no quarto reator ( $P_4$ ). A alimentação de substrato  $F_0$  foi a variável manipulada e as temperaturas de cada reator foram as variáveis distúrbio, ambas variáveis de entrada para o treinamento de ANN. A concentração de etanol no quarto reator foi o valor de referência (Fig. 9).

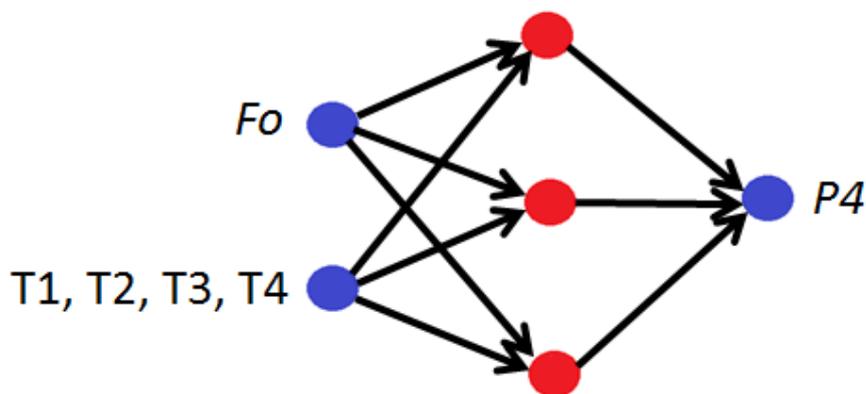


Figura 9: Configuração da rede utilizada no sistema sensor.

Para o treinamento da rede, utilizou-se de 4500 horas de simulação e as 500 horas remanescentes foram utilizadas para o teste onde a soma dos quadrados dos erros em cada instante de tempo é o parâmetro de performance escolhido para esse sistema (Tabela 3).

Dados de entrada	Fo, T1, T2, T3, T4
Dados de referência	Concentração de etanol (P4)
Tempo de Simulação	5000 horas
Tempo de treino	4500 horas
Tempo de teste	500 horas
Função objetivo	Soma dos Quadrados dos Erros (SSE)
Função de ativação	Tangente hiperbólica

Tabela 3: Configuração da rede neural para o modelo de predição.

A rede foi treinada várias vezes objetivando a escolha do número ideal de neurônios; o SSE também foi utilizado como critério de desempenho nesta etapa. O tempo de amostragem da simulação foi de 30 min e cada 50 horas foi feita uma perturbação aleatória no fluxo de alimentação de substrato no primeiro reator para um intervalo de  $50 < Fo < 150$ . Os dados de entrada e de referência, o algoritmo de treinamento e a função de ativação foram os mesmos para diferentes números de neurônios.

### 3.3.3 Controle PID

Com a necessidade de comparar os resultados obtidos com o controle MPC, foi aplicado ao sistema uma configuração de controle Proporcional-Integral-Derivativo, que, diferente do controle preditivo, não considera ações futuras do processo, como demonstrado da seção 2.1.

O ajuste dos ganhos proporcional, integral e derivativo foram feitos através do método de Ziegler-Nichols. Nesse método, os ganhos  $K_i$  e  $K_d$  tem seus valores nulos. Em seguida, o ganho proporcional  $K_p$  é aumentado até que a resposta do sistema se torne oscilatório, neste ponto tem-se o ganho crítico  $K_u$  e

o período da oscilação  $T_u$  é definido como período crítico. Os ganhos dos controladores são então calculados conforme a Tabela 4:

Configuração	$K_p$	$K_i$	$K_d$
<b>Proporcional</b>	$0.5K_u$		
<b>Integral</b>	$0.45K_u$	$1.2K_p/T_u$	
<b>Derivativo</b>	$0.6K_u$	$2K_p/T_u$	$K_p T_u/8$

Tabela 4: Método de Ziegler-Nichols para ajuste do controle PID.

### 3.3.4 Controle preditivo com modelo neural

Foi utilizado um modelo neural em conjunto com o modelo fenomenológico para a aplicação do controlador MPC do processo fermentativo, tendo como variável manipulada a vazão de alimentação de substrato e como variável controlada a concentração de etanol na saída do processo. Uma rotina de autoprogramação da rede neural será implementada com a finalidade de atualizar a rede neural em um espaço de tempo pré-definido. Para a aplicação do MPC, faz-se necessário a geração de um modelo neural a partir do processo contínuo que represente satisfatoriamente o processo real.

- Modelo de predição

Para o treinamento do modelo utilizado no controlador foi utilizado o Modelo Neural Auto Regressivo com Entradas Externas (NNARX), onde entrada e valores de referências passado são relacionados à uma variável predita. Para este processo de fermentação,  $F_0$  e  $P_4$  são variáveis em um instante de tempo passado, sendo associados com a  $P_4$  uma unidade de tempo à frente (MELEIRO; FILHO, 2000).

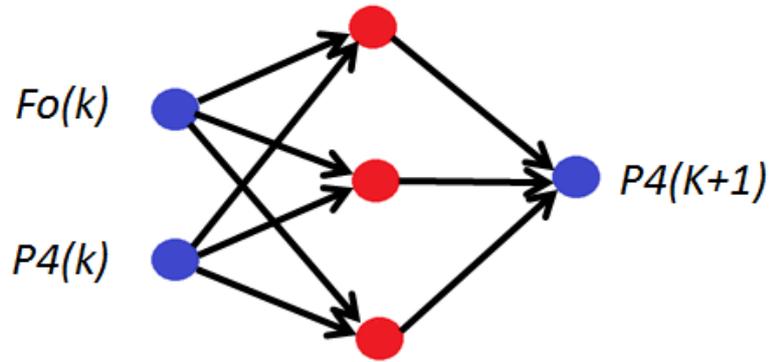


Figura 7: Configuração da rede utilizada no modelo de predição.

Desta forma a rede neural gera uma função de forma que:

$$P'_4(k + 1) = f[F_0(k), P_4(k)] \quad (25)$$

Para a simulação da rede, têm-se um conjunto de dados de  $F_0$  e apenas o valor inicial de  $P_4$ , onde os próximos valores  $P'_4$  serão obtidos pelo próprio modelo de predição, esta metodologia é conhecida como simulação recursiva (MELEIRO; FILHO, 2000):

$$P'_4(k + 2) = f[F_0(k + 1), P_4(k + 1)] \quad (26)$$

$$P'_4(k + 3) = f[F_0(k + 2), P'_4(k + 2)] \quad (27)$$

$$P'_4(k + 4) = f[F_0(k + 3), P'_4(k + 3)] \quad (28)$$

Onde  $P_4(k)$  é a concentração de etanol de quarto reator num instante  $k$ , o índice em  $P'_4$  é um indicador de valor de predição.

Dados de entrada	$F_0(k), P_4(k)$
Dados de referência	$P_4(k+1)$
Tempo de Simulação	5000 horas
Tempo de Treino	4500 horas
Tempo de teste	500 horas
Função objetivo	SSE
Função de ativação	Tangente hiperbólica

Tabela 4: Configuração da rede neural para o modelo de predição.

- Otimização

O controle preditivo utiliza o modelo de predição para escolher a melhor combinação de sinais de controle com a finalidade de minimizar o quadrado erro acumulado entre o valor de referência e a saída do processo. A escolha é feita por um algoritmo de otimização não linear.

Para este estudo, como se tem um modelo neural não-linear, utilizou-se o método dos pontos interiores para programação não-linear. O algoritmo do ponto está atualmente entre os algoritmos mais eficientes e robusto dentre os métodos de otimização de propósito geral e funcionam bem quando sujeito a restrições. A função objetivo da otimização é apresentada na Eq. 29:

$$J = \sum_{i=1}^{N_y} (y'_{k+i} - set)^2 + \beta \sum_{i=1}^{N_u} (\Delta u)^2 \quad (29)$$

onde  $y'_{k+1}$  é a predição dos valores futuros da saída do processo até o horizonte de predição  $N_y$ ,  $set$  é o valor de referência;  $\beta$  é a constante de penalização para a ação de controle sobre as mudanças na variável manipulada  $\Delta u$ ,  $N_u$  é o horizonte de controle.

# CAPÍTULO 4

## 4. Resultados

### 4.1 Análise dinâmica do processo em malha aberta

O processo estudado apresenta quatro reatores em série, com uma vazão de alimentação igual a 100 foi feita uma perturbação simétrica de 20% na vazão de alimentação  $F_0$ . O resultado da dinâmica do processo é mostrado nas Figuras 11 e 12:

