

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS**

**PREDIÇÃO DA PERFORMANCE DE UM REATOR
UASB PARA TRATAMENTO DE VINHAÇA USANDO
IDENTIFICAÇÃO E REDES NEURONAIS**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

André Friderichs

Santa Maria, RS, Brasil

2013

**PREDIÇÃO DA PERFORMANCE DE UM REATOR UASB
PARA O TRATAMENTO DE VINHAÇA USANDO
IDENTIFICAÇÃO E REDES NEURONAIS**

André Friderichs

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Mestre em Engenharia de Processos.**

Orientador: Prof. Dr. Ronaldo Hoffmann
Coorientadora: Prof^a. Dr^a. Nina Paula Gonçalves Salau

Santa Maria, RS, Brasil

2013

**Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos**

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação de Mestrado,

**PREDIÇÃO DA PERFORMANCE DE UM REATOR UASB PARA
TRATAMENTO DE VINHAÇA USANDO IDENTIFICAÇÃO E REDES
NEURONAIIS**

elaborada por
André Friderichs

como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Engenharia de Processos

COMISSÃO EXAMINADORA:

Ronaldo Hoffmann, Dr.
(Presidente/Orientador)

Nina Paula Gonçalves Salau, Dra. (UFSM)

Ademar Michels, Dr. (FAHOR)

Djalma Dias da Silveira, Dr. (UFSM)

Santa Maria, 28 de março de 2013.

Agradecimentos

Agradeço a meus pais e a meu irmão pelo apoio e pela compreensão nesta caminhada.

Agradeço a todos os colegas do PPGEPro e demais amigos que estiveram comigo nesta jornada.

Agradeço aos professores Ronaldo Hoffmann e Nina Paula Gonçalves Salau pela orientação, conselhos e amizade ao longo do mestrado.

Agradeço ao professor Djalma Dias da Silveira pela ajuda relacionada à operação do aparato experimental.

Ao colega Diego Polônia Weber, e aos graduandos Amir e Gustavo que formaram comigo uma equipe responsável pela operação dos reatores.

Agradeço a CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Ministério da Educação) pela bolsa de incentivo à pesquisa disponibilizada.

Agradeço ao restante do corpo docente e aos funcionários pela amizade, apoio e incentivo ao longo desses últimos dois anos.

RESUMO

Dissertação de Mestrado
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos
Universidade Federal de Santa Maria

PREDIÇÃO DA PERFORMANCE DE UM REATOR UASB PARA O TRATAMENTO DE VINHAÇA USANDO IDENTIFICAÇÃO E REDES NEURONAIS

AUTOR: ANDRÉ FRIDERICHS

ORIENTADOR: RONALDO HOFFMANN

COORIENTADORA: NINA PAULA GONÇALVES SALAU

Local e Data de Defesa: Santa Maria, 28 de março de 2013.

O Brasil é um país tropical com uma quantidade enorme de recursos naturais energéticos. Tendo em vista o crescimento que o país está vivenciando, a exploração destes recursos energéticos se torna a cada dia mais atrativa. Entre as diversas alternativas, a biomassa está entre as mais notáveis principalmente pela sua aplicabilidade em propriedades rurais e agroindústrias de todo território nacional. A utilização de biomassa, para produção de etanol, mesmo em pequena escala, resulta em uma considerável produção de vinhaça – resíduo de produção que apresenta elevado teor de matéria orgânica e é visto como um efluente altamente poluente. A biodigestão anaeróbia da vinhaça em reatores anaeróbios de fluxo ascendente e manta de lodo (UASB) é uma alternativa eficiente tanto para o tratamento da vinhaça quanto para a produção de biogás. Este trabalho apresenta o estudo da modelagem empírica, usando ferramentas tais como redes neuronais artificiais (RNAs) e identificação paramétrica, do funcionamento de um reator UASB tratando a vinhaça obtida com a destilação do etanol produzido a partir de duas biomassas diferentes: matéria-prima amilácea (batata) e sacarídea (cana-de-açúcar). As entradas usadas nos modelos foram selecionadas através de métodos estatísticos a partir de uma série de parâmetros monitorados durante a operação experimental do reator, onde fica evidente a importância da Demanda Química de Oxigênio inicial, das temperaturas e do período de operação do reator com a mesma carga. Os resultados mostraram-se promissores para o uso destas ferramentas para a predição da performance de sistemas biológicos de alta complexidade tais como a digestão anaeróbia, nos melhores casos sendo alcançado uma correlação de 0,98841 para a vinhaça de batata, e uma correlação de 0,99738 para a vinhaça de cana-de-açúcar usando redes neuronais.

Palavras-chave: Etanol, Vinhaça, UASB, Identificação, Redes Neuronais.

ABSTRACT

Dissertation for the degree of Master of Science
Post-Graduation Program in Process Engineering
Federal University of Santa Maria

PREDICTION OF THE PERFORMANCE OF A UASB REACTOR FOR THE TREATMENT OF STILLAGE USING IDENTIFICATION AND NEURAL NETWORKS

AUTHOR: ANDRÉ FRIDERICHS

ADVISOR: RONALDO HOFFMANN

COADVISOR: NINA PAULA GONÇALVES SALAU

Local and Date of defense: Santa Maria, March, 28, of 2013

Brazil is a tropical country with a huge amount of natural energy resources. In view of the growth that the country is experiencing, such resources exploitation becomes increasingly attractive. Among many resources alternatives, the biomass is one of the most notable mainly due to its applicability in farms and agro-industries around the country. The use of biomass to ethanol production, even on a small scale, results in a considerable production of stillage – waste production that presents high organic matter content and that is seen as a highly polluting effluent. The anaerobic digestion of stillage in Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB) reactors is an efficient alternative to stillage treatment as well as to biogas production. This work presents the study of empirical modeling, using tools such as artificial neural networks (ANN) and parametric identification, of an UASB reactor operation which treats the distillation stillage of ethanol produced from two different biomasses: raw starch (potato) and saccharide (sugar cane). The inputs used in the models were chosen by statistical methods according to a series of parameters that are monitored during the experimental reactor operation, where it is evident the importance of the initial Chemical Oxygen Demand, temperatures and the period of operation of the reactor with the same charge. The results were promising for the use of such tools in performance estimation of highly complex biological systems such as the anaerobic digestion, chosen as case study in this work, being achieved in the best cases a correlation of 0,98841 for potato stillage, and a correlation of 0,99738 for the stillage of sugar cane using neural networks.

Keyword: Ethanol, Stillage, UASB, Identification, Neural Network.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Composição média da cana-de-açúcar	16
Tabela 2 - Composição química média da batata	18
Tabela 3 - Classificação das destilarias por volume de produção.	22
Tabela 4 - Composição da vinhaça de cana-de-açúcar proveniente de mosto de caldo, segundo vários autores.	24
Tabela 5 - Vantagens e desvantagens do sistema anaeróbio em reatores UASB	31
Tabela 6 - Monitoramento realizado nas amostras	45
Tabela 7 - Dados experimentais para a digestão da vinhaça de batata	46
Tabela 8 - Dados experimentais para a digestão da vinhaça de cana-de-açúcar	47
Tabela 9 - Dados experimentais selecionados para modelagem da digestão da vinhaça de batata	50
Tabela 10 - Dados experimentais selecionados para modelagem da digestão da vinhaça de cana-de-açúcar	51
Tabela 11 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 1 com a função de treinamento <i>trainlm</i>	54
Tabela 12 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 1 com a função <i>trainlm</i>	55
Tabela 13 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 1 com a função de treinamento <i>trainbr</i>	58
Tabela 14 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 1 com a função <i>trainbr</i>	58
Tabela 15 - Modelos discretos usados na identificação da performance do reator UASB mediante utilização de vinhaça de batata, a partir do monitoramento de sua DQO inicial e final	72
Tabela 16 - Modelos discretos usados na identificação da performance do reator UASB mediante utilização de vinhaça de cana-de-açúcar, a partir do monitoramento de sua DQO inicial e final	73

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Produção de Etanol no Brasil, 2000/2001 – 2010/2011 em Mil m ³	15
Figura 2 - Produção de Cana-de-açúcar no Brasil, 2000/2001 - 2010/2011 em Mil Toneladas.....	17
Figura 3 - Fluxograma da produção de álcool a partir da cana-de-açúcar.	20
Figura 4 - Fluxograma da produção de álcool a partir de amiláceas.....	21
Figura 5 - Digestão anaeróbia da matéria orgânica.	27
Figura 6 - Esquema de um reator UASB.....	30
Figura 7 - Neurônio Artificial.....	34
Figura 8 - Estrutura da MLP.....	35
Figura 9 - <i>Backpropagation</i>	36
Figura 10 - Modelo geral para identificação paramétrica.....	37
Figura 11 - Modelo <i>ARX</i>	38
Figura 12 – Modelo <i>ARMAX</i>	39
Figura 13 - Modelo <i>Output Error</i>	39
Figura 14 – Modelo <i>Box Jenkins</i>	40
Figura 16 - Reator UASB em operação.....	42
Figura 15 - Projeto do reator UASB.....	42
Figura 17 - Funcionamento do reator UASB.....	43
Figura 18 - Coluna de destilação.....	44
Figura 19 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-12-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	55
Figura 20 - Resposta gráfica para redução de DQO da rede neuronal com arquitetura 3-12-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	56
Figura 21 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-17-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	56
Figura 22 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-17-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	57
Figura 23 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-19-2 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	59
Figura 24 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-19-2 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	59
Figura 25- Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-25-2 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	60
Figura 26 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-25-2 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	60
Figura 27 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-14-1 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	61
Figura 28 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-3-1 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	61
Figura 29 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 1-17-1 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	62
Figura 30 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 1-14-1 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	63
Figura 31 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-12-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de batata.....	64

Figura 32 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-12-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de batata	64
Figura 33 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-14-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar.....	65
Figura 34 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-14-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar.....	66
Figura 35 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-13-2 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar	66
Figura 36 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-13-2 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar	67
Figura 37 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-9-1 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar.....	68
Figura 38 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-13-1 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar	68
Figura 39 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 1-15-1 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar.....	69
Figura 40 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 1-15-1 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar	69
Figura 41 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-16-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar.....	70
Figura 42 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-16-2 utilizando a função <i>trainlm</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar.....	70
Figura 43 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-25-2 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar	71
Figura 44 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-25-2 utilizando a função <i>trainbr</i> para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar	71
Figura 45 - Resposta gráfica para a DQO final do processo de identificação com o modelo ARX 110 para a degradação da vinhaça de batata	73
Figura 46 - Resposta gráfica para a DQO final do processo de identificação com o modelo ARX 331 para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar.....	74

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ADM1 – Modelo de Digestão Anaeróbia No. 1

ARMAX – *Auto Regressive Moving Average with eXogenous input*

ARX – *Auto Regressive with eXogenous input*;

BJ – *Box Jenkins*;

CO₂ – Dióxido de carbono

CH₄ - Metano

DQO – Demanda Química de Oxigênio;

DBO – Demanda Bioquímica de Oxigênio;

HN – Neurônios na camada oculta;

Ite - Iterações

OE – *Output Error*

N – Nitrogênio;

NaOH – Hidróxido de sódio;

NTK – Nitrogênio Total Kjeldahl;

P - Fósforo

pH – potencial de hidrogênio contador de estágios de equilíbrio;

R² – Coeficiente de determinação;

RNAs – Redes Neurais Artificiais ;

ST – Sólidos Totais;

UASB – Reator Anaeróbio de Fluxo Ascendente e Manta de Lodo (*Upflow Anaerobic Sludge Blanket*);

UFMS – Universidade Federal de Santa Maria;

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	10
1.1 Objetivo Geral	12
1.1.1 Objetivos Específicos	12
1.2 Estrutura da Dissertação	12
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
2.1 Etanol.....	14
2.1.1 Matérias-primas para a Produção de Etanol	15
2.1.2 Processo de Produção de Etanol.....	19
2.2 Vinhaça.....	22
2.2.1 Características da vinhaça	23
2.2.2 Sistemas de tratamento da vinhaça.....	24
2.3 Digestão Anaeróbia	25
2.3.1 Fases do Processo de digestão anaeróbia	26
2.3.2 Influências na degradação anaeróbia.....	29
2.4 Reator UASB.....	29
2.5 Modelagem da Digestão Anaeróbia	32
2.5.1 Redes Neurais	33
2.5.2 Modelos de Identificação Paramétrica	37
3. ANÁLISE ESTATÍSTICA	41
3.1 Aparato experimental	41
3.1.1 Operação do reator.....	43
3.1.2 Composição da alimentação	43
3.1.3 Análises de acompanhamento experimental.....	44
3.1.4 Hardware e Softwares utilizados	45
3.2 Dados Experimentais utilizados	46
3.3 Análise estatística dos dados experimentais.....	47
3.3.1 Correlação de Pearson	48
3.3.2 Estimativa não linear de parâmetros	48
3.4 Dados experimentais usados na modelagem matemática.....	50
4. MODELAGEM MATEMÁTICA.....	52
4.1 Redes Neurais	52
4.1.1 Batata.....	54
4.1.2 Cana-de-açúcar	65
4.2 Identificação	71
5. CONCLUSÕES	75
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	77
APÊNDICES.....	89
APÊNDICE A – Funções de Treinamento <i>trainlm</i> e <i>trainbr</i>.....	89
APÊNDICE B – Resultados complementares	91

1. INTRODUÇÃO

O Brasil é um país rico em fontes de energia, e está vivenciando um período de crescimento, o que resulta em uma contínua exploração de recursos energéticos. Entre as diversas alternativas, o uso de biomassa para produção de etanol está entre as mais importantes, especialmente, por ser aplicável em propriedades rurais e agroindústrias de todo território nacional.

A produção de etanol é ainda incipiente no Rio Grande do Sul, existindo apenas uma única indústria operando em solo gaúcho, a Coopercana, em Porto Xavier. A produção estadual em escala comercial está em torno de 7 milhões de litros por ano, o que representa apenas 2% do consumo do estado (SECRETÁRIA DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E AGRONEGÓCIO, 2012). Visando mapear as demais indústrias o Grupo de Trabalho do Etanol identificou, também, a existência de aproximadamente 30 microdestilarias de etanol no Estado, com produção para consumo próprio e também algum excedente (IRGA, 2012).

Nesta conjuntura, torna-se importante apreciar o zoneamento climático para a cana-de-açúcar, estabelecido e aprovado pela Portaria Mapa nº 54, 16/04/2009, indicando o período, a variedade e as regiões propícias para o cultivo dessa matéria-prima para produção de álcool, o qual contempla várias regiões do estado do Rio Grande do Sul e abre espaço para futuro aumento na produção, principalmente em pequena escala, mini ou microdestilarias, devido à estrutura fundiária e condições de solo e clima.

O aumento da produção de etanol ampliará o volume de vinhaça produzido, sendo este o efluente gerado pelas destilarias ao se efetuar a separação do etanol do mosto fermentado (CRAVEIRO, 1983). A vinhaça é o principal resíduo da fabricação do etanol, não apenas pelo

seu grande volume gerado, mas, principalmente, pelo seu elevado potencial poluidor. Deste modo, o desenvolvimento de alternativas de deposição e aproveitamento deste efluente tanto em destilarias de grande porte como em microdestilarias torna-se indispensável (SZYMANSKI, *et al.* 2010).

Uma das alternativas de maior destaque para este subproduto é a digestão anaeróbia, que tem como ponto forte o caráter econômico de seus produtos gerados (CORAZZA, 1996). A digestão, no entanto, só tornou-se atrativa com o desenvolvimento de reatores de alta taxa, como é o caso do Reator Anaeróbio de Fluxo Ascendente e de Manta de Lodo (UASB, do inglês *Upflow Anaerobic Sludge Blanket*) (SZYMANSKI, *et al.* 2010).

O reator modelo UASB tem sido visto como o de maior sucesso entre os reatores anaeróbios, devido principalmente a sua configuração e grau de agitação, além de dispensar qualquer material de enchimento para suporte da biomassa retida (CHERNICHARO, 1997).

O tratamento da vinhaça em reatores UASB, além de reduzir sua carga orgânica poluente, produz um material energético competitivo com os combustíveis fósseis, o biogás, composto principalmente por metano e dióxido de carbono. Portanto, trata-se de uma alternativa viável economicamente e benéfica ao ambiente (UNESP, 2007). Tal empregabilidade pode ser comprovada pela operação da primeira planta-piloto para pesquisas no processo da vinhaça criada pela Cetrel Bioenergia Ltda. em 2011.

Devido à importância dos resultados produzidos com reatores UASB operando com vinhaça, este sistema e os demais sistemas anaeróbios tem recebido uma crescente atenção em pesquisas e desenvolvimento. Uma ferramenta que pode ajudar no aprimoramento destes sistemas é a modelagem matemática. Modelos matemáticos permitem a representação dos principais aspectos de um sistema biológico. Eles melhoram a compreensão do sistema, a formulação e a validação de algumas hipóteses, a previsão do comportamento do sistema sob diferentes condições, reduzindo, como consequência, o número de informações experimentais, os custos, os riscos e o tempo (DONOSO-BRAVO *et al.* 2011).

Vários modelos matemáticos da digestão anaeróbia tem sido propostos nos últimos vinte anos e uma variedade de métodos utilizados para a estimação de parâmetros e validação de modelos. A digestão anaeróbia, entretanto, é caracterizada pela sua alta complexidade e não linearidade, além de apresentar dificuldades na coleta de grandes quantidades de dados experimentais para fins de modelagem.

Na pesquisa por sistemas que possam ser eficientes e robustos para a modelagem da digestão anaeróbia, muitos progressos foram feitos nos modelos fenomenológicos, mas ainda

os resultados são modelos complexos e que demandam grande esforço computacional. Assim, o desenvolvimento de algoritmos mais simplificados, que contribuam para uma maior eficiência nos sistemas de tratamento anaeróbio da vinhaça, ainda se faz necessário; uma alternativa válida é a modelagem empírica, com o uso de redes neurais e de identificação paramétrica.

A idealização desta configuração tem como finalidade a predição da performance do sistema de tratamento da vinhaça em planta compacta, visando diminuir a instabilidade do processo, permitir sua aplicação, tanto em pequena quanto em grande escala, e aumentar a eficiência da remoção de matéria orgânica, levando a uma maior geração de biogás.

1.1 Objetivo Geral

Este trabalho tem por objetivo a construção de um modelo empírico para um reator UASB aplicado no tratamento de vinhaça e, assim, predizer o seu desempenho, com o auxílio de redes neurais e identificação paramétrica.

1.1.1 Objetivos Específicos

- i) Selecionar e analisar estatisticamente as principais variáveis do processo de digestão anaeróbia da vinhaça em um reator UASB, que influenciam o rendimento do reator;
- ii) Analisar o uso das redes neurais na descrição do processo de digestão anaeróbia;
- iii) Projetar, treinar e validar uma rede neural capaz de predizer o rendimento da digestão anaeróbia da vinhaça em um reator UASB;
- iv) Desenvolver modelos identificados, com entradas exógenas, para estimar a redução de matéria orgânica em um reator UASB;

1.2 Estrutura da Dissertação

Esta dissertação está dividida em cinco capítulos, conforme descrição a seguir:

O capítulo 1 trata da introdução ao tema abordado. O capítulo 2 consiste em uma revisão bibliográfica sobre os principais tópicos pertinentes ao assunto, como etanol, etanol no Brasil, as matérias-primas para sua produção, vinhaça e a digestão anaeróbia, bem como a modelagem empírica principalmente por redes neurais e identificação paramétrica.

O capítulo 3 corresponde à análise dos dados experimentais. Primeiramente, é apresentado o aparato experimental que foi utilizado para a obtenção dos dados usados na modelagem. Na sequência são apresentadas análises estatísticas que levaram à escolha dos experimentos mais significativos que foram utilizados nos modelos. A primeira análise foi a correlação de Pearson, uma análise linear, e em seguida foi feita a estimação não-linear de parâmetros e finalmente foram apresentados os dados utilizados na modelagem matemática.

O capítulo 4 baseia-se na apresentação dos modelos construídos empiricamente. Na primeira seção são dispostos os modelos da rede neuronal para a digestão anaeróbia da vinhaça em um reator UASB. Este estudo foi composto por diferentes modelos para a vinhaça de batata e de cana-de-açúcar, com alterações nas configurações da rede neuronal. Na segunda seção são apresentados os modelos construídos através da identificação paramétrica.

O capítulo 5 traz a conclusão do trabalho de dissertação, onde são retomados os principais resultados obtidos nos capítulos 3 e 4 e são apresentadas sugestões para trabalhos futuros.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Etanol

O álcool etílico, mais conhecido como etanol, é composto por dois átomos de carbono, cinco átomos de hidrogênio e um íon OH, sendo descrito pela fórmula C_2H_5OH . É um produto incolor, volátil, inflamável e completamente solúvel em água (MORRISON, 1990).

O etanol vem sendo usado como combustível no Brasil desde 1920, mas foi somente com o advento do Programa Nacional do Álcool (Proálcool), em novembro de 1975, que seu papel ficou evidente em longo prazo (LEITE *et al.*, 2007). Atualmente, o Brasil está consolidado como um dos grandes produtores de álcool; na safra de 2010/11 a produção foi de 27,376 milhões m^3 (UNICA, 2012), conferindo ao país a segunda posição no ranking mundial de produção do etanol, ficando atrás apenas dos Estados Unidos. A produção é dividida entre álcool anidro e álcool hidratado. O álcool hidratado atende a demanda da indústria de bebidas e combustíveis (devido a seu baixo custo é mais indicado para a substituição da gasolina), e o anidro visa atender a demanda da indústria química e é também usado como aditivo à gasolina, variando sua concentração entre 20 e 25% em volume (FREITAS *et al.*, 2011). Na Figura 1 apresenta-se a produção de etanol total no Brasil, no período de 2000 a 2011, onde se percebe a elevação em sua produção.



Figura 1 - Produção de Etanol no Brasil, 2000/2001 – 2010/2011 em Mil m³

Fonte: UNICA (2012)

Considerando apenas o Estado do Rio Grande do Sul, a produção de etanol a partir de cana-de-açúcar, para a safra de 2012, tem perspectiva para 7,53 milhões de litros, o que corresponde a menos de 1% da produção do Brasil (CONAB, 2012).

Neste panorama, o estado é um grande comprador de etanol, produzindo apenas 2% do consumo estadual de etanol hidratado combustível, na Coopercana, única indústria operando em solo gaúcho. No Rio Grande do Sul há também o consumo de 600 milhões de litros de etanol anidro anualmente. A partir de 2010, o consumo de etanol teve um crescimento anual de 460 milhões de litros, destinados à produção de polietileno verde. Este cenário demonstra uma grande oportunidade para que o estado aumente sua produção local de etanol, conforme postulado por Almeida & Silva (2011).

2.1.1 Matérias-primas para a Produção de Etanol

As principais fontes para a produção de etanol de primeira geração são os matérias sacarídeos, principalmente provenientes de cana-de-açúcar, sorgo sacarino e beterraba, e os materiais amiláceos, representados por mandioca, milho e batata. No Brasil a cana-de-açúcar é a principal matéria-prima para a produção de álcool (UNICA, 2012). Apesar da produção de etanol a partir da sacarose ser um processo bem estabelecido no Brasil, com a maior

produtividade, menores custos e o melhor balanço energético, ainda há espaço para o crescimento e redução de custos.

2.1.1.1 Cana-de-açúcar

A cana-de-açúcar (*Saccharum spp.*) é uma das principais culturas do Brasil. Introduzida no período colonial, o Brasil hoje não é apenas o maior produtor mundial de cana-de-açúcar, é também um dos maiores produtores de açúcar e etanol e conquista, cada vez mais, o mercado externo com o uso do biocombustível como alternativa energética (MAPA, 2012). Segundo a Companhia Nacional de Abastecimento (CONAB), o país apresentou para a safra de 2010/11 uma área plantada de 8.055,54 mil hectares e uma produtividade média de 77,52 t/ha (CONAB, 2012).

Excelente conservadora fotossintética, a cana-de-açúcar é uma planta de alta eficiência energética na captura e armazenamento de energia solar: cada tonelada tem um papel energético equivalente a 1,2 barris de petróleo. A mesma cana-de-açúcar pode ser colhida até cinco vezes, mas a cada ciclo devem ser feitos investimentos significativos para manter a produtividade (KITAYAMA, 2008).

A composição média da cultura cana-de-açúcar é representada na Tabela 1. Entre as substâncias encontradas na cana, a mais importante é a sacarose, um tipo de glicídeo formado por uma molécula de glicose e uma de frutose (SANTOS, 2011).

Tabela 1 - Composição média da cana-de-açúcar

Componente	Teor(%)
Água	65-75
Açúcares	11-18
Fibras	8 – 14
Sólidos Solúveis	12 -23

Fonte: NOGUEIRA (1987)

Na safra de 2010/11, a produção do setor sucroalcooleiro foi 624,50 milhões de toneladas de cana-de-açúcar, um acréscimo de 140 % em relação a safra de 2000/2001, Figura 2 (UNICA, 2012). É importante observar que a expansão da produção ocorreu não apenas com o aumento da área cultivada, mas também com expressivos ganhos de produtividade nas fases agrícola, que apresentou incremento anual de 1,4%. Graças a esses ganhos de produtividade, a

área atualmente dedicada à cultura da cana-de-açúcar para produção de etanol, cerca de 3,5 milhões de hectares, é 38% da área que seria requerida considerando a produção atual e a produtividade agroindustrial em 1975 (BNDES; CGEE, 2008).

