



JOHNATHAN GONÇALVES FARIA

**AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE ESTIMADORES DE
ESTADO BAYESIANOS APLICADOS AO PROCESSO DE
FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA EXTRATIVA**

LAVRAS – MG

2021

JOHNATHAN GONÇALVES FARIA

**AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE ESTIMADORES DE ESTADO BAYESIANOS
APLICADOS AO PROCESSO DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA EXTRATIVA**

Monografia apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Curso de Engenharia Química, para a obtenção do título de Bacharel.

Prof. Dr. Gilson Campani Junior
Orientador

LAVRAS – MG
2021

JOHNATHAN GONÇALVES FARIA

**AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE ESTIMADORES DE ESTADO BAYESIANOS
APLICADOS AO PROCESSO DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA EXTRATIVA**

Monografia apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Curso de Engenharia Química, para a obtenção do título de Bacharel.

APROVADA em 22 de maio de 2021

Prof. Dr. Gilson Campani Junior
Orientador

LAVRAS – MG
2021

Dedico esse trabalho a toda minha família, em especial à minha mãe Renata pelo apoio, carinho e conselhos que me fizeram chegar até aqui.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Deus por ter proporcionado paz e saúde a mim e aos meus familiares, e amigos.

À minha mãe por todo amor, carinho e apoio que foi a base para conquistar essa etapa. Palavras são indescritíveis para demonstrar o meu agradecimento e amor.

Ao meu padrasto e irmão que sempre me apoiaram e incentivaram incondicionalmente nessa jornada.

Ao Prof. Dr. Gilson Campani Junior pela orientação, conselhos, oportunidades, e por ser tão prestativo e atencioso durante toda a construção desse trabalho, que contribuiu imensamente para o meu crescimento intelectual.

Aos funcionários da biblioteca José Miserani de Carvalho em Campo Belo - MG, que me receberam com imensa hospitalidade em um período tão difícil como foi 2020.

Aos amigos que sempre estiveram lado a lado nos bons e maus momentos.

Aos professores e professoras que me proporcionaram conhecimento, que é a maior riqueza que alguém pode ter.

À Universidade Federal de Lavras pela oportunidade desse trabalho e por todas as alegrias, conquistas, aprendizado e conhecimento.

*“Se eu vi mais longe, foi por
estar sobre ombros de gigantes.”
(Isaac Newton)*

RESUMO

A crescente necessidade de controle de processos da indústria química implica no desenvolvimento de sensores de monitoramento cada vez mais caros e sofisticados, trazendo desafios quanto à construção de plantas industriais automatizadas com uma boa relação custo-benefício. No entanto, para reduzir o uso de sensores de alto custo tem sido desenvolvidas ferramentas de estimação, também denominadas de *softsensors*. Dos diversos estimadores de estado existentes, existe uma classe de métodos denominados de Bayesianos, dentre os quais temos três que se destacam pela sua aplicabilidade e eficácia: Filtro de Kalman Estendido (EKF), Filtro de Kalman Unscented (UKF) e Estimador de Horizonte Móvel (MHE). Diante desse contexto, no presente trabalho objetivou-se desenvolver, avaliar e aplicar, *in silico*, os estimadores EKF, UKF e MHE no processo de fermentação em batelada alimentada com remoção de etanol por esgotamento (*stripping*) com CO₂, também conhecida como fermentação alcoólica extrativa. Para isso, o processo foi simulado em MATLAB™, juntamente com os estimadores de estado, frente a ruídos nas medidas, perturbações nas variáveis do processo, imprecisões do modelo, assim como Condição Inicial Desconhecida (CID). A eficácia dos estimadores de estado foi quantificada através de critérios de desempenho como Tempo Médio por Iteração (TMI) e Erro Médio Quadrático (EMQ). De modo geral, a aplicação dos estimadores ao bioprocessos se mostrou viável, uma vez que o maior TMI (0,131 s) obtido pelos estimadores foi menor que o tempo de amostragem do processo (3,6 s). Na comparação entre o desempenho dos estimadores, o UKF apresentou excelentes resultados, fornecendo estimativas até trinta vezes mais precisas que o MHE, que espera-se ser mais robusto e com maior acurácia na estimativa.

Palavras chave: EKF, UKF, MHE, fermentação alcoólica extrativa.

ABSTRACT

The increasing need for process control in the chemical industry implies the development of expensive and sophisticated monitoring sensors, bringing up challenges regarding the construction of cost-effective automated industrial plants. However, to reduce the use of expensive sensors, estimation tools have been developed, also known as softensors. Of the various existing state estimators, there is a class of methods called Bayesians. Among them, there are three that stand out for their applicability and effectiveness: Extended Kalman Filter (EKF), Kalman Unscented Filter (UKF), and Moving Horizon Estimator (MHE). In this context, the present study aimed to develop, evaluate and apply, *in silico*, the estimators EKF, UKF, and MHE in the fed-batch fermentation with ethanol removal by CO₂ stripping, also known as extractive alcoholic fermentation. For this, the process was simulated in MATLAB™, along with the state estimators, subject to noise in the measurements, disturbances in the process variables, model inaccuracies, as well as Unknown Initial Condition (CID, *Condição Inicial Desconhecida*). The effectiveness of the state estimators was measured through performance criteria such as Average Time per Iteration (TMI, *Tempo Médio por Iteração*) and Average Error Quadratic (EMQ, *Erro Médio Quadrático*). In general, the application of the estimators to the bioprocess proved to be suitable, since the highest TMI (0.131 s) demanded by the estimators was lower than the sampling time of the process (3.6 s). When comparing the performance of the estimators, the UKF showed excellent results, providing estimates up to thirty times more precise than the MHE, which is expected to be more robust and accurate.

Keywords: EKF, UKF, MHE, extractive alcoholic fermentation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Diagrama esquemático para estimativa de estados Bayesiana	18
Figura 2.2 – Fluxograma da implementação do EKF	20
Figura 2.3 – Fluxograma da implementação do UKF	22
Figura 2.4 – Fluxograma da produção de etanol em batelada alimentada.....	27
Figura 3.1 – Fluxograma da fermentação alcoólica extrativa	31
Figura 4.1 – Intervalo de confiança do modelo com 95% de confiança.....	40
Figura 4.2 – Estimativas oriundas do EKF, UKF e MHE aplicados à fermentação alcoólica extrativa e erro ao longo do processo.....	42
Figura 4.3 – Estimativas oriundas do EKF, UKF e MHE aplicados à fermentação alcoólica extrativa e erro ao longo do processo com condição inicial desconhecida.....	44

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Valores dos coeficientes de conversão e dos parâmetros cinéticos e de <i>stripping</i>	33
Tabela 3.2 – Configurações de medida.....	35
Tabela 4.1 – Observabilidade dos parâmetros.....	39
Tabela 4.2 – TMI e EMQ para EKF, UKF e MHE.....	41
Tabela 4.3 – TMI e EMQ para EKF, UKF e MHE com CID.....	44

LISTAS DE SIGLAS E ABREVIATURAS

α	fator de esquecimento	
κ	parâmetro de escala	
δq	erro padrão dos parâmetros de fermentação	
μ	velocidade específica de crescimento celular	(h^{-1})
$\mu_{máx}$	velocidade específica máxima de crescimento celular	(h^{-1})
Φ	vazão de alimentação de gás de CO ₂	$(vvm, L_{CO_2} L_{reator}^{-1} min^{-1})$
$\hat{\chi}$	valores preditos pelo modelo	
A	matriz de sensibilidade	
ANP	agência nacional de petróleo, gás natural e biocombustíveis	
ART	açúcares redutores totais	
C	matriz de observação	
C_E	concentração de etanol no caldo de fermentação	
$C_{E'max}$	concentração de etanol máxima após ao fim do crescimento celular	
C_E^*	concentração de etanol para início do <i>stripping</i>	
C_S	concentração de substrato no caldo de fermentação	
C_{SF}	concentração de substrato no mosto de alimentação	
C_X	concentração de células no caldo de fermentação	
CID	condição inicial desconhecida	
EKF	<i>extend Kalman filter</i>	
EMQ	erro médio quadrático	

F	vazão volumétrica de alimentação	(Ls^{-1})
K_{IS}	constante de inibição por substrato	(gL^{-1})
K_S	constante de saturação por substrato	(gL^{-1})
k_E	constante de remoção de etanol	(h^{-1})
k_W	constante de remoção de água	(h^{-1})
L	ganho de Kalman	
MHE	<i>moving horizon estimator</i>	
N	tamanho do horizonte do estimador de estados	
O	matriz de observabilidade	
P	matriz de covariância das variáveis de estado	
P_0	chute inicial para a matriz de covariância das variáveis de estado	
P^a	matriz de covariância aumentada das variáveis de estado	
Q	matriz de covariância do ruído do processo	
R	matriz de covariância do ruído da medida	
t	tempo	(h)
t_k	tempo no passo k	(h)
t_0	tempo inicial	(h)
$t_{95\%;(ne-nm)}$	variável da distribuição Student	
TMI	tempo médio por iteração	(s)
UT	<i>unscented transformation</i>	
UKF	<i>unscented Kalman filter</i>	

v	ruído da medida	
V	volume do caldo	
W	matriz de pesos dos pontos sigma	
w	ruído do processo	
X	matriz de regressão	
X^a	matriz de pontos sigma aumentada	
X^x	matriz de pontos sigma das variáveis de estado	
X^Q	matriz de pontos sigma do ruído do processo	
X^R	matriz de pontos sigma do ruído da medida	
x	estado real simulado	
$x(t)$	variável de estado	
\hat{x}	variável de estado estimada	
\hat{x}_{ic}	intervalo de confiança dos valores preditos	
x^a	vetor aumentado variável de estado	
\hat{x}^a	vetor aumentado dos estados e dos ruídos do processo e das medidas	
Y	matriz de pontos sigma relativo as medidas	
$Y_{X/S}$	coeficientes de conversão de substrato em célula	$(g_X g_S^{-1})$
$Y_{E/S}$	coeficientes de conversão de substrato em etanol	$(g_E g_S^{-1})$
y	variável medida	

SUMÁRIO

1 - INTRODUÇÃO	15
1.1 – Objetivos	17
2 – REFERENCIAL TEÓRICO	18
2.1 – Estimadores de estado.....	18
2.1.1 – Filtro de Kalman Extendido (EKF).....	19
2.1.2 – Filtro de Kalman Unscented (UKF)	21
2.1.3 – Estimador de horizonte móvel (MHE)	23
2.2 – Produção de etanol: características gerais do processo	25
2.2.1 – Efeito inibitório do etanol na fermentação alcoólica	27
2.2.2 – Fermentação alcoólica extrativa	28
3 – METODOLOGIA.....	30
3.1 – Processo de fermentação alcoólica extrativa: modelo matemático e condições operacionais	30
3.2 – Análise estatística do modelo matemático	33
3.3 - Teste de observabilidade	34
3.4 - Formulação dos estimadores de estado	36
3.4.1 – Condição inicial desconhecida.....	37
3.5 – Critérios de desempenho dos estimadores	38
4 – RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	39
4.1 – Teste de Observabilidade.....	39
4.2 – Análise estatística do modelo matemático	40
4.3 – Comparação entre os estimadores	41
4.3.1 – Condição inicial desconhecida (CID)	44
5 – CONSIDERAÇÕES FINAIS	48

6 – TRABALHOS FUTUROS	50
7 - REFERÊNCIAS.....	51

1 - INTRODUÇÃO

Plantas químicas e bioquímicas modernas devem satisfazer uma série de requisitos técnicos, econômicos e ambientais cada vez mais severos para garantir tanto uma operação mais lucrativa, quanto especificações mais rígidas na qualidade do produto. Essa realidade tem demandado o desenvolvimento de sensores de monitoramento cada vez mais sofisticados e, muitas vezes, de elevado custo, trazendo desafios quanto à construção de plantas industriais automatizadas com uma boa relação custo-benefício. Nesse cenário, o monitoramento e controle dos processos têm ganhado cada vez mais atenção, direcionando o desenvolvimento de novas tecnologias para que as plantas modernas operem com segurança, robustez e lucratividade (ALEXANDER et al., 2020; DOCHAIN et al., 2009; GONZALEZ et al., 2001; HULHOVEN et al., 2006 JANA, 2010; SOROUSH, 1997)

A utilização de sensores é de fundamental importância para monitorar variáveis de processo, fornecendo informações em tempo real para sistemas de controle *feedback* e para detectar perturbações. Quando as medições *online* de variáveis de estado são ruidosas ou não estão disponíveis na prática, seja pela dificuldade de efetuar a medida ou pelo alto custo de sensores, uma ferramenta matemática conhecida como estimador de estado pode ser usada para reconciliar dados ruidosos e estimar variáveis não medidas, reduzindo o uso de sensores de alto custo (ALEXANDER, 2020, MOHD ALI et al., 2015, DOCHAIN et al., 2009).