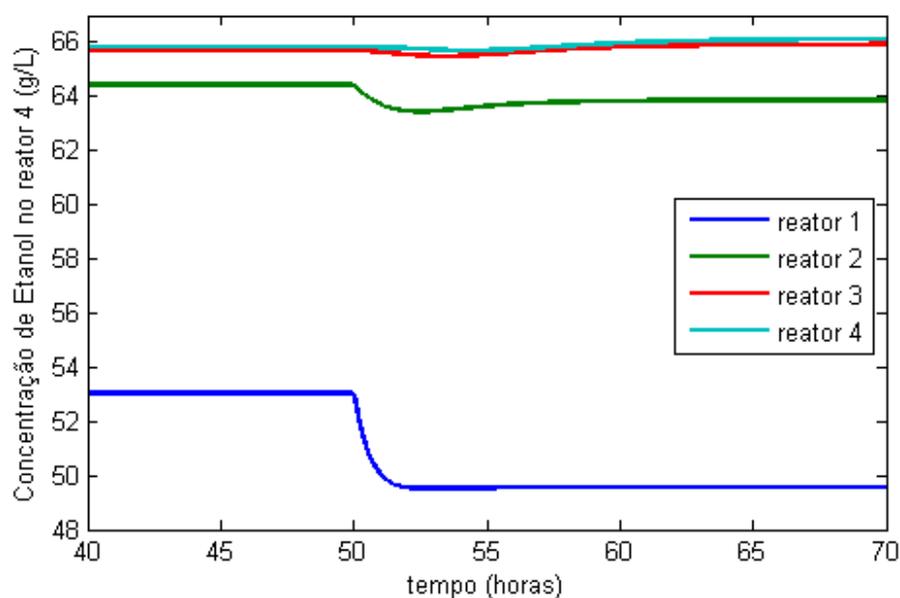


Figura 8: Perturbação de +20% vazão alimentação  $F_0$

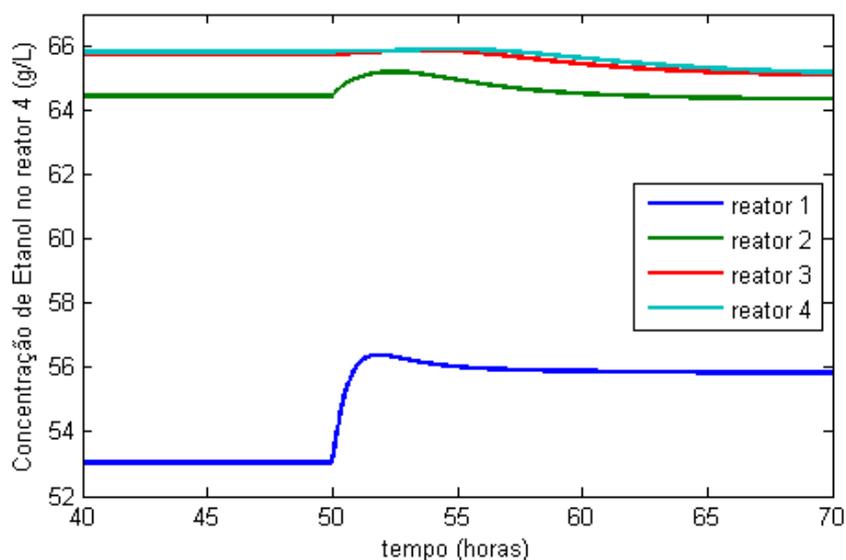


Figura 9: Perturbação de -20% vazão alimentação  $F_0$

Como se pode observar pelos resultados, os reatores três e quatro apresentam respostas semelhantes às perturbações. Para uma perturbação negativa de 20% da vazão de alimentação obteve-se uma concentração de produto de 63.88 e 65.62 g/L para os reatores 3 e 4, respectivamente, tendo uma diferença de apenas 2.5%. Porém, a utilização do último reator pode ser justificada pelo amortecimento do processo mediante mudanças bruscas nos estágios anteriores, mantendo a especificação do produto final a mais inalterada possível. Além disso, se houver perturbações no processo, o quarto reator tem a função de corrigir a concentração final do produto desejado, como mostra a Figura 13.

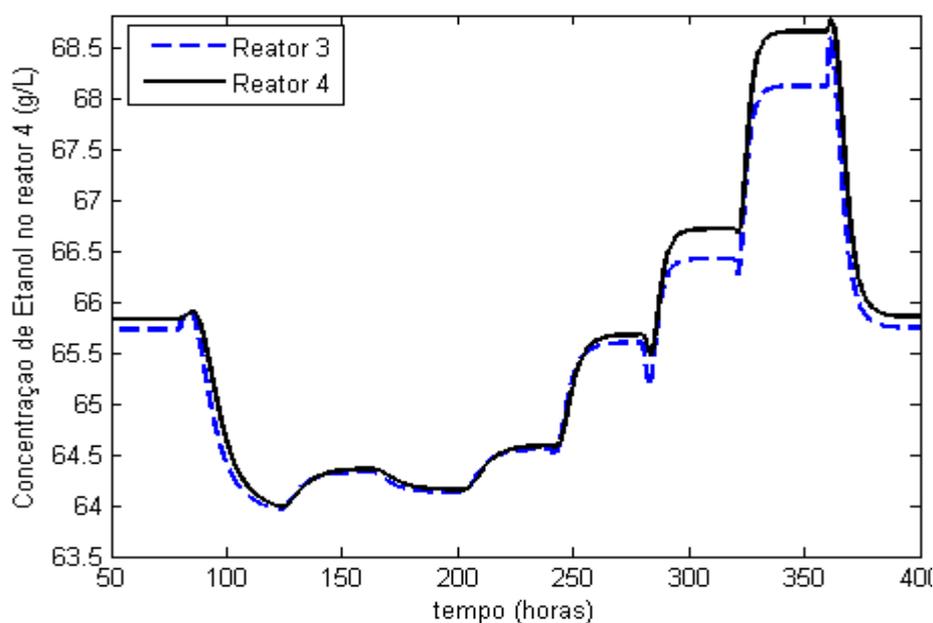


Figura 10: Comparação entre as respostas dos reatores 3 e 4 mediante três perturbações degraus em  $F_0$  a cada 10 horas na vazão de alimentação.

Foram feitas oito perturbações randômicas a cada 80 horas ao longo de 400 horas de simulação na vazão de alimentação  $F_0$  de forma a comparar os reatores três e quatro. Apesar de que nos instantes iniciais a diferença na concentração de saída ser muito baixa dos dois reatores, quando foi aplicado um degrau mais acentuado em  $F_0$ , observa-se que a concentração de etanol na saída de cada reator é diferente. O quarto reator, portanto, tem a função efetuar a fermentação de açúcares excedentes que saem do terceiro reator. As concentrações de açúcares na saída de cada reator foram de  $C_1 = 29.81$ ,  $C_2 =$

3.183,  $C_3 = 0.257$  e  $C_4 = 0.03$  para uma vazão de alimentação de  $100 \text{ m}^3/\text{h}$  de substrato.

Uma análise de sensibilidade foi feita com as duas variáveis manipuladas do processo: A vazão alimentação de substrato " $F_o$ " e a vazão de água de resfriamento no primeiro trocador de calor " $F_{j1}$ ". Para esta análise utilizou-se do cálculo do ganho relativo de cada uma das variáveis manipuladas, o que indica quais destas têm maior influência sobre a variável controlada (concentração de etanol  $P$ ). Perturbações simétricas foram feitas de forma a calcular o ganho relativo.

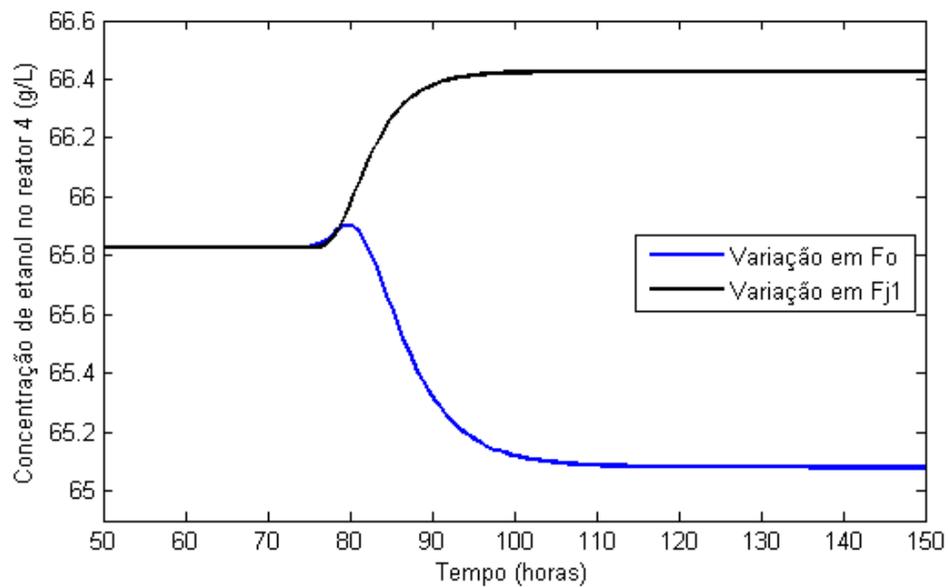


Figura 11: Perturbação de +10% na vazão de alimentação  $F_o$  e de fluido refrigerante  $F_{j1}$

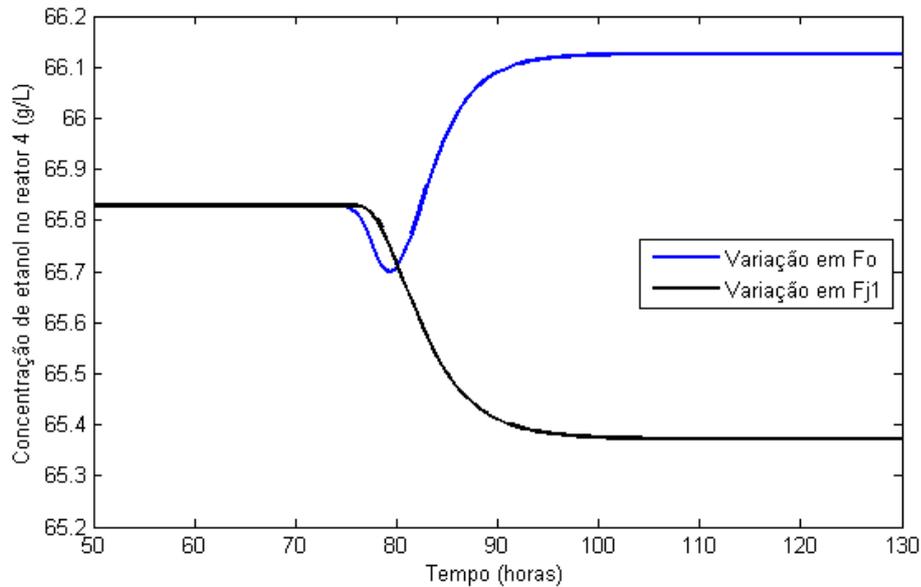


Figura 12: Perturbação de -10% na vazão de alimentação  $F_o$  e de fluido refrigerante  $F_{j1}$

Pelas figuras 14 e 15 observa-se que a vazão de alimentação de mosto tem ação inversa, enquanto a vazão de água de resfriamento tem ação direta à concentração de etanol.