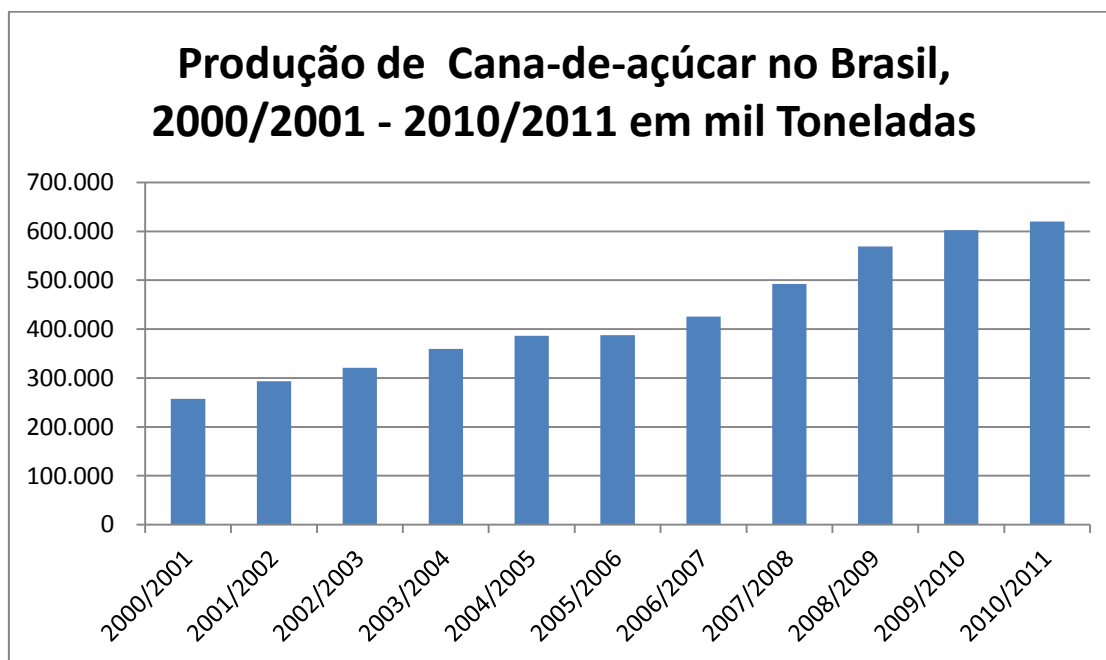


Figura 2 - Produção de Cana-de-açúcar no Brasil, 2000/2001 - 2010/2011 em Mil Toneladas

Fonte: UNICA (2012)

O cultivo da cana-de-açúcar apresenta certas desvantagens, como a concentração renda e terras, além do êxodo rural e da grande dependência de um único cultivo. Entretanto, a grande desvantagem é a sazonalidade da produção (seis meses, aproximadamente) e os custos com matéria-prima e produto. Por esses fatores, a produção sucroalcooleira em grande escala só apresenta viabilidade de implantação em regiões com clima e relevo favoráveis, como ocorre, por exemplo, nas regiões sudeste e centro-oeste do país.

No Rio grande do Sul, com o zoneamento climático para a cana-de-açúcar, algumas variedades e regiões foram consideradas propícias para o cultivo desta cultura, porém com o predomínio de pequenas propriedades e com produção agrícola baseada na mão-de-obra familiar, o modelo de produção em grande escala não é a melhor escolha (MAYER, 2013). Nessas regiões deve-se buscar um outro modelo, com características específicas e que potencialize as qualidades da pequena escala, como é o caso das microdestilarias.

2.1.1.2 Batata

A batata (*Solanum tuberosum*) é uma planta herbácea, que apresenta em sua parte subterrânea do caule, as reservas de amido, representada pelos tubérculos (FORTES E PEREIRA, 2003). No Brasil essa cultura ocupa uma área de 127 mil ha, com uma produção de 3,38 milhões de toneladas. O Rio Grande do Sul é responsável pela produção de 359 mil toneladas de batata em uma área de 19 mil ha (IBGE, 2013). Segundo a Associação Brasileira da Batata, o volume por ano de batata descartada como resíduo pode chegar a 300 mil toneladas em todo Brasil (ABBA, 2007).

Na Tabela 2 é apresentada a composição química média da batata (LI, 2006; STOREY, 2007).

Tabela 2 - Composição química média da batata

Componente	Teor(%)
Água	80 – 85
Amido	12,6 – 18,2
Fibras	1 – 2
Glicose	0,01 - 0,6
Frutose	0,01 - 0,6
Sacarose	0,13 - 0,68
Proteínas	0,6 - 2,1

Fonte: (LI, 2006; STOREY, 2007)

Os produtos agrícolas amiláceos compõem um grupo de material disponível, em grandes quantidades e de baixo custo, para a aplicação em processo industriais. Mesmo que sejam necessárias algumas operações de preparo desta matéria-prima, a qual se destaca a hidrólise, este grupo vem sendo cada vez mais utilizado para o processamento de álcool, principalmente objetivando o aproveitamento do material residual. A batata residual, que contém elevado teor de amido (12,6 a 18,2 %), torna a produção de etanol proveniente de batata uma alternativa viável já que tal material não é empregado na alimentação e acaba sendo destinado aos aterros sanitários (REZENDE, 2007; ABBA, 2007).

2.1.2 Processo de Produção de Etanol

O etanol pode ser obtido de duas maneiras: por síntese química e por fermentação. Na síntese química, o etanol é produzido a partir de hidrocarbonetos insaturados, como o eteno e o etino, e de gases de petróleo e hulha. O etanol obtido desta forma não é originado de matéria-prima renovável e tampouco pode ser considerado um combustível alternativo. Portanto, a via fermentativa é a mais utilizada na obtenção do etanol no Brasil e na maior parte do mundo, sendo a cana-de-açúcar a principal matéria-prima para a produção fermentativa do etanol no país (FREITAS *et al.*, 2011).

A produção de etanol é um processo diferenciado, especialmente o bioetanol. A transformação de recursos biológicos ricos em energia (como culturas de cana-de-açúcar, batata ou biomassa lignocelulósica) requer o pré-tratamento ou condicionamento das matérias-primas para a fermentação de organismos para então convertê-los em etanol. A complexidade deste processo ajuda a explicar em parte porque o etanol combustível não tem desempenhado um papel de liderança em comparação aos combustíveis derivados do petróleo. Somente nos últimos anos devido ao aumento das preocupações ambientais e às crises periódicas em alguns dos maiores países exportadores de petróleo, o etanol tem se tornado uma alternativa viável e realista no mercado de energia (SANCHEZ *et al.*, 2008).

Os materiais sacarídeos apresentam um processo produtivo mais simplificado, a fermentação se procede de maneira direta, não necessitando de um preparo do substrato. O amido, por ser um material polissacarídeo, carece de um pré-tratamento, como a hidrólise enzimática e o cozimento, que transforma o amido em monossacarídeos que são fermentados para a formação do etanol (BALAT & BALAT, 2009).

O processo básico para a produção de etanol a partir da cana-de-açúcar começa, segundo Cortez *et al.* (2008), com a preparação da matéria-prima, onde é feita a limpeza e a moagem. O caldo de cana-de-açúcar (garapa) é destinado à produção do etanol e os bagaços e bagacilhos podem ser utilizados como alimento animal ou incinerados em caldeiras para geração de vapor. O caldo então passa por um decantador para que fique com um menor número de impurezas. Este caldo clarificado após as etapas de tratamento passa para a etapa de fermentação, onde os açúcares são transformados em álcool devido à ação de leveduras. Estas leveduras estão contidas em fermento, que é misturado no caldo, visando que todos os açúcares se transformem em álcool. Após a fermentação tem-se o vinho, que deslevedurado contém de 7 a 8 % de álcool.

O vinho com pequena quantidade de levedura vai para as colunas de destilação, que através de aquecimento e evaporação separam o álcool, e em seguida o álcool é concentrado e purificado atingindo os padrões normativos do mercado, de acordo com a resolução nº 7 da ANP (2011), o etanol hidratado combustível deve ser entre 95,1% (v/v) e 96% (v/v), enquanto o etanol anidro combustível deve ter concentração mínima de 99,6% (v/v). Nesta etapa aparece a vinhaça, que é parte aquosa do vinho, rica em sais mineirais e considerada um grande agente poluidor (WILKIE *et al.*, 2000). O fluxograma da produção de etanol a partir da cana-de-açúcar está representado na Figura 3.

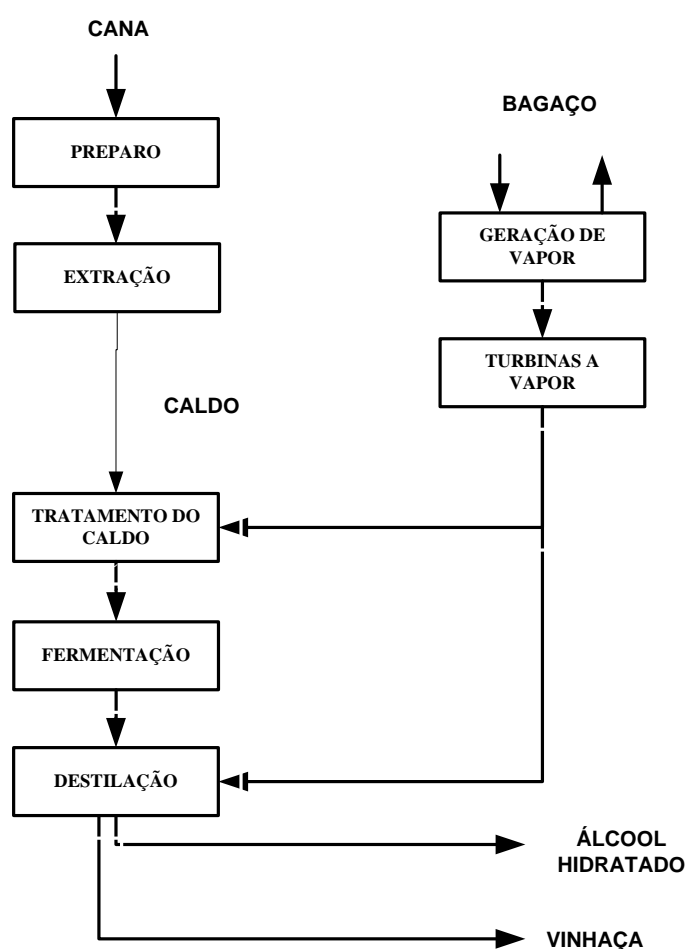


Figura 3 - Fluxograma da produção de álcool a partir da cana-de-açúcar.

Fonte: adaptado de XAVIER (1970)

Diferentemente do processo sacarídeo, o processamento de amiláceas para a produção de álcool conta com processos de desintegração, cozimento/gelatinização e de sacarificação. A desintegração é realizada em um ralador, visa aumentar a superfície de contato da matéria-

prima, facilitando o emprego do calor e dos agentes sacarificantes, para aumentar a eficiência da hidrólise e da fermentação. O cozimento/gelatinização é realizado para liberar os grãos de amido, facilitando a sacarificação. Já a sacarificação é o emprego de agente sacarificante para que o amido possa ser transformado em açúcares fermentescíveis. Este processo emprega enzimas amilolíticas e faz com que aproximadamente 85% do amido seja convertido em açúcares fermentescíveis (CAMACHO, 2009). O fluxograma do processamento de amiláceas para produzir álcool está representado na Figura 4.

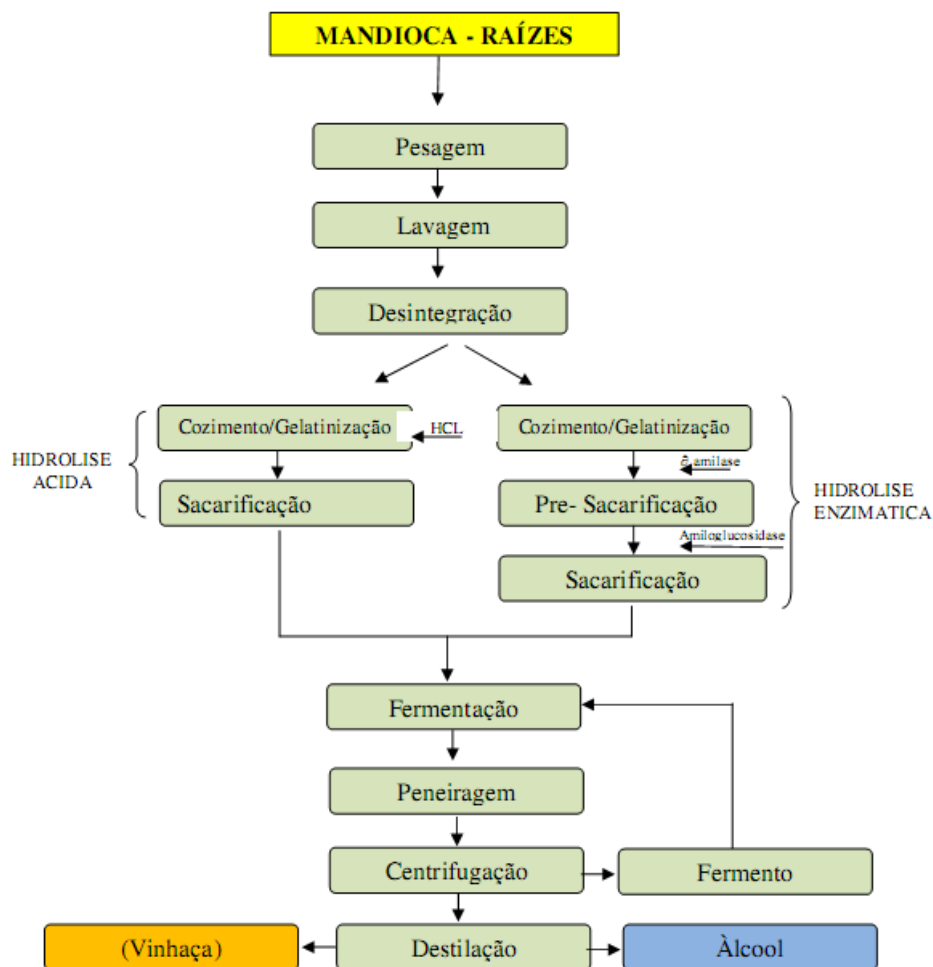


Figura 4 - Fluxograma da produção de álcool a partir de amiláceas.

Fonte: CAMACHO (2009)

Uma alternativa para o aumento da produção de etanol são as microdestilarias, que geram uma descentralização da fabricação em meio a grande variedade de plantas industriais. A produção de etanol combustível em pequena escala apresenta diversas peculiaridades, como a ineficiência do processamento industrial, o que acarreta em perdas.

A produção de álcool combustível em pequena escala, que ainda apresenta-se pouco desenvolvida, desempenha um grande papel econômico e social no meio em que está inserida.

Pode-se diferenciar as unidades produtoras em função da capacidade de produção em litros por dia, conforme visto na Tabela 3.

Tabela 3 - Classificação das destilarias por volume de produção.

Escala ou nome	Capacidade de Produção (L/dia)
macro	Maior que 60.000
mini	Entre 5.000 e 60.000
micro	Menor que 5.000

Fonte: HOFFMANN (1985).

A tecnologia das microdestilarias pode ser entendida como uma simplificação daquela empregada em grande escala, mas devido à grande variação entre as plantas de microdestilarias, é difícil falar em uma planta padrão para este tipo de configuração (BENGSTON, 1983). Habitualmente, esta tecnologia pode ser dividida em quatro grandes setores: recepção de matéria-prima; obtenção de substrato para fermentação; fermentação; e destilação. Existem ainda as utilidades, como geração de calor (incluída no setor de destilação), eletricidade e tratamento de água. Destas etapas, o principal diferencial está na destilação, pois uma microdestilaria pode optar pelo uso da destilação em batelada, menos sofisticada que a destilação contínua. A destilação em batelada é utilizada, comumente, quando a composição dos materiais a ser separados varia consideravelmente, quando a separação não ocorre de maneira frequente ou quando os materiais a serem separados são produzidos em pequenas quantidades (KISTER, 1992).

O Rio Grande do Sul conta com, aproximadamente, 30 microdestilarias de etanol com produção para consumo próprio e também algum excedente (IRGA, 2012).

2.2 Vinhaça

A vinhaça de cana-de-açúcar, ou vinhoto, garapão, restilo, vinhote, slops, vinasse, stillage, dependendo da região, é um líquido marrom escuro, com cheiro característico e sua qualidade está relacionada ao teor residual de açúcar o qual, por sua vez provoca um processo de putrefação tão logo a vinhaça é descarregada (FREIRE *et al.*, 2000).

Dos resíduos da fabricação do álcool, a vinhaça é sem dúvida o mais importante, não só em termos de volume gerado, mas também em potencial poluidor, isto se justifica pela dificuldade apresentada na eliminação deste resíduo, desde o início da fabricação do álcool no Brasil (GRANATO, 2003).

2.2.1 Características da vinhaça

A riqueza nutricional deste material está ligada à origem do mosto que será fermentado. Quando se parte do mosto do melão, a vinhaça apresenta concentrações maiores em matéria orgânica, potássio, cálcio e magnésio, ao passo que estes elementos decaem consideravelmente quando se trata de mosto de caldo de cana, como é o caso de destilarias autônomas e microdestilarias (SILVA *et al.*, 2007).

Entre os efluentes líquidos, a vinhaça é a que possui a maior carga poluidora, pois apresenta uma elevada Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) (CABELLO *et al.*, 2009). Segundo Cabello *et al.* (2009) a proporção de produção pode variar, dependendo do mosto utilizado, e fica na faixa de 13 litros de vinhaça por litro de álcool produzido. Então, a partir desta estimativa foram gerados no Brasil aproximadamente 328,512 milhões m³ de vinhaça na safra 2010/2011. A temperatura da vinhaça que sai dos aparelhos de destilação é de 80 a 100°C (MACHADO *et al.*, 2009).

Segundo Pinto (1999) a vinhaça proveniente da fabricação do álcool, a partir da cana-de-açúcar, apresenta composição variável em função dos seguintes fatores:

- Natureza e composição da matéria-prima;
- Sistema de fermentação;
- Aditivos utilizados na fermentação;
- Tipos de aparelhos utilizados na destilação;
- Tipo da levedura utilizada;
- Qualidade da água;
- Sistema de trabalho e influência dos operadores

A vinhaça é principalmente composta por água (97%). A fração sólida é constituída por matéria orgânica e elementos minerais. O potássio representa cerca de 20% dos elementos minerais e constitui um fator limitante para a definição da dosagem a ser aplicada no solo (MARQUES, 2006).

Segundo Silva (2011), além de apresentar elevado teor de potássio, possui quantidades menores de nitrogênio, cálcio, fósforo e magnésio. Várias são as citações bibliográficas sobre a composição química da vinhaça. Na tabela 4 está disponível um resumo de suas principais características. Através da tabela percebe-se que a relação média de DBO/DQO, (Demanda Bioquímica de Oxigênio/Demanda Química de Oxigênio) é de 54%, ou seja, mais da metade de toda a DQO (Demanda Química de Oxigênio) presente na vinhaça é composta por matéria orgânica biodegradável.

Tabela 4 - Composição da vinhaça de cana-de-açúcar proveniente de mosto de caldo, segundo vários autores.

Referência	pH	DBO(g/l)	DQO(g/l)	N(total)(g/l)	SO4(g/l)	P(Total)(g/l)
Van Haandel <i>et al.</i> (1994)	3,5	12,0	25,0	0,40	0,20	0,80
Driessen <i>et al.</i> (1994)	3,5	15,0	22,0	0,40	0,06	-
Costa <i>et al.</i> (1986)	4,2	16,5	33,0	0,70	0,09	1,74
Callander <i>et al.</i> (1983)	3,9	-	26,0	1,19	0,32	2,10

A vinhaça de destilação proveniente de material amiláceo não apresenta a mesma quantidade de dados na literatura, porém os valores encontrados por Weber (2012) condizem com os valores apresentados na Tabela 4.

2.2.2 Sistemas de tratamento da vinhaça

Até a década de 1970, as principais destinações da vinhaça eram os mananciais de superfície e “áreas de sacrifício” (locais próximos das destilarias onde a vinhaça era depositada sobre o solo). Os efeitos desta prática são conhecidos: a alta carga orgânica causa a proliferação de microorganismos que esgotam o oxigênio dissolvido na água, destruindo fauna e flora, além de provocar mau cheiro e contribuir para o agravamento de epidemias como a malária, a amebíase e a esquistossomose (ALMEIDA, 1952).

A portaria do Ministério do Interior n° 323, de 29/11/1978, proibiu, a partir da safra de 1978/1979, o lançamento da vinhaça *in natura* nos mananciais superficiais incorrendo de multa à usina que violasse a proibição. Atualmente, a norma que estabelece os padrões para a

disposição de efluentes domésticos quanto industriais é a Resolução 430 do Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA) de 13 de maio de 2011, que dispõe sobre condições, parâmetros, padrões e diretrizes para a gestão de efluentes em corpos de água receptores.

Com o advento destas leis, a questão sobre o que fazer com a vinhaça passou a fazer parte da pesquisa tecnológica, seja em grupos de cientistas, seja em pesquisas individuais, tanto em órgãos públicos como na própria indústria sucroalcooleira. De maneira geral, segundo Pinto (1999), a respeito da vinhaça observam-se os possíveis conjuntos de tratamentos: 1) concentração do resíduo a cerca de 60% de sólidos totais, permitindo a diminuição do seu volume e, assim, o uso como fertilizante, a transformação em proteína para ração ou mesmo a incineração; 2) fermentação ou digestão tanto aeróbia como anaeróbia, para obtenção de concentrado de levedos e bactérias de alto teor proteico no processo aeróbio, e gás metano e fertilizante no anaeróbio; 3) aplicação *in natura* na lavoura como fertilizante.

Desta forma, diversos processos podem ser empregados para simples tratamento ou para aproveitamento da vinhaça. O processo da digestão anaeróbia é o processo que se enquadra tanto na categoria dos processos de tratamento, pela elevada redução de DBO alcançada, quanto nos processos de aproveitamento devido à produção de energia na forma de biogás (CRAVEIRO, 1983).

2.3 Digestão Anaeróbia

Além de ser um processo natural, a digestão anaeróbia é também um dos processos mais antigos usados para o tratamento de efluentes e de estabilização de biossólidos (METCALF & EDDY, 2003). É um processo biológico natural que ocorre na ausência de oxigênio molecular, no qual populações bacterianas interagem estreitamente para promover a fermentação estável e auto-degradada da matéria orgânica, da qual resultam principalmente os gases metano e dióxido de carbono (MOSEY, 1983).

Historicamente o homem aprendeu a usar os microrganismos anaeróbios a seu favor, como na produção de queijo, vinho e cerveja, muito antes de saber de sua existência. Atualmente, para o tratamento de efluentes a aplicação da biotecnologia anaeróbia pode ser considerada como relativamente recente, pois vem sendo utilizada de forma sistemática há pouco mais de cem anos (CAMPOS *et al.*, 1999). O processo anaeróbio para tratamento de

efluentes industriais é considerado com início no começo da década de 1920 por Arthur M. Buswell e seus colegas (McCARTY, 2001).

O desenvolvimento desta tecnologia só foi possível e melhor utilizado com o concomitante desenvolvimento e conhecimento dos aspectos microbiológicos, bioquímicos, termodinâmicos e cinéticos do processo (CAMPOS *et al.*, 1999). Um salto no desenvolvimento da tecnologia foi o desenvolvimento do Reator anaeróbio de fluxo ascendente e manta de lodo (UASB, do inglês *Upflow Anaerobic Sludge Blanket*) concebido por G. Lettinga no início da década de 1970. O conceito do UASB e seu método de trabalho aceleraram o desenvolvimento e a aplicação de processos biológicos anaeróbios no tratamento de águas residuais (FENG, 2004).

Ultimamente o processo de digestão anaeróbia para tratamento de águas residuais pode ser considerado como estado-da-arte da tecnologia devido as suas características sustentáveis, por exemplo, alta capacidade de tratar substratos lentamente degradáveis em altas concentrações, baixa necessidade de energia, redução de odores, possibilidade de recuperação de energia e redução de emissões de CO₂ quando comparado a outras técnicas (RAMIREZ *et al.*, 2009).

A digestão anaeróbia produz produtos como as energias renováveis, bem como um fertilizante rico em nutrientes e adubos orgânicos. Na Alemanha, cerca de 4000 plantas são atualmente operadas para a geração de biogás de substratos agrícolas (LÜBKEN *et al.*, 2007).

Atualmente, a digestão anaeróbia é considerada como uma tecnologia consolidada com mais de 2200 reatores de alta taxa implementados em todo mundo (Van LIER, 2008). Além disso, o número de reatores deverá aumentar devido tanto à conscientização sobre a mudança climática como ao aumento significativo do uso de energia renovável (DONOSO-BRAVO *et al.*, 2011).

2.3.1 Fases do Processo de digestão anaeróbia

O processo de digestão anaeróbia envolve várias etapas e diferentes grupos de microrganismos utilizados para a degradação da matéria orgânica complexa em metano, gás carbônico, água, gás sulfídrico e amônia, além de novas células bacterianas.

O consórcio de microrganismos ativos no tratamento anaeróbio, para a remoção da matéria orgânica, realiza um processo complexo envolvendo muitas espécies de bactérias, atuando de forma simbiótica, evidenciando algumas etapas intermediárias (TOERIEN *et al.*,

1971). O processo de digestão pode ser normalmente dividido em quatro etapas principais, apresentadas na Figura 5.

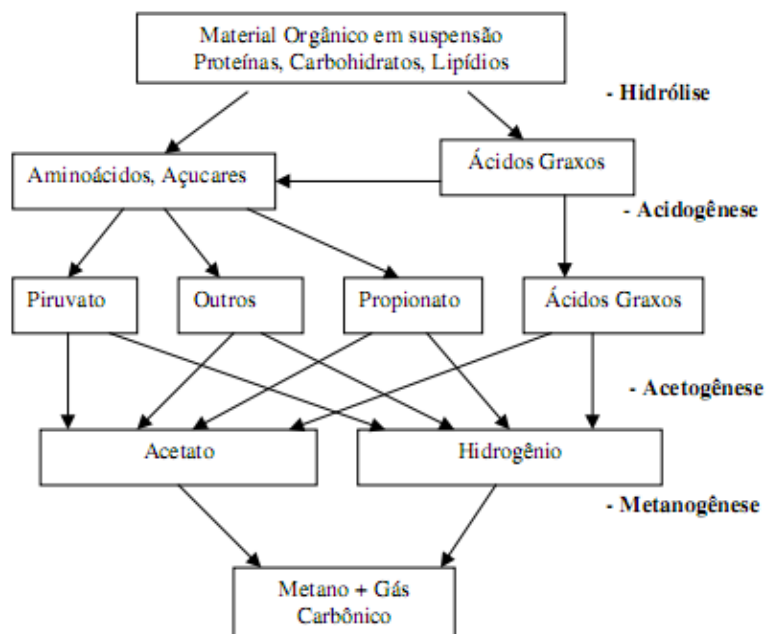


Figura 5 - Digestão anaeróbia da matéria orgânica.