Dentre os estimadores existentes, três se destacam pelo seu desempenho, aplicabilidade e eficácia frente à dinâmica não lineares de sistemas: Filtro de Kalman Estendido (EKF, *Extended Kalman Filter*), Filtro de Kalman *Unscented* (UKF, *Unscented Kalman Filter*), e Estimador de Horizonte Móvel (MHE, *Moving Horizon Estimator*) (RAWLINGS et al., 2017). Estes métodos são estimadores Bayesianos, que são baseados na hipótese de distribuição normal de probabilidade das variáveis de estado e medidas, e são, portanto, estimadores consistentes e versáteis, que são apropriados para estimativas rápidas e robustas (HASELTINE; RAWLINGS, 2005; MOHD ALI et al., 2015).

O EKF é um método recursivo, relativamente fácil de implementar, que fornece estimativas rápidas, e utiliza como premissa básica a linearização do modelo do sistema através da determinação da matriz Jacobiana, o que o torna menos robusto quanto a erros de modelagem e condições iniciais imprecisas (CAMPANI et al., 2019; RAWLINGS et al., 2017; SUI et al., 2008).

O UKF também é um método recursivo que utiliza um conjunto de pontos denominado pontos sigma para aproximar a distribuição de probabilidade e para propagar a média e a covariância por meio das equações do modelo. Nesse método não é necessário o cálculo da matriz Jacobiana, solucionando os impasses gerados pelo EKF (RAWLINGS et al., 2017; ZHU et al., 2018).

Já o MHE é capaz de lidar com restrições e fornece estimativas mais precisas, porém com maior tempo computacional, decorrente da necessidade de solucionar problemas de otimização não linear a cada iteração. Por isso, o MHE pode ser inadequado para processos com dinâmica rápida e tempo curto de amostragem. A carga computacional de MHE pode ser reduzida encurtando o tamanho do horizonte móvel. Entretanto, horizontes curtos podem levar a estimativas imprecisas, especialmente frente a perturbações não modeladas (ALEXANDER et al., 2020; HASELTINE; RAWLINGS, 2005).

Devido à relativa simplicidade e reprodutibilidade de cada estimador, inúmeros trabalhos vêm sendo publicados no desenvolvimento, aplicação e comparação de estimadores de estado em processos químicos e bioquímicos (AFSHARI et al., 2017; CAMPANI et al., 2019; FURLONG et al., 2020; LIMA et al., 2012; LIMA; RAWLINGS, 2011; LÓPEZ-NEGRETE; BIEGLER, 2012; MARKANA et al., 2018; RAÍSSI et al., 2005; RAJAMANI; RAWLINGS, 2007; RAWLINGS et al., 2017; RINCÓN et al., 2014; ROMANENKO; CASTRO, 2004; VARSHNEY et al., 2019; WANG et al., 2010; YIN; LIU, 2017).

Um importante bioprocesso que pode ser beneficiado pela utilização de diferentes estimadores de estados é a fermentação alcoólica em batelada alimentada com remoção de etanol por esgotamento (*stripping*) com CO₂, também conhecida como fermentação alcoólica extrativa (SONEGO et al., 2018). Nesse contexto, o monitoramento das concentrações de substrato, etanol e biomassa

celular através de estimadores de estado pode auxiliar na condução do processo, mais especificamente na realimentação de sistemas de controle. Um exemplo de aplicação seria para o controle da concentração de substrato, uma vez que o controle dessa variável em um certo valor de referência pode beneficiar a dinâmica de crescimento celular e, conseqüentemente, a produção de etanol. Portanto, o estudo e a aplicação de diferentes estimadores de estado contribuem para o melhor desempenho do processo de fermentação alcoólica extrativa, aumentando a sua produtividade e reprodutibilidade.

1.1 – Objetivos

Posto isso, o presente trabalho tem como objetivo geral estudar e avaliar a aplicação de estimadores de estado Bayesianos para monitorar o processo de fermentação alcoólica extrativa.

Já os objetivos específicos são:

- avaliar a observabilidade do sistema através do teste de observabilidade local, como etapa preliminar à implementação dos estimadores;
- avaliar o desempenho dos estimadores de estado frente a desafios como Condição Inicial Desconhecida (CID), imprecisões no modelo (*plant-model mismatch*) e ruídos nas medidas;
- verificar a aplicabilidade dos estimadores através de critérios de desempenho tais como o Tempo Médio por Iteração (TMI) e o Erro Médio Quadrático (EMQ).

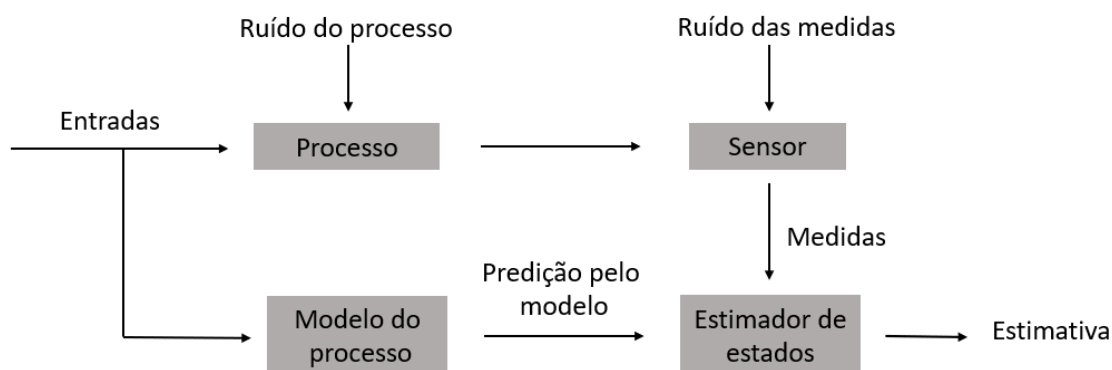
2 – REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 – Estimadores de estado

A estimação de estado é um conjunto de técnicas matemáticas desenvolvidas para reconstruir o estado de um sistema, especialmente quando as suas informações são ruidosas ou não são disponíveis na prática (ALEXANDER et al., 2020). O principal desafio da implementação de estimadores de estado em processos químicos e bioquímicos é fornecer estimativas robustas, de forma *online*, e com baixo custo computacional (ALEXANDER et al., 2020; LIMA; RAWLINGS, 2011).

Dentre as diversas categorias de estimadores existentes, os métodos Bayesianos são os mais empregados em processos químicos, especialmente o Filtro de Kalman Extendido (EKF), Filtro de Kalman *Unscented* (UKF) e o Estimador de Horizontes Móvel (MHE) (ALEXANDER et al., 2020). Esses estimadores assumem que as todas as variáveis envolvidas são estocásticas, com distribuição de probabilidade normal. A estimativa dos estados é fornecida através das informações do modelo do processo, das medidas e do ruído associado (CAMPANI et al., 2019; MOHD ALI et al., 2015; RAWLINGS et al., 2017). A Figura 2.1 a seguir ilustra a dinâmica para a estimativa Bayesiana.

Figura 2.1 – Diagrama esquemático para estimativa de estados Bayesiana



Fonte: Adaptada de Alexander et al. (2020).

Para que a estimativa fornecida seja robusta e precisa, é necessário que o estimador seja sintonizado. Em estimadores Bayesianos os principais parâmetros de sintonia são as matrizes de covariância associada ao processo (Q) e às medidas (R), cujas configurações podem ter um efeito significativo no desempenho do estimador (ALEXANDER et al., 2020; RHUDY et al., 2017). Quando é atribuída uma grande incerteza associada ao processo, o estimador de estados pretere as informações oriundas do modelo matemático, confiando mais nas informações fornecidas pelo sensor. Por outro lado, quando é o sistema de medidas que tem grande incerteza associada, o estimador confia menos nas informações do sistema de medição para fornecer a estimativa (RHUDY et al., 2017).

2.1.1 – Filtro de Kalman Extendido (EKF)

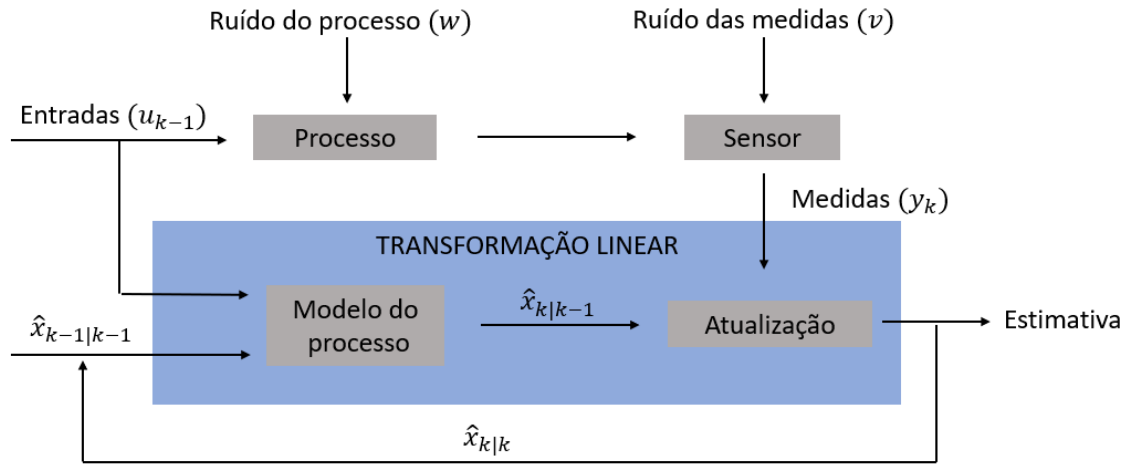
O EKF é uma extensão do método recursivo, proposto por Kalman (1960) e desenvolvido para estimativa de sistemas não lineares. O EKF ganhou destaque devido à relativa simplicidade de implementação, mostrando-se eficiente em lidar com alguns sistemas como destilação reativa (PUROHIT et al., 2013), reações de polimerização (PRASAD et al., 2002) e processos de fermentação (GUDI et al., 1994).

Para fornecer a estimativa, primeiramente é necessária a linearização do modelo matemático, por meio das matrizes Jacobianas A e G (Equação 2.4), e a definição das condições iniciais do estado do sistema e de sua covariância (Equação 2.3). Em seguida, as equações do filtro de Kalman tradicional (Equações 2.1 e 2.2) são aplicadas ao sistema linearizado (ALEXANDER, 2020; CAMPANI et al., 2019; RAWLINGS, et al., 2017).