Calculando o ganho do processo tem-se que:

- *Vazão de alimentação*

$$G1 = \frac{|\Delta P|}{\Delta F_a} = \frac{0.121}{10} = 0.0121 \quad (28)$$

- *Vazão de água de resfriamento*

$$G1 = \frac{|\Delta P|}{\Delta F_a} = \frac{0.458}{10} = 0.0485 \quad (29)$$

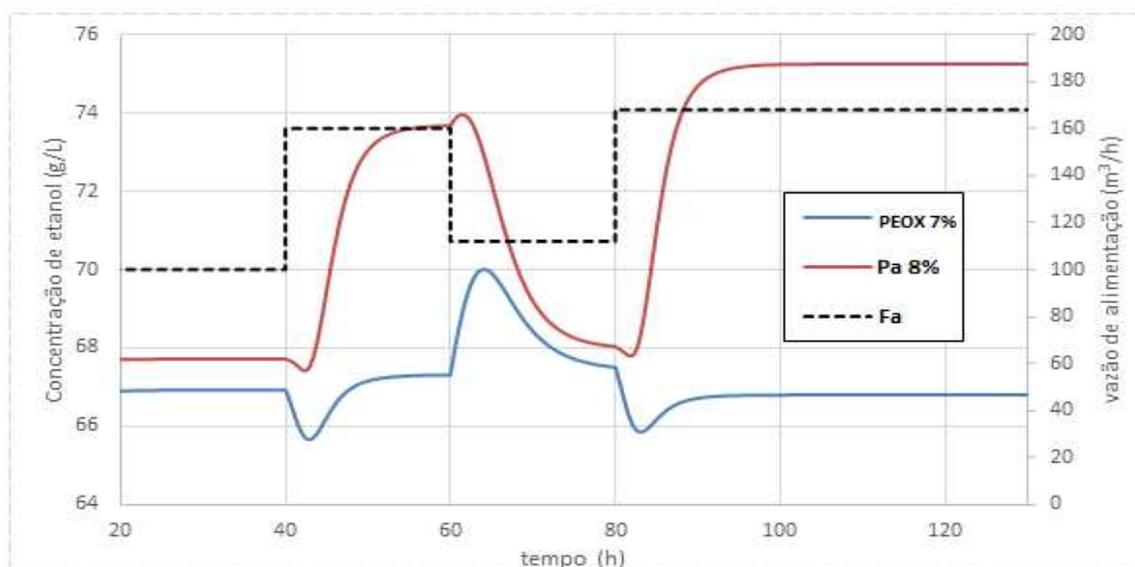
Portanto, a vazão de água de resfriamento possui uma maior influência sobre o processo. Isso ocorre devido ao fato de que o metabolismo celular é mais sensível à temperatura do que ao aumento da concentração do substrato.

#### 4.1.1 Influência de diferentes tratamentos da matéria prima na dinâmica do processo

O processamento do bagaço da cana de açúcar pode ser feito de diversas formas e cada uma dessas formas afeta diretamente na fermentação. A

Figura 17 mostra um comparativo entre as dinâmicas de dois processos de fermentação, onde considera-se os parâmetros cinéticos provenientes das fermentações das matérias primas obtidas pela hidrólise enzimática com ácido (sulfúrico HE+PA) a uma concentração de sólidos de 8% (m/v) e o pelo hidrolisado resultante do processo com peróxido de hidrogênio (HE+PEOX) com 7% de sólidos (m/v), (HERRERA, 2016).

Os resultados apresentados da Figura 16 mostram que existe uma diferença significativa nas dinâmicas da operação para diferentes tipos de processamento do bagaço de cana devido à influência do pré-tratamento na cinética da reação de fermentação, o que mostra a importância da aplicação de um controle robusto que consiga contornar as diferenças cinéticas de diferentes alimentações.



## 4.2 Soft-Sensor

Os dados de entrada e de saída, o algoritmo de treinamento e a função de ativação foram os mesmos para diferentes números de neurônios. O teste SSE tem seu primeiro mínimo em 35 neurônios (Figura 17). Para maior número de neurônios, o SSE tem um pequeno aumento ou mantém quase a SSE para 35 neurônios, então o número ideal de neurônios na camada oculta para o *sensor soft* foi de 35.

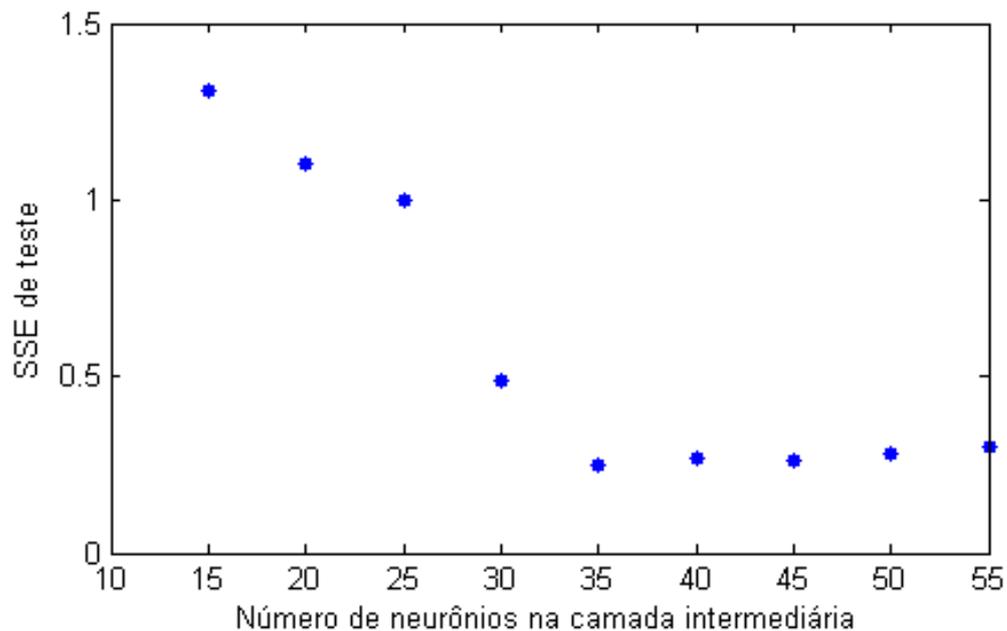


Figura 14: SSE de teste para diferentes números de neurônios na camada intermediária.

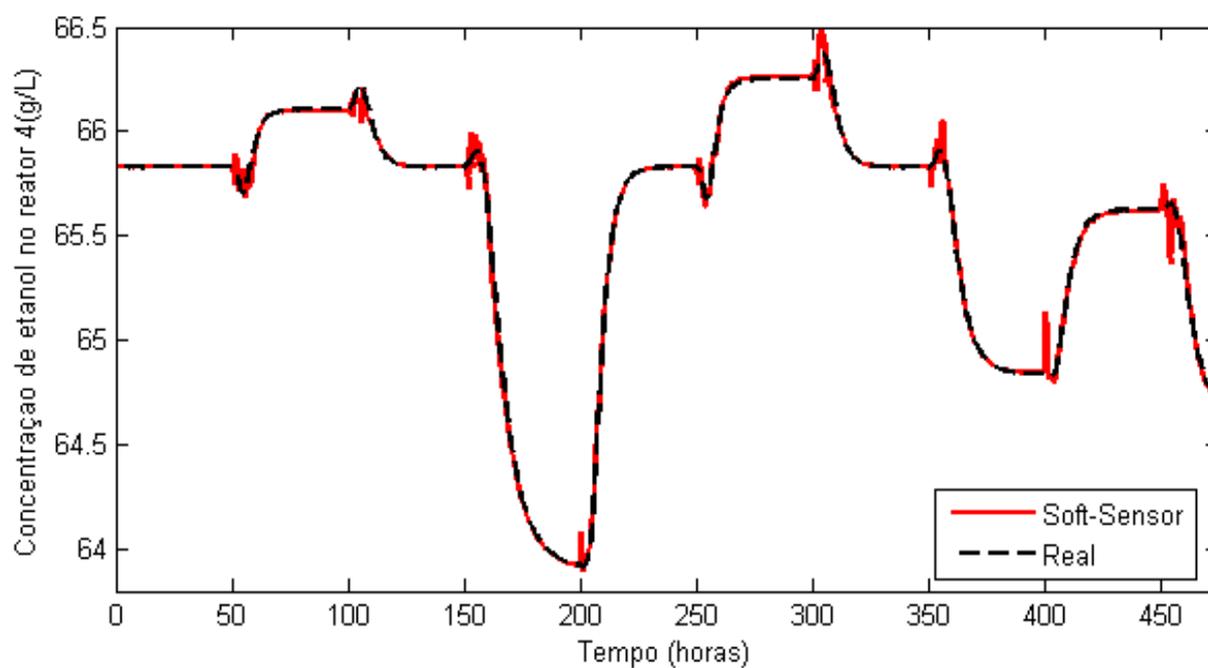


Figura 15: Comparação entre a resposta do sensor virtual e a resposta da simulação fenomenológica para valores randômicos de  $F_o$  a cada 50 horas (primeira simulação).