Fonte: adaptado de FORESTI (1999)

2.3.1.1 Hidrólise

O processo de degradação da matéria orgânica começa com a hidrólise do material presente no efluente, que é a conversão de partículas e polímeros solúveis em produtos solúveis, tais como os aminoácidos, os açúcares e os ácidos graxos. Este processo é realizado por enzimas extracelulares produzidas por bactérias, do tipo celulasas, amilase e protease, por exemplo. Os microrganismos que produzem as enzimas podem ser anaeróbios facultativos ou estritos.

São gerados então compostos mais simples, que podem ser assimilados pelos microrganismos. As reações responsáveis são geralmente hidrolíticas e catalisadas. Em muitos casos, a velocidade de hidrólise pode ser a etapa limitante para todo o processo, nos casos em que o substrato está na forma de partículas, pois partículas grandes com relação superfície/volume baixas são hidrolisadas de forma mais lenta do que partículas de pequenas dimensões (CHERNICHARO, 1997).

2.3.1.2 Acidogênese

A acidogênese é a segunda etapa do processo. Nesta, aminoácidos e açúcares, obtidos pela hidrólise, são degradados por reações fermentativas obtendo-se hidrogênio e ácidos propiônico, butírico, acético e similares. A maioria das bactérias acidogênicas são anaeróbias estritas, mas cerca de 1% delas consiste em bactérias facultativas, as quais podem oxidar o substrato orgânico por via aeróbia para retirar o oxigênio dissolvido que se torna tóxico para a etapa metanogênica. Acidogênese é muitas vezes o passo mais rápido do processo anaeróbio (MUSSATI, 1998).

2.3.1.3 Acetogênese

A acetogênese é a conversão dos produtos da acidogênese em compostos que formam os substratos para a produção de metano: acetato, hidrogênio e dióxido de carbono. Aproximadamente 70% da DQO digerida é convertida em ácido acético, enquanto o restante da DQO é concentrado no hidrogênio formado (FORESTI, 1999).

2.3.1.4 Metanogênese

O processo de degradação do substrato é finalizado por esta etapa, que consiste na transformação dos produtos formados anteriormente em metano e dióxido de carbono. A formação do metano é um processo lento que se dá por dois grupos distintos de bactérias, as metanogênicas acetoclásticas, que utilizam como substrato o acetato e as metanogênicas hidrogenotróficas, que utilizam como substrato o hidrogênio e o gás carbônico.

Pode-se representá-las pelas seguintes reações:

- Metanogênese acetoclástica:



- Metanogênese hidrogenotrófica:



As bactérias que produzem metano a partir de hidrogênio crescem mais rapidamente que aquelas que usam ácido acético. Desta forma, a metanogênese acetoclástica geralmente

limita a velocidade de transformação do material orgânico complexo (CHERNICHARO, 1997).

2.3.2 Influências na degradação anaeróbia

A degradação da matéria orgânica via biodigestão anaeróbia pode ser seriamente comprometida por uma série de fatores, na sua maioria passíveis de controle, tanto em relação às condições de operação do sistema de tratamento, quanto às variações ambientais (LEITÃO *et al.*, 2006).

Os principais fatores que podem alterar a digestão anaeróbia são:

Temperatura: Segundo Angelidaki & Sanders (2004), a temperatura é um dos fatores mais importantes, pois os microrganismos não possuem mecanismos para controlar a temperatura interna e dependem da temperatura externa. As faixas de digestão anaeróbia são: psicrófila (temperaturas abaixo de 20°C), mesófila (temperatura entre 25°C e 40°C) e termófila (45 a 60°C).

pH: Os microrganismos são seres vivos que necessitam de um meio propício ao seu desenvolvimento, por isso, a acidez e a alcalinidade são fatores importantes na digestão anaeróbia. O pH do processo deve ser mantido entre 6 e 8, podendo ser considerado ótimo entre 6.8 e 7.4 (GRADY *et al.*, 1999).

Composição e concentração: Uma maior concentração de matéria orgânica disponível gera um aumento de gás produzido, influenciando no mecanismo da digestão anaeróbia. O processo também está relacionado à disponibilidade de nitratos, fosfatos e sulfatos. Nitrogênio, fósforo e enxofre são essenciais para a última etapa da degradação anaeróbia, uma relação de 500:5:1 de DQO:Nitrogênio:Fósforo geralmente é suficiente para atender a demanda de macronutrientes pelos microorganismos (SPEECE, 1996).

Inibidores da digestão anaeróbia: A toxicidade de um composto à digestão anaeróbia é um termo relativo, onde dependendo da concentração, uma mesma espécie pode ser estimulante ou maléfica (SOUZA, 1984). Os principais compostos que podem ser inibidores são os ácidos orgânicos voláteis e etanol (WANG *et al.*, 2009), amônia (HANSEN *et al.*, 1998), nitratos (SOUZA, 1984) e cianetos (YANG *et al.*, 1980).

2.4 Reator UASB

O interesse em sistemas anaeróbios que tinham em sua principal componente o passo biológico (tratamento secundário) no tratamento de efluentes foi escasso até o desenvolvimento do reator anaeróbio de fluxo ascendente e manta de lodo (UASB) no início dos anos 70 (LETTINGA *et al.*, 1980; LETTINGA & VINKEN, 1980). Antecedentes do reator UASB podem ser encontradas no chamado processo anaeróbio de contato estudado por Coulter *et al.* (1957), Ettinger *et al.* (1958), Simpson (1971), e Pretorius (1971). Agora, o reator UASB é extensivamente utilizado para o tratamento de vários tipos de águas residuais (LETTINGA & HULSHOFF POL, 1991; KATO *et al.*, 1994), inclusive a vinhaça (CRAVEIRO, 1983, SZYMANSKI *et al.*, 2010).

O diagrama esquemático de um reator UASB é mostrado na Figura 6. O reator consiste em duas partes: uma coluna cilíndrica ou retangular, e um separador de trifásico (LETTINGA e HULSHOFF POL, 1991). O reator UASB é inicialmente semeado (com inóculo, podendo ser partículas de lodo ativado, lodo anaeróbio ou do próprio efluente a ser digerido, por exemplo). O lodo entra na base do reator. Sob condições apropriadas, partículas leves e dispersas serão levados para fora enquanto que os componentes mais pesados retidos, minimizando assim o crescimento de lodos dispersos enquanto formam-se grânulos ou flocos constituídos pelo material orgânico inerte, material inorgânico e pequenas bactérias agregadas ao inóculo (HULSHOFF POL *et al.*, 2004).

Depois de um determinado período (geralmente 2 a 8 meses), dependendo das condições de operação e das características do inóculo e do efluente a ser tratado, um leito de lodo muito denso que pode ser granular ou floculento, com elevadas propriedades de sedimentação se desenvolve.

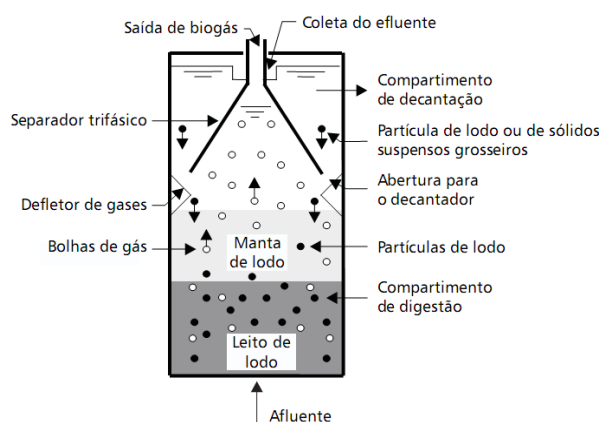


Figura 6 - Esquema de um reator UASB

Fonte: adaptado de CAMPOS (1999)

Acima do leito denso de lodo existe uma zona de manta de lodo com um crescimento muito difuso e velocidades mais baixas de partículas sedimentáveis (AIYUK *et al.*, 2006). As reações biológicas ocorrem durante todo o leito de lodo altamente ativo e na zona de manto de lodo. Como o fluxo passa para cima, os compostos solúveis orgânicos no afluente são convertidos em biogás consistem principalmente de metano e dióxido de carbono. O biogás produzido e o lodo carregado pelas bolhas de gás são então separadas do efluente pelo separador trifásico, em que os defletores tentam impedir de forma tão eficiente quanto possível, o “*wash-out*” da matéria bacteriana ativa ou do lodo flutuante granular pela decantação das partículas até a zona de reação (LETTINGA e HULSHOFF POL, 1991; HICKEY *et al.*, 1991).

O reator UASB pode substituir o decantador primário, o digestor anaeróbico de lodo, a etapa aeróbia (lodos ativados) e o decantador secundário de um sistema aeróbico convencional. No entanto, o efluente de reatores UASB geralmente precisa de tratamento adicional, a fim de remover restos de matéria orgânica, nutrientes e patógenos. Este pós-tratamento pode ser realizado em sistemas convencionais aeróbicos como lagoas de estabilização, plantas de lodos ativados, e outros. Na Tabela 5, estão apresentadas as principais vantagens e desvantagens do reator UASB.

Tabela 5 - Vantagens e desvantagens do sistema anaeróbico em reatores UASB

Vantagens	Desvantagens
Baixa produção de lodo excedente	Suscetibilidade a inibição
Baixo consumo de energia	Start up lento
Pequena demanda de área	Necessidade de pós tratamento
Aproveitamento do gás metano	Remoção de nitrogênio e fósforo de maneira insatisfatória
Tolerância a elevadas cargas orgânicas	Bioquímica e microbiologia do processo complexas
Baixo consumo de nutrientes	
Baixo custo de implantação	

Fonte: adaptado de CHERNICHARO (1997)

2.5 Modelagem da Digestão Anaeróbia

Embora a tecnologia da digestão anaeróbia venha sendo aplicada há várias décadas, existe ainda a falta de conhecimentos fundamentais sobre os mecanismos de digestão, o que se deve principalmente à complexidade muito elevada do processo. Como resultado, a concepção de sistemas de digestor ainda geralmente é realizada de maneira empírica (De BAERE, 2006).

Há uma concordância na literatura de que a aplicação de modelos matemáticos é um pré-requisito para melhorar o desempenho dos digestores e do entendimento do processo e, portanto, muita atenção está focada no desenvolvimento de modelos precisos (DEWIL, 2011). Estes modelos cada vez mais se tornam uma ferramenta orientada para o projeto de plantas de tratamento de águas residuárias, treinamento de operadores, controle de processos biotecnológicos e detecção de falhas (RODRIGUEZ, 2003).

Segundo Donoso-Bravo *et al.* (2011) vários modelos matemáticos de digestão anaeróbia tem sido propostos nos últimos vinte anos e uma variedade de métodos têm sido utilizados para a estimativa de parâmetros e de validação do modelo. Entretanto, a digestão anaeróbia é um processo complexo caracterizado pela sua alta não linearidade e pela dificuldade de coletar grandes quantidades de dados experimentais informativos para fins de modelagem.

Muito esforço vem sendo gasto na tentativa de gerar modelos dinâmicos para o processo anaeróbio. Estes processos são ainda um campo extremamente fértil para a modelagem matemática. Muitos modelos de digestão anaeróbia existentes foram desenvolvidos para aplicações específicas ou em fermentadores alimentados com um substrato muito específico e não tem seu uso generalizado (LÜBKEN *et al.*, 2007).

A maior parte dos modelos gerados baseia-se nas relações desenvolvidas por Monod, em 1949, Novick e Szilard, em 1950, Moser, em 1958, e Cointois, em 1959, na área da microbiologia. A pesquisa em modelagem matemática fenomenológica reportada na literatura técnica especializada refere-se basicamente às reações biológicas e, recentemente, às reações que ocorrem no interior das células (PAVLOSTHATIS & GIRARDO GOMEZ, 1991).

Basicamente, existem duas maneiras em que um modelo pode ser estabelecido: este pode ser derivado de uma maneira dedutiva usando leis da natureza, chamado de modelagem fenomenológica, ou pode ser inferido a partir de um conjunto de dados recolhidos durante

uma experiência prática com o sistema, chamado de modelagem empírica ou de caixa-preta (BEQUETTE, 2010).

Há um grande desenvolvimento nos modelos fenomenológicos do processo de digestão anaeróbia (FEDOROVICH *et al.*, 2003) com base no modelo de digestão anaeróbia No. 1 (ADM1) (BATSTONE *et al.*, 2002), porém sua alta complexidade ainda dificulta o uso. Já para a modelagem em caixa-preta, redes neuronais artificiais (STRIK *et al.*, 2005) e identificação paramétrica (CAMERON *et al.*, 2011) tem sido métodos de bastante emprego.

Em suma, um modelo transforma uma dada entrada (u) em uma saída (y), através de uma relação conhecida. As saídas são as variáveis de interesse do usuário, enquanto as entradas são as manipulações que irão afetar as saídas (SILVA, 2007). Na situação da digestão anaeróbia, as entradas são a composição e quantidade de efluente a ser tratado, e as saídas são a concentração do efluente ao passar pelo processo e a quantidade de gás metano gerada.

2.5.1 Redes Neuronais

As redes neuronais artificiais (RNAs) são modelos matemáticos empíricos, com memória e não-lineares, que buscam representar matematicamente o funcionamento neurológico do cérebro. O cérebro humano possui uma enorme habilidade de processar informações e, a partir deste diagnóstico, pesquisas foram realizadas visando reproduzir as reações do cérebro em máquinas (HAYKIN, 1994).

As pesquisas sobre redes neurais artificiais começaram em 1943, Warrem McCulloch e Walter Pitts propuseram as bases da neurocomputação, a partir de analogias matemáticas com o funcionamento dos neurônios biológicos. Porém somente em 1949, Donald Hebb propôs um modo no qual as redes neuronais artificiais tivessem capacidade de aprendizado, isto proporcionou o surgimento de redes neurais eficazes (TAFNER *et al.*, 1996).

Após um período de esquecimento entre os anos de 60 e 80, o surgimento do trabalho de Hopfield e Kohonemt, com algoritmos de aprendizado mais poderosos, numa época de aparecimento de grandes avanços computacionais levou a maior facilidade de implementação destas redes (BRAGA *et al.*, 2000).

Segundo Haykin (1994), as redes neuronais apresentam elevada robustez e tolerância a falhas, podem ser ajustadas a novos ambientes por meio do processo de aprendizagem,

conseguem realizar vários processos ao mesmo tempo e possuem a capacidade de realizar mapeamentos não-lineares entre entrada e saída.

O neurônio artificial é o elemento básico de todas redes neuronais, pode ser chamado também de nó ou unidade de processamento (Figura 7).

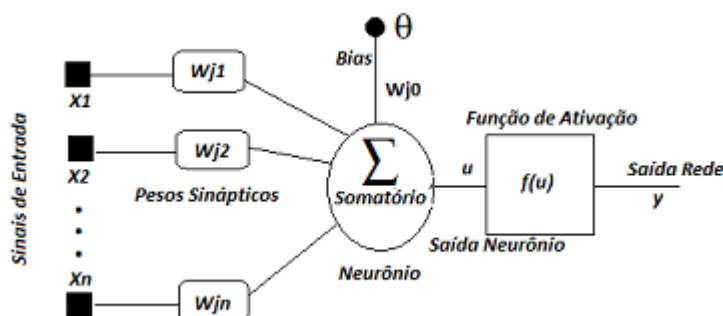


Figura 7 - Neurônio Artificial

Fonte: SOUZA (2012)

O neurônio artificial conta com um sinal adicional *bias* que favorece ou não a sua ativação. O processo sináptico é representado pelos pesos (w) que amplificam os sinais recebidos. Tem-se ainda a função de ativação (f) que serve para modelar a maneira com que o neurônio responde ao nível de excitação, definindo e limitando a saída da RNA. Existem três tipos básicos de funções de ativação: limiar, linear e sigmoide. A sua escolha varia de acordo com o objetivo do usuário (MAIER *et al.*, 2004).

A arquitetura de uma rede neuronal é o que define a maneira como os diversos neurônios artificiais estarão dispostos. Em geral, ela é dividida em três partes, entrada, camada oculta e saída. Tais camadas, respectivamente, captam os dados de entrada, processam os dados de entrada e apresentam o resultado final da rede. Existem várias arquiteturas distintas, na seção 2.5.2.1 será apresentada a estrutura adotada nesta dissertação com uma breve explicação.

Todas RNAs possuem um processo chamado de treinamento e aprendizado, onde elas aprendem com o ambiente e melhoram o desempenho. Sendo esta a propriedade mais importante de uma rede neuronal, nesta fase a rede retira informações importantes de padrões de informações apresentados a ela, criando então sua própria representação do sistema. Este aprendizado é realizado através de um processo que modifica os pesos sinápticos que são ajustados de acordo com os padrões de treinamento propostos. Novamente, há um número diverso de tipos de algoritmos de aprendizado para diferentes RNAs, o que difere um de outro

é a maneira com que os pesos são ajustados. A maneira com mais usada para o aprendizado é o aprendizado supervisionado, no qual é usado um agente externo que recomenda à rede a resposta desejada para o padrão de entrada (HAYKIN, 1994).

2.5.2.1 Redes Neurais de Múltiplas Camadas - MLP

Esta arquitetura tem a presença de uma ou mais camadas intermediárias (ou ocultas), a função destes neurônios ocultos é trabalhar entre a entrada externa e a saída da rede da melhor maneira possível. Esta adição de camada oculta torna a rede capaz de conseguir estatísticas de elevada ordem e com capacidade de tratar dados que não são linearmente separáveis (OLIVEIRA, 2005).

As MLP são redes unidirecionais, distribuídas em camadas, em que apenas a camada de entrada não realiza processamento. Em cada camada pode-se ter vários neurônios, e estas camadas se comunicam entre si até alcançar a última camada (Figura 8).

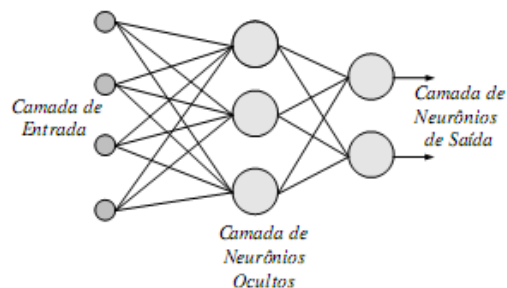


Figura 8 - Estrutura da MLP

Fonte: OLIVEIRA (2005)

A rede MLP é a mais conhecida entre as redes neuronais existentes, pela sua fácil implementação e compreensão, sendo bastante usada com o seu treinamento de maneira supervisionada e com o algoritmo de retropropagação de erro, conhecido como *error backpropagation* (EYNG, 2006).

Este algoritmo acha através de iterações a mínima diferença entre a saída buscada e a obtida pela rede, com o mínimo possível de erro. Então, ajusta os pesos entre as camadas pela retropropagação do erro localizado em cada iteração. Este procedimento é repetido até que o erro experimental entre o real e o calculado pela rede de saída satisfaça um critério pré-

determinado. Este algoritmo de forte estabilidade pode aproximar qualquer sistema dinâmico não-linear, sendo adequado para estabelecer os modelos de sistemas altamente não-lineares (HAYKIN, 1994)

Uma ilustração do algoritmo é encontrada na Figura 9.

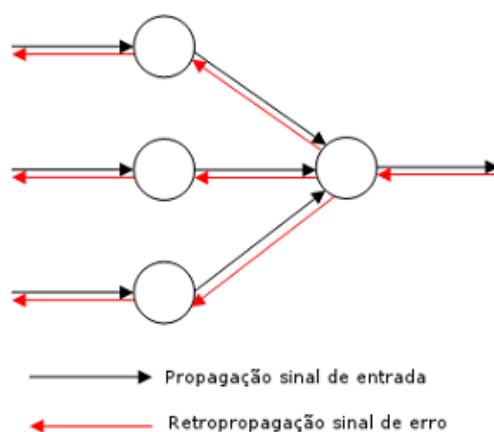


Figura 9 - *Backpropagation*

Fonte: SOUZA (2012)

2.5.1.2 O estudo de redes neurais em processos de digestão anaeróbia

Nos últimos anos, as RNAs tem sido aplicadas com sucesso em multivariados bioprocessos não-lineares como uma ferramenta útil para a construção de modelos e prever com precisão as saídas para um novo conjunto de dados de entrada (MU *et al.*, 2007).

A principal vantagem desta configuração é que ela pode ser construída apenas a partir das entradas e saídas prévias, sem o conhecimento detalhado do processo, e consegue prever as saídas futuras com grande capacidade (NASR *et al.*, 2013).

Chen *et al.* (2011) e Mu *et al.* (2007) simularam e provaram a eficiência de redes neurais para o acompanhamento de reatores UASB. Bioprocessos para a produção de hidrogênio já foram modelados por redes neurais por Nasr *et al.* (2013), Rosales-Colunga *et al.* (2010) e Prakasham *et al.* (2011). O estudo de Nasr *et al.* (2013) se destaca, pois encontrou altos coeficientes de correlação para o bioprocessos através de estudos em batelada e com redes neurais de configuração simplificada.

Erdirencelebi *et al.* (2011) também utilizaram redes neurais para prever a qualidade do efluente de um sistema de digestão anaeróbio, a predição demonstrou alta confiabilidade. No mesmo caminho, Elmolla *et al.* (2010) modelaram somente a remoção de DQO de um

processo com auxílio exclusivo de redes neurais artificiais e encontraram um coeficiente de determinação (R^2) de 0.997, o que leva a uma alta predição do processo estudado.

No Brasil, um trabalho se destaca, Carvalho *et al.* (1999) modelaram o comportamento de um reator UASB com RNAs tratando esgoto. Com a predição da qualidade do efluente considerada eficiente, este trabalho abriu portas para o uso desta técnica em demais processos no país, como o trabalho de Medeiros (2006), no qual foi avaliado a operacionalidade de uma estação de tratamento com um reator UASB utilizando as redes neuronais.

2.5.2 Modelos de Identificação Paramétrica

A identificação de sistemas é uma alternativa muito importante para análises de processos. Esta busca através de uma relação matemática prever, com certa confiabilidade, o comportamento da saída de um sistema dinâmico, utilizando dados colhidos da entrada e da saída do processo. Na identificação paramétrica, a estrutura da relação matemática é fixada *a priori* através de métodos matemáticos já conhecidos (ex. atribuição de pólos, lugar das raízes, etc.) e os parâmetros da estrutura são ajustados aos dados (LJUNG, 1987).

A estrutura geral dos modelos paramétricos pode ser definida por uma função de transferência discreta, representada em 10.

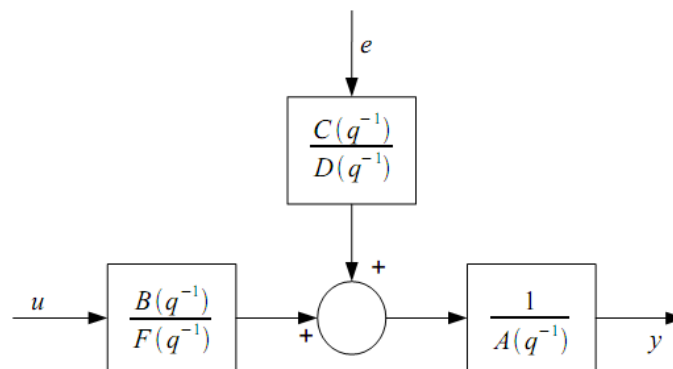


Figura 10 - Modelo geral para identificação paramétrica

Equacionalmente, temos:

$$A(q^{-1})y(k) = \frac{B(q^{-1})}{F(q^{-1})}u(k - nT) + \frac{C(q^{-1})}{D(q^{-1})}e(k) \quad (2.1)$$

em que q^{-1} representa o operador de atraso e

$$A(q^{-1}) = 1 + a_1q^{-1} + \dots + a_{na}q^{-na} \quad (2.2)$$

$$B(q^{-1}) = b_1q^{-1} + b_2q^{-2} \dots + b_{nb}q^{-nb} \quad (2.3)$$

$$C(q^{-1}) = 1 + c_1q^{-1} + \dots + c_{nc}q^{-nc} \quad (2.4)$$

$$D(q^{-1}) = 1 + d_1q^{-1} + d_2q^{-2} \dots + d_{nd}q^{-nd} \quad (2.5)$$

$$F(q^{-1}) = 1 + f_1q^{-1} + f_2q^{-2} \dots + f_{nf}q^{-nf} \quad (2.6)$$

onde na, nb, nc, nd e nf são as ordens dos respectivos polinômios e $e(k)$ é a perturbação tipo ruído branco com média nula e variância λ .

Verifica-se que $A(q^{-1})$ indica os pólos comuns à modelação da dinâmica do sistema e ao ruído, $C(q^{-1})$ e $D(q^{-1})$ os pólos e zeros que afetam o ruído, já $B(q^{-1})$ e $F(q^{-1})$ representam os pólos e zeros que afetam apenas as entradas.

2.5.2.1 Modelo ARX

O modelo *Auto Regressive with eXogenous input (ARX)* é alcançado através do modelo geral (2.1) onde, $C(q^{-1}) = D(q^{-1}) = F(q^{-1}) = 1$, assim origina a Equação 4.2, na qual nT representa o número de atrasos da entrada para a saída.

$$A(q^{-1})y(k) = B(q^{-1})u(k - nT) + e(k) \quad (2.7)$$

O modelo *ARX* tem uma interpretação simples e por isso é muito utilizado, porém o apresenta a desvantagem do polinômio $A(q^{-1})$ afetar a dinâmica do sistema como um ruído (Figura 11)

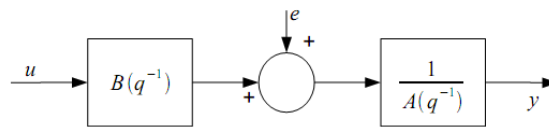


Figura 11 - Modelo ARX

2.5.2.2 Modelo ARMAX

O modelo *Auto Regressive Moving Average with eXogenous input (ARMAX)* é uma extensão natural do modelo *ARX*, onde o termo que representa o erro é expresso como uma média móvel do ruído branco, e é representado por:

$$\frac{1}{A(q^{-1})}y(k) = B(q^{-1})u(k - nT) + C(q^{-1})e(k) \quad (2.8)$$

Este modelo tem mais flexibilidade que o modelo anterior e está representado na Figura 12.