A implementação do EKF consiste em duas etapas: predição (Equação 2.1) e atualização das medidas (Equação 2.2). Na etapa de predição o estado anterior ($\hat{x}_{k-1|k-1}$) é propagado para um intervalo de tempo adiante (t_k) com base no modelo do processo e nas suas entradas u_{k-1} , obtendo-se a estimativa *a priori* ($\hat{x}_{k|k-1}$). A partir dessa estimativa, a informação da medida atual (y_k) contendo ruído (v) é utilizada para atualizar a informação *a priori*, fornecendo então a estimativa *a*

posteriori ($\hat{x}_{k|k}$), que é mais precisa e, portanto, utilizada pelo sistema de monitoramento (CAMPANI et al., 2019). A Figura 2.2 a seguir ilustra a dinâmica de implementação supracitada.

Figura 2.2 – Fluxograma da implementação do EKF



Fonte: Do autor (2021).

$$\text{Predição pelo modelo} \begin{cases} \hat{x}_{k|k-1} = f(\hat{x}_{k-1|k-1}, u_{k-1}) \\ P_{k|k-1} = A_k P_{k-1|k-1} A_k^T + G_k Q_{k-1} G_k^T \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\text{Atualização baseada na medida} \begin{cases} \hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + L_k (y_k - C \hat{x}_{k|k-1}) \\ P_{k|k} = P_{k|k-1} - L_k C P_{k|k-1} \end{cases} \quad (2.2)$$

$$\hat{x}_{0|0} = x_0, P_{0|0} = P_0 \quad (2.3)$$

$$L_k = P_{k|k-1} C^T (C P_{k|k-1} C^T + R)^{-1} \quad (2.4)$$

$$A_k = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\hat{x}_{k|k}}, G_k = \left. \frac{\partial f}{\partial w} \right|_{\hat{x}_{k|k}} \quad (2.5)$$

onde P, Q e R são as matrizes de covariância associada aos estados, perturbações do processo e ruídos das medidas, respectivamente; x_0 e P_0 são chutes iniciais para os estados e para sua a covariância; L_k é o ganho de Kalman. Definimos $\hat{x}_{k|k-1}$ como sendo a estimativa de estado no passo k dada a informação do processo antes de k , e $\hat{x}_{k|k}$ como sendo a estimativa em k dada a medida y_k ; C é a matriz de observação.

Mesmo sendo amplamente utilizado e apresentando bom desempenho em alguns casos, a necessidade da linearização do modelo matemático faz com que haja uma queda de desempenho do estimador, diminuindo a acurácia da estimativa. (JULIER; UHLMANN, 2004; MOHD ALI et al., 2015). De acordo com RAWLINGS et al. (2017), em alguns casos o erro resultante gerado pela linearização pode ser suficiente para descartar a estimativa à *posteriori*, fazendo o EKF divergir mesmo com o modelo bem definido.

2.1.2 – Filtro de Kalman Unscented (UKF)

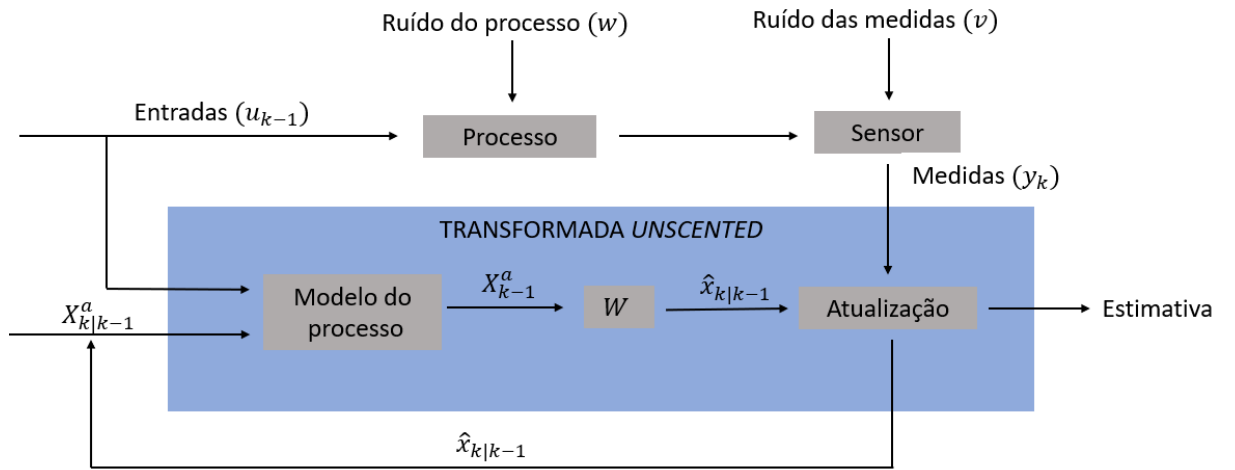
Para superar os impasses gerados pelo EKF, Julier et al. (2000) propuseram o UKF. Esse estimador utiliza a Transformada *Unscented* (UT, *Unscented Transformation*) para fornecer a estimativa, sem a necessidade de linearização do modelo. Essa técnica utiliza um conjunto mínimo de pontos, denominados de pontos sigma, que aproximam a distribuição de probabilidade sem a necessidade de linearizar os modelos matemáticos do sistema. A média e a covariância dessa amostra de pontos sigma são então propagadas através do modelo não linearizado (WAN; VAN DER MERWE, 2000).

A aplicação da UT é vantajosa uma vez que as estimativas fornecidas pelo UKF se mostraram mais precisas em relação ao EKF, demandando o custo computacional semelhante (JULIER; UHLMANN, 2004; RAWLINGS et al., 2017; WAN; VAN DER MERWE, 2000). Alguns trabalhos que comparam o desempenho desses estimadores em processos químicos corroboram as vantagens com o emprego do UKF (ROMANENKO; CASTRO, 2004, ROMANENKO et al., 2004).

Os pontos sigma são calculados através da Equação 2.8, com base no vetor de estados aumentado (\hat{x}^a) e na matriz de covariância aumentada (P_{k-1}^a). O vetor aumentado \hat{x}^a é composto pelos estados do sistema (\hat{x}), perturbações no processo (w) e ruídos nas medidas (v) (Equação 2.6). Já a matriz aumentada P_{k-1}^a é formada pela concatenação das matrizes de covariância do sistema ($P_{k-1|k-1}$), da perturbações do processo (Q_{k-1}) e dos ruídos das medidas (R_{k-1}) (Equação 2.7) (WAN; VAN DER MERWE, 2000).

De modo análogo ao EKF, a construção do UKF também consiste nas etapas de predição (Equação 2.8) e atualização das medidas (Equação 2.9) (ZHU et al., 2018). Na etapa de predição os pontos sigma (X_{k-1}^a) são propagados para um intervalo de tempo adiante (t_k) com base no modelo do processo e na matriz de pesos (W), obtendo-se a estimativa *a priori* ($\hat{x}_{k|k-1}$). A partir dessa estimativa, a informação da medida atual (y_k) contendo ruído (v) é utilizada para atualizar a informação *a priori*, fornecendo então a estimativa *a posteriori* ($\hat{x}_{k|k}$). A Figura 2.3 a seguir ilustra a dinâmica de estimação supracitada.

Figura 2.3 – Fluxograma da implementação do UKF



Fonte: Do autor (2021).

$$\hat{x}^a = \begin{bmatrix} \hat{x} \\ w \\ v \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

$$P_{k-1}^a = \begin{bmatrix} P_{k-1|k-1} & 0 & 0 \\ 0 & Q_{k-1} & 0 \\ 0 & 0 & R_{k-1} \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

$$X_{k-1}^a = \begin{bmatrix} X_{k-1,0}^a \\ X_{k-1,i}^a \\ \dots \\ X_{k-1,2n_\sigma}^a \end{bmatrix}_{2n_\sigma+1} \begin{cases} X_{k-1,i}^a = \hat{x}^a + \left(\sqrt{(n_\sigma + \kappa) P_{k-1}^a} \right)_i & i = 1, \dots, n_\sigma \\ X_{k-1,i}^a = \hat{x}^a - \left(\sqrt{(n_\sigma + \kappa) P_{k-1}^a} \right)_i & i = n_\sigma + 1, \dots, 2n_\sigma \end{cases} \quad (2.8)$$

$$W = \begin{bmatrix} W_0 \\ W_1 \\ \dots \\ W_{2n_\sigma} \end{bmatrix}_{2n_\sigma+1} \begin{cases} W_0 = \frac{\kappa}{n_\sigma + \kappa} \\ W_i = \frac{1}{2(n_\sigma + \kappa)} \quad i = 1, \dots, 2n_\sigma \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\text{Predição pelo modelo} \begin{cases} X_{k|k-1}^a = f(X_{k-1}^a, u_{k-1}) \\ \hat{x}_{k|k-1} = W^T X_{k|k-1}^x \\ P_{k|k-1} = W^T [X_{k|k-1}^x - \hat{x}_{k|k-1}] [X_{k|k-1}^x - \hat{x}_{k|k-1}]^T \\ Y_{k|k-1} = C X_{k|k-1}^x \end{cases} \quad (2.10)$$

$$\text{Atualização baseada na medida} \begin{cases} \hat{x}_{k|k} = \hat{x}_{k|k-1} + L_k (y_k - C \hat{x}_{k|k-1}) \\ P_{k|k} = P_{k|k-1} - L_k P_{yy} L_k^T \end{cases} \quad (2.11)$$

$$L_k = P_{xy} P_{yy}^{-1} \quad (2.12)$$

$$P_{yy} = W [Y_{k|k-1} - W Y_{k|k-1}] [Y_{k|k-1} - W Y_{k|k-1}]^T \quad (2.13)$$

$$P_{xy} = W [X_{k|k-1}^x - \hat{x}_{k|k-1}] [Y_{k|k-1} - W Y_{k|k-1}]^T \quad (2.14)$$

onde $X^a = [X^x \ X^Q \ X^R]$; n_σ é o tamanho do vetor aumentado \hat{x}^a ; κ é um parâmetro de escala que indica a dispersão da distribuição de probabilidade; C é a matriz de observação; $Y_{k|k-1}$ é a matriz de pontos sigma relativos às medidas; P_{yy} e P_{xy} são matrizes de covariância; L_k é ganho de Kalman.

Através da Equação 2.9 é possível observar que κ tem influência direta na matriz de pesos (W), que por sua vez tem ação na etapa de predição e atualização. Conseqüentemente, κ é um parâmetro de sintonia do UKF, uma vez que ele influencia diretamente na precisão da estimativa. Posto isso diversas heurísticas foram propostas para otimizar o seu valor (JULIER; UHLMANN 2004; KANDEPU et. al., 2008; VACHHANI et. al., 2006).

2.1.3 – Estimador de horizonte móvel (MHE)

Enquanto as estimativas geradas pelo EKF e UKF são baseadas na informação do estado no tempo presente e passado imediato (veja Equações 2.1 e 2.9), o MHE fornece estimativas baseadas nos estados do sistema em $N +$

1 instantes de tempos passados e presente, onde N é um parâmetro de sintonia do estimador chamado de tamanho do horizonte (CAMPANI et al., 2019).