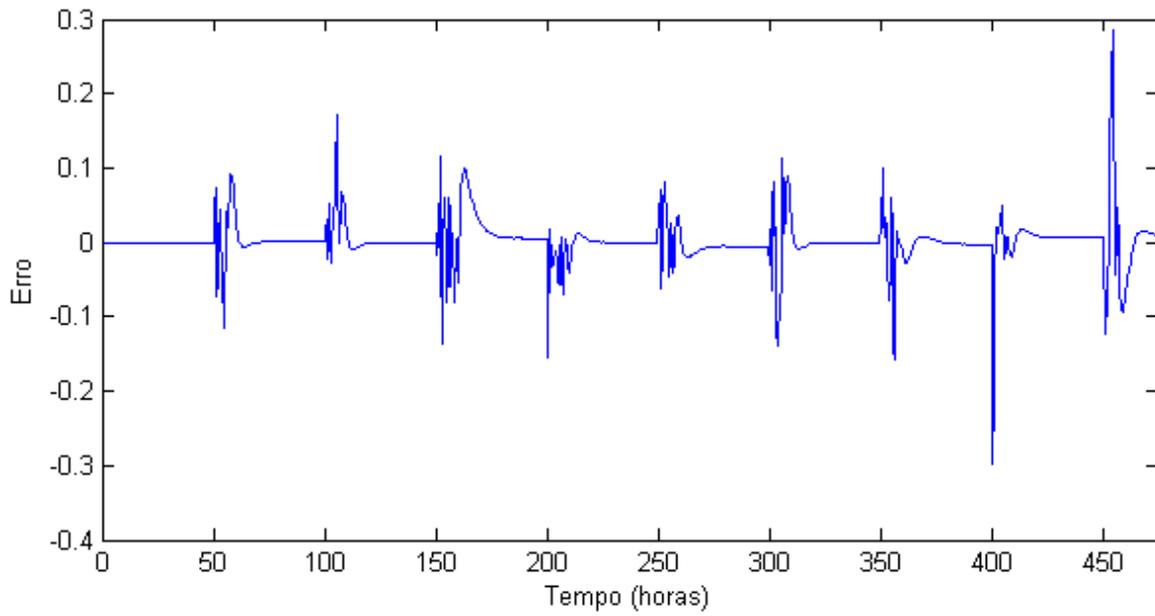


Figura 19: Erro entre a resposta do sensor virtual e a simulação fenomenológica (primeira simulação).

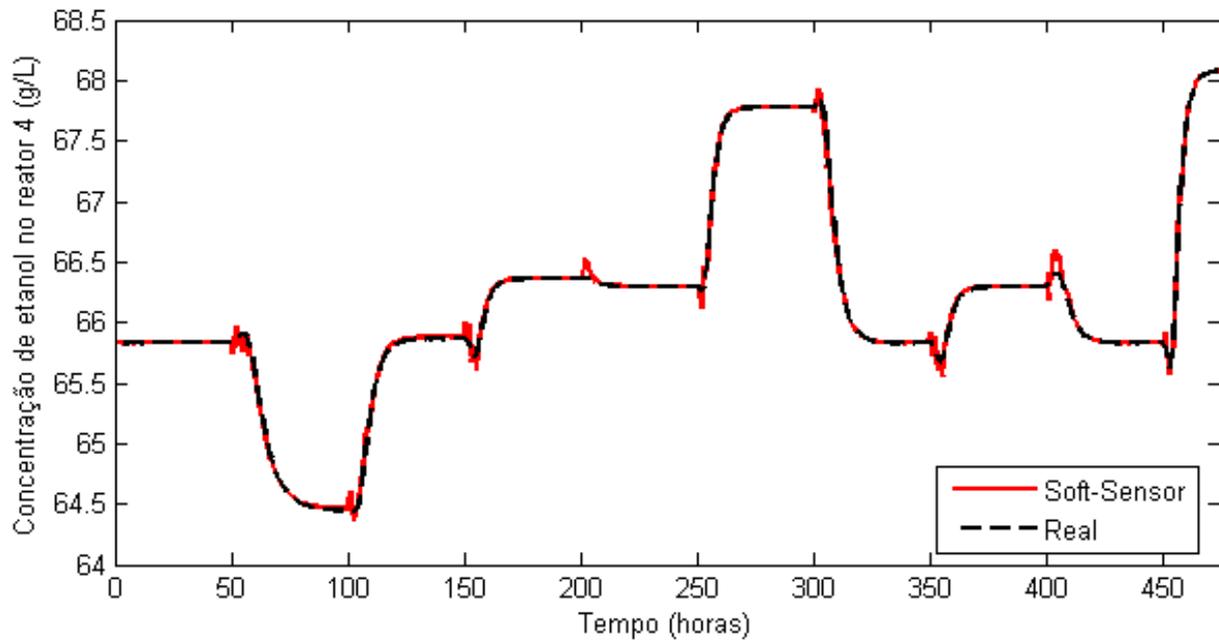


Figura 16: Comparação entre a resposta do sensor virtual e a resposta da simulação fenomenológica para valores randômicos de  $Fo$  a cada 50 horas (segunda simulação).

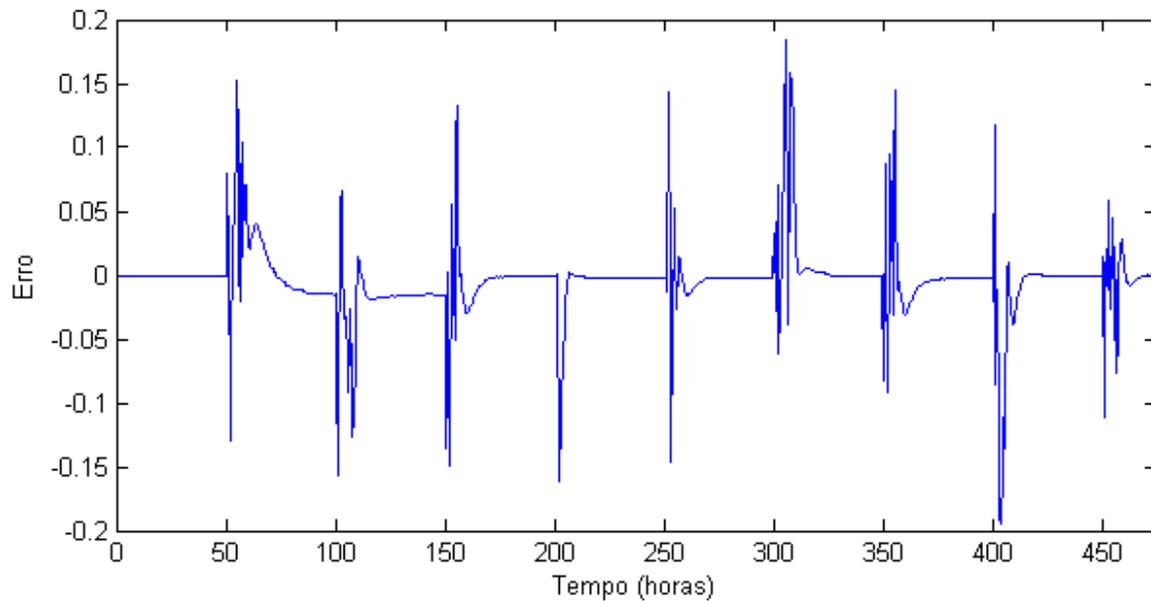


Figura 17: Erro entre a resposta do sensor virtual e a simulação fenomenológica (segunda simulação).

As Figuras 18 e 20 apresentam a concentração de etanol no último reator versus o tempo de simulação; estes dois gráficos representam diferentes condições na simulação, ambos estão comparando o modelo fenomenológico e o sensor virtual. Nas Figuras 18 e 20 e pode-se verificar que o modelo neural se ajusta bem aos à resposta do modelo fenomenológico. O teste SSE calculado foi menor que 0,2 para ambas as simulações, um valor baixo considerando o tamanho do conjunto de dados. Existe um aumento no erro no instante das perturbações que pode ser justificado pela alteração do grau de  $Fo$  imposta ao sistema (Figuras 19 e 21), que é normalizada imediatamente após os primeiros momentos da simulação onde erro volta a ser mínimo e rede neural segue a tendência do processo.

### 4.3 Controle

Na implementação do controle preditivo, foram geradas perturbações randômicas na vazão de alimentação ( $Fo$ ) no primeiro reator ao longo de 5000 horas (Figura 22), com a finalidade de produzir dados de entrada e de referência no treinamento da rede neural

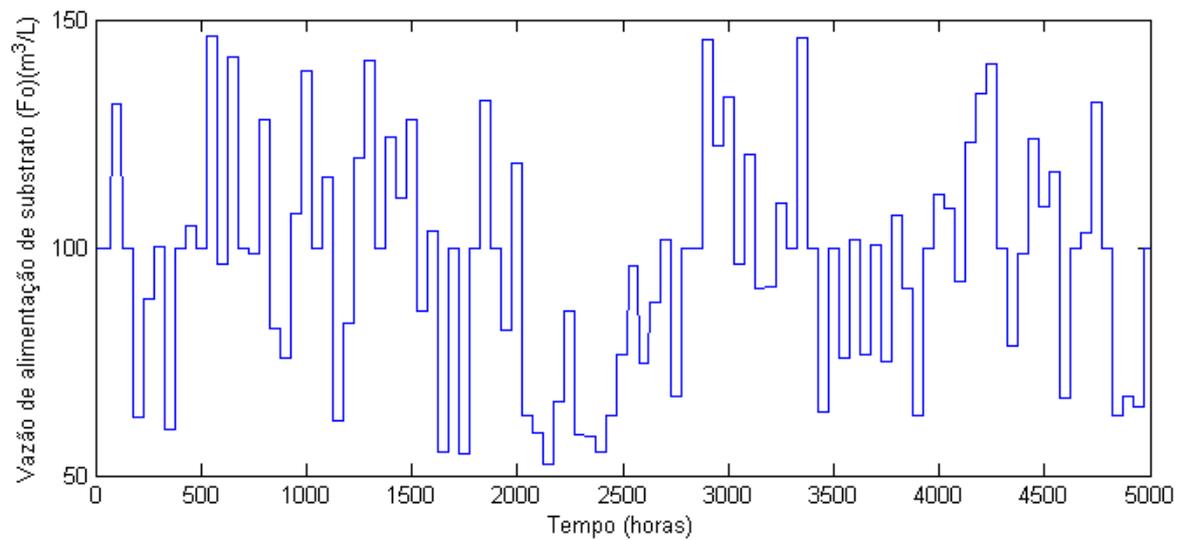


Figura 22: Dados de  $F_o$  para a geração da rede neural.