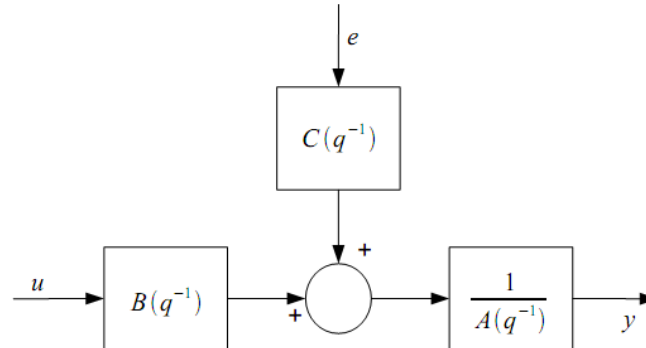


Figura 12 – Modelo ARMAX

2.5.2.3 Modelo Output Error

O modelo *Output Error (OE)* é representado pela Equação 2.9 e pela Figura 13. A dinâmica do sistema é modelada de forma separada, não tendo nenhum parâmetro que modele o ruído.

$$y(k) = \frac{B(q^{-1})}{F(q^{-1})} u(k - nT) + e(k) \quad (2.9)$$

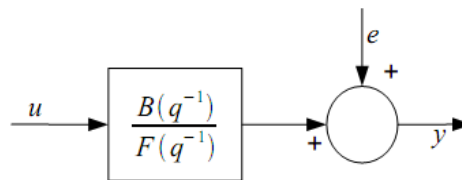
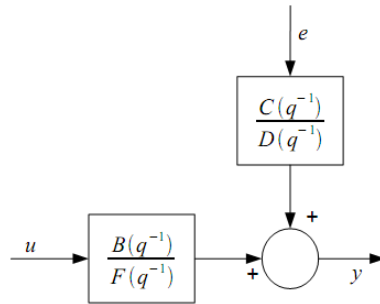


Figura 13 - Modelo Output Error

2.5.2.4 Modelo Box Jenkins

O modelo *Box Jenkins (BJ)*, Figura 14, é uma generalização natural do *OE*, permitindo que a função de transferência fosse uma função racional com parâmetros desconhecidos.

$$y(k) = \frac{B(q^{-1})}{F(q^{-1})} u(k - nT) + \frac{C(q^{-1})}{D(q^{-1})} e(k) \quad (2.10)$$

Figura 14 – Modelo *Box Jenkins*

3. ANÁLISE ESTATÍSTICA

Na presente dissertação é avaliada a modelagem empírica do desempenho de um reator UASB para o tratamento de vinhaça proveniente de uma microdestilaria. Para realizar esta modelagem recorreu-se aos dados de operação de um reator tratando dois tipos de vinhaça: vinhoto proveniente de material amiláceo (batata) e de material sacarídeo (cana-de-açúcar). Este trabalho foi realizado por Weber (2012), conjuntamente com o presente autor, e sua metodologia bem como principais resultados gerados estão tratados na seção 3.1. Entretanto para a criação dos modelos empíricos foi necessário *a priori* realizar uma análise estatística dos dados, avaliando-se quais apresentam maior importância e são indispensáveis para os modelos predizerem corretamente a performance do processo.

3.1 Aparato experimental

Foram construídos e operados dois reatores UASB em escala laboratorial, os quais estão instalados no Laboratório de Processos Industriais do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Maria. Salienta-se que o mesmo projeto de reator já foi utilizado por Hamerski (2012) para o tratamento de efluente de usina de laticínios, e por Silveira *et al.* (2011) como pós tratamento de efluente hospitalar. Os resultados são constituídos de análises do afluente ao reator e do efluente após o período estipulado de digestão anaeróbia. Os dados apresentados para a modelagem matemática correspondem a um período de 30 dias de operação, para o vinhoto de batata, e a um período de 50 dias de operação para o vinhoto de cana-de-açúcar.

Os reatores foram construídos em material acrílico transparente, com as seguintes dimensões: 1,25 metros de altura e 0,12 metros de largura, totalizando um volume útil de 18 litros. Cada reator é dotado de quatro pontos de coleta de amostra, de placas de distribuição de efluente, que evitam os caminhos preferenciais, de placas defletoras de lodo e de um separador trifásico, o que é característica própria deste tipo de reator (CHERNICHARO, 1997). O projeto do reator apresenta-se na Figura 15 e o reator em operação é ilustrado na Figura 16.

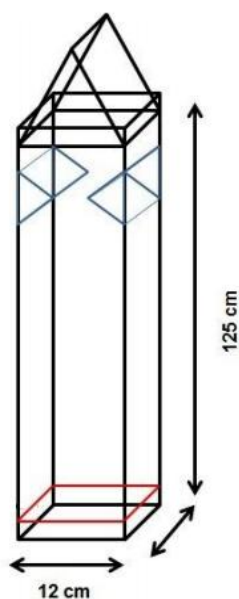


Figura 15 - Projeto do reator UASB

Fonte: Adaptado de HAMRESKY (2012)



Figura 16 - Reator UASB em operação

Fonte: WEBER (2012)

3.1.1 Operação do reator

O reator em seu período de operação apresentou sempre uma vazão afluyente constante, de $8,64 \text{ l.h}^{-1}$. Sua velocidade ascensional então esteve em valores médios de acordo com Campos (1999), na faixa de $0,6 \text{ m.h}^{-1}$.

A alimentação do reator funcionou em um sistema de ciclos, cada ciclo corresponde ao período em que o reator operava em reciclo até a nova realimentação. Weber (2012) demonstrou que para uma vinhaça de batata a duração mais adequada do ciclo é de 3 dias, já para a vinhaça de cana-de-açúcar a duração fica em 5 dias.

As realimentações foram realizadas manualmente, completando o reservatório de 50 litros com nova vinhaça e retirando a tratada do ciclo anterior. Um esquema do funcionamento está apresentado na Figura 17.

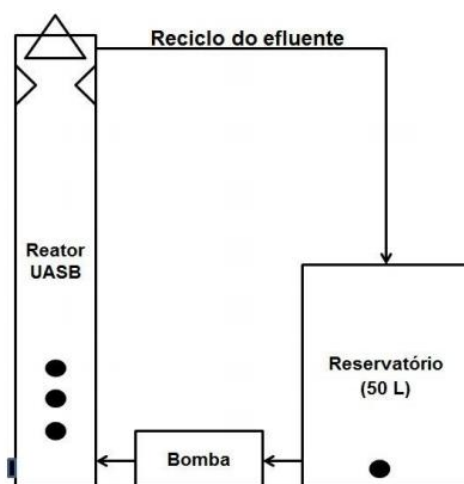


Figura 17 - Funcionamento do reator UASB

Fonte: Adaptado de HAMERSKY (2012)

Os dados utilizados para a modelagem foram dados de operação estável do reator, após o período de *start* (partida), o qual foi realizado com inóculo proveniente de um reator UASB em operação no sistema de tratamento de uma cervejaria, mais detalhes deste *start* podem ser encontrados em Weber (2012).

3.1.2 Composição da alimentação

O substrato do experimento foi proveniente da microdestilaria do Colégio Politécnico da Universidade Federal de Santa Maria. As amostras foram retiradas diretamente da coluna

de destilação e armazenadas em uma câmara fria, em temperatura de 5°C. A coluna de destilação é ilustrada na Figura 18.



Figura 18 - Coluna de destilação

Conforme dito anteriormente, foram utilizados dois tipos diferentes de vinhaça; uma proveniente de material amiláceo (batata) e outra proveniente de material sacarídeo (cana-de-açúcar). o tratamento foi idêntico em ambos os casos.

Antes de entrar em operação o efluente foi previamente corrigido, ou seja, seu pH de entrada era mantido em 7, a partir de uma neutralização realizada com uma solução de 4 M de NaOH, e, de acordo com necessidade de cada amostra, foi corrigida a carga de macronutrientes (Nitrogênio e Fósforo) com soluções de fertilizantes, para que a vinhaça que adentrasse ao reator sempre tivesse a mesma relação 350:7:1 de DQO:Nitrogênio:Fósforo.

3.1.3 Análises de acompanhamento experimental

O acompanhamento experimental foi realizado a partir de parâmetros físico-químicos de controle, os quais as análises foram realizadas no Laboratório de Controle Ambiental do Departamento de Engenharia Química da UFSM.

Analisou-se a DQO, os Sólidos Totais (ST), o NTK (Nitrogênio Total Kjeldahl) e o Fósforo Total. Esses parâmetros foram avaliados conforme o *Standard Methods for Examination of Water and Wastewater, 1998*, e a sua periodicidade está retratada na Tabela 6, juntamente com os outros parâmetros monitorados, que foram o pH e a temperatura.

A DQO é o parâmetro que representa a quantidade de oxigênio consumido na oxidação de materiais e substâncias orgânicas e minerais sob atuação de agente oxidante forte. A análise de DQO foi realizada conforme o método colorimétrico do refluxo fechado - 5220D (APHA *et al.*, 1998).

Os Sólidos Totais representam a quantidade total de compostos orgânicos e inorgânicos, em suspensão e solúveis presentes na amostra. A análise foi realizada pelo método de secagem a 103-105°C – 2540B (APHA *et al.*, 1998).

O NTK indica a quantidade de nitrogênio total presente tanto na forma orgânica como na forma amoniacal. A análise de Nitrogênio foi realizada pelo método Kjeldahl – 4500 – Norg B. Macro (APHA *et al.*, 1998).

Para a análise do Fósforo Total foi usado o método colorimétrico de ácido vanadomolibdato fosfórico – 4500-P C (APHA *et al.*, 1998).

Para registrar a temperatura, cada reator continha um termômetro que ficou ligado durante todo experimento, que registrava, além da temperatura instantânea, a temperatura máxima e a mínima. Adicionalmente, o pH foi analisado pelo método potenciométrico.

Tabela 6 - Monitoramento realizado nas amostras

Análise	Amostragem realizada para cada ciclo		
	Afluente	Reator	Efluente
DQO	Presente	Diário	Presente
ST	Presente		
NTK	Presente		
F	Presente		
Temperatura		Diário	
pH	Presente	Diário	

3.1.4 Hardware e Softwares utilizados

Para as análises estatísticas o software escolhido foi o STATISTICA 8.0.

Para o desenvolvimento dos modelos de redes neuronais utilizou-se a ferramenta computacional MATLAB® versão 9.0 (The Mathworks Inc. EUA) através de *Neural Network Toolbox*. Um arquivo no MATLAB foi escrito, que carregou os dados experimentais, e então construiu-se as redes neuronais, treinando e validando cada alternativa de arquitetura e

configuração testada. Os dados de entrada e de saída foram normalizados e desnormalizados antes e após a aplicação efetiva da rede.

Para realizar a identificação paramétrica dos dados coletados, utilizou-se o MATLAB através de seu *System Identification Toolbox* – IDENT, que consiste em um programa que acompanha o MATLAB, cuja função é auxiliar na identificação de sistemas baseados nos sinais de entrada e saída oferecidos pelo usuário (neste caso, DQO de entrada e DQO de saída, respectivamente).

O PC utilizado apresenta um processador *Intel® Core™ 2 Duo Processor T6500* de 2.26 GHz e memória RAM de 4 Gb, e levou cerca de 10 segundos para o processamento de uma rede neuronal. O *Neural Network Toolbox* oferece uma ampla variedade de parâmetros para o desenvolvimento da rede neuronal, que pode ser escolhido de forma flexível..

3.2 Dados Experimentais utilizados

Os dados experimentais utilizados estão apresentados nas Tabelas 7 e 8; na Tabela 7 são dispostos os dados da digestão anaeróbia da vinhaça de batata em reator UASB, durante o período de 19/09/2012 ao período de 23/11/2012, e na Tabela 8 estão dispostos os dados para a cana-de-açúcar, obtidos durante o período de 4/09/2012 a 16/11/2012.

Tabela 7 - Dados experimentais para a digestão da vinhaça de batata

Redução (%)	DQO inicial (mg/L)	Sólidos Totais (mg/L)	Temperatura Mínima (°C)	Temperatura Máxima (°C)	Temperatura Média (°C)	Período do Ciclo (dias)
55.88	54400	24976	10	18	13	5
51.32	53000	25212	9.2	20.2	16.5	3
80.49	28200	25212	12	28	16.1	3
57.09	28200	25212	15.2	28	16.76	3
58.51	28200	24056	17.8	24.8	18.56	3
93.04	30200	23152	17.9	31.8	25.1	3
95.75	25900	25400	20.2	31.8	28.1	3
50.43	34100	21200	16.6	24.4	21.63	3
66.66	60600	21200	12.6	18.6	17.3	3
68.88	87100	9652	13	28.5	19.98	3
81.55	75900	23152	15.2	28	21.12	5
53.23	41700	25400	16.9	34.5	23.02	3

Fonte: adaptado de WEBER (2012)

Tabela 8 - Dados experimentais para a digestão da vinhaça de cana-de-açúcar

Redução (%)	DQO inicial (mg/L)	Sólidos Totais (mg/L)	Temperatura Mínima (°C)	Temperatura Máxima (°C)	Temperatura Média (°C)	Período do Ciclo (dias)
42.40	56600	22000	16.9	26.5	20.91	5
39.56	27300	18858	13.8	19.8	16.40	5
46.39	34700	19600	18.2	27.5	21.76	5
41.23	43900	22000	9.2	19.7	13.78	5
75.65	72300	20000	3.8	22	13.33	5
58.47	48400	28800	15.2	28	20.18	5
63.94	68500	29588	17.9	31.8	22.71	5
37.00	94300	35472	12.6	24.4	18.59	5
56.33	112000	31412	12	22.4	16.72	3
81.56	65200	37500	12	28.5	20.56	5
24.77	44800	33820	12	28	20.12	5
6.47	44800	33820	19.6	27.3	22.04	3
9.04	43100	21860	14	27	20.59	5
8.56	43200	21604	14.6	30.8	21.99	3
57.42	72100	18280	16.5	33.3	25.90	5
58.66	72100	18280	18.8	34.2	25.25	5
30.51	72100	18280	12.9	29.1	20.01	5

Fonte: adaptado de WEBER (2012)

3.3 Análise estatística dos dados experimentais

Para garantir uma boa escolha dos parâmetros que alimentaram as entradas de dados dos modelos empíricos a serem montados, utilizou-se uma abordagem estatística para analisar a importância dos mesmos. Dois métodos distintos foram utilizados, a correlação de Pearson, para verificar alguma influência linear e a estimação de parâmetros, tal escolha foi baseada nos trabalhos de Amgarten (2012) e Bhunia & Ghangrekar (2008). Amgarten (2012) utilizou a análise estatística de correlação, juntamente com a análise de sensibilidade para definir os parâmetros que comporiam as entradas das redes neurais. O coeficiente de correlação de Pearson foi utilizado, demonstrando muita eficácia. Já Bhunia & Ghangrekar (2008) utilizaram a estimação não-linear de parâmetros para encontrar as variáveis significativas em um reator UASB operando com efluentes de baixa carga orgânica.

3.3.1 Correlação de Pearson

O coeficiente de correlação de Pearson é usado para determinar a força da correlação entre os parâmetros selecionados e o rendimento em questão. Sendo que sua definição de força de correlação é baseada em valores que ficam na faixa de -1 a 1, onde:

- 0,7 positivo ou negativo corresponde a forte correlação;
- 0,3 a 0,7 positivo ou negativo corresponde a moderada correlação;
- 0 a 0,30 corresponde a correlação fraca.

Para os dados correspondentes à vinhaça de batata, apenas os valores referentes às temperaturas mínimas, máximas e médias obtiveram correlação moderada, com valores de 0,42; 0,48 e 0,57; respectivamente. No caso da vinhaça de cana-de-açúcar somente a DQO inicial teve uma correlação considerada moderada com valor de 0,42. Os demais dados apresentaram correlação fraca.

3.3.2 Estimação não linear de parâmetros

Em termos gerais, a estimação não-linear calcula a relação entre um conjunto de variáveis independentes e uma variável dependente (STATISTICA, 2013). Assim podemos calcular a relação da DQO inicial, da temperatura, dos Sólidos Totais e do período de duração do ciclo com a redução de DQO obtida no ciclo em questão. Técnicas como regressão múltipla ou análise de variância geralmente são empregadas para este tipo de pesquisa, e pode-se considerar a estimação não-linear como uma generalização destes métodos (STATISTICA, 2013).

As relações não-lineares não podem geralmente ser interpretadas e verbalizadas de maneira simples, mas pode-se dizer que sempre que o modelo de regressão linear simples não representa adequadamente as relações entre as variáveis, em seguida, a abordagem com modelos de regressão não-linear é apropriada. De maneira geral, estes modelos de regressão podem ser expressos por:

$$y = F(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (3.1)$$

O interesse é voltado em se, e como uma variável dependente está relacionada com uma lista das variáveis independentes. Na Equação 3.1, o termo $F(x,...)$ significa que y , a variável dependente, é uma função de x , ou seja, das variáveis independentes.

Na estimação não-linear encontram-se os coeficientes de regressão que minimizam a variância residual (soma do quadrado dos resíduos) em torno da linha de regressão. Qualquer desvio de uma pontuação observada para uma pontuação prevista significa uma perda na precisão. Então, o objetivo é minimizar uma função perda, e quando esta função está em seu mínimo temos as estimativas de parâmetros. Neste trabalho utilizou-se a função perda de:

$$F = (y_{obs} - y_{pre})^2 \quad (3.2)$$

Onde: y_{obs} é o valor observado, e y_{pre} é o valor predito.

A estimação não-linear contém vários métodos de minimização de funções que podem ser usados para minimizar qualquer tipo de função perda. Utilizou-se a função Quasi-Newton, que é um método de fácil convergência, onde as derivadas de segunda ordem da função perda são assintoticamente estimadas e usadas para determinar o movimento dos parâmetros a cada iteração (STATISTICA, 2013).

Utilizando a Equação 3.3, tanto para o tratamento da vinhaça de batata, como para a vinhaça de cana-de-açúcar, chega-se aos valores apontados como significativos estatisticamente.

$$v1 = a1 + a2 * v2 + a3 * v3 + a4 * v4 + a5 * v5 + a6 * v6 + a7 * v7 \quad (3.3)$$

Onde: $a1, \dots, a7$ são os parâmetros a serem estimados;

$v1$ = Rendimento da digestão anaeróbia (%)

$v2$ = DQO inicial (mg/L)

$v3$ = Sólidos Totais Iniciais (mg/L)

$v4$ = Temperatura mínima ao longo do ciclo (°C)

$v5$ = Temperatura máxima ao longo do ciclo (°C)

$v6$ = Temperatura média ao longo do ciclo (°C)

$v7$ = Número de dias de duração do ciclo

Como resultado, para o caso da batata e da cana-de-açúcar, os parâmetros que foram considerados estatisticamente significativos foram a_2 ; a_5 e a_7 , em que o valor- p foi menor do que 0,05. Este valor- p é uma ferramenta estatística usada para simplificar o resultado do teste de hipóteses. O valor- p representa a probabilidade de erro envolvida em aceitar o resultado como válido, um valor- p de 0,05 indica que há 5% de probabilidade de que a relação entre as variáveis, encontradas na amostra, seja um “acaso infeliz”. Sendo em muitas áreas de pesquisa o valor- p de 0,05 é adotado como sendo o limite aceitável do erro (HUBBARD, 2011).

3.4 Dados experimentais usados na modelagem matemática

Analisando os resultados encontrados na análise estatística e também analisando o conjunto de dados experimentais dispostos, chega-se aos dados experimentais utilizados na modelagem matemática empírica, que estão nas Tabelas 9 e 10, para a batata e cana-de-açúcar, respectivamente.

Percebe-se que os sólidos totais não mostraram significância em nenhuma análise, e a temperatura média mostrou significância em apenas uma abordagem, sendo estes dois parâmetros excluídos da modelagem matemática.

Tabela 9 - Dados experimentais selecionados para modelagem da digestão da vinhaça de batata

Ciclo	Redução (%)	DQO inicial (mg/L)	DQO final (mg/L)	Temperatura Mínima (°C)	Temperatura Máxima (°C)
1	51.32	53000	25800	9.2	20.2
2	80.5	28200	5500	12	28
3	57.09	28200	12100	15.2	28
4	58.51	28200	11700	17.8	24.8
5	93.05	30200	2100	17.9	31.8
6	95.75	25900	1100	20.2	31.8
7	50.44	34100	16900	16.6	24.4
8	66.67	60600	20200	12.6	18.6
9	68.89	87100	27100	13	28.5
10	53.24	41700	19500	15.2	28

Tabela 10 - Dados experimentais selecionados para modelagem da digestão da vinhaça de cana-de-açúcar

Ciclo	Redução (%)	DQO inicial (mg/L)	DQO final (mg/L)	Temperatura Mínima (°C)	Temperatura Máxima (°C)
1	42.4	56600	32600	16.9	26.5
2	39.56	27300	16500	13.8	19.8
3	46.4	34700	18600	18.2	27.5
4	41.23	43900	25800	9.2	19.7
5	58.47	48400	20100	15.2	28
6	37.01	94300	59400	12.6	24.4
7	24.78	44800	33700	12	28
8	57.42	72100	30700	16.5	33.3
9	58.67	72100	29800	18.8	34.2
10	30.51	72100	50100	12.9	29.1

A duração dos ciclos se mostrou significativa estatisticamente, porém devido à baixa disponibilidade de dados optou-se por excluir este parâmetro e utilizar ciclos com o mesmo número de dias. Outro ponto importante para chegar aos dados finais foi a tentativa de obter o mesmo número de experimentos para os dois casos, batata e cana-de-açúcar, assim, ainda foram retirados ciclos onde se ocorreram pequenos problemas operacionais no reator, chegando aos 10 ciclos para cada caso.

Com a retirada de alguns ciclos, principalmente no caso da cana-de-açúcar, os dados experimentais finais não obedeceram a uma ordem cronológica ideal. Tendo em vista que os microorganismos já estavam adaptados ao meio em todos os ciclos, e que problemas operacionais podem ser comuns na área, à opção por considerar os ciclos como sendo contínuos facilita a modelagem, justifica a análise estatística dos resultados e não traz malefícios aos dados experimentais.

4. MODELAGEM MATEMÁTICA

Várias alternativas podem ser testadas para a construção de um modelo empírico representativo para a digestão anaeróbia da vinhaça em reatores UASB, no entanto, neste trabalho, optou-se por utilizar as redes neurais e a identificação paramétrica. São modelos que alcançam uma boa predição e conseguem compensar o forte caráter não-linear do processo em questão.

4.1 Redes Neurais

Os modelos neurais foram realizados para os experimentos com vinhaça de batata e de cana-de-açúcar e serão abordados separadamente. Em cada caso, foi proposto um modelo diferente com quatro possibilidades distintas:

- a) Três entradas e duas saídas: As entradas foram a DQO inicial (mg/L), a temperatura mínima durante todo o ciclo e a temperatura máxima durante todo o ciclo. As saídas foram consideradas como sendo a DQO final (mg/L) do ciclo e a porcentagem de redução de DQO (%).
- b) Três entradas e uma saída: As entradas foram a DQO inicial (mg/L), a temperatura mínima durante todo o ciclo e a temperatura máxima durante todo o ciclo. A saída foi considerada como sendo apenas a DQO final (mg/L) do ciclo.
- c) Uma entrada e uma saída: A entrada considerada foi apenas a DQO inicial (mg/L) e a saída como sendo a DQO final (mg/L) do ciclo.
- d) Três entradas e duas saídas – Acompanhamento: Neste caso as entradas foram as mesmas do caso a), porém além do valor inicial da DQO, foram adicionados nesta entradas o valores da DQO final (mg/L) do primeiro e do segundo dia de

operação do reator, para o caso da batata, e do primeiro e terceiro dias, no caso da cana-de-açúcar. As temperaturas mínimas e máximas também foram obtidas nos mesmo períodos da DQO, objetivando-se ter um acompanhamento da degradação da matéria orgânica e facilitar a predição das redes.

Cada caso foi testado com duas funções de treinamento. A função *trainlm*, algoritmo de Levenberg-Marquardt, considerada a função padrão no Toolbox do Matlab e avaliada por Hagan *et al.* (1994) e Hagan *et al.* (1996), como sendo o método mais rápido de treinar redes neurais “feedforward” e com ótimo rendimento. Outra função testada foi a função *trainbr* indica por MacKay (1992), como sendo mais indicada para situações em que se conta com um número reduzido de dados. Maiores detalhes sobre o comportamento das funções encontram-se no apêndice A.

Para encontrar a melhor arquitetura da rede neuronal, primeiramente, buscou-se achar o melhor número de neurônios na camada escondida; para tal baseou-se a busca no valor da regressão linear encontrada, esta regressão é calculada pela Equação 4.1.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_1^{N_{exp}} (y_{real} - y_{rede})^2}{\sum_1^{N_{exp}} (y_{exp} - y_m)^2} \quad (4.1)$$

Onde: y_{real} : valor experimental

y_{rede} : valor predito pela rede neuronal

y_m : é a média dos valores atuais

N_{exp} : número de experimentos

Segundo Hagan *et al.* (1994) se o número de neurônios for muito elevado, o esforço computacional é grande e a rede tem uma generalização fraca, porém se o número de neurônios é muito pequeno a rede pode não conseguir a performance desejada. Então preferiu-se trabalhar com redes com baixo número de neurônios na camada oculta, testando a performance pelo R^2 .

Após encontrar as configurações que obtinham o maior valor de R^2 , comparava-se as mesmas em função do erro, representado pela Equação 4.2, com isso buscava-se a arquitetura que apresentava o menor erro e, por consequência, uma maior capacidade de predição.

$$Erro = \frac{\sum_1^{N_{exp}} (y_{real} - y_{rede})^2}{N_{exp}} \quad (4.2)$$

Nas próximas seções serão apresentados os resultados para vinhaça de batata e de cana-de-açúcar, para os 4 casos previamente citados. A mesma metodologia empregada será utilizada em todos os casos, sendo exemplificada no caso 1. Visando deixar o trabalho menos massivo, apresentam-se apenas os gráficos finais da melhor arquitetura para cada função de treinamento abordada nos demais casos. Os gráficos e tabelas restantes são apresentados no apêndice B.

4.1.1 Batata

Caso 1) Três entradas e duas saídas

Na Tabela 11 apresenta-se os valores das correlações encontradas para diferentes números de neurônios na camada oculta (HN) com a função de treinamento *trainlm*. Além do valor de R^2 , é informado pela Tabela 11 o número de iterações necessárias (Ite) para encontrar a configuração final.