O MHE é um método baseado em otimização, por isso ele é capaz de lidar explicitamente com restrições. Devido a essa característica, o MHE tem sido amplamente utilizado em diversos processos químicos e bioquímicos, se mostrando bastante robusto e eficiente, fornecendo estimativas com bastante acurácia (ALEXANDER et al., 2020; CAMPANI et al., 2019; FURLONG et al., 2020; LOPÉZ-NEGRETE; BIEGLER, 2012; MESBAH et al., 2011; MOHD ALI et al., 2015; RINCÓN et al., 2014).

Mesmo com os inúmeros trabalhos apresentados acerca da reprodutibilidade e eficiência do MHE, o seu uso pode ser inadequado para processos com dinâmica rápida e tempo curto de amostragem, uma vez que a cada iteração é solucionado um problema de otimização, demandando um grande esforço computacional. Além disso, na maioria dos trabalhos supracitados não existe heurísticas de seleção consolidadas para o valor de N , o que pode ser crucial, uma vez que o tamanho do horizonte afeta diretamente o tempo computacional (ALEXANDER et al., 2020).

O MHE soluciona o problema de otimização minimizando a soma do quadrado dos erros entre as $N + 1$ informações de medida ($y_{k-m}, y_{k-m+1}, \dots, y_k$) e as N previsões pelo modelo ($\hat{x}_{k-m+1|k-m}, \hat{x}_{k-m+2|k-m+1}, \dots, \hat{x}_{k|k+1}$) (ALEXANDER et al., 2020; CAMPANI, 2019; RAWLINGS et al., 2017). A função objetivo a ser otimizada é caracterizada pela Equação 2.15. A primeira e a segunda parcela da função se referem ao erro para a estimativa *a priori* (Equação 2.16) e para a informação de medida (Equação 2.17), respectivamente. A última parcela da Equação 2.15 é chamada custo de chegada, e a sua finalidade é ponderar, de forma aproximada, a informação do sistema desde o tempo inicial (t_0) até o tempo t_{k-N} , transformando o problema de dimensão crescente (*full information estimation*) em um equivalente de dimensão constante e com menor esforço computacional (ALEXANDER et al., 2020; CAMPANI et al., 2019; RAO; RAWLINGS, 2002; RAWLINGS et al., 2017).

$$\min_{x_{k-N}, \dots, x_k} \left(\sum_{i=k-N}^{k-1} \|w_i\|_{Q^{-1}}^2 + \sum_{i=k-N}^k \|v_i\|_{R^{-1}}^2 + \alpha \|x_{k-N} - \hat{x}_{k-m}\|_{P_{k-N}^{-1}} \right) \quad (2.15)$$

$$w_i = \hat{x}_{k|k-1} - f(\hat{x}_{k-1|k-1}, u_{k-1}) \quad (2.16)$$

$$v_i = y_i - Cx_i \quad (2.17)$$

onde $\|x\|_{A^{-1}}^2$ denota o produto interno ponderado $x^T A^{-1} x$; \hat{x} é a estimativa do estado e x é a variável a ser otimizada; α é o fator de esquecimento; Q e R são as matrizes de covariância associadas às perturbações no processo e ruídos nas medidas, respectivamente; P_{k-N} é a matriz de covariância associada aos estados que é obtida através das equações de atualização do EKF (Equação 2.2).

2.2 – Produção de etanol: características gerais do processo

Devido à crescente demanda energética global e à necessidade de reduzir a emissão de gases do efeito estufa, existe uma grande preocupação acerca da produção e uso de combustíveis oriundos de fontes renováveis. Nesse cenário, o etanol, que exibe menor emissão líquida de gases do efeito estufa devido à fixação de carbono na etapa de cultivo da cana-de-açúcar (ou de outras matérias-primas), surge como uma alternativa para a substituição dos combustíveis fósseis (BAEYENS et al., 2015; RODRIGUES, 2019; SONEGO et al., 2018).

Desde os anos 1970, inúmeros programas de incentivo à indústria sucroalcooleira brasileira têm sido criados, visando o aumento da produção e da participação do etanol na matriz energética brasileira (RODRIGUES, 2019). O grande estímulo proporcionado a esse setor é refletido na produção de etanol do Brasil, que no ano de 2020 representou 30% da produção mundial (cerca de 33,0 bilhões de litros), ficando atrás apenas dos Estados Unidos. (AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS - ANP, 2020; RENEWABLE FUELS ASSOCIATION, 2020).

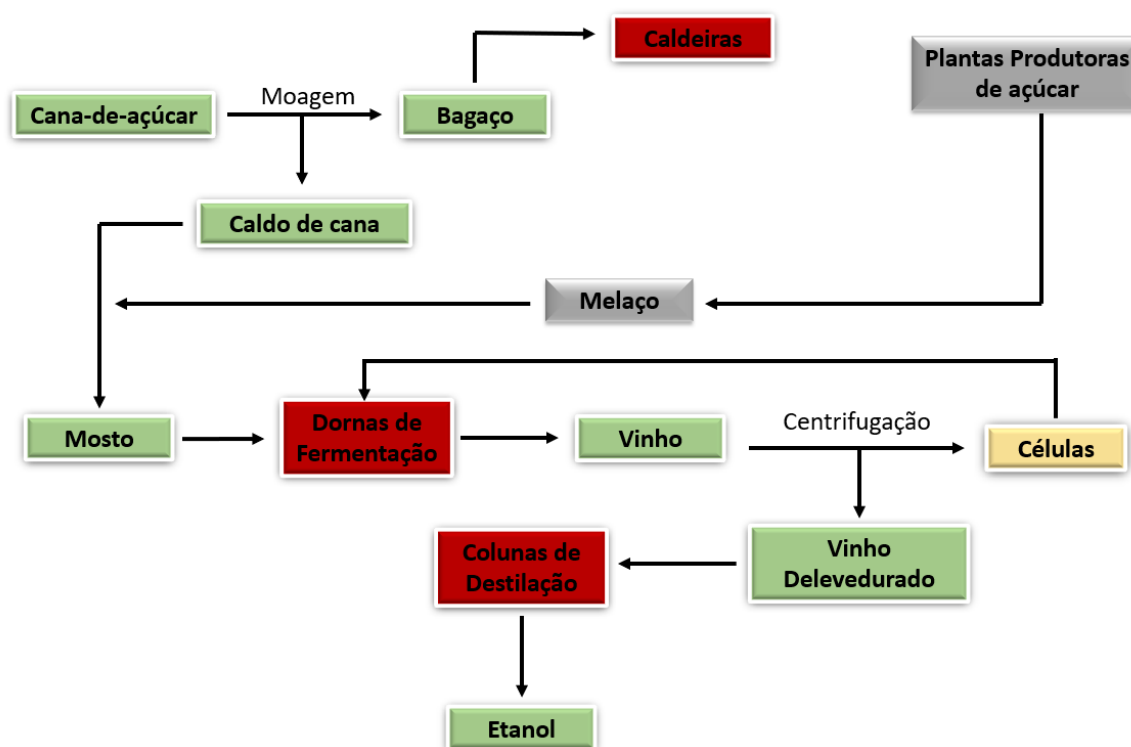
No Brasil, o etanol é produzido majoritariamente através da fermentação direta dos açúcares presentes na cana-de-açúcar (BASSO et al., 2011).

Primeiramente a cana-de-açúcar é submetida ao processo de moagem para extração do caldo, que é o componente principal do mosto, enquanto o bagaço remanescente é utilizado como combustível nas caldeiras, visando mitigar a queima de combustíveis fósseis (RODRIGUES, 2019). Na composição do mosto também pode estar presente o melaço oriundo das plantas produtoras de açúcar, que em sua grande parte são anexas às destilarias (RODRIGUES, 2019). O montante total de açúcares no mosto (sacarose, frutose, glicose) é denominado de açúcares totais redutores (ATR).

Em 75% das destilarias brasileiras o processo de fermentação acontece em batelada alimentada (BASSO et al., 2011; FONSECA, 2014). Nesse modo de operação, o mosto é alimentado à dorna de fermentação, onde inicialmente existe uma suspensão de células *Saccharomyces cerevisiae*, que representa de 10 a 30% do volume final da dorna. A etapa de alimentação acontece até o enchimento da dorna (4 a 6 horas). Em seguida, a etapa de batelada acontece até o consumo completo dos ATR (2 a 4 horas) (BASSO et al., 2011; PEREIRA et al., 2018; RODRIGUES, 2019). Durante todo o período de fermentação deve haver o controle da temperatura do caldo, que deve ser mantido entre 32 e 35°C (WHEALS et al., 1999; BASSO et al., 2011).

Ao final do processo, o caldo fermentado (vinho) composto por água (majoritariamente), etanol (8 a 12 °GL) e leveduras é centrifugado para separação de células que são recicladas e reutilizadas no processo (processo Melle-Boinot). O vinho de levedurado, efluente da centrifugação, é conduzido para as colunas de destilação, onde pode ser obtido o etanol hidratado (concentrado até 95° GL), ou o etanol anidro, caracterizado pela completa remoção de água. (BASSO et al., 2011; PEREIRA et al., 2018; RODRIGUES, 2019). O esquema a seguir ilustra de forma simplificada produção de etanol nas destilarias brasileiras.

Figura 2.4 – Fluxograma da produção de etanol em batelada alimentada



Fonte: do autor (2021).

2.2.1 – Efeito inibitório do etanol na fermentação alcoólica

Um dos principais fatores que explicam o baixo teor alcoólico (12 °GL) obtido no vinho é a inibição por etanol. A concentração do álcool no caldo aumenta gradativamente ao longo da fermentação, e isso interfere no metabolismo da levedura, causando a perda de atividade metabólica das células. (LY et al., 2002; MAIORELLA et al., 1983; RODRIGUES, 2019).

Para que o efeito inibitório seja atenuado, é necessário que a concentração de substrato (ATR) dentro da dorna de fermentação seja menor que 160 g L^{-1} (THATIPAMALA et al., 1992; ZHANG et al., 2015). Para se adequar a essa concentração é realizada a diluição do mosto, uma vez que dependendo do estágio da safra, a concentração de ART oriundo da cana-de-açúcar pode chegar até 250 g L^{-1} (BASSO et al., 2011; PEREIRA et al., 2018).

Em decorrência da diluição, existe uma grande quantidade de água presente no vinho após a fermentação, isso implica na necessidade de dornas com grandes

volumes, o que aumenta consideravelmente o custo com equipamentos (RODRIGUES, 2019; SONEGO et al., 2018). Além disso, existe elevada demanda energética associada à recuperação do etanol na etapa de destilação, no qual para cada litro produzido do biocombustível são gastos cerca de 2,6 Kg de vapor (MORANDIN et al., 2011).

Mesmo com todas as adversidades já apresentadas para a produção de etanol, o principal problema das destilarias brasileiras está associado ao custo de armazenamento, transporte e descarte da vinhaça, que pode chegar a R\$ 7,80 por m³ de vinhaça (RODRIGUES, 2019; RUIZ, 2015). De acordo com Mohana et al. (2009), para cada litro de etanol produzido são gerados de 10 a 15 L de vinhaça. Projetando esses dados para a produção brasileira de 2020, foram empregados somente com o descarte de vinhaça no mínimo R\$ 2,5 bilhões.

2.2.2 – Fermentação alcoólica extrativa

Uma maneira de superar os efeitos de inibição por etanol é o emprego da fermentação alcoólica extrativa, que consiste em remover o etanol presente no caldo durante o próprio processo (RODRIGUES, 2019). Dentre as inúmeras abordagens existentes para realizar a extração do biocombustível, o esgotamento (*stripping*) tem ganhando cada vez mais atenção, apresentando resultados promissores especialmente em escala industrial (RODRIGUES, 2019; TAYLOR et al., 1998, 2010).