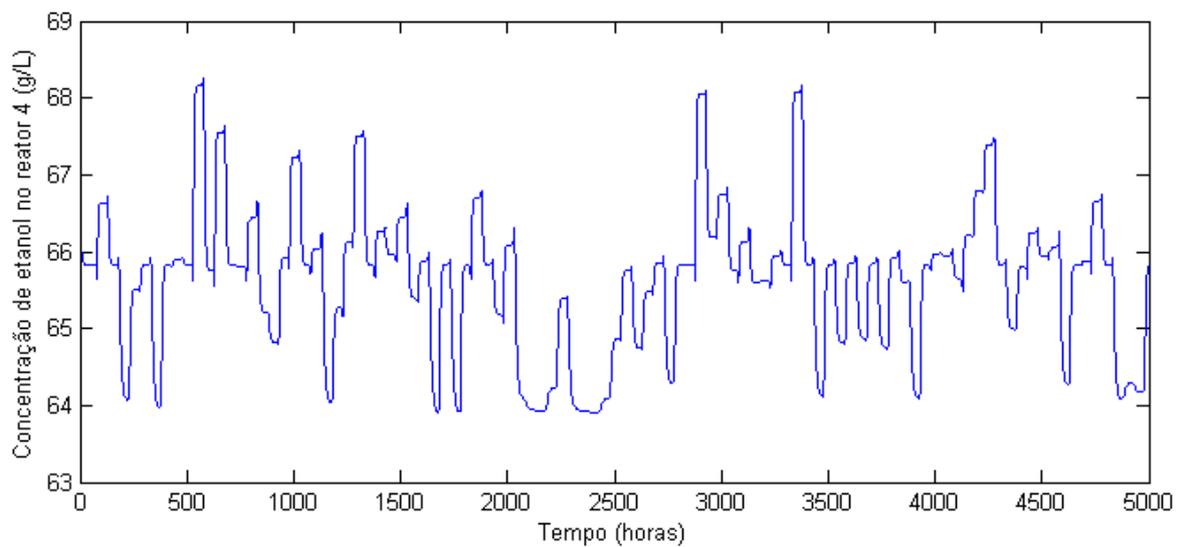


Figura 23: Dados da concentração de etanol no reator 4 ( $P_4$ ) para o treinamento da rede neural.

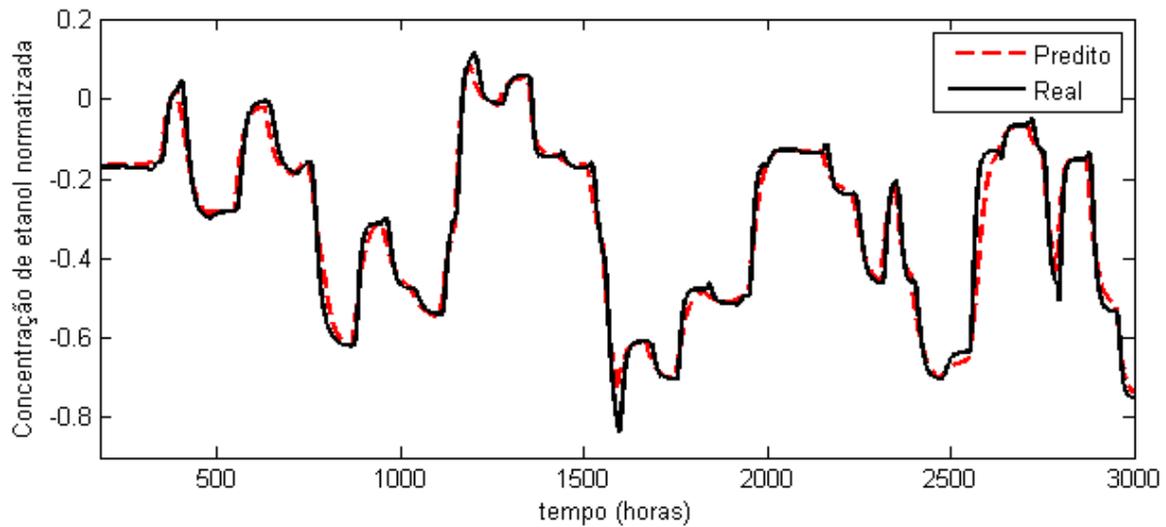


Figura 24: Simulação recursiva comparada com dados da simulação do modelo fenomenológico.

A rede neural treinada foi submetida à simulação recursiva de forma a analisar a qualidade do ajuste. A Figura 24 mostra um excelente ajuste entre o valor real e o valor predito pelo modelo neural, podendo assim ser utilizado no controle MPC não-linear.

Na aplicação do controlador preditivo, o horizonte de predição  $N_y$  e o horizonte de controle  $N_u$  foram 60 e 1 respectivamente, a constante de penalização para a ação de controle  $\beta$  foi de 0.01. As constantes do controle PID foram ajustadas pelo método de Ziegler-Nichols, obtendo os valores do ganho proporcional, integral e derivativo de 0.5, 0.02 e 0.2 respectivamente.

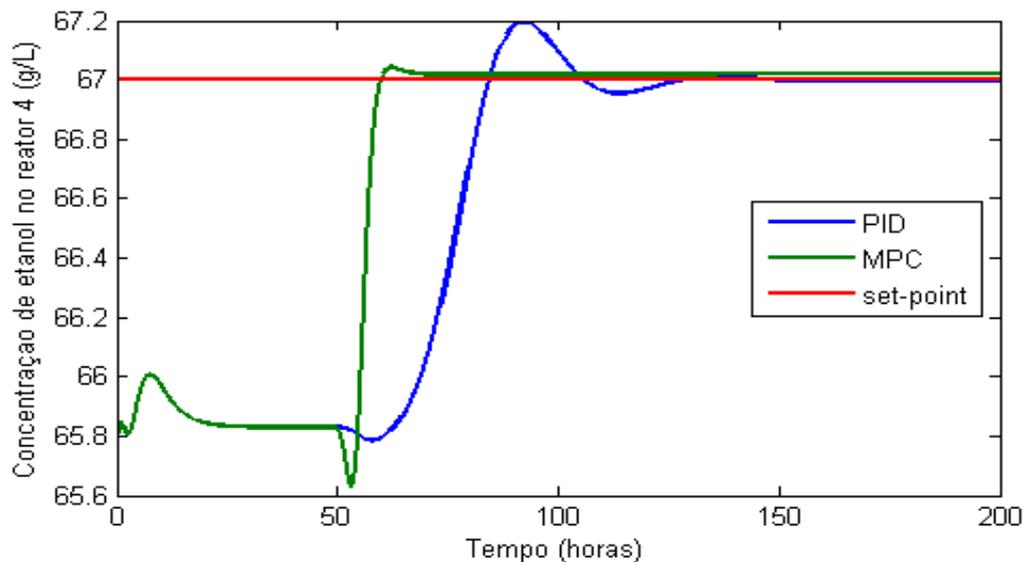


Figura 25: Resposta dos controladores PID e MPC quando submetidos a alterações no *set-point* para 67 g/L na concentração de etanol no reator 4.

Com o processo em malha fechada, foi feita uma mudança de 65.8 para 67 no *set-point* da concentração de etanol no reator 4 (Figura 25). O tempo em que o sistema leva para atingir 99% do valor da variável de saída do estado estacionário (tempo de subida ou de acomodação) de aproximadamente 18 horas para o controlador MPC e de 65 horas para o controlador PID. O tempo computacional médio por amostragem do controlador MPC, para a sintonia apresentada, foi de 2 segundos, enquanto, para o PID o esforço computacional levou em média 0.02 segundos por amostragem, obtendo uma concentração de açúcares no produto de 0.15 g/L.

Na comparação das respostas dinâmicas entre o controlador MPC e o controlador PID, o controlador preditivo apresentou um tempo de acomodação e uma oscilação consideravelmente baixa se comparado com o controlador PID. Apesar do controle MPC exigir mais tempo computacional, o processo fermentativo possui uma dinâmica lenta, o que possibilita a aplicação deste tipo de controlador.