Tabela 11 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 1 com a função de treinamento *trainlm*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.92221	9	9	-0.20167	6	17	0.97603	3
2	0.95335	14	10	0.94939	5	18	0.63848	5
3	0.56545	6	11	0.96045	5	19	0.73394	4
4	0.74919	15	12	0.96952	5	20	0.15843	4
5	0.43736	7	13	0.78767	4	25	0.64883	3
6	0.91367	8	14	0.90415	4	30	0.68082	3
7	0.9418	4	15	0.8873	4	50	0.75773	3
8	0.92911	4	16	0.77074	3	100	0.64423	3

Analisando-se os valores obtidos na Tabela 11, salienta-se a boa capacidade de predição das redes neuronais, mas evidencia-se a importância dos neurônios na camada oculta, pois para a mesma configuração o valor da correlação passou de -0,20167 para 9 neurônios na camada oculta a 0,97603 com 17 HN. As quatro melhores arquiteturas para este caso foram com 2, 11, 12 e 17 HN, as quais foram comparadas na Tabela 12 em função do erro produzido.

Tabela 12 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 1 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
2	$1,6949 \times 10^7$
11	$1,8947 \times 10^7$
12	$1,5351 \times 10^7$
17	$0,85106 \times 10^7$

Os valores de erro das redes neurais mostraram que as duas melhores configurações para esta rede são com 12 e 17 neurônios na camada oculta, o que leva as arquiteturas 3-12-2 e 3-17-2. Nesta abreviação o primeiro número corresponde ao número de entradas, o segundo número à quantidade de neurônios na camada oculta e por fim é apresentado o número de saídas. O erro à primeira vista pode ser considerado elevado, mas este erro, ao analisar os valores de DQO percebeu-se que a faixa pode ser considerada aceitável. Uma última ferramenta pode trazer certeza sobre a predição das redes neurais: uso do artifício gráfico; assim sendo, as Figuras 19 e 20 apresentam os resultados gráficos para a arquitetura 3-12-2 e as Figuras 21 e 22 para a arquitetura 3-17-2.

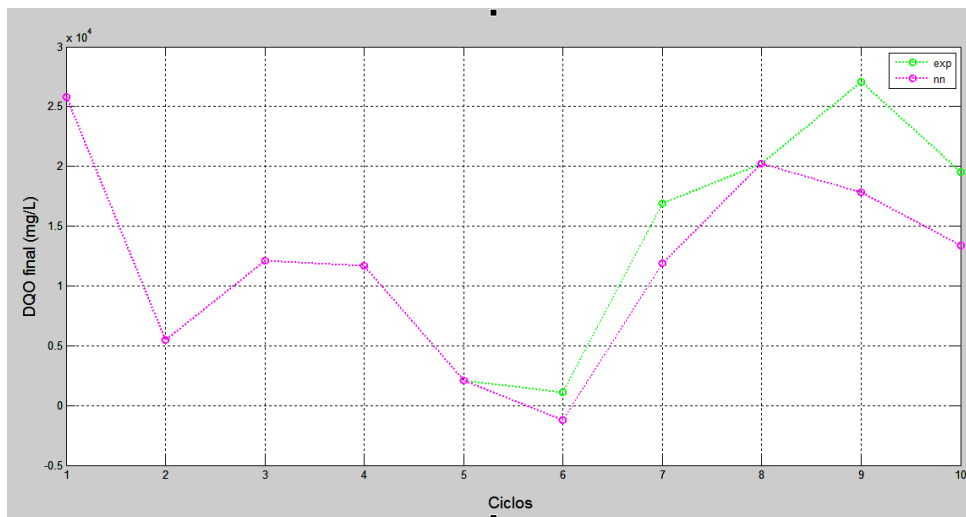


Figura 19 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-12-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de batata

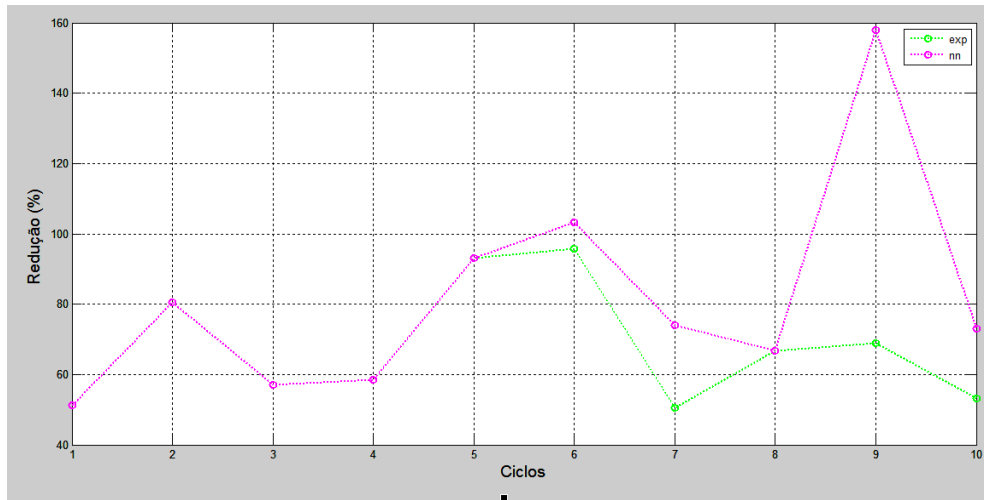


Figura 20 - Resposta gráfica para redução de DQO da rede neuronal com arquitetura 3-12-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de batata

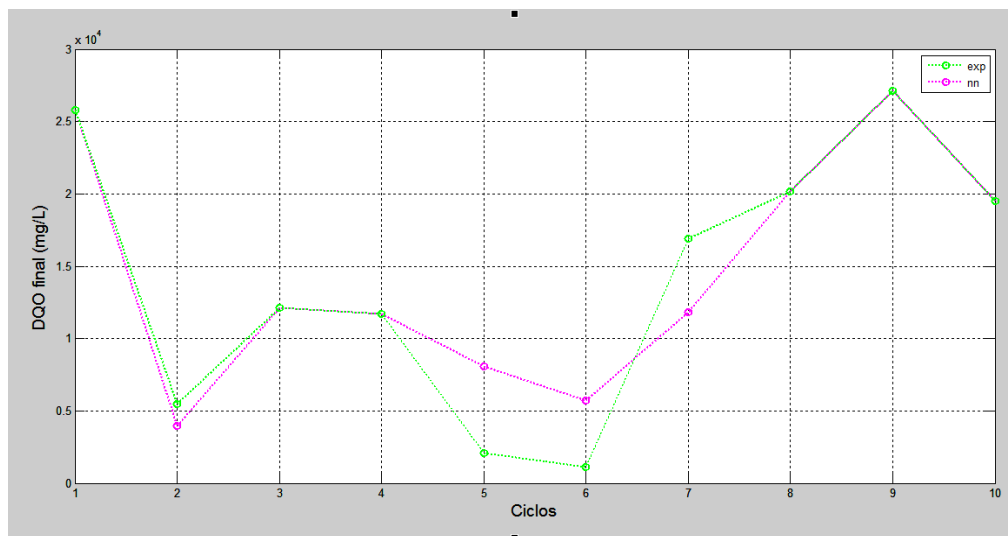


Figura 21 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-17-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de batata

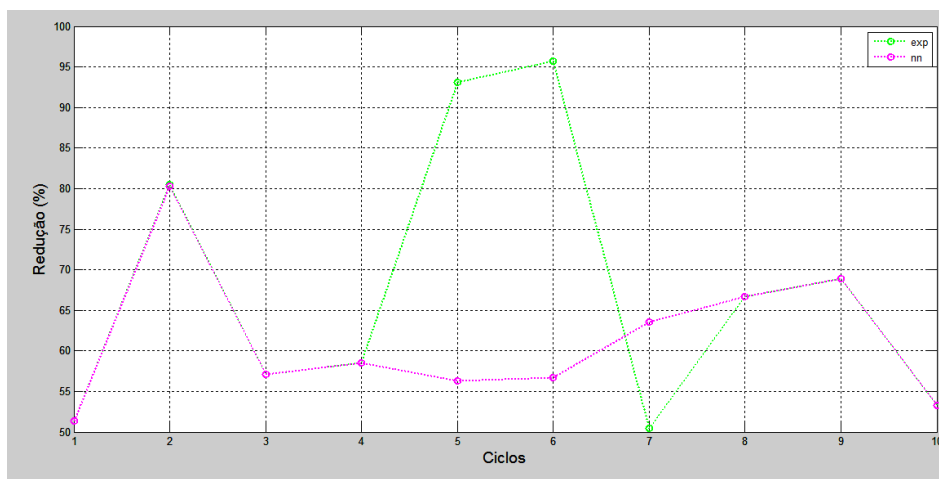


Figura 22 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-17-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de batata.

Analisando-se a resposta da rede neuronal com a arquitetura 3-12-2, percebe-se a boa predição que a mesma consegue, apresentando problema apenas no ciclo 9, no qual obteve um erro elevado para a DQO final e, conseqüentemente, também para a redução da DQO. O erro pode ter ocorrido pela elevada DQO inicial que o ciclo apresentou (87.100 mg/L), a maior de todas para o caso da vinhaça de batata, e este valor deve ter induzido a rede neuronal ao erro.

Já a arquitetura 3-17-2 também apresentou-se com uma boa predição, mas com grandes problemas nos ciclos 5 e 6, ciclos onde ocorreram as maiores reduções de carga orgânica experimentalmente: 93,05% e 95,75%, respectivamente. Ao se considerar apenas os valores de DQO final percebe-se que a rede, mesmo apresentando os problemas nos ciclos 5 e 6, mostra um comportamento coerente e com um elevado grau de precisão.

Portanto, a arquitetura 3-17-2 com a função de treinamento *trainlm* foi a que teve melhores resultados, sendo recomendada para a predição do sistema experimental em comparação as demais possibilidades apresentadas.

Na Tabela 13 são apresentados os valores das correlações encontradas para diferentes HN com a função de treinamento *trainbr*, e o número de iterações necessárias para encontrar a configuração final também é informado.

Tabela 13 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 1 com a função de treinamento *trainbr*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.75	20	9	0.93827	1000	17	0.93859	1000
2	0.75	157	10	0.75	52	18	0.95099	970
3	0.75	831	11	0.75	28	19	0.96315	492
4	0.75	165	12	0.88247	584	20	0.96637	755
5	0.75	137	13	0.75	120	25	0.95988	750
6	0.75	43	14	0.75	27	30	0.75	108
7	0.75	24	15	0.75	813	50	0.91315	507
8	0.93748	675	16	0.94565	1000	100	0.75	99

Analogamente à função de treinamento *trainlm*, as melhores arquiteturas são comparadas na Tabela 14 em função do erro produzido, sendo que as três melhores arquiteturas foram com 19, 20 e 25 HN.

Uma particularidade desta função de treinamento, para o caso relatado, é a maior correlação para HN maiores e a necessidade de um elevado número de iterações até o resultado final.

Tabela 14 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 1 com a função *trainbr*

Hidden Neurons	Erro
19	1,4886 x 10 ⁷
20	3,3507 x 10 ⁷
25	1,5543 x 10 ⁷

Seguindo a mesma abordagem da função *trainlm*, os menores valores de erro foram obtidos com as arquiteturas com 19 e 25 neurônios na camada oculta. As melhores arquiteturas são então 3-19-2 e 3-25-2, e as elas são apresentadas graficamente nas Figuras 23 e 24 e 25 e 26, para 19 e 25 HN, respectivamente.

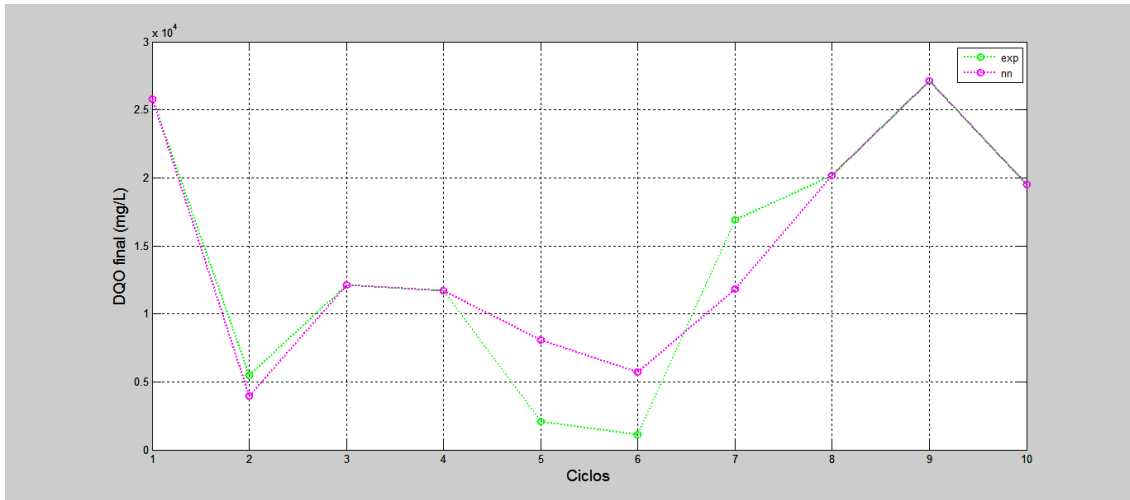


Figura 23 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-19-2 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de batata

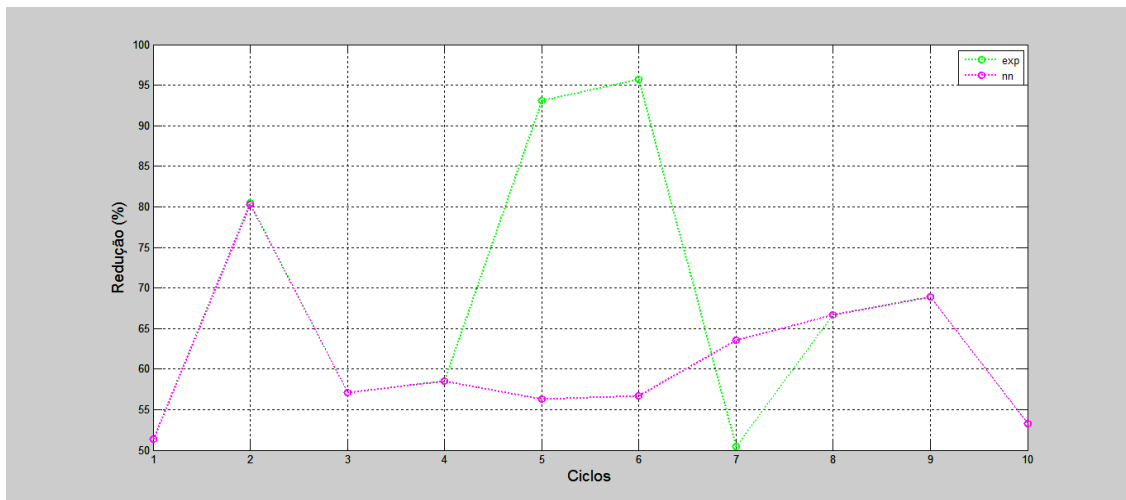


Figura 24 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-19-2 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de batata

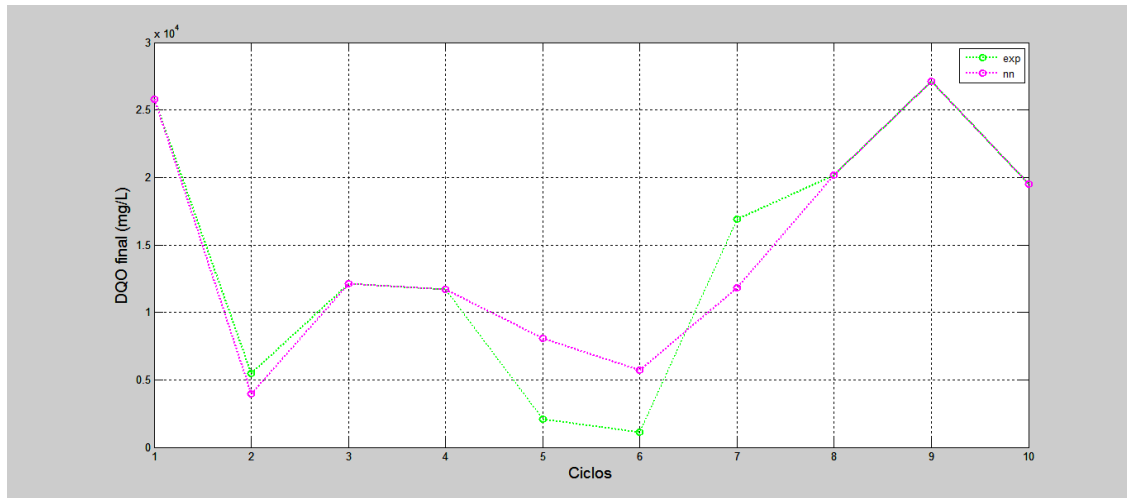


Figura 25- Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-25-2 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de batata

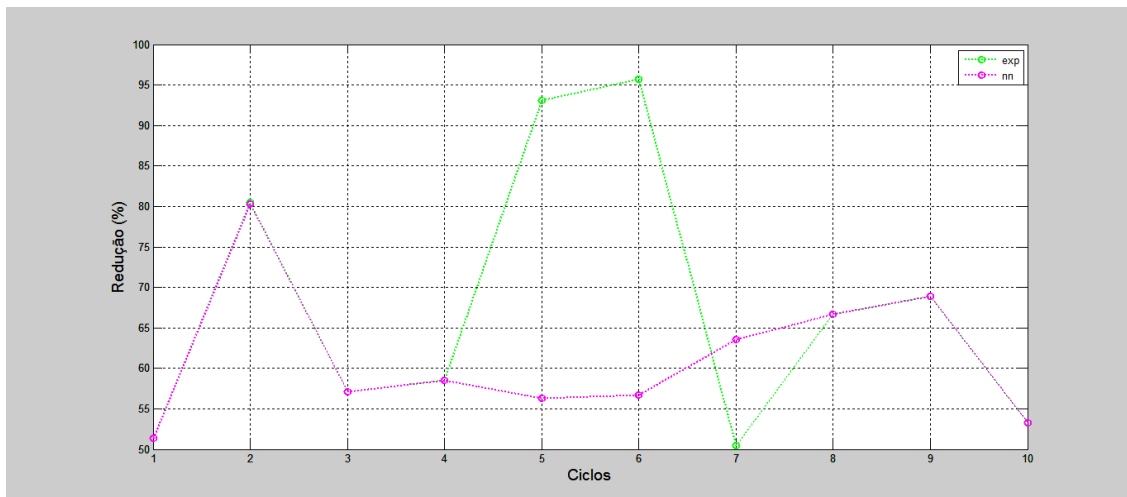


Figura 26 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-25-2 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de batata

Analisando-se a resposta da rede neuronal, percebe-se que as duas arquiteturas apresentaram uma boa predição, mas com problemas novamente nos ciclos 5 e 6, ciclos onde ocorreram as maiores reduções de carga orgânica experimentalmente. Para valores de DQO as redes são plenamente representativas. A arquitetura 3-19-2 com a função de treinamento *trainbr* foi a que teve melhores resultados principalmente por apresentar o menor erro, pois graficamente as redes mostraram-se muito próximas.

Caso 2) Três entradas e uma saída

Neste caso apenas uma rede é criada para cada função de treinamento, a rede que acompanha a DQO final para cada ciclo. A melhor configuração encontrada com a função de treinamento *trainlm* foi a 3-14-1, onde o erro ficou na casa de $0,19583 \times 10^7$, com uma correlação de 0,98841, sendo atingida após 4 iterações, representada na Figura 27. Com a função de treinamento *trainbr*, a arquitetura 3-3-1 apresentou os melhores resultados, com erro de $1,3787 \times 10^7$, R^2 igual a 0,91269 após 397 iterações e está representada na Figura 28.

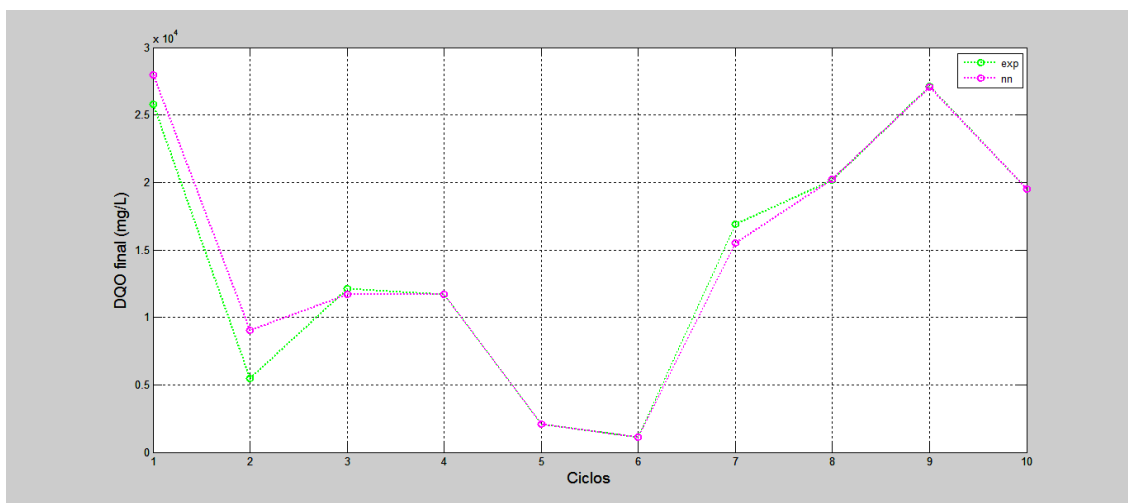


Figura 27 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-14-1 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de batata

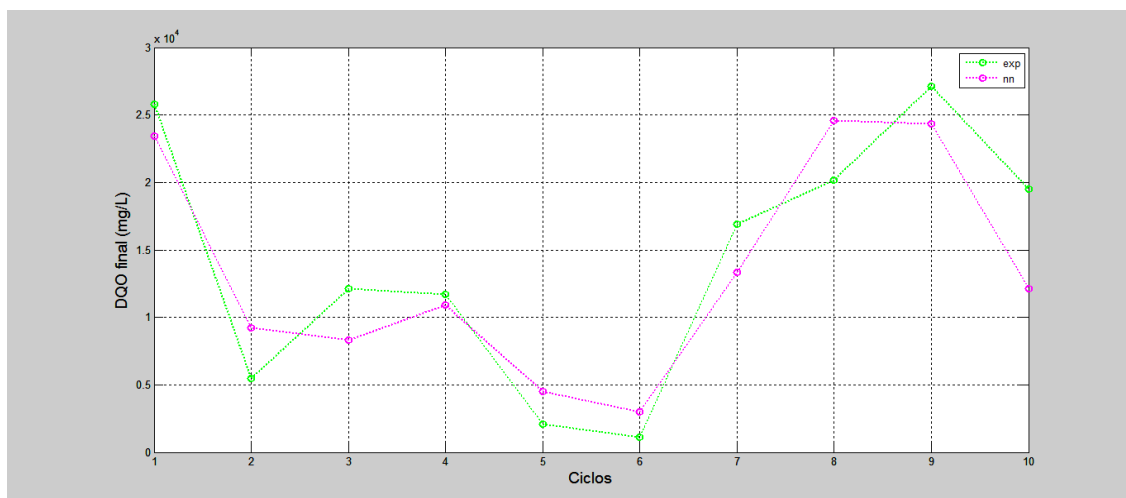


Figura 28 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-3-1 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de batata

Uma comparação final pode ser feita entre as duas funções de treinamento, onde se percebe que a melhor arquitetura para a função *trainlm* alcançou melhores resultados que a arquitetura da função *trainbr*. Evidencia-se também a boa predição da rede em ambos os casos, acompanhando satisfatoriamente a dinâmica dos resultados experimentais.

Caso 3) Uma entrada e uma saída

No caso 3, a degradação do vinhoto de batata foi acompanhada pelo valor final de cada ciclo, e cada função de treinamento resultou em uma rede neuronal. A função *trainln* obteve melhores resultados com a configuração 1-17-1, onde o erro encontrado foi de $1,0494 \times 10^7$ e uma correlação de 0,95613 atingida após 3 iterações. Esta configuração está representada na Figura 29. A função de treinamento *trainbr* alcançou os melhores valores com a arquitetura 1-14-1, erro de $1,7525 \times 10^7$, R^2 de 0,88187 após 108 iterações; sua representação gráfica está na Figura 30.