O *stripping* é uma técnica de separação baseada no equilíbrio líquido-vapor, que consiste na aspensão de um gás de arraste através de uma solução líquida, de forma que ocorra a transferência seletiva de etanol do caldo para a fase gasosa, sem o arraste de nutrientes (HAMER, 1965; KUJAWSKA et al., 2015; RODRIGUES, 2019; SONEGO et al., 2014).

O emprego do *stripping* na fermentação extrativa, especialmente utilizando CO₂ como gás de arraste, apresenta grande potencial econômico, uma vez que é produzida uma grande quantidade de gás carbônico durante a fermentação, que por

sua vez pode ser reutilizado no processo como gás de arraste (LU et al., 2012; PARK; GENK 1992; RODRIGUES, 2019; SONEGO et al., 2016).

Diversos trabalhos mostram que a fermentação alcoólica extrativa com *stripping* por CO₂ reduz os efeitos inibitórios do etanol, aumentando a eficiência do processo mesmo com altas concentrações de ATR no caldo de fermentação. Essa característica impacta de forma direta no custo operacional da planta, uma vez que reduz o volume da dorna de fermentação e principalmente da vinhaça (DE VRIJE et al., 2013; EZEJI et al., 2003; PONCE et al., 2016; PHAM et al., 1989; RODRIGUES, 2019; SONEGO et al., 2014, 2016, 2018; TAYLOR et al., 1995, 1997, 1998, 2010).

Após a remoção do etanol da dorna de fermentação é necessário recuperar o biocombustível da mistura gasosa. Para isso são empregados diferentes métodos de separação, tais como adsorção por carvão ativado (HASHI et al., 2010), condensação (PONCE et al., 2016), membranas para permeação de vapor (GAYKAWAD et al., 2017) e absorção, que tem apresentado o desempenho mais promissor dentre os demais, com recuperação de etanol de até 98,3% (RODRIGUES, 2019).

3 – METODOLOGIA

3.1 – Processo de fermentação alcoólica extrativa: modelo matemático e condições operacionais

O processo de fermentação alcoólica extrativa a ser utilizado como estudo de caso neste trabalho é caracterizado pela remoção de etanol do meio reacional através de *stripping* com CO₂, onde a diminuição da concentração de etanol do caldo faz com que os efeitos de inibição por produto sejam minimizados, aumentando a produção de etanol em 65,4% em relação à fermentação convencional sem *stripping* (RODRIGUES, 2019; SONEGO et al., 2016, 2018). Essa técnica é atrativa devido à extração seletiva de etanol, preservando tanto a qualidade das células, quanto os nutrientes do caldo. Além disso, o emprego dessa operação unitária é de baixo custo, uma vez que para cada litro de etanol produzido, são gerados 425 L de CO₂, que é reutilizado no esgotamento (SONEGO et al., 2018).

O processo de fermentação empregado por Sonego et al. (2014, 2016, 2018) é realizado em dois estágios de operação em um biorreator de coluna de bolhas de 5 L com agitação mecânica. Primeiramente ocorre a alimentação da dorna de fermentação até 100% do seu volume (estágio de batelada alimentada). Após o seu preenchimento, ocorre a fermentação até que não haja substrato na dorna (estágio em batelada).

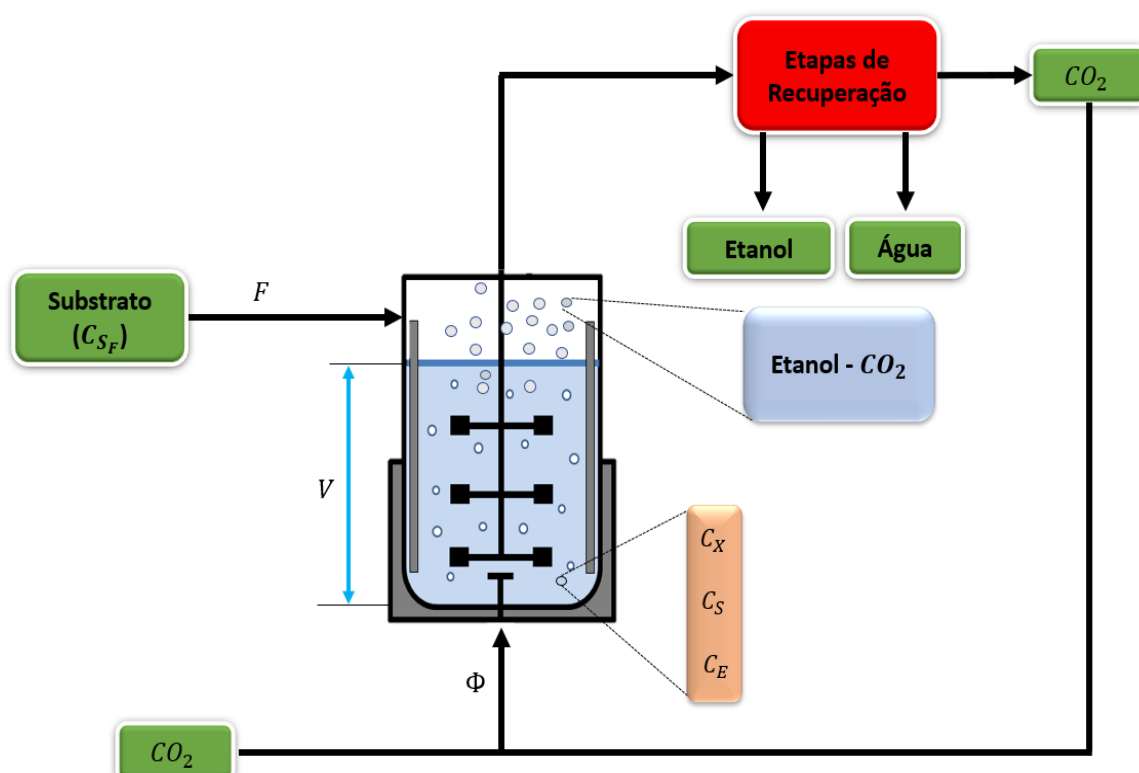
Antes da etapa de batelada alimentada o volume do caldo (inóculo) é igual a 1,5 L, no qual a concentração de células é de 50 gL⁻¹ e as concentrações de substrato e etanol são nulas. No início do processo, o substrato é introduzido no reator através da corrente de alimentação com concentração C_{SF} , e vazão volumétrica F . Para garantir homogeneidade e evitar “volume morto” dentro do biorreator, o meio de cultura é agitado a 250 rpm.

Após alguns minutos de operação, a concentração de etanol atinge o valor ótimo C_E^* e a agitação mecânica é desligada. A partir disso, o gás de arraste, CO₂, adentra ao biorreator com vazão (Φ) de 2,5 vvm ($L_{CO_2} L_{reator}^{-1} min^{-1}$) pela parte inferior, extraíndo parte do etanol produzido junto de uma pequena quantidade de

água. Essa solução hidroalcoólica é submetida a etapas de recuperação, onde o etanol e a água são separados, assim como o CO_2 , que pode ser reutilizado no processo.

Os valores ótimos da vazão de alimentação da dorna ($F = 0,56 \text{ Lh}^{-1}$) e da concentração de etanol para início do *stripping* ($C_E^* = 34,18 \text{ gL}^{-1}$) foram obtidos através de um algoritmo genético de otimização que teve como objetivo maximizar a produção volumétrica de etanol (SONEGO et al., 2018). A concentração de substrato na alimentação (C_{S_F}) foi de $371,4 \text{ gL}^{-1}$.

Figura 3.1– Fluxograma da fermentação alcoólica extrativa



Legenda: F representa a vazão volumétrica de alimentação, enquanto Φ indica a vazão específica (vvm) de CO_2 inserido no biorreator.

Fonte: Do autor (2021).

Sonego et al. (2018) propuseram a modelagem dessa fermentação através do emprego de balanços de massa para células (X), substrato (S) e etanol (E), considerando a remoção de etanol e água (W) por absorção gasosa, assim como variações no volume do caldo de fermentação (V).

O balanço de massa para as células contempla dois fatores: taxa de crescimento celular (primeiro termo) e a taxa de diluição (segundo termo). Para a concentração de substrato foram considerados a alimentação do biorreator (primeiro termo) e a taxa de diluição (terceiro termo), assim como a taxa de consumo de substrato para formação de células (segundo termo). No balanço de massa para o etanol foram consideradas a da taxa de produção de etanol (primeiro termo), assim como a sua remoção através do arraste gasoso (segundo termo), além da taxa de diluição (terceiro termo). A variação de volume no caldo foi modelada considerando a vazão de alimentação (primeiro termo) e a taxa de remoção de etanol (segundo termo).

A dinâmica das etapas de batelada e batelada-alimentada do processo é descrita pela Equação 3.1, e pode ser observada por meio da Figura 3.1.

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_X \\ C_S \\ C_E \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(\mu - \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} \right) C_X \\ C_{SF} \frac{F}{V} - \left(\frac{1}{Y_{X/S}} \mu C_X + \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} C_S \right) \\ \frac{Y_{E/S}}{Y_{X/S}} \mu C_X - \left(k_E + \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} \right) C_E \\ F - \left(\frac{(k_E C_E + k_W (\rho_w - C_E)) V}{\rho_w} \right) \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

onde C_X , C_S , C_{SF} e C_E são as concentrações de células, substrato, substrato no mosto de alimentação, e etanol (gL^{-1}); $Y_{X/S}$ e $Y_{E/S}$ são os coeficientes de conversão de substrato em célula ($g_X g_S^{-1}$) e etanol ($g_E g_S^{-1}$); k_E e k_W são as constantes de remoção de etanol e água (h^{-1}); ρ_w é a massa específica de água (gL^{-1}); F é a vazão volumétrica de mosto na alimentação da dorna, onde seu valor é nulo no estágio em batelada; μ é velocidade específica de crescimento celular (h^{-1}), descrito pelo modelo cinético híbrido de Andrews-Levenspiel a seguir (Equação 3.2).

$$\mu = \mu_{max} \frac{C_S}{\left(K_S + C_S + \frac{C_S^2}{K_{IS}} \right)} \left(1 - \frac{C_E}{C_{E_{max}}} \right)^n \quad (3.2)$$

onde μ_{max} é a velocidade específica máxima de crescimento (h^{-1}); K_S e K_{IS} são as constantes de saturação e a constante de inibição por substrato, respectivamente (gL^{-1}); $C_{E_{max}}$ é a concentração máxima de etanol após o fim do crescimento celular; n é uma constante adimensional.

Os valores de todos os parâmetros supracitados foram obtidos por Sonogo et al. (2018) e estão dispostos na Tabela 3.1 a seguir.

Tabela 3.1 – Valores dos coeficientes de conversão e dos parâmetros cinéticos e de *stripping*

COEFICIENTES DE CONVERSÃO	VALOR	ERRO PADRÃO
$Y_{X/S}$ ($g_X g_S^{-1}$)	0,0415	0,0022
$Y_{E/S}$ ($g_E g_S^{-1}$)	0,452	0,006
Parâmetros cinéticos	–	–
μ_{max} (h^{-1})	0,125	0,002
K_S (gL^{-1})	25,1	1,8
K_{IS} (gL^{-1})	131,8	9,3
$C_{E_{max}}$ (gL^{-1})	86,1	1,7
n (–)	0,22	0,03
Parâmetros do <i>stripping</i>	–	–
k_E (h^{-1})	0,0656	0,0016
k_w (h^{-1})	0,00443	0,00002

Fonte: Do autor (2021).