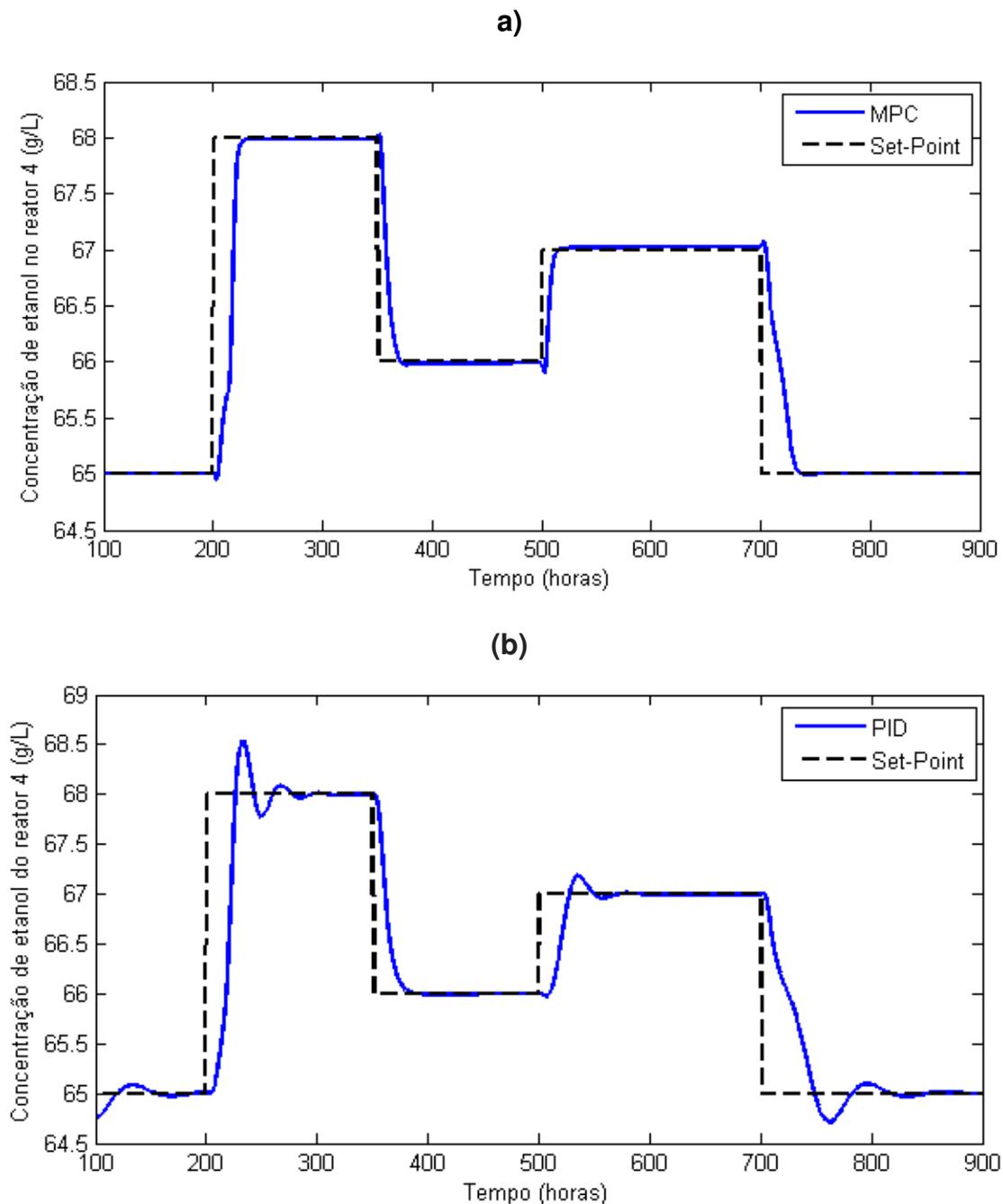


Figura 26: perturbações degrau para o processo fermentativo em malha fechada: (a)-MPC, (b)-PID.

A Figura 26 mostra o comportamento dos controladores PID e MPC para diversas perturbações degrau, onde se vê claramente um controle com menos oscilação, com uma resposta mais rápida e grande estabilidade. A redução no tempo de acomodação e na oscilação do processo faz com o produto final mantenha sua especificação e diminui significativamente as perdas do processo.

## 5. Conclusões

As variáveis de medição *on-line* nos processos de fermentação são um grande desafio na indústria de etanol, mas com o avanço das ferramentas de sensores virtuais, que é potencialmente aplicável a processos reais, mostra a possibilidade de melhorar a produção e o rendimento neste tipo de processo.

Os resultados observados na simulação de sensores virtuais mostram que a representação da concentração de etanol no quarto fermentador usando apenas a temperatura dos fermentadores 1 a 4 e o fluxo de alimentação é satisfatória pois a curva de teste mostra que a resposta do sensor virtual foi próxima dos dados reais e o SSE é significativamente baixo.

Esta metodologia pode ser utilizada para a implementação de estratégias de controle avançadas, devido à sua rápida resposta e precisão e a forte relação entre a temperatura e a concentração de etanol é um indicativo de que este estudo pode ser expandido para processos reais.

Na implementação dos controladores MPC não-linear e PID fica clara a eficiência do controle preditivo, tendo um tempo de acomodação baixo e alta estabilidade do sistema para a variável controlada se comparado ao controlador PID, o qual pode ser aplicado em conjunto com o *soft-sensor* para obter as variáveis de processo em tempo real.

## 6. Sugestões de trabalhos futuros

Para aprimorar e dar continuidade aos estudos desenvolvidos neste trabalho sugere-se para sua continuação:

1. Desenvolvimento de um módulo de auto-ajuste na sintonia do controlador MPC e nos pesos da rede neural, com a finalidade de sanar eventuais mudanças na dinâmica do processo.
2. Aplicação de metodologia do desenvolvimento do *soft-sensor* a partir das temperaturas dos reatores em uma planta experimental de produção de etanol de segunda geração.
3. Implementação de um controle distribuído, integrando a fermentação às operações de flash e destilação, visando aumentar o rendimento global do processo.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AFRAM, Abdul; JANABI-SHARIFI, Farrokh. Theory and applications of HVAC control systems—A review of model predictive control (MPC). **Building and Environment**, v. 72, p. 343-355, 2014.

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.

ANDRIETA, Silvio Roberto et al. Modelagem, simulação e controle de fermentação alcoólica contínua em escala industrial. Tese (Doutorado em Engenharia de Alimentos) – **Faculdade de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas**, Campinas.1994.

BRETHAUER, S.; WYMAN, C. E. Bioresource Technology Review: Continuous hydrolysis and fermentation for cellulosic ethanol production. **Bioresource Technology**, v. 101, n. 13, p. 4862–4874, 2010.

BENSON, H. Y., SHANNO, D. F., VANDERBEI, R. J., “A comparative study of large-scale nonlinear optimization algorithms”, In:High performance algorithms and software for nonlinear optimization (Erice, 2001), v. 82, pp. 95–127, Appl. Optim. , Kluwer Acad. Publ.: Norwell, MA, 2003.

BONASSA, Gabriela et al. Optimization of first generation alcoholic fermentation process with *Saccharomyces cerevisiae*. **Acta Scientiarum. Technology**, v. 37, n. 3, p. 313-320, 2015.

CAMACHO, Eduardo F.; BORDONS, Carlos. **Model predictive control in the process industry**. Springer Science & Business Media, 2012.

COSTA, A. C. A hybrid neural model for the optimization of fed-batch fermentations. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 16, n. 1, p. 53-63, 1999.

CINAR, Ali et al. **Batch fermentation: modeling: monitoring, and control**. CRC press, 2003.

DA CRUZ MELEIRO, Luiz Augusto; VON ZUBEN, Fernando José; MACIEL FILHO, Rubens. Constructive learning neural network applied to identification and control of a fuel-ethanol fermentation process. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**, v. 22, n. 2, p. 201-215, 2009.

DAI, Xianzhong et al. “Assumed inherent sensor” inversion based ANN dynamic soft-sensing method and its application in erythromycin fermentation process. **Computers & chemical engineering**, v. 30, n. 8, p. 1203-1225, 2006.

DE CASTRO, IA006–Prof Leandro N.; VON ZUBEN, Fernando J. Redes neurais artificiais. **Porto Alegre, RS: Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul**, 2001.

D.R. Baughman, Y.A. Liu, **An expert network for predictive modeling and optimal design of extractive bioseparations in aqueous two-phase systems**, *Ind. Eng. Chem. Res.* 33 (11) (1994) 2668–2687.

DUARTE, E. R. Avaliação e desenvolvimento de algoritmos de controle aplicado a um processo extrativo de fermentação contínua. 181f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – **Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas**, Campinas. 2007.

Farrell, A.E., Plevin, R.J., Turner, B.T., Jones, A.D., O'Hare, Kammen, D.M., 2006. Ethanol can contribute to energy environmental goals, **Science** 311, 506-508.

F.O. Lichts. [Industry Statistics: 2010 World Fuel Ethanol Production. Renewable Fuels Association](#). Consultado em: 2015-11-22. Em "Produção de Etanol Combustível".

GARRIGA, Jorge L.; SOROUGH, Masoud. Model predictive control tuning methods: A review. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 8, p. 3505-3515, 2010.

GUOHAI, Liu et al. Soft sensor modeling using SVM in fermentation process [J]. **Chinese Journal of Scientific Instrument**, v. 6, p. 020, 2009.

GUPTA, N. Artificial Neural Network. **Network and Complex Systems**, v. 3, n. 1, p. 24–28, 2013.

HATANAKA, Takeshi et al. Explicit receding horizon control of automobiles with continuously variable transmissions. In: **Nonlinear Model Predictive Control**. Springer Berlin Heidelberg, 2009. p. 561-569.

HATANAKA, T., YAMADA, T. **Nonlinear Model Predictive Control Towards New Challenging Applications**, Springer Science & Business Media, 2009.

HENSON, Michael A.; SEBORG, Dale E. Nonlinear control strategies for continuous fermenters. **Chemical Engineering Science**, v. 47, n. 4, p. 821-835, 1992.

HERRERA, W. E. et al. Modeling and Control of a Continuous Ethanol Fermentation Using a Mixture of Enzymatic Hydrolysate and Molasses from Sugarcane. v. 50, p. 169–174, 2016.

HOSKINS, Josiah Collier; HIMMELBLAU, D. M. Artificial neural network models of knowledge representation in chemical engineering. **Computers & Chemical Engineering**, v. 12, n. 9, p. 881-890, 1988.

HOCALAR, AKİF; TÜRKER, MUSTAFA. Nonlinear control of large-scale fed-batch yeast fermentation: control of the specific growth rate. **TURKISH JOURNAL OF ENGINEERING AND ENVIRONMENTAL SCIENCES**, v. 38, n. 3, p. 338-353, 2016.

JOHNSONF, A. The Control of Fed-batch Fermentation Processes: A Survey. **Automatica**, v. 23, n. 6, p. 691–705, 1987.

KARAKUZU, Cihan; TÜRKER, Mustafa; ÖZTÜRK, Sıtkı. Modelling, on-line state estimation and fuzzy control of production scale fed-batch baker's yeast fermentation. **Control Engineering Practice**, v. 14, n. 8, p. 959-974, 2006.

KIRAN, A. Uma Maheshwar; JANA, Asim Kumar. Control of continuous fed-batch fermentation process using neural network based model predictive controller. **Bioprocess and biosystems engineering**, v. 32, n. 6, p. 801-808, 2009.

KURTANJEK, Želimir. Principal component ANN for modelling and control of baker's yeast production. **Journal of biotechnology**, v. 65, n. 1, p. 23-35, 1998.