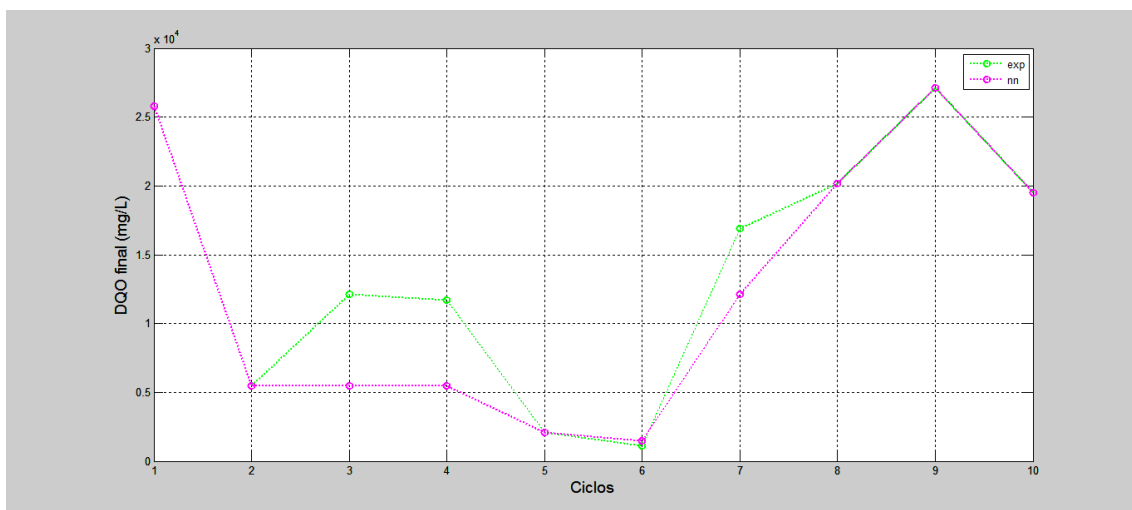


Figura 29 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 1-17-1 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de batata

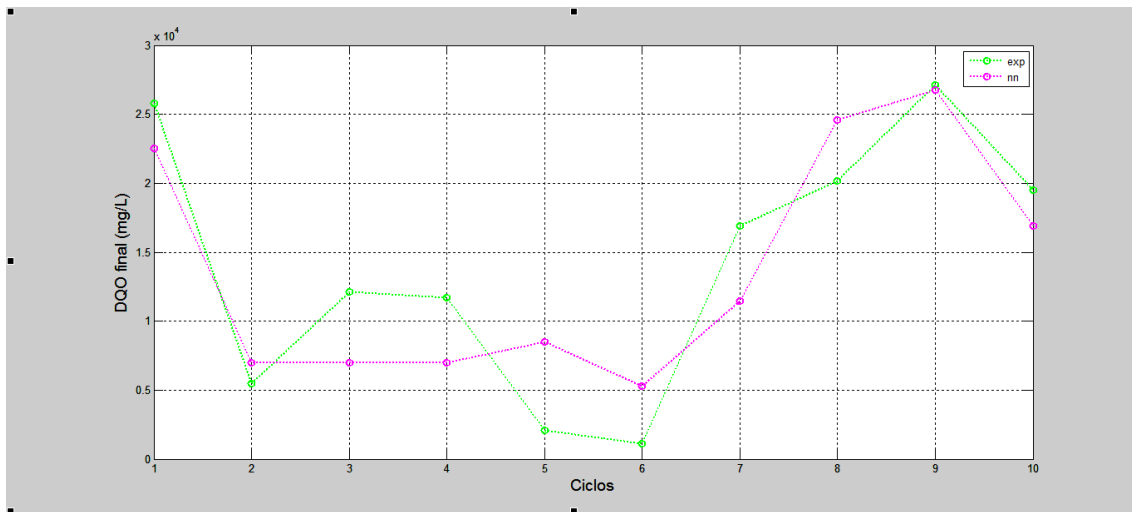


Figura 30 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 1-14-1 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de batata

Por fim, comparando as duas funções de treinamento pode-se concluir que a função *trainlm* apresentou melhores resultados, tanto em valores de R^2 e de erro total, quanto na abordagem gráfica. A rede neuronal 1-17-1, com a função de treinamento *trainlm*, é capaz de prever, com grande precisão, a DQO final da vinhaça proveniente de álcool de batata após o tratamento anaeróbico em reator UASB.

Caso 4) Três entradas e duas saídas - Acompanhamento

Para o caso 4 os dados de entrada da DQO inicial, temperatura mínima e temperatura máxima foram obtidos antes de iniciar a operação do reator com o novo substrato, e no final do primeiro e segundo dias do ciclo, fornecendo assim um acompanhamento da redução da DQO. As redes foram construídas com duas saídas: DQO final e redução alcançada, sendo testadas as duas funções de treinamento abordadas nos demais casos, *trainlm* e *trainbr*.

A função *trainlm* com a arquitetura 3-12-2 alcançou os melhores resultados, mesmo não sendo a função com o menor erro ($1,1025 \times 10^7$) e seus resultados foram os mais estáveis, apresentando um erro médio em função da DQO final no ciclo 5, e um erro médio em função da redução no ciclo 10. O erro encontrado na DQO final do ciclo 5 provavelmente deve-se à elevada redução deste ciclo, onde a rede não teve capacidade de acompanhar. Já para a redução do ciclo 10 novamente a rede não teve habilidade para prever a alta redução. Esta arquitetura alcançou um R^2 de 0,97297 após 4 iterações e sua resposta gráfica consta nas Figuras 31 e 32.

A função de treinamento *trainbr* para este caso não teve resultados satisfatórios, e a partir da análise gráfica percebeu-se que esta não convergiu aos valores ideais, não sendo indicado o seu uso para este caso.

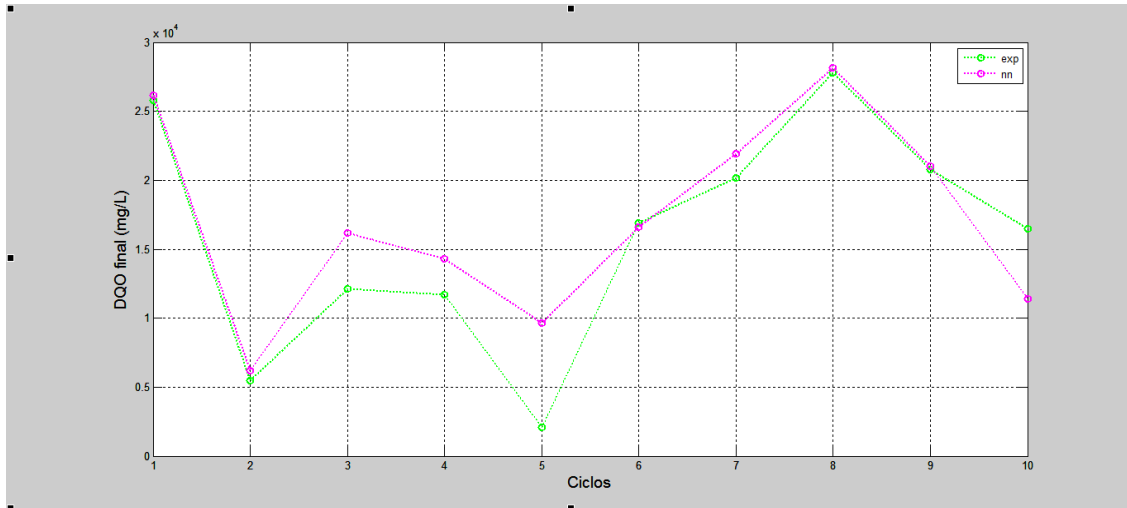


Figura 31 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-12-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de batata

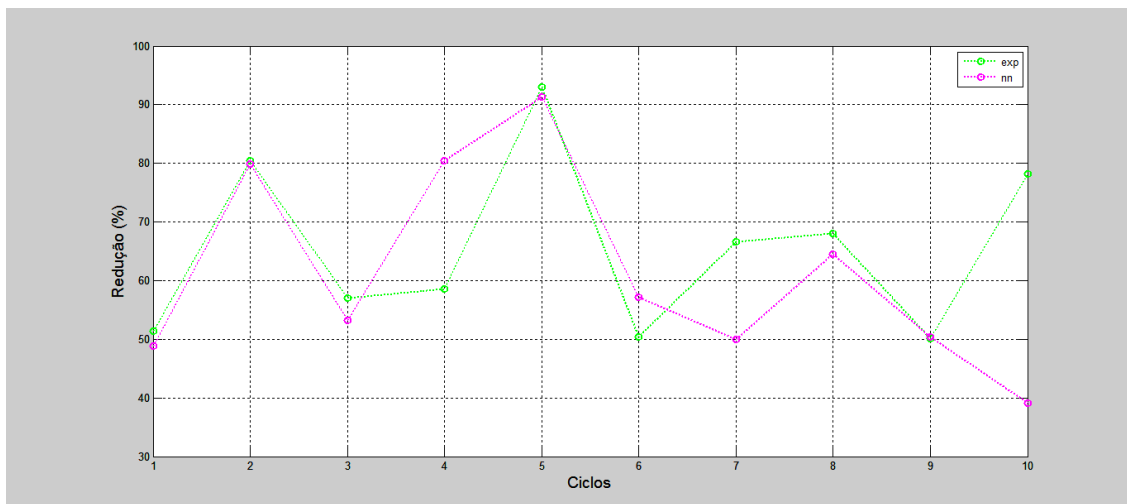


Figura 32 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-12-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de batata

4.1.2 Cana-de-açúcar

Caso 1) Três entradas e duas saídas

O primeiro caso testado para a degradação da vinhaça de origem sacarídea em reator UASB foi a rede neuronal com três entradas e duas saídas. Testou-se duas funções de treinamento distintas, *trainlm* e *trainbr*, a melhor arquitetura encontrada para a função *trainlm* foi a 3-14-2, com erro de $4,062 \times 10^7$, obtida após 14 iterações, sendo a correlação desta arquitetura de 0,97159.

A função *trainbr* obteve resultados mais precisos, sua arquitetura 3-13-2 alcançou uma correlação de 0,99043, erro de $1,5091 \times 10^7$ em 187 iterações. Esta função apresentou problema apenas no ciclo 5, onde a elevada redução de DQO não pode ser prevista, mas em todos os outros ciclos o comportamento pode ser considerado satisfatório. Nas Figuras 33 e 34 estão representadas as respostas gráficas da função *trainlm* e nas Figuras 35 e 36 da função *trainbr*.

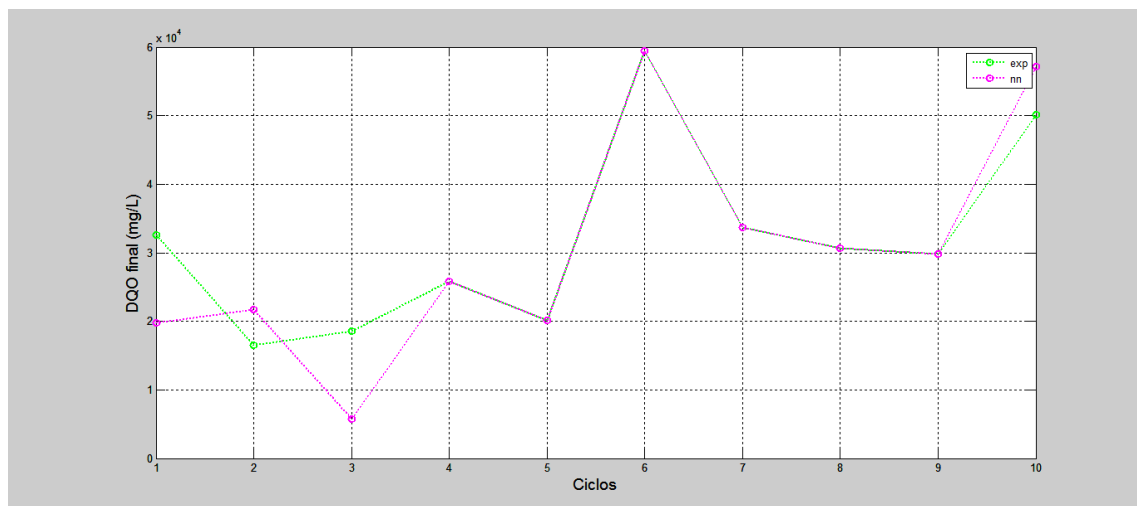


Figura 33 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-14-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

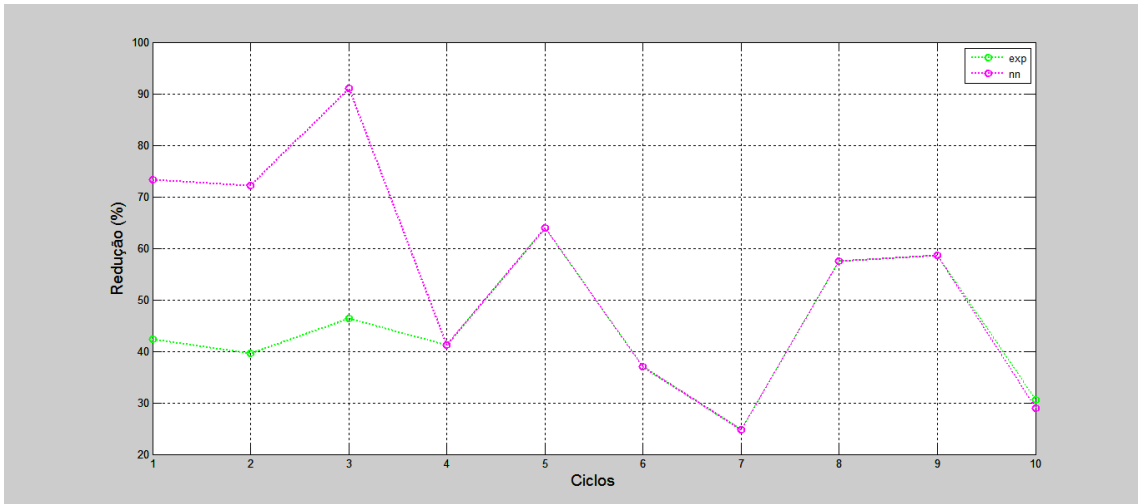


Figura 34 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-14-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

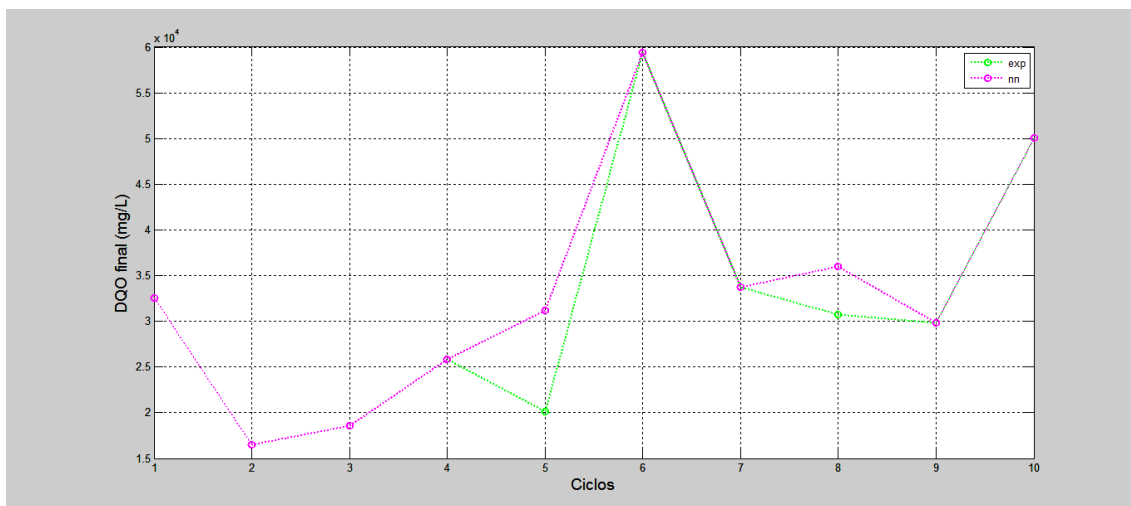


Figura 35 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-13-2 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

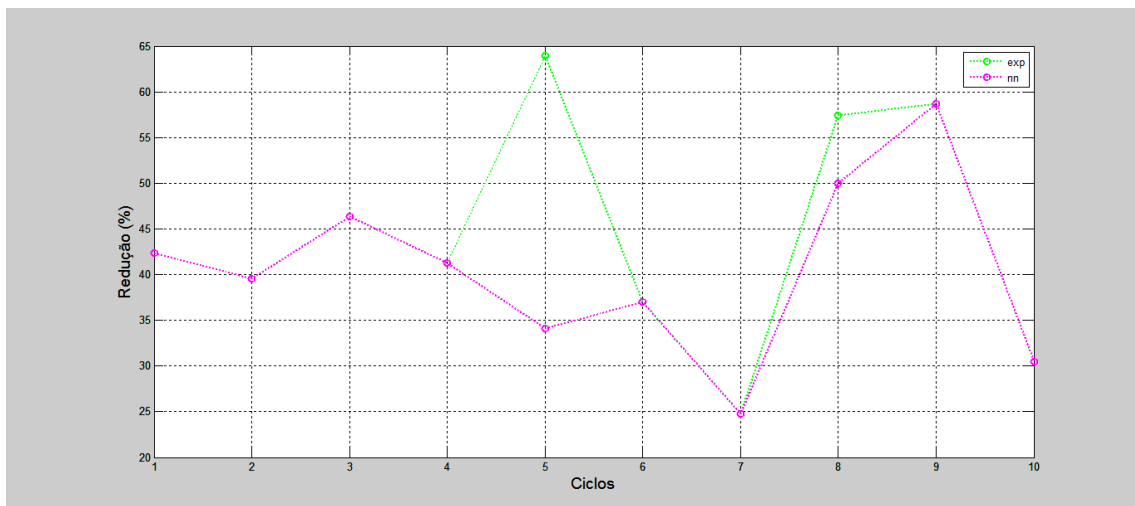


Figura 36 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-13-2 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

Caso 2) Três entradas e uma saída

No caso 2 somente uma rede foi criada para cada função de treinamento, a rede neuronal que acompanhou a DQO final de cada ciclo. Para a função de treinamento *trainlm* a melhor configuração encontrada foi a 3-9-1, onde o erro ficou na casa de $1,8442 \times 10^7$, a correlação de 0,94498 foi atingida após 4 iterações, e os resultados são representados na Figura 37. A função de treinamento *trainbr* teve seu melhor resultado com a arquitetura 3-13-1, onde o erro encontrado foi de $2,1270 \times 10^7$, R^2 de 0,93635 após 1000 iterações, estando representada na Figura 38.

Comparando as duas funções de treinamento, a função *trainlm* apresentou melhores resultados, com pequenos erros no ciclo 1, 5 e 10, mas com grande capacidade de predição e acompanhamento geral da degradação anaeróbia.

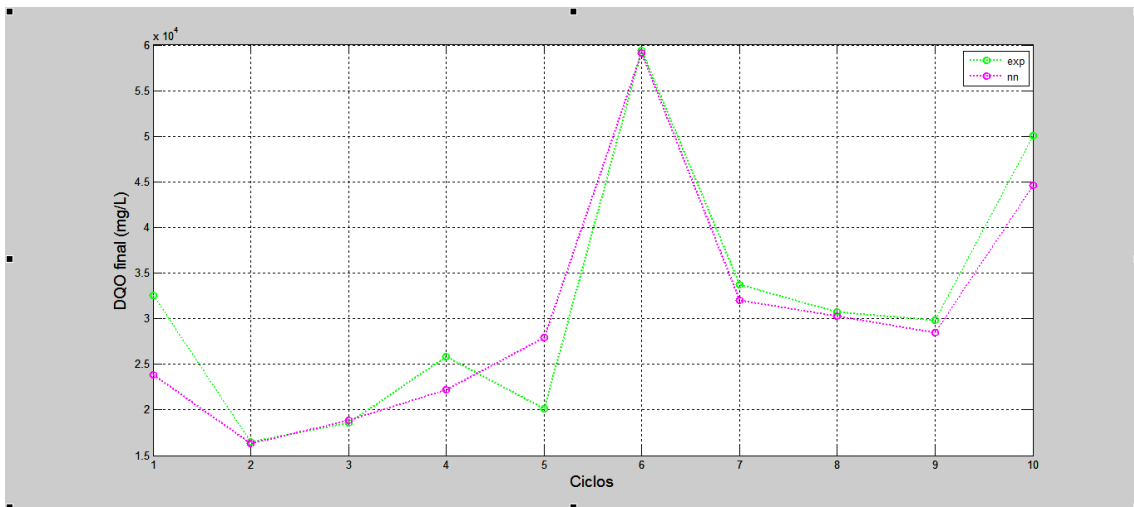


Figura 37 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-9-1 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

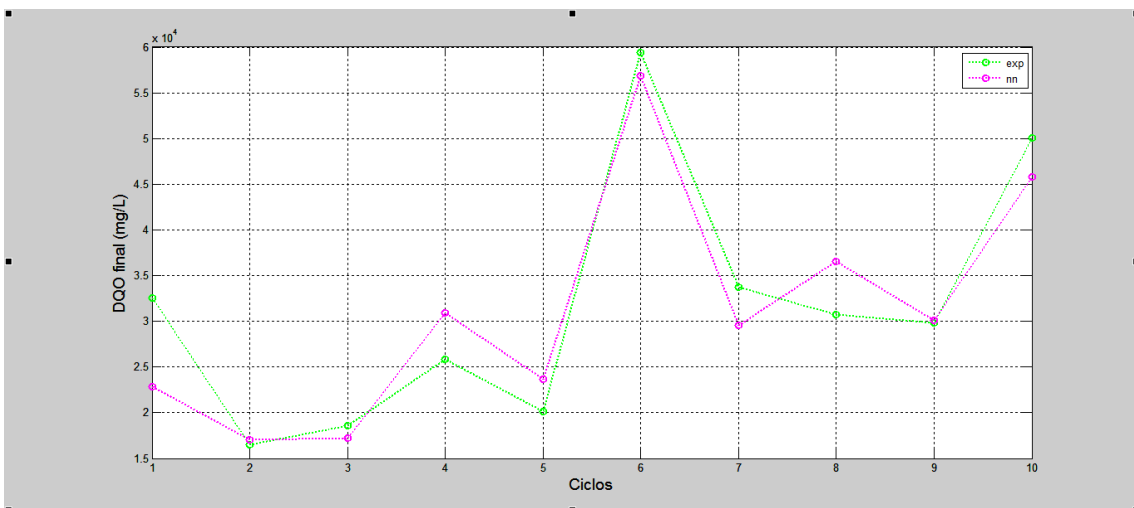


Figura 38 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-13-1 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

Caso 3) Uma entrada e uma saída

No terceiro caso, acompanhou-se a degradação anaeróbia do substrato apenas pelo valor final de cada ciclo, e as duas funções de treinamento rotineiras foram testadas. A função *trainlm* e a função *trainbr* obtiveram os melhores resultados com a mesma arquitetura, 1-15-1, porém a função *trainlm* apresentou o erro de $5,3991 \times 10^7$, e correlação de 0,87557 após 3 iterações, representada na Figura 39. Já a função *trainbr* apresentou erro de $4,7593 \times 10^7$, R^2 0,85471 após 464 iterações, e sua resposta gráfica está na Figura 40.

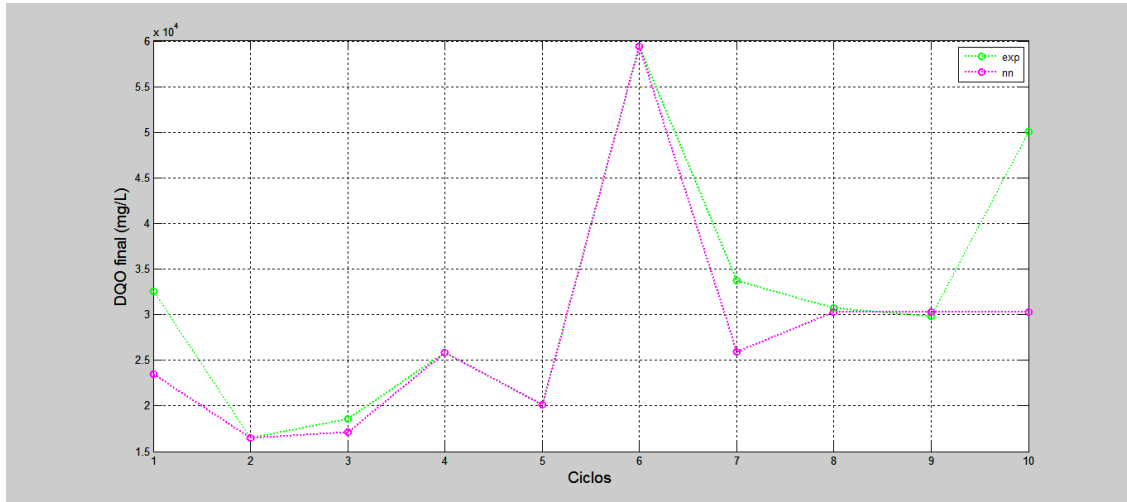


Figura 39 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 1-15-1 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

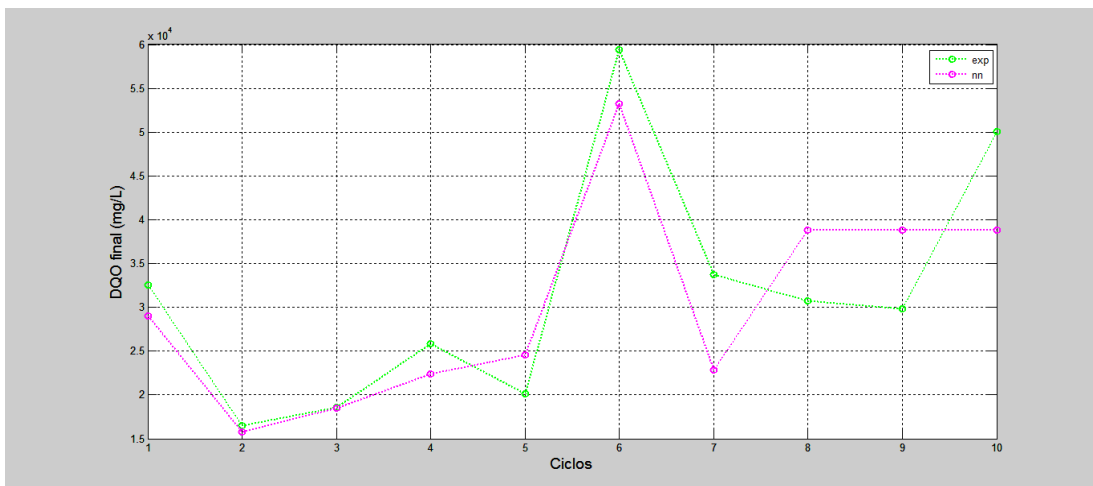


Figura 40 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 1-15-1 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

Caso 4) Três entradas e duas saídas – Acompanhamento

Nos testes do caso 4, foram realizados de maneira análoga aos teste do caso 4 com vinhoto de batata. A função *trainlm* com a arquitetura 3-16-2 alcançou os melhores resultados, com erro de $0,25605 \times 10^7$, e correlação de 0,99601 em 4 iterações, tendo ótimos resultados para predição da DQO final e, conseqüentemente para a sua redução, sendo representada nas Figuras 41 e 42. A função *trainbr* também obteve ótimos resultados, a sua arquitetura 3-25-2 obteve erro de $0,34408 \times 10^7$, com R^2 de 0,99738 após 815 iterações,

Figura 43 e 44. Comparando as duas funções percebe-se que a função *trainlm* é melhor para prever a redução, já a função *trainbr* é uma boa função nesta arquitetura para prever a DQO final de cada ciclo.