3.2 – Análise estatística do modelo matemático

Quando o sistema de Equações 3.1 é resolvido, a variância oriunda dos parâmetros (Tabela 3.1) é propagada, e cada um dos valores predito pelo modelo ($\hat{\chi}$) assume um intervalo de confiança ($\hat{\chi}_{i.c.}$). A determinação desse intervalo é de

suma importância na formulação dos estimadores de estado para saber qual das variáveis é mais susceptível a incertezas do modelo.

O intervalo de confiança do modelo foi calculado por meio da Equação 3.3, assumindo um nível de confiança de 95%. A matriz de regressão X (Equação 3.4) foi calculada através do método de diferenças finitas implementado em Matlab™ (R2018a). A simulação do modelo foi realizada com intervalo de amostragem de 1 hora.

A matriz de covariância Q (Equação 3.5) foi obtida através do erro padrão de cada parâmetro (δq_i) da Tabela 3.1, no qual cada elemento da diagonal principal da matriz corresponde à variância de um dos parâmetros. As demais entradas da matriz são zero, uma vez que a interdependência estatística (covariância) entre os parâmetros não fora relatada por Sonogo et al. (2018).

$$\hat{x}_{i,c} = \hat{\chi} \pm t_{95\%;(n_e-n_m)} \sqrt{\text{diag}(XQX^T)} \quad (3.3)$$

$$X = \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial Q} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\chi}_1}{\partial Q_1} & \dots & \frac{\partial \hat{\chi}_1}{\partial Q_{n_m}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \hat{\chi}_{n_e}}{\partial Q_1} & \dots & \frac{\partial \hat{\chi}_{n_e}}{\partial Q_{n_m}} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

$$Q = \begin{bmatrix} \delta q_1^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \delta q_{n_m}^2 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

onde Q_i são os parâmetros do modelo; n_e e n_m são respectivamente os números de pontos experimentais e de parâmetros do modelo; $t_{95\%;(n_e-n_m)}$ é a variável da distribuição de Student com $(n_e - n_m)$ graus de liberdade no nível de 95% de confiança.

3.3 - Teste de observabilidade

Antes de implementar os estimadores de estado, a observabilidade do sistema deve ser avaliada (CAMPANI et al., 2019). Um sistema é dito observável se for possível determinar o estado $x(t)$ com base em informações das entradas $u(t)$ e

das medidas $y(t)$ em um horizonte de tempo finito $[t_0, t]$ (ALEXANDER et al., 2020; HENSON; SEBORG, 1997; OGATA, 2010; RAWLINGS et al., 2017).

Para aplicações práticas, como o sistema descrito na seção 3.1, a observabilidade local pode ser adotada. Posto isso, a condição necessária para que esse sistema seja considerado observável, em um tempo discreto t_k , é que a matriz de observabilidade O com dimensão $nq \times n$ (Equação 3.8) apresente posto n , onde n e q são as dimensões do vetor de estados e de medidas do sistema, respectivamente (ALEXANDER et al., 2020; CAMPANI et al., 2019). A matriz de sensibilidade A é dada pela Equação 2.1.

$$f(x, u) = Ax + Bu \quad (3.6)$$

$$y = Cx \quad (3.7)$$

$$O = \begin{bmatrix} C \\ CA \\ \vdots \\ CA^{n-1} \end{bmatrix}_{nq \times n} \quad (3.8)$$

$$\text{posto}(O) = n \quad (3.9)$$

O teste foi realizado assumindo quinze diferentes configurações de medidas, ou seja, considerando quais variáveis serão medidas para estimação dos quatro estados do sistema (C_X , C_S , C_E e V), conforme mostrado na Tabela 3.2. Os parâmetros que atenderam a Equação 3.9 se tornaram elegíveis a serem o vetor de estados medidos (y_k).

Tabela 3.2 – Configurações de medida

MEDIDAS		
C_X, C_S, C_E, V	C_X, C_S	C_E, V
C_X, C_S, C_E	C_X, C_E	C_X
C_X, C_S, V	C_X, V	C_S
C_X, C_E, V	C_S, C_E	C_E
C_S, C_E, V	C_S, V	V

Fonte: Do autor (2021).

3.4 - Formulação dos estimadores de estado

Para a implementação *in silico* dos estimadores foi realizada a simulação do processo ($\hat{x}_{k|k-1}$) e das medidas (y_k) com base no estado do sistema no tempo t_{k-1} (\hat{x}_{k-1}). O computador empregado nas simulações possui processador quad-core i5-8250U com velocidade do *clock* de 1,6 GHz, executando o *software* Matlab™ (R2018a). Primeiramente, o sistema de equações (Equações 3.1) foram resolvidos, no qual foi adicionado ruído (w) ao valor de $\hat{x}_{k|k-1}$, com média zero e covariância Q , decorrente da incerteza dos parâmetros (Tabela 3.1), desafio conhecido como *plant-model mismatch*. Em seguida, o valor de $\hat{x}_{k|k-1}$ foi utilizado para simular o valor y_k com adição de ruído (v) também com média zero e covariância R .

A matriz de observação C foi definida a partir do pareamento selecionado pelo teste de observabilidade, e a matriz de covariância R foi estabelecida adotando um desvio padrão relativo de 20% para C_X e V , enquanto para C_S o valor foi de 10%. Dessa forma, as estimativas para a concentração de células e para o volume do caldo foram mais influenciadas pelo modelo do que as estimativas da concentração de substrato. A matriz de covariância Q foi determinada com base no erro padrão da estimativa dos parâmetros apresentado na Tabela 3.1, conforme Equação 3.5.

O EKF foi implementado de acordo com as Equações 2.1-2.4. As matrizes Jacobianas A e G (Equação 2.5) foram calculadas a cada iteração pelo método de

diferenças finitas, e a matriz P foi definida inicialmente como identidade para que seus efeitos não fossem significativos (RHUDY et al., 2017). A estimativa *a posteriori* ($\hat{x}_{k|k}$) foi obtida a cada iteração baseada no estado simulado sem ruído (estimativa *a priori*, $\hat{x}_{k|k-1}$) e na medida (y_k).

A implementação do UKF foi realizada por meio das Equações 2.8-2.14. Assim como no EKF, a matriz P também foi iniciada como identidade, já a matriz de covariância aumentada P^a foi definida como uma matriz aumentada das covariâncias de P , Q e R , respectivamente, de acordo com o proposto por Wan e Van der Merwe (2000).

Assim como descrito na seção 2.1.2, o valor de κ é de suma importância na determinação da matriz de pesos para os pontos sigma (W). Dentre as inúmeras heurísticas de seleção para o seu valor, foi adotada a proposta por Vachhani et. al., (2006), que assume κ igual a um, e garante que a matriz P seja definida positiva. A estimativa *a posteriori* ($\hat{x}_{k|k}$) do UFK a cada iteração foi fornecida baseada na matriz W , e nas matrizes de pontos sigma.

O MHE foi implementado adotando a janela de horizonte (N) igual a um e desprezando o custo de chegada ($\alpha = 0$). Essa estratégia foi estabelecida com o intuito de diminuir a complexidade da função objetivo (Equação 2.15) e, conseqüentemente, o custo computacional. A estimativa $\hat{x}_{k|k}$ foi obtida fornecida através da função de otimização *fminuc* do Matlab™, que a cada iteração minimiza a função objetivo implementada.

A simulação foi implementada com intervalo de amostragem de 3,6 s (1×10^{-3} h) para um processo com duração de 13 h. A simulação foi dividida em dois intervalos: de 0 a 6,25 h (estágio batelada alimentada) e 6,26 a 13 h (estágio em batelada).

3.4.1 – Condição inicial desconhecida

Com intuito de avaliar o desempenho dos estimadores frente a desafios distintos, foi realizada a mesma simulação descrita anteriormente, porém assumindo

que as condições iniciais eram desconhecidas. Ao invés de adotar as mesmas condições iniciais propostas por Sonogo et al. (2018) ($C_X = 50 \text{ gL}^{-1}$, $C_S = C_E = 0$, $V = 1,5 \text{ L}$), foi empregada uma alteração de 20% nessas variáveis iniciais. Deste modo, a condição inicial assumida foi: volume do caldo de $1,80 \text{ L}$, concentração de células C_X de 40 gL^{-1} , e concentrações de substrato e etanol nulas.

3.5 – Critérios de desempenho dos estimadores

Para avaliar e comparar de maneira quantitativa o desempenho dos estimadores de estado para o monitoramento do processo, foram calculados o Tempo Médio por Iteração (TMI) (Equação 3.10) e o Erro Médio Quadrático (EMQ) (Equação 3.11).

$$TMI = \frac{t}{n_T} \quad (3.10)$$

$$EMQ = \sum \sqrt{\frac{(\hat{x} - x)^2}{x} \frac{1}{n_T}} \quad (3.11)$$

onde t é o tempo total de simulação, cronometrado pelo Matlab™, n_T é o número de iterações realizadas na simulação; \hat{x} e x são as estimativas dos estados e seus valores reais simulados, respectivamente.

4 – RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 – Teste de Observabilidade

Os pareamentos de medida apresentados na Tabela 3.2 foram submetidos ao teste de observabilidade, e os resultados são apresentados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Observabilidade dos parâmetros

i	PAREAMENTOS	OBSERVÁVEL
1	C_X, C_S, C_E, V	SIM
2	C_X, C_S, C_E	NÃO
3	C_X, C_S, V	SIM
4	C_X, C_E, V	SIM
5	C_S, C_E, V	SIM
6	C_X, C_S	NÃO
7	C_X, C_E	NÃO
8	C_X, V	NÃO
9	C_S, C_E	NÃO
10	C_S, V	SIM
11	C_E, V	SIM
12	C_X	NÃO
13	C_S	NÃO
14	C_E	NÃO
15	V	NÃO

Fonte: Do autor (2021)

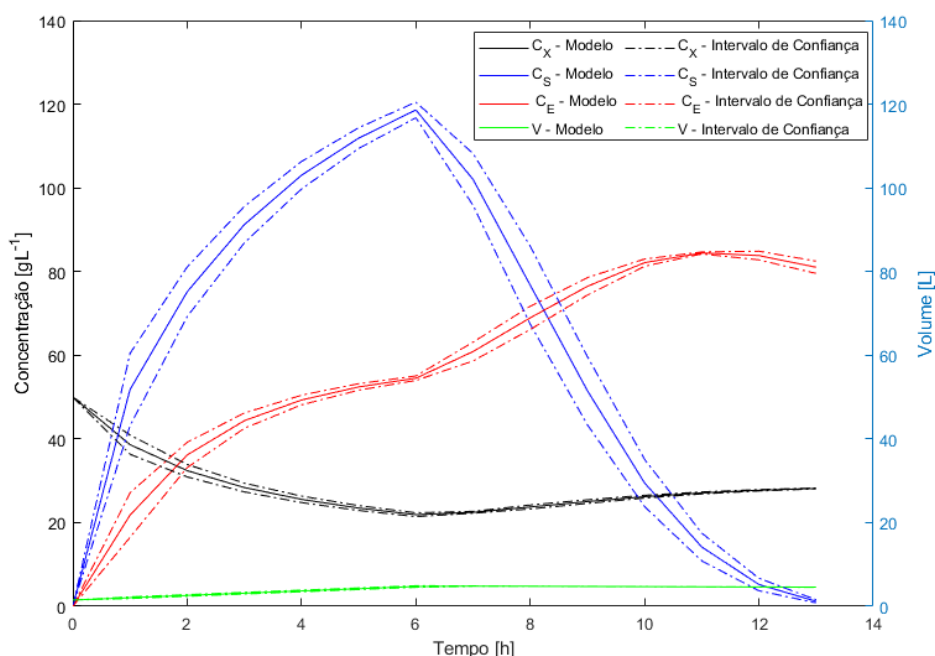
Dentre os sistemas observáveis, foi escolhida a combinação composta pela medição da concentração de células (C_X) substrato (C_S) e volume do caldo (V). Medidas da concentração de etanol (C_E) foram desconsideradas, uma vez que elas

são usualmente feitas em laboratório (*offline*), com o maior tempo de análise dentre as demais variáveis (ordem de minutos).