LAMERS, P. et al. International bioenergy trade - A review of past developments in the liquid biofuel market. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 15, n. 6, p. 2655–2676, 2011.

LEE, J. H. Model predictive control: Review of the three decades of development. **International Journal of Control, Automation and Systems**, v. 9, n. 3, p. 415–424, 2011.

L.H. Ungar, B. Powel, S.N. Kamens, **Adaptive network for fault diagnosis and process control**, *Comput. Chem. Eng.* 14 (1990) 561–572.

LIN, Yan; TANAKA, Shuzo. Ethanol fermentation from biomass resources: current state and prospects. **Applied microbiology and biotechnology**, v. 69, n. 6, p. 627-642, 2006.

LIU, Chongyang et al. Modelling and optimal control for a fed-batch fermentation process. **Applied Mathematical Modelling**, v. 37, n. 3, p. 695-706, 2013.

MAIA, Guilherme Arielo Rodrigues et al. Optimisation of the alcoholic fermentation of aqueous jerivá pulp extract. **ActaScientiarum. Technology**, v. 36, n. 4, p. 699-705, 2014.

MAIORELLA, B. L.; BLANCH, Harvey W.; WILKE, Charles R. Economic evaluation of alternative ethanol fermentation processes. **Biotechnology and bioengineering**, v. 26, n. 9, p. 1003-1025, 1984.

MARIANO, A. P.; EZEJI, Thaddeus; QURESHI, Nasib. Butanol production by fermentation: efficient bioreactors. In: **Commercializing Biobased Products: Opportunities, Challenges, Benefits, and Risks, RSC Green Chemistry**. Royal Society of Chemistry Cambridge, 2015. p. 48-70.

MELEIRO, L. A. .; FILHO, R. M. A self-tuning adaptive control applied to an industrial large scale ethanol production. **Computers & Chemical Engineering**, v. 24, n. 2-7, p. 925–930, 2000.

MORALES, J. L., NOCEDAL, J., WALTZ, R. A., et al., “Assessing the potential of interior methods for nonlinear optimization”, In: Large-scale PDE-constrained optimization (Santa Fe, NM, 2001), v. 30, pp. 167–183, Lect. Notes Comput. Sci. Eng, Springer: Berlin, 2003.

NAGY, Zoltan Kalman. Model based control of a yeast fermentation bioreactor using optimally designed artificial neural networks. **Chemical Engineering Journal**, v. 127, n. 1, p. 95-109, 2007.

OLIVÉRIO, J. L. et al. Alcoholic fermentation with temperature controlled by ecological absorption chiller—EcoChill. In: **Proceedings of the International Society of Sugar Cane Technologists**. 2010. p. 1-9.

OLSSON, L., & Hahn-Hägerdal, B. (1996). Fermentation of lignocellulosic hydrolysates for ethanol production. **Enzyme and Microbial technology**, 18(5), 312-331.

OHTSUKA, Toshiyuki; OZAKI, Kohei. Practical issues in nonlinear model predictive control: real-time optimization and systematic tuning. In: **Nonlinear Model Predictive Control**. Springer Berlin Heidelberg, 2009. p. 447-460.

PETERSEN, L. N.; JORGENSEN, J. B. Real-time economic optimization for a fermentation process using Model Predictive Control. p. 1831–1836, 2014.

PHILLIPS, L. Cellulosic ethanol: Brazil's next chapter, North American Representative, Brazilian Sugarcane Industry Association, ÚNICA, ETHANOL PRODUCER MAGAZINE, 2016.

QIN, S. Joe; BADGWELL, Thomas A. A survey of industrial model predictive control technology. **Control engineering practice**, v. 11, n. 7, p. 733-764, 2003.

RAHMAN, A.; SPURGEON, S.; YAN, X. Estimation and control of non-linear variables in a continuous fermentation process using sliding mode techniques. **Transactions of the Institute of Measurement and Control**, v. 34, n. 7, p. 769–779, 2011.

RAZBANI, Omid; ASSADI, Mohsen. Artificial neural network model of a short stack solid oxide fuel cell based on experimental data. **Journal of Power Sources**, v. 246, p. 581-586, 2014.

RIVERA, Elmer Alberto Ccopa. Otimização de bioprocessos: avaliação de desempenho das abordagens determinísticas e por algoritmos genéticos. 194f. Tese (Doutorado em Engenharia Química). **Faculdade de engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas**, Campinas. 2006.

SANCHEZ, K. B.; RICARDEZ-SANDOVAL, L. A. Simultaneous Design and Control under Uncertainty Using Model Predictive Control. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 13, p. 4815–4833, 2013.

SMITH, Zachary Alden; TAYLOR, Katrina D. **Renewable and alternative energy resources: a reference handbook**. ABC-CLIO, 2008.

THIBAUT, J.; CHERUY, A. On-Line Prediction of Fermentation Variables Using Neural Networks. v. 1048, p. 1041–1048, 1990.

VISIOLI, Antonio. **Practical PID control**. Springer Science & Business Media, 2006.

WANG, Ying-Chung et al. A fuzzy-neural adaptive terminal iterative learning control for fed-batch fermentation processes. **International Journal of Fuzzy Systems**, v. 17, n. 3, p. 423-433, 2015.(WANG et al., 2015)

ZANIN, G. M., Santana, C. C., Bon, E. P., Giordano, R. C., De Moraes, F. F., Andrietta, S. R., ... & Fontana, J. D. (2000). Brazilian bioethanol program. In: **Twenty-First Symposium on Biotechnology for Fuels and Chemicals** (pp. 1147-1161). Humana Press.

ZAVALA, Victor M.; BIEGLER, Lorenz T. Nonlinear programming strategies for state estimation and model predictive control. In: **Nonlinear model predictive control**. Springer Berlin Heidelberg, 2009. p. 419-432.

ZHONG, Weimin; PI, Daoying; SUN, Youxian. SVM based soft sensor for antibiotic fermentation process. In: **Systems, Man and Cybernetics, 2003. IEEE International Conference on**. IEEE, 2003. p. 160-165.

# Apêndice A

## Algoritmo de Simulação

### Modelo Fenomenológico

```
global Fa; global P4; global Fj1; global Fj2; global Fj3; global Fj4;
global To; global Tje; global So;
global LMDT_1; global LMDT_2; global LMDT_3; global LMDT_4;
global V1 V2 V3 V4; global FaV_1; global P4v_1;
global N; global net; global Ny; global Nu; global set;
global So;
Tsim=10000; %5000 Tempo total da simulação em horas
tmc=0.5; %Tempo de amostragem do controlador em horas
tx_r = 0.3; %Taxa de reciclo
So = 180; %s0_min;
Fao = 100; %fa_min;
Fa = Fao
Y1c=[]; Y2c=[]; Y3c=[]; Y4c=[]; FaV = []; Nv = [];
Y5c=[]; Y6c=[]; Y7c=[]; Y8c=[]; SoV = []; sett = [];
Y9c=[]; Y10c=[]; Y11c=[]; Y12c=[]; tx_rV = [];
Y13c=[]; Y14c=[]; Y15c=[]; Y16c=[]; P4v = [];
Y17c=[]; Y18c=[]; Y19c=[]; Y20c=[]; S4v = [];
Y21c=[]; Y22c=[]; Y23c=[]; Y24c=[]; X4v = [];
time=[]; tf=0; tk=0; D8 = [];

LMDT_1 = 3.2865; LMDT_2 = 3.3467; LMDT_3 = 3.3924; LMDT_4 = 3.8677;

Fj1 = 400; Fj2 = 350; Fj3 = 180; Fj4 = 60;
To = 28; Tje = 28;

% condições iniciais para as equações diferenciais
% (estado estacionário de referência)
S1 = 53.68781098062961; S2 = 20.90738239240737;
S3 = 4.66720395549191; S4 = 0.76001783945483;
X1 = 29.39006452236358; X2 = 30.47181992376290;
X3 = 31.00775236105115; X4 = 31.13669761797306;
P1 = 42.07362937154644; P2 = 56.66091967945654;
P3 = 63.88779815113933; P4 = 65.62649508306343;
T1 = 33.54060742042542; T2 = 33.51925388973194;
T3 = 33.49545662842527; T4 = 33.45838096389363;
Tj1 = 30.19592663145976; Tj2 = 30.11653037114717;
Tj3 = 30.04887447548435; Tj4 = 29.54975672878527;
Tc1 = 31.22910715484541; Tc2 = 31.29132717609687;
Tc3 = 31.33874696193899; Tc4 = 31.82706300658850;

x0 = [S1 S2 S3 S4 P1 P2 P3 P4 X1 X2 X3 X4 T1 T2 T3 T4 Tc1 Tc2 Tc3 Tc4 Tj1
Tj2 Tj3 Tj4]';

tic
cont = 0;
cont2 = 0;
cont3 = 0;

for i=1:Tsim/tmc
% tempo de integração e condição inicial
```

```

    tk=tf+tk; %variável auxiliar para o cálculo do vetor tempo tkk
t0 = 0;
    p = 0.01; %0.01;
    tf = tmc; %50;
    tspan = [t0:p:tf];

%Resolução do modelo dinâmico
    [T,Y] = ode45('ode',tspan,x0);
    Siz=size(T);
    tkk = tk*ones(Siz(1),1) + T; %vetor tempo corrigido

%Atualização do vetor de estado inicial
    x0=Y(Siz(1),:);
%geração do vetor Fa a cada 0.5 h
Fav = Fa*ones(Siz(1),1);
    Sov = So*ones(Siz(1),1);
tx_rv = tx_r*ones(Siz(1),1);

% Cálculo do Rendimento e da Produtividade

    Fo = Fa/(1 - tx_r);
    FR = Fo - Fa;
    XR = 90; %Concentração células do reciclo
    XL = 180; %Concentração de células no creme de levedura, depois
da centrifuga
XVT = 3;
    FL1 = FR*XR/XL;
    F1 = Fo; F2 = Fo; F3 = Fo; F4 = Fo;
%V1 = 210.374; V2 = 268.037; V3 = 316.663; V4 = 208.208;
    [n_Y_LINHA n_Y_COLUNA] = size(Y);

    FVT = F4*(XL - Y(n_Y_LINHA,12))/(XL - XVT);
FL = F4 - FVT;
    FS = FL - FL1;

REND(i) = (FVT + FS)*Y(n_Y_LINHA,8)/(So*Fa*0.511);
    PROD(i) = (FVT + FS)*Y(n_Y_LINHA,8)/(V1+V2+V3+V4);
    PROD_NORM(i) = 1.0 - (11.0 - PROD(i))/11.0;
    TOTAL(i) = REND(i) + PROD_NORM(i);

%Perturbações

    incr_Fa = 0;
    incr_So = 0;
if i >= 150
%
    Fa = 120;
%
    Fj1 = 440;
%
    So = 182;
if cont2 == 40/tmc
    incr_Fa=Fa*(-0.5 + (1)*rand); %gera perturbação randomica
    cont2 = 0;
end
if cont3 == 100/tmc
    incr_tx_r=tx_r*(-0.05 + (0.1)*rand);
    incr_So=So*(-0.05 + (0.1)*rand);
    cont3 = 0;
end

    cont2 = cont2+1;
    cont3 = cont3+1;
end