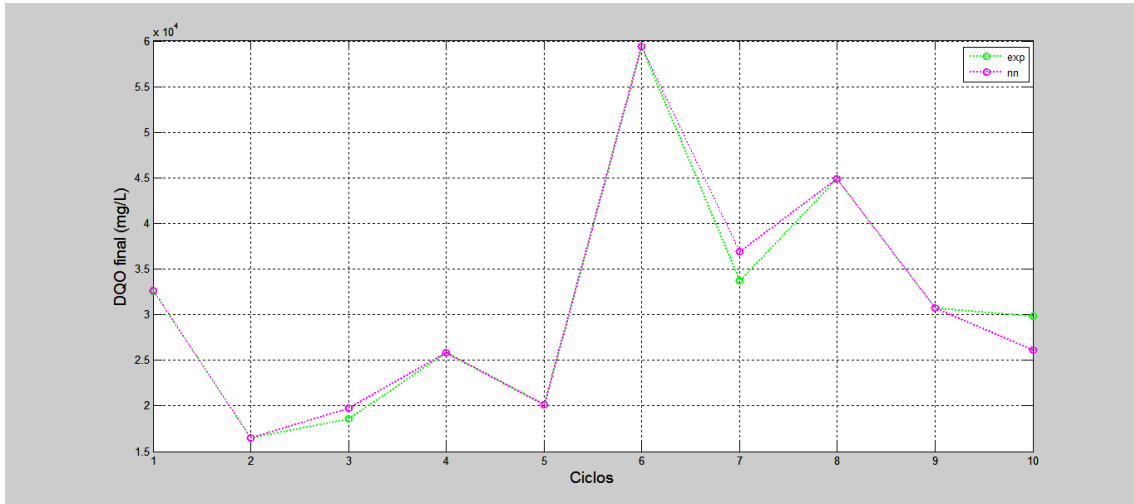


Figura 41 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-16-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

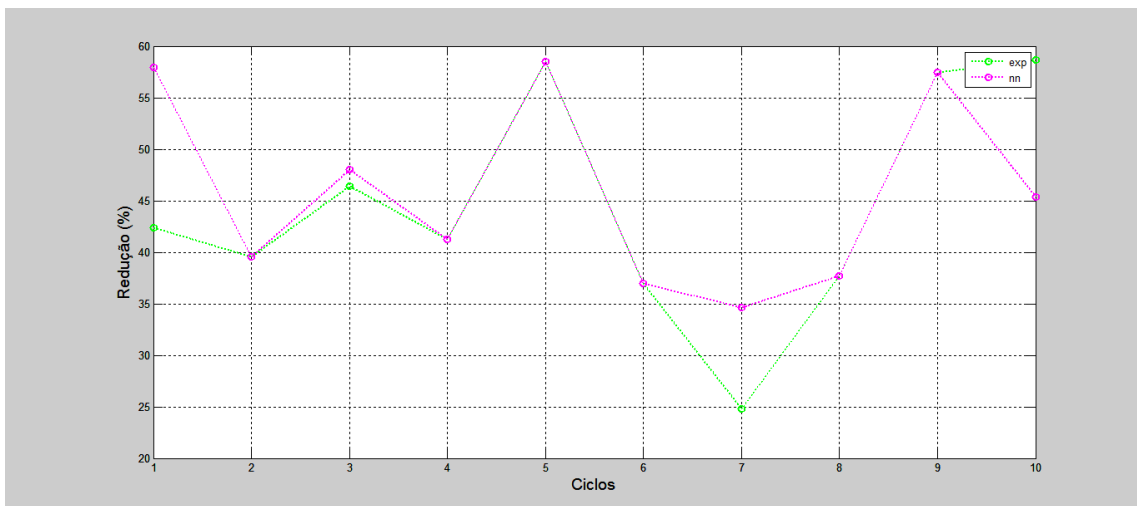


Figura 42 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-16-2 utilizando a função *trainlm* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

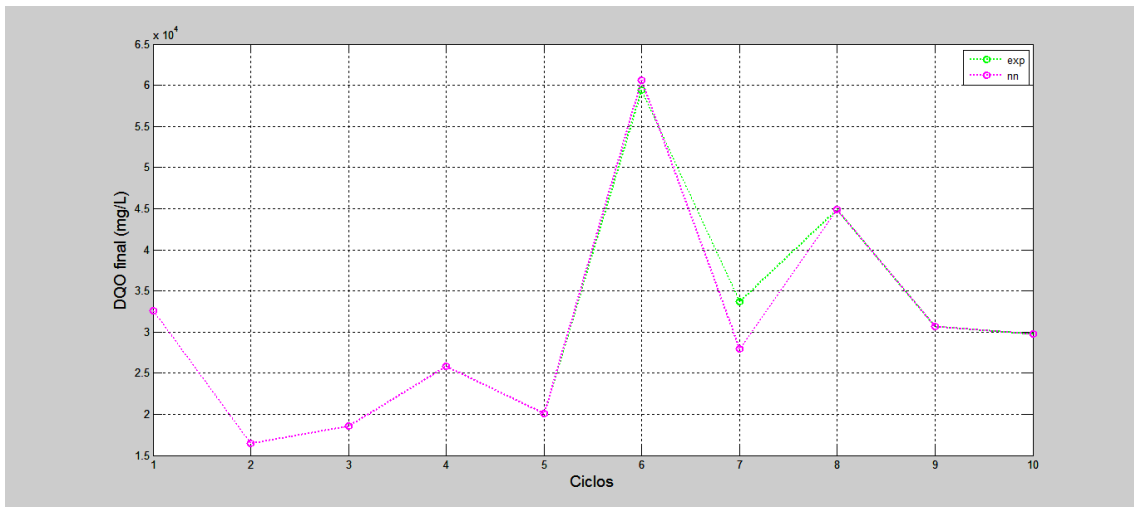


Figura 43 - Resposta gráfica para a DQO final da rede neuronal com arquitetura 3-25-2 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

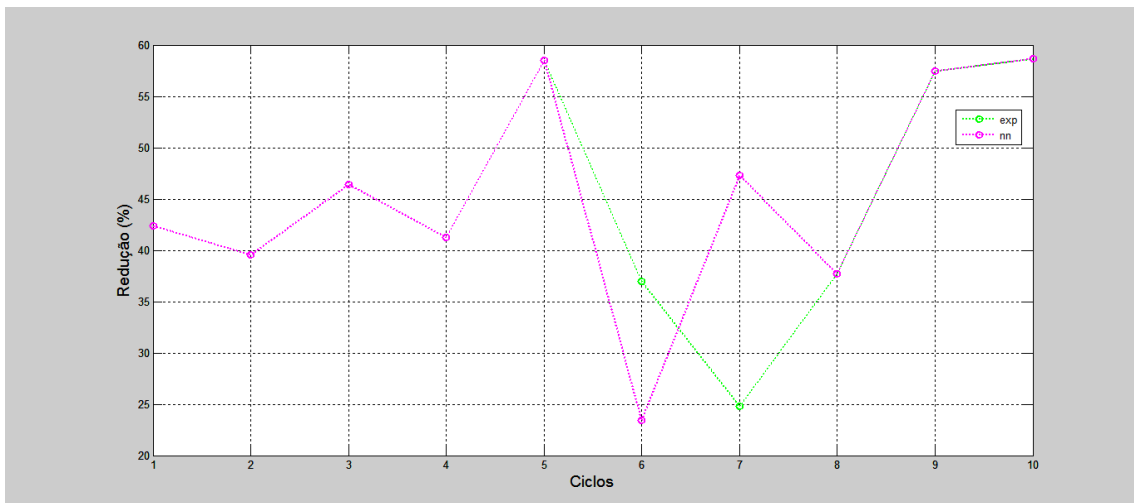


Figura 44 - Resposta gráfica para a redução DQO da rede neuronal com arquitetura 3-25-2 utilizando a função *trainbr* para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

4.2 Identificação

O uso da identificação teve como finalidade a obtenção de modelos para o processo complexo da degradação da vinhaça em um reator anaeróbico do tipo UASB. O primeiro passo para realizar o processo de identificação dos modelos é escolher a estrutura do modelo a ser identificado, posteriormente os parâmetros são ajustados a esta estrutura, fazendo com que a

saída do modelo reproduza da melhor maneira possível a saída do sistema real, para avaliar o modelo é utilizado a sua função de ajuste *fit* descrita pela Equação 4.3.

$$fit = 100 \cdot \left[\frac{1 - norm(y - \hat{y})}{norm(y - mean(y))} \right] \quad (4.3)$$

Onde: y = saída medida

\hat{y} = saída do modelo identificado

Com o auxílio do *software* Matlab e seu *System Identification Toolbox* foram construídos modelos matemáticos para o sistema a partir dos dados obtidos experimentalmente. Os dados experimentais utilizados foram a DQO inicial (mg/L) de cada ciclo como entrada e a DQO final (mg/L) de cada ciclo como saída.

Quatro estruturas de modelos discretos foram comparadas, OE (*Output Error*), ARX (*Autoregressive with Exogenous input*), ARMAX (*Autoregressive Moving Average Exogenous input*) e BJ (*Box-Jenkins*). No pré-processamento dos dados foi removido a média, auxiliando na identificação.

Os modelos discretos identificados de melhores resultados são mostrados na Tabela 15 para a vinhaça de batata e na Tabela 16 para a vinhaça de cana-de-açúcar.

Tabela 15 - Modelos discretos usados na identificação da performance do reator UASB mediante utilização de vinhaça de batata, a partir do monitoramento de sua DQO inicial e final

Modelo discreto	Ajuste (%)
ARX 110	45,53
BJ 11110	39,29
AMX 2221	39,23
OE 110	30,8

Tabela 16 - Modelos discretos usados na identificação da performance do reator UASB mediante utilização de vinhaça de cana-de-açúcar, a partir do monitoramento de sua DQO inicial e final

Modelo discreto	Ajuste (%)
ARX 331	82,79
BJ 22220	68,34
OE 220	60,11
AMX 2221	48,65

Avaliando separadamente os modelos para cada caso, percebe-se que no caso do efluente proveniente do processo produtivo de álcool de batata o modelo com o melhor ajuste foi o modelo ARX, como ordem 1 e sem tempo morto. Para o acompanhamento da degradação da vinhaça de material sacarídeo o modelo ARX também foi o que obteve melhores resultados, porém com ordem 3 e com tempo morto.

A resposta gráfica destes modelos está representada nas Figuras 45 para o efluente de material amiláceo e Figura 46 para a vinhaça de cana-de-açúcar. Observa-se-se que esta estratégia não foi tão eficiente quanto esperado, principalmente para o caso da batata, e em sua totalidade apresentou resultados piores que os alcançados com as redes neurais.

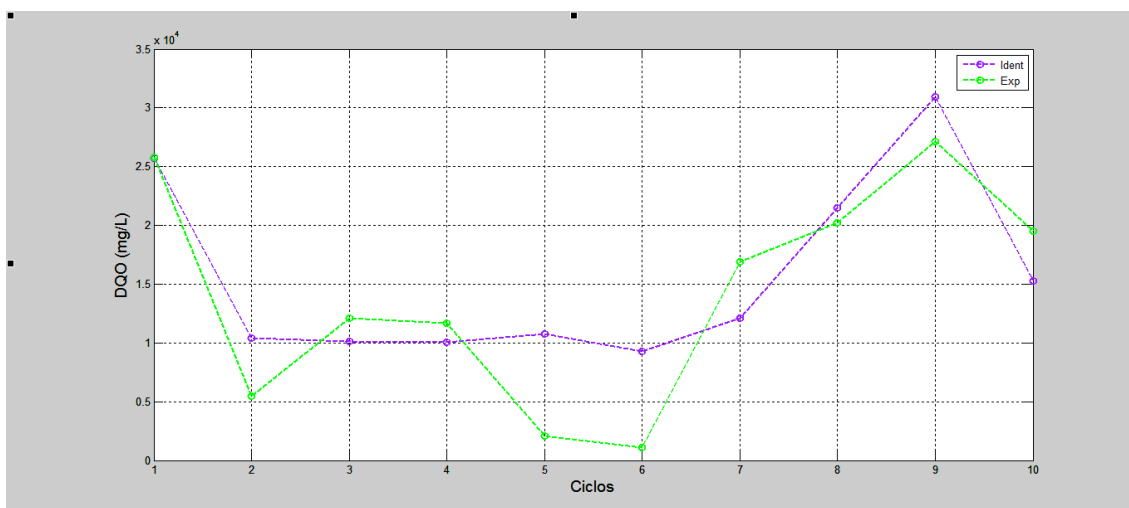


Figura 45 - Resposta gráfica para a DQO final do processo de identificação com o modelo ARX 110 para a degradação da vinhaça de batata

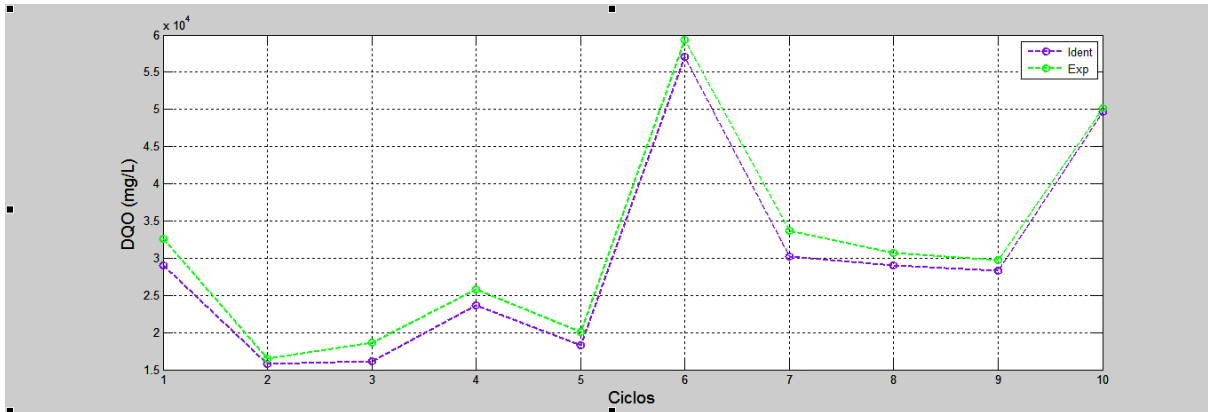


Figura 46 - Resposta gráfica para a DQO final do processo de identificação com o modelo ARX 331 para a degradação da vinhaça de cana-de-açúcar

5. CONCLUSÕES

A necessidade de tratamento para a vinhaça já é uma realidade e, com o destaque que a produção de etanol vem recebendo nos últimos tempos, tal situação irá se tornar cada vez mais imperativa. Neste panorama, a digestão anaeróbia da vinhaça em reatores UASB é uma alternativa tecnológica de grande aceitação e muito promissora.

O intuito deste trabalho foi estudar a biodigestão em reatores UASB da vinhaça, provenientes de álcool de matérias-primas distintas, amilácea e sacarídea. Para isso, a partir de dados experimentais construiu-se modelos empíricos, que visam prever a performance do reator no tratamento deste efluente.

A análise estatística mostrou-se eficiente para selecionar os dados experimentais mais importantes. A correlação de Pearson evidenciou a importância das temperaturas da digestão anaeróbia da vinhaça de batata, e a DQO inicial no caso da vinhaça de cana-de-açúcar. Com a estimação não linear de parâmetros observou-se a significância da DQO inicial, da temperatura máxima e do período de duração dos ciclos nos dois casos testados. Essa análise facilitou a implementação dos modelos empíricos, trabalhando apenas com os dados significativos.

Os modelos baseados em redes neurais apresentam boas correlações com os diferentes efluentes testados. Para a batata, a melhor correlação encontrada foi de 0,98841 com a rede neuronal 3-14-1, onde o erro ficou em torno de $0,19583 \times 10^7$ atingido de maneira rápida após 4 iterações pela função de treinamento *trainlm*. As redes com arquitetura de uma entrada e uma saída foram as que se comportaram pior, indicando a importância do fornecimento de dados para a construção do modelo neuronal.

No caso do efluente de material sacarídeo, a melhor arquitetura encontrada foi a 3-25-2, utilizada no caso 4, onde se acompanhou a redução da DQO. Esta rede apresentou erro de $0,34408 \times 10^7$ e foi alcançada após 815 iterações com a função de treinamento *trainbr*. Neste caso, novamente, os piores resultados foram obtidos com arquiteturas de uma entrada e uma saída.

Conclui-se, de maneira geral, que as redes neuronais são uma ferramenta poderosa para avaliar o sistema em questão, podendo ser usada para prever o comportamento e realizar testes para possíveis modificações no processo.

Com relação à identificação paramétrica, os melhores resultados foram alcançados com o modelo ARX, porém em ambos os casos, batata e cana-de-açúcar, os valores encontrados não foram superiores aos encontrados com as redes neuronais. Entretanto, esta abordagem também pode ser considerada válida, pois conseguiu prever a dinâmica do sistema de degradação dos ciclos experimentais.

Por fim, observou-se que as RNAs e a identificação paramétrica são instrumentos de grande capacidade para prever o comportamento de processos biológicos, podendo então, aumentar a produtividade nesses sistemas altamente não-lineares.

Como sugestão de trabalhos futuros, cita-se o desenvolvimento de redes neuronais mais complexas, utilizando um conjunto maior de dados experimentais, incluindo a produção de biogás. Sugere-se também o estudo com diferentes funções de treinamento e arquiteturas diferentes das apresentadas neste trabalho. Outra sugestão é a comparação do modelo empírico proposto com algum modelo fenomenológico, como por exemplo o modelo ADM1.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AIYUK, S., *et al.*; **Anaerobic and complementary treatment of domestic sewage in regions with hot climates** – A review. *Bioresource technology*, v.97, n. 17, p. 2225-2241, 2006;

ALMEIDA, I.R. de; SILVA, S.D.A. **Paralelo 30: futuro eixo para produção de etanol no RS?** 2011. Artigo em Hypertexto. Disponível em: <http://www.infobibos.com/Artigos/20113/paralelo30/index.htm> Acesso em: setembro de 2012;

ALMEIDA, J.R. **O problema da vinhaça em São Paulo**. Piracicaba: Instituto Zimotécnico da ESALQ. (Boletim - IZ-ESALQ, 3). 1952. 24p.;

AMERICAN PUBLIC HEALTH ASSOCIATION – APHA. **Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater**, 20th Edition, ed. Clesceri L.S., Greenberg A.E., Eaton A.D.. Washington, DC: American Public Health Association, 1998;

AMGARTEN, E. L., **Estudo da viabilidade de uso de redes neurais artificiais para a predição do rendimento da fermentação alcoólica**. Dissertação de Mestrado – Universidade Positivo, Curitiba, 2012;

ANGELIDAKI, I.; SANDERS, W. **Assessment of the anaerobic biodegradability of macropollutants**. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, v.3, p. 117–129, 2004;

ANP - Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Resolução ANP nº 7**, 2011. Disponível em:

<http://nxt.anp.gov.br/NXT/gateway.dll/leg/resolucoes_anp/2011/fevereiro/ranp%207%20-%202011.xml> Acessado em: março de 2013;

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DA BATATA - ABBA. **Descartes de Batata**. Disponível em: <http://www.abbabatatabrasileira.com.br/revista19_012.htm>. Acesso em novembro de 2012;

BALAT, M.; BALAT, H. **Recent trends in global production and utilization of bio-ethanol fuel**. *Applied Energy*, v. 86, p. 2273–2282, 2009;

BATSTONE, D.J., *et al.*. **Anaerobic Digestion Model No. 1**, Scientific and Technical Report No. 13, IWA Publishing, London, UK, 2002;

BENGTSON, H., **Small Scale Ethanol Production from corn** – Technology, Energy Efficiency and Economics. *Energy in Agriculture*, v. 2, p. 197-217, 1983;

BEQUETTE, B. W. **Process Control: Modeling, Design and Simulation**. Prentice Hall PTR., 2010;

BHUNIA, P., GHANGREKAR, M. M., **Statistical modeling and optimization of biomass granulation and COD removal in UASB reactors treating low strength wastewaters**. *Bioresource Technology*, v.99, p. 4229-4238, 2008;

BNDES, CGEE. Banco Nacional do Desenvolvimento Econômico e Social; Centro de Gestão e Estudos Estratégicos (Coord.). **Bioetanol de cana-de-açúcar: energia para o desenvolvimento sustentável**. Rio de Janeiro: BNDES, 2008;

BRAGA, A. P., *et al.*; **Redes Neurais Artificiais** – Teoria e Aplicações, Editora LCT, 2000;

CABELLO, P. E. *et al.* **Tratamento de vinhaça em um reator anaeróbio de leito fluidizado**. *Engenharia Ambiental - Espírito Santo do Pinhal*, v.6, n.1, p. 321-338, 2009;

CALLANDER I. J., BARFORD J.P.; **Anaerobic digestion of high sulphate cane juice stillage in a tower fermenter**. *Biotechnology Letters*, v. 5, n. 11, p. 755-760, 1983;

- CAMACHO, I. A. O. **Caracterização dos resíduos do processamento de Mandioca para produção de bio-etanol e sua utilização na alimentação de aves.** Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Botucatu, 2009;
- CAMERON, E., *et al.*; **Anaerobic Digestion of Microalgae: Identification for Optimization and control.** In: *Perpints of the 18th IFAC World Congress.* IFAC, 2011, p. 5052-5057, 2011;
- CAMPOS, J. R. *et al.* **Tratamento de Esgotos Sanitários por Processo Anaeróbio e Disposição Controlada no Solo.** Rio de Janeiro: ABES – PROSAB, 1999. 464 p.;
- CAMPOS, J. R., **Tratamento de Esgotos Sanitários por Processo Anaeróbio e Disposição Controlada no Solo,** 1^a Ed, Rio de Janeiro, Brasil, ABES, Associação Brasileira de Engenharia Sanitária e Ambiental – ABES, Projeto PROSAB , 1999;
- CARVALHO, A. L., *et al.*; **Utilização de técnicas neurais para a modelagem de um reator UASB.** In: *20^o Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental,* Rio de Janeiro: ABES, 1999. v. 1, p. 875-884, 1999;
- CHEN, Z., *et al.*; **Performance and model of a full-scale up-flow anaerobic sludge blanket (UASB) to treat the pharmaceutical wastewater containing 6-APA and amoxicillin.** *Journal of Hazardous Materials,* v. 185, p.905-913, 2011;
- CHERNICHARO C. A. L. **Princípios do tratamento biológico de águas residuárias: biodigestores anaeróbios.** Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental. UFMG, v.5, 1997;
- CHERNICHARO, C. A. L., **Reatores anaeróbios,** SEGRAC, Belo Horizonte, p. 246, 1997;
- CONAB – Companhia Nacional de Abastecimento. **Acompanhamento da safra brasileira: cana-de-açúcar. Segundo levantamento,** 2012. Disponível em: <http://www.conab.gov.br/OlalaCMS/uploads/arquivos/12_08_09_15_07_05_boletim_cana_portugues_-_agosto_2012_2o_lev.pdf> Acessado em: outubro de 2012;
- CORAZZA, R. I. **Reflexões sobre o papel das políticas ambientais e de ciência e tecnologia na modelagem de opções produtivas ‘mais limpas’ numa perspectiva evolucionista: um estudo sobre o problema da disposição da vinhaça.** 1996.163p. Tese (Doutorado em política científica/tecnológica), Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1996;

- CORTEZ, *et al.*, **Biomassa para Energia**. Campinas: Ed. UNICAMP, 2008;
- COSTA F. J. C. B., *et al.*; **Utilization of vinasse effluents from an anaerobic reactor**. *Water Science e Technology*, v 18, n.12, p. 135-141, 1986;
- COULTER, J. B., *et al.*; **Anaerobic contact process for sewage disposal**. *Sewage and Industrial Wastes*, v. 29, p.468, 1957;
- CRAVEIRO, A. M. **Produção de biogás a partir de vinhaça**. *Saccharum*. São Paulo. v.6, n.25, p.16-25, 1983;
- DE BAERE, L. **Will anaerobic digestion of solid waste survive in the future?** *Water Science Technology*, v. 53, n. 8, p.187–194, 2006;
- DEWIL, R., *et al.*. **Anaerobic digestion of biomass and waste: current trends in mathematical modeling**. Proceedings of 18th IFAC World Congress. 18th IFAC World Congress. Milan (Italy), 2011;
- DONOSO-BRAVO A, *et al.* **Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: A review**. *Water research*, v. 45, p.5347-5364, 2011;
- DRIESSEN, W. J. B. *et al.*; **Experience on anaerobic treatment of distillery effluent with the UASB process**. *Water Science e Technology*, v. 30, n.12 p.193-201, 1994;
- EMOLLA, E. S., *et al.*; **The use of artificial neural network (ANN) for modeling of COD removal from antibiotic aqueous solution by the Fenton process**. *Journal of Hazardous Materials*, v. 179, p.127-134, 2010;
- ERDIRENCEBELI, D., YALPIR, S.; **Adaptive network fuzzy inference system modeling for the input selection and prediction of anaerobic digestion effluent quality**. *Applied Mathematical Modelling*, v.35, p. 3821-3832, 2011;
- EYNG, E. **Controle Feedforward baseado em redes neurais aplicado a coluna de absorção do processo de produção de etanol**. Dissertação de Mestrado. Universidade de Campinas (UNICAMP), 2006;

- FEDOROVICH, V., *et al.*; **Extension of Anaerobic Digestion Model No. 1 with processes of sulfate reduction**. Applied Biochemistry and Biotechnology, v.109, p. 33-45, 2003;
- FENG Y. **Calibration and Verification of a Mathematical Model for the Simulation of Blackwater/Biowaste Digestion**. Dissertação de Mestrado, Hamburg University of Technology, Hamburgo/Alemanha. 2004;
- FORESTI, E.; *et al.*. Fundamentos do tratamento anaeróbio. In: Campos, R. J. (Coord.). **Tratamento de esgotos sanitários por processo anaeróbio e disposição controlada de lodo**. Rio de Janeiro: Projeto PROSAB, 1999, cap. 2, p. 29-52;
- FORTES, G. R. L.; PEREIRA, J. E. S. Classificação e descrição botânica. In: **O cultivo da batata na região sul do Brasil**. EMBRAPA. Informação tecnológica. Brasília, Distrito Federal, 2003;
- FREIRE, W.J.; CORTEZ, L.A.B. **Vinhaça de cana-de-açúcar**. Livraria e Editora Agropecuária. Guaíba. 203p. 2000;
- FREITAS, L.C., KANEKO, S.; **Ethanol Demand in Brazil: Regional approach**. Energy Policy, v. 39, p. 2289-2298, 2011;
- GRADY, C. P. L.; DAIGGER, G. T.; LIM, H. C. Anaerobic processes. In: **Biological wastewater treatment**. 2. ed. rev. and exp. Boca Raton: CCR Press, 1999, p. 599-689;
- GRANATO, E. F., **Geração de Energia Através da Biodigestão Anaeróbia de Vinhaça**. 2003. 139p. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual Paulista, Bauru, 2003;
- HAMERSKI, F., **Partida de um reator anaeróbio de fluxo ascendente com manta de lodo (UASB) no tratamento de efluentes de uma indústria de laticínios**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 2012;
- HANSEN, K. H; *et al.*. **Anaerobic digestion of swine manure: inhibition by ammonia**. Water Research., v. 32, n.1, p. 5-12, 1998;
- HAYKIN, S. **Neural Networks – A comprehensive Foundation**. New York: Macmillan College Publishing Company, 1994;