4.2 – Análise estatística do modelo matemático

A confiabilidade do modelo matemático do processo foi analisada conforme especificado na seção 3.2. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 4.1 a seguir, onde é possível observar de forma qualitativa o intervalo de confiança de cada uma das variáveis do modelo ao nível de 95% de confiança.

Figura 4.1– Intervalo de confiança do modelo com 95% de confiança



Legenda: A linha cheia indica a simulação as concentrações de células (C_X – preta), substrato (C_S – azul), etanol (C_E – vermelha), e volume do caldo (V). As linhas pontilhadas são os limites superior e inferior do intervalo de confiança.

Fonte: Do autor (2021).

Através da Figura 4.1 é possível observar que as variáveis exibiram comportamento estatístico distinto. As concentrações de substrato (C_S) e produto (C_E) apresentaram intervalos de confiança maiores durante praticamente todo o tempo de simulação. De modo contrário, a concentração de células (C_X) e o volume do caldo (V) apresentaram intervalos de confiança relativamente mais estreitos.

Logo as previsões de C_S e C_E pelo modelo são mais imprecisas, ou seja, elas são mais impactadas pela imprecisão dos parâmetros do modelo, de acordo com a matriz de covariância Q . Esse fato ressalta a importância do uso de estimadores de estado para prever o valor dessas variáveis com maior precisão, levando em consideração informação das medidas além das previsões do modelo. Ademais, como C_E não é medido, espera-se também que a sua estimativa apresente maior imprecisão, pois ela dependerá exclusivamente do modelo.

4.3 – Comparação entre os estimadores

O procedimento descrito na seção 3.4 foi aplicado, e na Figura 4.2 são apresentados os resultados da simulação do modelo, da estimativa e do erro de cada uma das variáveis de estado para os três estimadores. A Tabela 4.2 apresenta os dados quantitativos de desempenho dos estimadores através dos critérios TMI e EMQ, no qual o desvio padrão refere-se a análises em triplicata.

Tabela 4.2 – TMI e EMQ para EKF, UKF e MHE

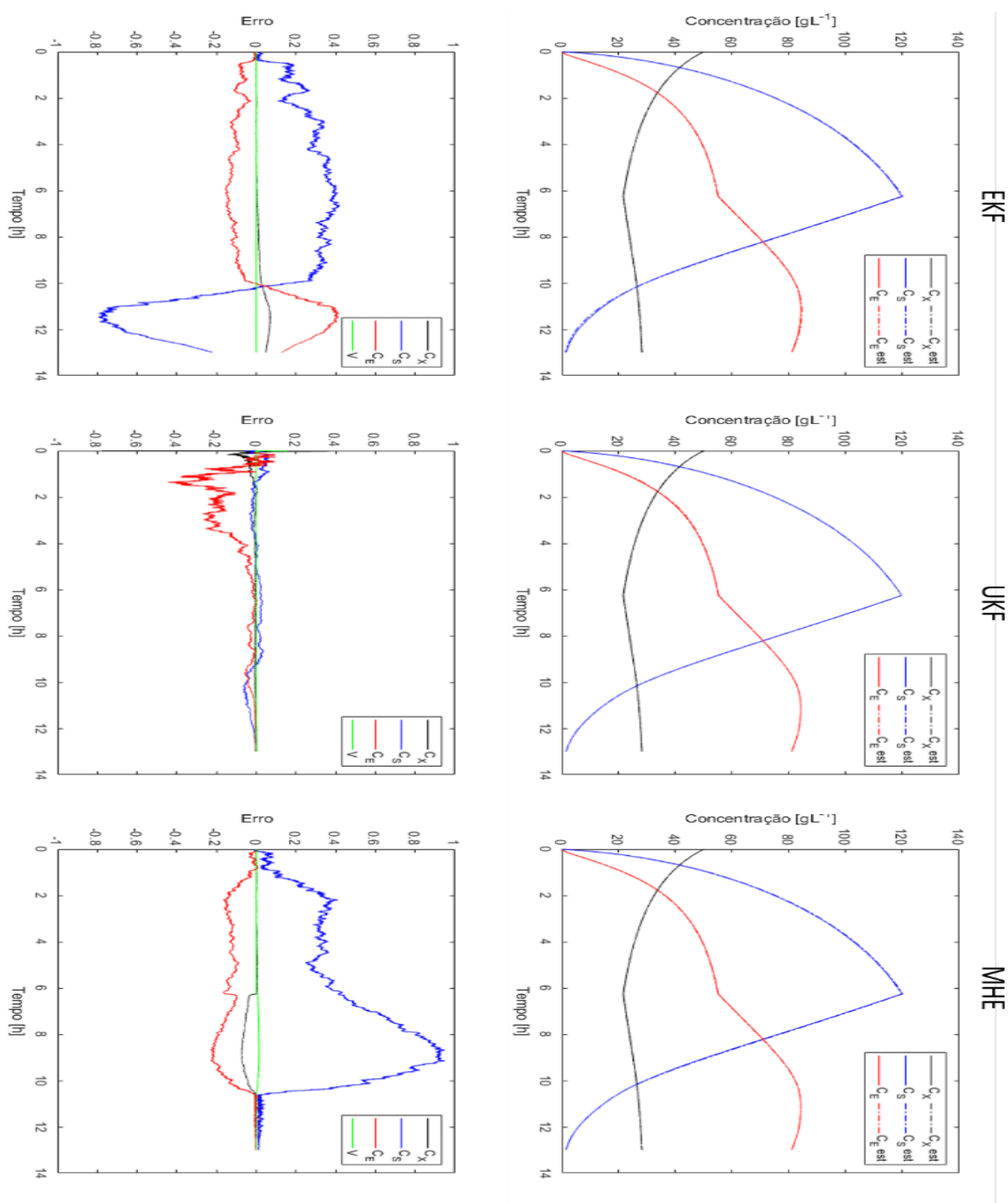
	TMI (s)	EMQ
EKF	0,009	0,030 ± 0,001
UKF	0,019	0,009 ± 0,003
MHE	0,120	0,024 ± 0,008

Legenda: O desvio padrão do critério EMQ refere-se a análises em triplicata.

Fonte: Do autor (2021).

Através da Tabela 4.2 é possível observar que os estimadores apresentaram TMI bastante distintos, porém coerentes com o comportamento esperado para cada estimador. O EKF, que apresenta menor complexidade no algoritmo de resolução, foi o mais rápido entre os demais. De modo contrário o MHE, que resolve um problema de otimização em cada iteração, apresentou TMI cerca de treze vezes maior que o EKF, e seis vezes maior que o UKF. Considerando que o tempo de amostragem do processo é de 3,6 s, os três estimadores poderiam ser empregados, já que o maior TMI foi de 0,120 s para o MHE.

Figura 4.2– Estimativas oriundas do EKF, UKF e MHE aplicados à fermentação alcoólica extrativa e erro ao longo do processo.



Legenda: Em cada coluna é apresentado um estimador: na parte superior é exibida a simulação do modelo (linhas cheias) e das estimativas (linhas pontilhadas), no qual são apresentadas as concentrações de células (C_X – preta), substrato (C_S – azul) e etanol (C_E – vermelha). Na parte inferior é mostrado o comportamento do erro relativo ao longo da simulação tanto para as concentrações supracitadas quanto para o volume do caldo (V – verde).

Fonte: do autor (2021).

Se por um lado os resultados obtidos para o TMI foram coerentes com o proposto pela literatura, por outro, essa coesão não foi observada na acurácia das estimativas. O EMQ apresentado pelo MHE foi cerca de três vezes maior que o UKF, e estatisticamente igual ao EKF. Esse comportamento foi inesperado, uma vez que o MHE é mais robusto, e teoricamente sua estimativa deveria ser a mais precisa entre os demais.

Para aumentar a acurácia da estimativa do MHE, foram empregados alguns ajustes na configuração do estimador. Foi alterado o tamanho da janela de horizonte (N), o fator de esquecimento (α), a função de otimização do MATLAB™, e até mesmo os valores estabelecidos na matriz de covariância das medidas (R). Porém nenhum desses ajustes apresentou resultados satisfatórios. Mesmo com todo o esforço empreendido em sintonizar o MHE, uma explicação para o pior desempenho desse estimador pode ser justamente a dificuldade em sintonizá-lo adequadamente, uma vez que faltam heurísticas consolidadas para esse método (ALEXANDER et al., 2020).

De modo distinto ao MHE, o grande valor do EMQ apresentado pelo EKF se deve principalmente à linearização do modelo, que aproxima a dinâmica não linear do processo. Por sua vez, o UKF que não utiliza essa técnica, apresenta um erro 70% menor que o do EKF. Isso pode ser observado através da Figura 4.2, onde o erro ao longo da simulação para a estimativa do UKF é bem menor quando comparado com os demais.

Por meio da Figura 4.2 é possível ainda avaliar o comportamento de cada uma das variáveis de estado ao longo da simulação. De modo geral, as estimativas que apresentaram maior erro foram as concentrações de substrato (C_S), que apontou maior intervalo de confiança do modelo (veja seção 4.2), e a concentração de etanol (C_E), que além de um intervalo de confiança elevado, é a única variável não medida. A concentração de células (C_X) e o volume do caldo (V) não apresentaram desvios significativos, e isso está atribuído à maior precisão do modelo para essas variáveis, além de ambas serem medidas de forma *online*.

O efeito oriundo da variância do modelo (Q) foi sentido de forma diferente por cada estimador. O EKF e o MHE se mostraram sensíveis às imprecisões do modelo,

apresentando desvio em C_S e C_E praticamente durante todo tempo de simulação. Já o UKF se mostrou mais sensível para a variável não medida, onde a maior incidência de erro aconteceu para C_E durante a etapa de batelada alimentada.

4.3.1 – Condição inicial desconhecida (CID)

Novas simulações foram realizadas impondo imprecisão nas condições iniciais do processo, conforme descrito na seção 3.4.1. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 4.3 e na Tabela 4.3 a seguir.