```

```

%Atualização das entradas Fa e So
Fa = Fa + incr_Fa;
    So = So + incr_So;
tx_r = tx_r + incr_tx_r;

if Fa > 150
    Fa = 100;
elseif Fa < 50;
    Fa = 100;
end
if So > 190
    So = 180;
    incr_So = 0;
elseif So < 170
    So = 180;
end
if tx_r > 0.33
    tx_r = 0.33;
incr_tx_r = 0;
elseif tx_r < 0.27
    tx_r = 0.27;
    incr_tx_r = 0;
end
% Ajuste dos vetores com a trajetória no tempo dos 24 estados

Y1=Y(:,1); Y5=Y(:,5); Y9=Y(:,9);    Y13=Y(:,13); Y17=Y(:,17); Y21=Y(:,21);
    Y2=Y(:,2); Y6=Y(:,6); Y10=Y(:,10); Y14=Y(:,14); Y18=Y(:,18);
Y22=Y(:,22);
    Y3=Y(:,3); Y7=Y(:,7); Y11=Y(:,11); Y15=Y(:,15); Y19=Y(:,19);
Y23=Y(:,23);
    Y4=Y(:,4); Y8=Y(:,8); Y12=Y(:,12); Y16=Y(:,16); Y20=Y(:,20);
Y24=Y(:,24);

    Y1c=[Y1c;Y1];    Y2c=[Y2c;Y2];    Y3c=[Y3c;Y3];    Y4c=[Y4c;Y4];
    Y5c=[Y5c;Y5];    Y6c=[Y6c;Y6];    Y7c=[Y7c;Y7];    Y8c=[Y8c;Y8];
    Y9c=[Y9c;Y9];    Y10c=[Y10c;Y10]; Y11c=[Y11c;Y11];
Y12c=[Y12c;Y12];
    Y13c=[Y13c;Y13]; Y14c=[Y14c;Y14]; Y15c=[Y15c;Y15];
Y16c=[Y16c;Y16];
    Y17c=[Y17c;Y17]; Y18c=[Y18c;Y18]; Y19c=[Y19c;Y19];
Y20c=[Y20c;Y20];
    Y21c=[Y21c;Y21]; Y22c=[Y22c;Y22]; Y23c=[Y23c;Y23];
Y24c=[Y24c;Y24];
time=[time;tkk];
% discretização a cada 30 min de simulação
FaV = [FaV;Fa]; SoV = [SoV;So]; tx_rV = [tx_rV;tx_r];
    P4 = Y(51,8); P4v = [P4v;P4];
    S4 = Y(51,4); S4v = [S4v;S4];
    X4 = Y(51,12); X4v = [X4v;X4];
    FaV_1 = FaV';
P4v_1 = P4v';
    SoV_1 = SoV';
% contador no numero de pontos
    n = size(FaV);
    N = n(1)
Nv = [Nv;N];
    sett = [sett;set];

%      Perturbações degrau no set-point

```

```

if N > 50
if N == 400
    set = 120;
end
if N == 700
    set = 100;
end
if N == 1000
    set = 120;
end
if N == 1400
    set = 70;
end
%           Controlador PID
erro = set - P4v;
Kp = 0.5;
Ki = 0.02;
Kd = 0.1;
delta_u = (Kp*erro(N) + Ki*sum(erro([N-5:N],:)) + Kd*(erro(N-1)
- erro(N)));

%           Controlador MPC
Nu = 1;
Ny = 60;
delta_u = zeros(1,Nu);
options = optimoptions('fmincon','Algorithm','interior-point');
delta_u = fmincon('otimizador',delta_u,[],[],[],[],-20, 20);

    Fa = Fa + delta_u(1)
if Fa >= 150
    Fa = 150;
incr_Fa = 0;
elseif Fa <= 50;
    Fa = 50;
    incr_Fa = 0;
end
end
end

%treinamento de rede neural
entrada = [FaV,SoV,P4v];%, SoV, S4v, X4v
saida = [P4v];%, S4v, X4v
[sse_teste_nor,sai_teste_nor,Yrr, net]=rede(entrada,saida);

```

# Treinamento da Rede Neural

```
function [sse_teste_nor, sai_teste_nor,Yrr,net] = rede(entrada,saida)
% clear, clc
% M=xlsread('dados'); %carrega arquivo de dados para o treinamento
% entrada=M(:,1); %define os dados de entrada da rede (colunas 1 a 3)
% saida=M(:,2); % define os dados de saida da rede (colunas 4 a 6)
entrada=entrada'; % calcula matriz transposta
saida=saida';
[entradan,minentrada,maxentrada,saidan,minsaida,maxsaida]=premnmx(entrada
,saida);
%define parametros maximos e mininos das matrizes de entrada e saida,faz
normalização, devolvendo para matrizes chamadas "entradan" e "saidan";

ent_treina_nor=entradan(:,59:17000);
sai_treina_nor=saidan(:,60:17001);
%entrada e saida pegam as 3 linhas, com dados de 1 a 87 para treinamento

ent_teste_nor=entradan(:,17002:18002);
sai_teste_nor=saidan(:,17003:18003);
%entrada e saida pegam as 3 linhas, com dados de 88 a 99 para teste

%INICIO DOS COMANDOS PADRÃO PARA TREINO DA REDE
net=newff(minmax(ent_treina_nor),[10,1],{'tansig','purelin'},'trainbr');
net.trainParam.epochs=1000; %numero de passos máximo
net.trainParam.show=50; %atualiza no grafico o numero de
passos
net.trainParam.goal=1e-4; %convergencia desejada
net.initFcn='initlay'; %funcao que inicia os pesos e bias
net.performFcn='sse'; %função objetivo a ser minimizada
net.trainParam.min_grad=1e-100; %minimo gradiente
net.trainParam.mu_max=1e+100 ; %max MU
net=init(net); % inicializacao dos pesos da rede aleatoriamente

[net,tr]=train(net,ent_treina_nor,sai_treina_nor);
% realiza o treinamento da rede
% foram determinados os pesos e bias da rede e arquivados temporariamente
em "net"

Yrr=sim(net,ent_teste_nor); %simula com os dados de entrada do arquivo
de teste normalizado
e_nor = sai_teste_nor-Yrr;
sse_teste_nor = sse(e_nor);

X=postmnmx(Yrr,minsaida,maxsaida); %desnormaliza dados de saída
%e=saida(:,1);

figure(1); %grafico para y1
plot(Yrr, '-');
hold on
plot(sai_teste_nor, '.');
xlabel('vetor de teste');
ylabel('y1');
legend('y1 normalizado calculado','y1 normalizado real');
hold off;
```

## Simulação Recursiva

```
[f,PF] = mapminmax(FaV_1);
[s,PA] = mapminmax(SoV_1);
[p,PP] = mapminmax(P4v_1);
entradan = [f];
P4n = p(1);
for i = 1:1:10000
    entrada_r = entradan(1,i);
    entrada_r = [entrada_r;P4n];
    P4n = sim(net,entrada_r);
    nettv(:,i) = P4n;
    timee(:,i) = i;
end
```

## Otimizador para o controle preditivo

```
function J = otimizador(delta_u)
global FaV_1; global P4v_1; global N; global net;
global Fa; global P4; global Nu; global Ny; global set; global So;
global SoV_1

lambda = [0.01];
u = Fa;
y = P4;

%calcula novos Fa a partir de delta_u
for i = 1:1:Nu;
    u = u + delta_u(i);
    u_v(i) = u;
    s_v(i) = So;
end

%igualar o tamanho dos vetores u e y para a utilização na rede neural
for i = Nu:1:Ny;
    u_v(i) = u_v(Nu); %0;
    s_v(i) = s_v(Nu);
end

%normaliza os dados de entrada da rede neural
[f,PF] = mapminmax(FaV_1);
[s,PA] = mapminmax(SoV_1);
[p,PP] = mapminmax(P4v_1);

u_v = mapminmax('apply',u_v,PF);
s_v = mapminmax('apply',s_v,PA);
y = mapminmax('apply',y,PP);

%simulação recursiva da rede, gerando os valores de predição Y em um
vetor de tamanho Ny
entradan = [u_v];
P4n = y;
for i = 1:1:Ny
    entrada_r = entradan(1,i);
    entrada_r = [entrada_r;P4n];
    P4n = sim(net,entrada_r);
    P4p(:,i) = P4n;
```

```
timee(:,i) = i;
end

%Função objetivo
y_Ny = mapminmax('reverse',P4p,PP);
Eu = sum((y_Ny - set).^2);
Ey = sum((delta_u.*lambda).^2);
J = Eu + Ey
```