- HICKEY, *et al.*; **Start-up, operation, monitoring and control of a high-rate anaerobic treatment systems.** Water Science and Technology, v. 24, n.8, p.207-255, 1991;
- HOFFMANN, R., **Análise do Desempenho de uma Micro-Destilaria Anexa para a Região das Encostas Basálticas do Rio Grande Do Sul.** Dissertação de Mestrado - PPGEMM/UFRGS. Porto Alegre, 1985;
- HUBBARD, R., **The widespread misinterpretation of p-values as error probabilities.** Journal of Applied Statistics, v. 38, n. 11, p. 2617-2626, 2011;
- HULSHOFF POL, L. W., *et al.*; **Anaerobic sludge granulation.** Water Research, v. 38, n.6, p. 1376-1389;
- INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA – IBGE. **Indicadores IBGE** – Estatística da produção agrícola. Disponível em <http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/indicadores/agropecuaria/lspa/estProdAgr_201302.pdf>. Acesso em Março de 2013;
- IRGA. **Lavoura arrozeira.** Porto Alegre, v.60, n. 457 p. 30, 2012;
- KATO, M. T., *et al.*; **Treatment of low strength soluble wastewater in UASB reactors.** Journal of Fermentation and Bioengineering, v.77, n.6, p. 679-686, 1994;
- KISTER, H.Z. **Distillation design.** California – EUA. Editora McGraw-Hill, Inc., 1992;
- KITAYAMA, O.; **Bioeletricidade: perspectivas e desafios.** In: III Seminário Internacional do Setor de Energia Elétrica – GESEL/IE/UFRJ. Rio de Janeiro, 2008;
- LEITÃO, R. C.; *et al.*. **The effects of operational and environmental variations on anaerobic wastewater treatment systems: a review.** Bioresource Technology, v. 97, p. 1105-1118, 2006;
- LEITE, R. C. C.; LEAL, M. R. L. V. **O Biocombustível no Brasil.** Novos Estudos CEBRAP, n. 78, São Paulo July, 2007;
- LETTINGA, G.; VINKEN, J.N.; **Feasibility of the upflow anaerobic sludge blanket (UASB) process for the treatment of low strength water.** Proceedings of the 35th Purdue industrial waste conference, p. 625-634, 1980;

LETTINGA, G.A. & HULSHOFF POL, L. W. **UASB-process design for various types of wastewaters**. *Water Science and Technology*, v. 24, n.8, p.87-107, 1991;

LETTINGA, G.A., *et al.*. **Use of the Upflow Sludge Blanket (USB) reactor concept for biological wastewater treatment**. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 22, p.699-734, 1980;

LI, X. Q. Processing and Value Addition. In: J. Gopal, S. M. P. Khurana (Eds.), **Handbook of Potato Production, Improvement, and Postharvest Management**. Food Products Press, New York. 2006 p. 523–555;

LJUNG, L., **System Identification: theory for the user**. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1987;

LÜBKEN, M., *et al.*. **Modelling the energy balance of an anaerobic digester fed with cattle manure and renewable energy crops**. *Water Research*, v. 41, p. 4085-4096, 2007;

MACHADO, O. J.; FREIRE, F. B. **Tratamento de vinhaça em reator anaeróbio de fluxo ascendente e manta de lodo (UASB)**. IV Semana do Meio Ambiente da Universidade Tecnológica Federal do Paraná / Campos Mourão, OLAM – Ciência & Tecnologia, Rio Claro, SP, Brasil. n.2, n. especial, p.170-188, 2009;

MacKAY, D. J. C., **Bayesian interpolation**. *Neural Computation*, v. 4, n. 3, p. 415-447, 1992;

MAIER, H. R., *et al.*, **Use of artificial neural networks for predicting optimal alum doses and treated water quality parameters**, *Environmental Modelling & Software*, v. 19, n. 5, p. 485-494, 2004;

MAPA - Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. **Sistema de Acompanhamento de Produção Canavieira** - Sapcana. Disponível em : <www.agricultura.gov.br/vegetal/culturas/cana-de-acucar>. Acesso em: 3 Agosto 2012;

MARQUES, M.O. Aspectos técnicos e legais da produção, transporte e aplicação de vinhaça. In: SEGATO, S.V.; PINTO, A.S.; JENDIROBA, E.; NÓBREGA, J.C.M. **Atualização em produção de cana-de-açúcar**. Piracicaba: Editoral, p.369-375, 2006;

- MAYER, F. *et al.* **O papel do etanol como combustível no desenvolvimento do Rio Grande do Sul – Parte I.** Conselho em Revista, v.94, p.39, 2013;
- McCARTY, P. L. **The Development of Anaerobic Treatment and Its Future.** Water Science and Technology, v. 44, n. 8, p. 149-156, 2001;
- MEDEIROS, M. S.; **Avaliação do Sistema de Gestão Ambiental de um frigorífico com E.T.E. usando reator UASB.** Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), 2006;
- METCALF & EDDY. **Wastewater Engineering: Treatment and Reuse.** Ed. McGraw Hill, 4ª, 2003. 1819 p.;
- MORRISON, R. R. B. **Química orgânica.** 9ª ed. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1990;
- MOSEY, F.E **Mathematical modelling of the anaerobic digestion process: regulatory mechanisms for the formation of short-chain volatile acids from glucose,** Water Science & Technology v. 15, p. 209-232, 1983;
- MU, Y., YU, H.Q., **Simulation of biological hydrogen production in a UASB reactor using neural network and genetic algorithm.** International Journal of Hydrogen Energy, v. 32, p. 3308-3314, 2007;
- MUSSATI, M, *et al.*. **Modeling of real biological reactors for the treatment of complex substrates. dynamic simulation.** Computers & Chemical. Engineering, v. 22, p. 723-726, 1998;
- NASR, N., *et al.*; **Application of artificial neural networks for modeling of biohydrogen production.** International Journal of Hydrogen Energy, v. 38, p. 3189-3195, 2013;
- NOGUEIRA, L. A. H.; **Análise da utilização de energia na produção de etanol de cana-de-açúcar.** Tese de Doutorado – Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas/SP, 1987;
- OLIVEIRA, A. R. **Redes Neurais Artificiais aplicadas na detecção, classificação e localização de defeitos em linhas de transmissão.** Tese de Doutorado. Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), 2005;

- PAVLOSTHATIS, S. G., GIRALDO-GOMEZ, E., **Kinetics of anaerobic treatment**. Water Resource, v. 24, n.8, p. 35-59, 1991;
- PINTO, C. P. **Tecnologia da digestão anaeróbia da vinhaça e desenvolvimento sustentável**. Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas/SP. 1999;
- PRETORIUS, W. A. **Anaerobic digestion of raw sewage**. Water Research, v. 5, p.681-687, 1971;
- RAMIREZ I., *et al.* **Modeling microbial diversity in anaerobic digestion through an extended ADM1 model**. Water Research, v. 43, n.11, p. 2787-2800, 2009;
- REZENDE V. M. **Degradabilidade ruminal das silagens de capim-napier produzidas com diferentes níveis de farelo de "batata diversa"**. Ciência e agrotecnologia. Lavras, v.31, n. 2 mar/apr. 2007;
- RODRIGUEZ, J. E. N.: **Desenvolvimento de um Sensor por Software para Avaliação de Biomassa em Reatores Anaeróbios**. Dissertação de mestrado. Universidade De Federal de Santa Catarina. 2003;
- ROSALES-COLUNGA, L.M., *et al.*; **Estimation of hydrogen production in genetically modified E. coli fermentations using an artificial neural network**. International Journal of Hydrogen Energy, v. 35, p. 3186-3192, 2010;
- SANCHEZ OJ, CARDONA CA. **Trends in biotechnological production of fuel ethanol from different feedstocks**. Bioresour Techno, v. 99, p.5270–5295, 2008;
- SANTOS, R. E. R., **Análise da viabilidade energética e econômica da produção de etanol em microdestilarias**. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2011;
- SECRETARIA DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E AGRONEGÓCIO. **Notícias**. Disponível em <http://www.saa.rs.gov.br/noticias_detalhe.php?cod=4729>. Acesso em 22.set.2012;
- SILVA F.G.C.S.; **Modelização dinâmica do processo de digestão anaeróbia utilizando o modelo ADM1**. Dissertação de Mestrado. Universidade de Aveiro. 2007;

- SILVA, G. A. **Avaliação das tecnologias de disposição de vinhaça de cana-de-açúcar quanto ao aspecto de desenvolvimento ambiental e econômico.** Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo - USP, São Carlos, 2011;
- SILVA, M. A. S, *et al.* **Uso de vinhaça e impactos nas propriedades do solo e lençol freático.** Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental, v.11, n.1, p.108–114, 2007;
- SILVEIRA, D. D., *et al.*; **Use of an Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor (UASB) as a post-treatment of wastewater from University Hospital of Santa Maria (HUSM).** In: 5. Deustsch-Brasilianisches Symposium, 2011, Stuttgart/Alemanha. Tagungsband des 5. Deustsch-Brasilianischen Symposium. Stuttgart/Alemanha: Universität Stuttgart, 2011. v. 1. p. 27-27;
- SIMPSON, D. E. **Investigation on a pilot-plant contact digester for the treatment of a dilute urban waste.** Water Research, v. 5, p. 523-532, 1971;
- SOUZA, F. A. A. **Análise de desempenho da rede neural artificial do tipo multilayer perceptron na era multicore.** Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN), 2012;
- SOUZA, M. E. **Fatores que influenciam a digestão anaeróbia.** Revista DAE/SABESP, v. 44, n. 137, p. 88-94, 1984;
- SPEECE, R. E. **Anaerobic Biotechnology for industrial wastewaters.** Nashville, Tennessee: Vanderbilt University, 393 p.;
- STATISTICA. **Statistica for Windows.** Disponível na Internet via: <<http://www.statsoftinc.com/>>. Acesso em: 10.mar.2013;
- STOREY, M. The Harvested Crop. In: D. Vreugdenhil, **Potato Biology and Biotechnology Advances and Perspectives.** Elsevier, Oxford. 2007. p. 441–470;
- STRIK, D.P.B.T.B., *et al.*; **Prediction of trace compounds in biogas from anaerobic digestion using the MATLAB neural network toolbox,** Environmental Modelling & Software, v. 20, p. 803-810, 2005;

- SZYMANSKI, M. S. *et al.* N. **Biodigestão anaeróbia da vinhaça: aproveitamento energético do biogás e obtenção de créditos de carbono** – estudo de caso. Ciências Agrárias. Londrina. v.31, p. 901-910, 2010;
- TAFNER, M. A., *et al.*; **Redes neurais, introdução e princípios de neurocomputação**. Blumenau: Editora Eko, 1996;
- TOERIEN, D.F., *et al.* **Substrate flow in anaerobic digestion**, Advances in Water Pollution Research, v. 11, p. 2911-2917, 1971;
- UNICA – União da Indústria da Cana-de-Açúcar. **Cana-de-açúcar processada pelas Usinas Brasileiras (Produção cana-de-açúcar no Brasil)** [online 2012 jun. 10] Disponível em: <<http://www.unica.com.br/downloads/estatisticas/processcanabrasil.xls>>. Acesso em 15.ago.2012;
- UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA—UNESP. “**Termo de Referência para o Workshop Tecnológico-Vinhaça 2007**”. Disponível em <http://www.apta.sp.gov.br/cana/anexos/Termo_de_Referencia_Vinhaca.pdf>. Acesso em 15.ago.2012;
- VAN HAANDEL, A. C. **Influence of the digested COD concentration on the alkalinity requirement in anaerobic digesters**. Water Science e Technology, v. 30, n. 8, p. 23-24, 1994;
- VAN HAANDEL, A. C., CATUNDA, P. F. C.; **Profitability increase of alcohol distilleries by the rational use of byproducts**. Water Science e Technology, v. 29, n. 8, p. 117-124, 1994;
- VAN LIER, J.B., *et al.*. Anaerobic Wastewater Treatment. In: M. Henze, M.C.M. van Loosdrecht, G.A. Ekama, D. Brdjanovic (eds.), **Biological Wastewater Treatment, Principles, Modelling and Design**, IWA Publishing, London, UK, p. 415-456. 2008;
- WANG, Y.; *et al.* **Effects of volatile fatty acid concentrations on methane yield and methanogenic bacteria**. Biomass and Bioenergy, v. 33, p. 848-853, 2009;
- WEBER, D. P.; **Aplicação de um reator anaeróbio de alta eficiência para o tratamento de efluentes de uma microdestilaria de álcool**. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Santa Maria, 2012;

WILKIE, A.C., *et al.*: **Stillage characterization and anaerobic treatment of ethanol stillage from conventional and cellulosic feedstocks.** Biomass and Bioenergy, v.19, p.63-102, 2000;

XAVIER, S. **Álcool como carburante:** razões da sua utilização. Brasil Açucareiro, v. 76, p.12-16, 1970;

YANG, J.; *et al.*. **The response of methane fermentation to cyanide and chloroform.** Progress in Water Technology, v. 12, p. 977-987, 1980.

APÊNDICES

APÊNDICE A – Funções de Treinamento *trainlm* e *trainbr*

Trainlm

O algoritmo de Levenberg-Marquart (*trainlm*) foi concebido para se aproximar da velocidade da função de treinamento de segunda ordem, sem ter que calcular a matriz Hessiana. Quando a função de execução tem a forma de uma soma de quadrados (como é típico na formação de redes feedforward), então a matriz Hessiana pode ser aproximada como:

$$H = J^T J$$

E o gradiente pode ser computado como:

$$g = J^T e$$

Onde J é a matriz Jacobiana que contém as derivadas de primeira ordem dos erros da rede em relação aos pesos e tendências, e e é o vetor com os erros da rede. A matriz Jacobiana pode ser calculada com uma técnica de retropropagação padrão, que é muito menos complexa que o uso da matriz Hessiana, através da equação a seguir:

$$x_{k+1} = x_k - [J^T J + \mu I]^{-1} J^T e$$

Quando o escalar μ é 0, se torna apenas o método de Newton, utilizando a matriz Hessiana aproximada. Quando μ é um valor elevado, se torna um gradiente descendente com o passo pequeno. O método de Newton é mais rápido e mais preciso quando está perto de um erro mínimo, de modo que o objetivo é se deslocar para o método de Newton o mais rápido possível. Assim, μ é reduzido a cada passo com sucesso, e aumentado quando apenas um passo preliminar iria aumentar a função objetivo. Deste modo a função objetivo é sempre reduzida, em cada iteração do algoritmo.

A descrição original do algoritmo de Levenberg-Marquardt pode ser encontrada em Hagan *et al.* 1994, e este método é considerado por MATLAB como o método mais rápido para formação de redes neuronais feedforward de tamanho moderado.

Trainbr

Trainbr é uma função de treinamento de redes neuronais que atualiza os valores de pesos e tendências de acordo com a otimização de Levenberg-Marquardt. Ele minimiza uma combinação de erros quadráticos e pesos, e em seguida, determina a combinação correta de forma a produzir uma rede que generalize bem, este processo é chamado de regularização Bayesiana.

Regularização Bayesiana é uma função mais robusta que as demais funções de treinamento de retropropagação, assim podem eliminar ou reduzir a necessidade de uma validação cruzada.

O uso desta abordagem envolve modificar a função objetivo, que geralmente é a soma média dos erros quadrados da rede (E_d), esta modificação visa melhorar a capacidade de generalização do modelo, ficando a função objetivo adicionada de mais um termo, que é a soma dos quadrados dos pesos da rede (E_w):

$$F = \beta E_d + \alpha E_w$$

Onde β e α são parâmetros que devem ser otimizados.

Assume-se que os pesos e tendências da rede são variáveis aleatórias seguindo distribuições Gaussianas, e os parâmetros estão relacionados com variações desconhecidas associadas a estas variações.

APÊNDICE B – Resultados complementares

Vinhaça de Batata

Caso 2) Três entradas e uma saída

Tabela B1 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 2 com a função de treinamento *trainlm*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.50496	7	9	0.90874	5	17	0.91277	4
2	0.87095	6	10	0.3635	5	18	0.42273	3
3	-0.61382	5	11	0.59184	5	19	0.85456	3
4	0.73005	7	12	0.84989	4	20	0.81826	3
5	0.71306	6	13	0.8358	5	25	0.93982	3
6	-0.79287	5	14	0.98841	4	30	-0.7646	3
7	-0.07685	5	15	0.94617	4	50	-0.026	3
8	0.71432	7	16	0.945	4	100	0.19122	3

Tabela B2 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 1 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
14	0,19583 e 07
15	0,92315 e 07
16	1,2528 e 07

Tabela B3 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 2 com a função de treinamento *trainbr*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0	26	9	0.89312	134	17	0.89505	441
2	0.88431	69	10	0	18	18	0.87318	172
3	0.91269	397	11	0	63	19	0.89473	534
4	0.89275	350	12	0.89221	419	20	0.87303	483
5	0.87088	144	13	0.88981	242	25	0.72621	550
6	0	22	14	0.89408	182	30	0.88579	410
7	0.85134	143	15	0.88189	240	50	0.84755	458
8	0	26	16	0.89176	861	100	0.89304	1000

Tabela B4 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 2 com a função *trainbr*

Hidden Neurons	Erro
3	1,3787e 07
4	1,6886e 07
9	1,7770e 07

Caso 3) Uma entrada e uma saída

Tabela B5 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 3 com a função de treinamento *trainlm*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.87899	19	9	0.89483	5	17	0.95613	3
2	0.85053	9	10	0.55069	7	18	-0.4313	5
3	0.90294	13	11	0.77276	8	19	-0.6349	6
4	0.89943	6	12	0.53456	7	20	0.84005	3
5	0.86411	4	13	0.87402	4	25	0.48036	3
6	0.83885	4	14	0.58962	3	30	0.60028	4
7	0.88689	8	15	0.28741	7	50	0.47625	3
8	0.86868	3	16	0.73894	3	100	-0.6103	2

Tabela B6 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 3 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
3	1,5636 e 07
4	4,0851 e 07
17	1,0494 e 07

Tabela B7- Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 3 com a função de treinamento *trainbr*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0	13	9	0.88391	67	17	0.85766	160
2	0.85165	130	10	0.8423	1000	18	0.80704	570
3	0.85595	407	11	0.87967	89	19	0	28
4	0.87424	30	12	0.85756	189	20	0.80693	660
5	0.81042	419	13	0.8706	83	25	0	31
6	0.85583	925	14	0.88197	108	30	0.86745	184
7	0.87424	29	15	0.80716	639	50	0	57
8	0	25	16	0.89016	1000	100	0.84594	1000

Tabela B8 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 3 com a função *trainbr*

Hidden Neurons	Erro
9	1,8194e 07
14	1,7525e 07
16	1,8451e 07

Caso 4) Três entradas e duas saídas - Acompanhamento

Tabela B9 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 4 com a função de treinamento *trainlm*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.89775	18	9	0.94871	4	17	0.77992	3
2	0.82064	9	10	0.93158	4	18	0.13705	4
3	0.96427	7	11	0.53375	4	19	0.02370	4
4	0.9497	7	12	0.97297	4	20	-0.1480	4
5	0.91536	6	13	0.97674	5	25	0.82658	4
6	-0.6730	5	14	0.73907	4	30	0.65205	3
7	0.86212	5	15	0.82215	4	50	0.60301	3
8	0.85378	5	16	0.48945	4	100	-0.2875	3

Tabela B10 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 4 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
3	1,6872e 07
12	1,1025e 07
13	0,93851e 07

Tabela B11- Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 4 com a função de treinamento *trainbr*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.81994	273	9	0.81994	77	17	0.81994	114
2	0.81994	60	10	0.81994	86	18	0.81994	28
3	0.81994	31	11	0.81994	75	19	0.81994	28
4	0.81994	201	12	0.81994	55	20	0.81994	51
5	0.81994	29	13	0.81994	74	25	0.81994	59
6	0.81994	56	14	0.81994	1000	30	0.81994	80
7	0.81994	66	15	0.81994	35	50	0.81994	1000
8	0.81994	318	16	0.81994	38	100	0.81994	259

Vinhaça de Cana-de-açúcar

Caso 1) Três entradas e duas saídas

Tabela B12 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 1 com a função de treinamento *trainlm*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.9217	8	9	0.94498	4	17	0.91796	4
2	0.86156	7	10	0.95546	5	18	0.97527	4
3	0.93218	7	11	0.91738	4	19	0.72233	3
4	0.95137	11	12	0.94466	4	20	0.92422	4
5	0.96407	6	13	0.87255	4	25	0.47235	4
6	0.93966	7	14	0.97159	14	30	0.75793	4
7	0.93449	5	15	0.3435	5	50	0.43807	3
8	0.9468	7	16	0.85227	5	100	0.74847	3

Tabela B13 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 1 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
5	7,5419e 07
14	4,062e 07
18	4,1031e 07

Tabela B14 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 1 com a função de treinamento *trainbr*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.86512	63	9	0.86512	56	17	0.98741	281
2	0.86512	73	10	0.86512	40	18	0.94866	231
3	0.87549	263	11	0.9749	194	19	0.86512	42
4	0.86512	73	12	0.86512	53	20	0.96076	1000
5	0.86512	72	13	0.99043	187	25	0.86512	47
6	0.86512	30	14	0.86512	52	30	0.86512	40
7	0.86512	67	15	0.8808	1000	50	0.86512	75
8	0.86512	73	16	0.98864	191	100	0.86512	49

Tabela B15 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 2 com a função *trainbr*

Hidden Neurons	Erro
13	1,5091e 07
16	1,5244e 07
17	1,9545e 07

Caso 2) Três entradas e uma saída

Tabela B16 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 2 com a função de treinamento *trainlm*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.86646	16	9	0.94946	6	17	0.30607	4
2	0.61588	6	10	0.75393	6	18	0.87196	3
3	0.88701	10	11	0.0083	4	19	-0.4715	3
4	0.90387	4	12	0.71836	3	20	0.63107	4
5	-0.1490	4	13	0.91826	4	25	0.87695	3
6	0.86316	6	14	0.83069	4	30	0.21861	3
7	0.61657	6	15	0.89993	5	50	0.86811	3
8	0.95972	5	16	0.80791	3	100	-0.4439	3

Tabela B17- Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 2 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
8	1,9807e 07
9	1,8442e 07
13	2,7593e 07

Tabela B18 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 2 com a função de treinamento *trainbr*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.92444	404	9	0.80017	168	17	0.70106	133
2	0	94	10	0.91185	1000	18	0.91394	632
3	0.90245	250	11	0.86642	1000	19	0.86088	929
4	0.89133	89	12	0.89137	387	20	0.572	64
5	0.75615	55	13	0.93635	1000	25	0.91369	652
6	0	161	14	0.93255	1000	30	0.91299	1000
7	0.91694	502	15	0.91561	725	50	0.91673	1000
8	0.91297	407	16	0.80902	209	100	0.91562	1000

Tabela B19 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 2 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
1	2,8313e 07
13	2,1270e 07
14	2,5404e 07

Caso 3) Uma entrada e uma saída

Tabela B20 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 3 com a função de treinamento *trainlm*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.85805	9	9	0.63958	6	17	0.86724	3
2	0.85997	7	10	0.47453	7	18	0.01095	3
3	0.81403	7	11	0.81579	3	19	0.66977	5
4	0.85923	7	12	0.88085	3	20	0.86521	3
5	0.86216	3	13	0.58576	3	25	0.71482	3
6	0.78258	5	14	0.47283	4	30	0.06182	3
7	0.70743	7	15	0.87557	3	50	0.85689	8
8	0.77367	6	16	0.68277	6	100	0.22743	3

Tabela B21 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 3 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
5	5,3289e 07
15	5,3991e 07
17	1,8108e 08
20	2,3694e8

Tabela B22 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 3 com a função de treinamento *trainbr*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0	94	9	0.84822	231	17	0	63
2	0.84411	90	10	0	39	18	0.84871	303
3	0.85543	164	11	0.84827	257	19	0	46
4	0.84797	109	12	0.84886	388	20	0.84889	428
5	0.84805	455	13	0.84873	259	25	0	41
6	0.85439	181	14	0.84837	342	30	0.84882	467
7	0.84808	363	15	0.85471	464	50	0.84885	481
8	0.84916	108	16	0.84926	196	100	0	41

Tabela B23 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 3 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
3	4,9965e 07
7	4,8720e 07
15	4,7593e 07

Caso 4) Três entradas e duas saídas – Acompanhamento

Tabela B24 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 4 com a função de treinamento *trainlm*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.88954	6	9	0.89105	5	17	0.95554	5
2	0.95127	7	10	-0.4264	5	18	0.94544	4
3	0.92372	6	11	0.93068	11	19	0.91427	4
4	0.81754	6	12	0.94619	5	20	0.92768	4
5	0.92138	6	13	0.9203	4	25	0.98821	4
6	0.90723	5	14	0.92938	5	30	0.72631	4
7	0.8548	5	15	0.59345	5	50	0.44229	3
8	0.95178	4	16	0.99801	4	100	0.59454	3

Tabela B25 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 4 com a função *trainlm*

Hidden Neurons	Erro
16	0,25605e 07
17	7,1750e 07
25	1,76631e 07

Tabela B26 - Correlações e iterações obtidas para diferentes neurônios na camada oculta para o caso 4 com a função de treinamento *trainbr*

HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite	HN	R ²	Ite
1	0.87267	48	9	0.87267	89	17	0.87267	74
2	0.87267	107	10	0.87267	389	18	0.87267	104
3	0.8976	141	11	0.98454	500	19	0.99453	394
4	0.87267	1000	12	0.87267	56	20	0.87267	108
5	0.87267	97	13	0.87267	55	25	0.99738	815
6	0.87267	45	14	0.87267	303	30	0.87267	124
7	0.91041	206	15	0.90039	1000	50	0.90094	1000
8	0.87267	115	16	0.99624	221	100	0.87267	1000

Tabela B27 - Erro total obtido para diferentes neurônios na camada oculta no caso 4 com a função *trainbr*

Hidden Neurons	Erro
16	0,49653e 07
19	0,69685e 07
25	0,34408e 07