Tabela 4.3 – TMI e EMQ para EKF, UKF e MHE com CID

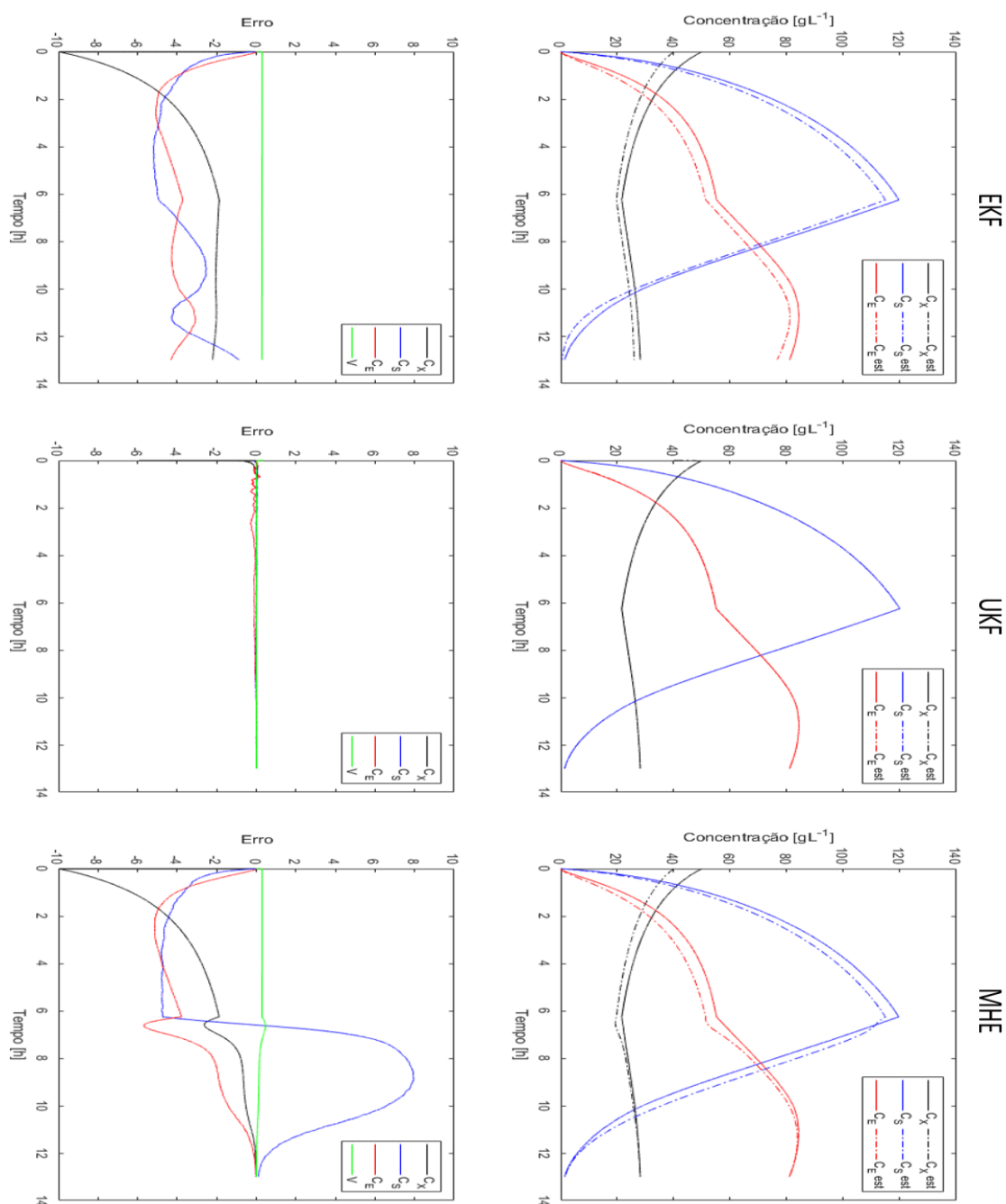
	TMI (s)	EMQ
EKF	0,009	0,549 ± 0,002
UKF	0,019	0,018 ± 0,002
MHE	0,131	0,556 ± 0,005

Legenda: O desvio padrão do critério EMQ refere-se a análises em triplicata.

Fonte: do autor (2021).

Através da Tabela 4.3 pode-se observar que o comportamento para o TMI dos estimadores foi análogo ao visto na Tabela 4.2. A adoção de uma condição inicial desconhecida não aumentou de forma significativa a complexidade de resolução dos algoritmos, com isso a proporcionalidade discutida previamente entre a carga computacional e o tempo por iteração foi conservada: o MHE apresentou maior TMI, seguido do UKF e EKF. Além disso, novamente os valores de TMI obtidos viabilizam a implementação dos estimadores no processo de fermentação alcoólica.

Figura 4.3 – Estimativas oriundas do EKF, UKF e MHE aplicados à fermentação alcoólica extrativa e erro ao longo do processo com condição inicial desconhecida



Legenda: Em cada coluna é apresentado um estimador: na parte superior é exibida a simulação do modelo (linhas cheias) e das estimativas (linhas pontilhadas), no qual são apresentadas as concentrações de células (C_X – preta), substrato (C_S – azul) e etanol (C_E – vermelha). Na parte inferior é mostrado o comportamento do erro relativo ao longo da simulação tanto para as concentrações supracitadas quanto para o volume do caldo (V – verde).

Fonte: do autor (2021).

A partir da implementação da CID era esperado que o EMQ fosse aumentado proporcionalmente em relação aos valores dispostos na Tabela 4.2, todavia essa tendência não foi observada. Para o EKF, os limites impostos pela linearização foram acentuados, aumentando demasiadamente o valor do erro da estimativa. A diferença mais relevante se deu em relação ao MHE, no qual o valor do EMQ foi cerca vinte vezes maior que o valor sem a condição inicial desconhecida, disposto na Tabela 4.2.

Era esperado que o MHE apresentasse um melhor desempenho por conseguir lidar melhor com perturbações. Por isso foram realizadas as mesmas estratégias de sintonia do estimador apresentadas anteriormente, entretanto os resultados novamente não foram satisfatórios.

Se por um lado o MHE se mostrou aquém da sua expectativa, por outro, o UKF apresentou resultados bastante positivos, no qual o valor do EMQ com a condição inicial desconhecida foi somente duas vezes maior do que o valor apresentado na Tabela 4.2, sem CID. Por meio da Tabela 4.3 pode-se observar que o erro para o UKF é em torno de trinta vezes menor em comparação com os demais estimadores. Através da Figura 4.3 é possível visualizar esses resultados, onde o erro ao longo da simulação para a estimativa do UKF é praticamente nulo quando comparado com os demais.

A partir da Figura 4.3 também é possível avaliar o comportamento de cada uma das variáveis de estado ao longo da simulação. Para o EKF as concentrações de substrato (C_S) e etanol (C_E) foram subestimadas durante toda a simulação, apresentando oscilações, e sem convergência para o estado real. O erro da estimativa da concentração de células (C_X) praticamente estabilizou a partir de 6 h, apresentando, porém, um pequeno erro estacionário (*offset*) entre a estimativa e o valor do modelo. O MHE se mostrou eficiente na questão de convergência da estimativa, apresentando um erro muito pequeno ao final da simulação. Porém, na transição entre os modos de operação (batelada alimentada – batelada), o valor de C_S aumenta consideravelmente, sendo essa a principal causa para o seu pior desempenho. O UFK exibiu um ótimo desempenho, convergindo as estimativas rapidamente e com boa acurácia. O UKF levou somente a uma pequena oscilação

na variável não medida C_E durante as primeiras horas de simulação devido as imprecisões do modelo e ao fato da variável não ser medida. A estimativa do volume do caldo (V) apresentou desvio insignificante durante todo o tempo de simulação.

5 – CONSIDERAÇÕES FINAIS

A crescente necessidade de satisfazer requisitos técnicos, econômicos e ambientais tem trazido desafios quanto à construção de plantas industriais automatizadas com uma boa relação custo-benefício, uma vez que são necessários sensores de monitoramento cada vez mais sofisticados. Diante desse obstáculo, a aplicação de estimadores de estados a processos químicos e bioquímicos torna-se uma alternativa ao uso de sensores de alto custo, uma vez que os estimadores conseguem reconciliar dados ruidosos e estimar variáveis não medidas.

Posto isso, o presente trabalho teve como objetivo geral estudar e avaliar a aplicação de estimadores de estado Bayesianos frente ao processo de fermentação extrativa e a desafios como Condição Inicial Desconhecida (CID), imprecisões no modelo e ruídos nas medidas. Especificamente, o desempenho desses estimadores foi quantificado através dos critérios de Tempo Médio por Iteração (TMI) e Erro Médio Quadrático (EMQ).

Primeiramente, foi confirmada a viabilidade de aplicação dos estimadores de estado à fermentação extrativa, uma vez que os maiores valores de TMI apresentados foram de 0,131 e 0,120 s para o MHE com e sem CID, respectivamente, os quais são bem menores que o tempo de amostragem do processo (3,6 s).

Em relação ao desempenho dos estimadores, os resultados alcançados mostraram uma excelente eficiência do UKF, apresentando, sem CID, EMQ cerca de 70% menor que os demais estimadores. Mesmo quando aplicado o desafio da condição inicial desconhecida, o estimador UKF se mostrou bastante robusto, com EMQ em torno de trinta vezes menor do que para o EKF e MHE.

A grande eficácia do UKF também pode ser observada no comportamento do erro ao longo do tempo. De modo geral o UKF estimou com bastante acurácia a concentrações de células (C_X), de substrato (C_S) e volume do caldo (V) durante todo tempo do processo. Pequenas oscilações foram observadas somente na

concentração de etanol (C_E), oriundas da imprecisão do modelo e do fato de ser a única variável não medida.

Ao início do trabalho, não fora esperado que o UKF apresentasse o melhor desempenho entre os estimadores. Essa expectativa existia acerca do MHE, devido aos bons resultados apresentados na literatura, assim como todas as particularidades inerentes à sua implementação. Entretanto, essa eficácia não foi observada. O EMQ para o MHE, com e sem CID, foi estatisticamente igual ao EKF, que é conhecido por ser bem menos robusto e apresentar uma série de limitações em consequência da técnica de linearização do modelo.

Durante a pesquisa foi empregado um grande esforço na tentativa de melhorar o desempenho do MHE, modificando de forma arbitrária os principais parâmetros de sintonia do estimador (tamanho da janela de horizontes, função de otimização, custo de chegada etc.), entretanto, sem sucesso. Esse resultado evidencia a principal limitação não só desse trabalho, mas como da aplicação do MHE de uma forma geral. Atualmente na literatura acerca de controle e monitoramento de processos químicos, não existem heurísticas consolidadas para o MHE, o que dificulta a sua implementação e reprodutibilidade.

A falta de heurísticas para implementação é justamente um precedente para o desenvolvimento de novos trabalhos que possam consolidar não só o MHE, mas a tecnologia de monitoramento de processos químicos e bioquímicos que é bastante promissora.

6 – TRABALHOS FUTUROS

Como sugestão para trabalhos futuros, pode-se avaliar o desempenho dos estimadores integrados a sistemas de controle *feedback* como, por exemplo, da concentração de substrato. O controle dessa variável em um certo valor de referência pode beneficiar a dinâmica de crescimento celular e, conseqüentemente, a produção de etanol. A avaliação do sistema integrado controlador-estimador pode ser feita, em um primeiro momento, em simulações do processo frente a variações no *setpoint*, perturbações e ruídos nas medidas, onde se espera que o uso de técnicas avançadas de controle e monitoramento contribua para o melhor desempenho do bioprocessamento, aumentando a sua produtividade e reprodutibilidade. Posteriormente, esse estudo pode ser validado através da aplicação dessa estrutura em ensaios reais em laboratório.

7 - REFERÊNCIAS

- ALEXANDER, R. et al. Challenges and Opportunities on Nonlinear State Estimation of Chemical and Biochemical Processes. **Processes**, v. 8, n. 11, p. 1462, 2020.
- AFSHARI, H. H.; GADSDEN, S. A.; HABIBI, S. Gaussian filters for parameter and state estimation: A general review of theory and recent trends. **Signal Processing**, v. 135, p. 218-238, 2017.
- AGÊNCIA NACIONAL DE PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCMBUSTÍVEIS. **Dados estatísticos**. 2020. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/centrais-de-conteudo/dados-estatisticos>. Acesso em: 27 abril 2021.
- BAEYENS, J. et al. Challenges and opportunities in improving the production of bioethanol. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 47, p. 60-88, 2015
- BASSO, L.C. et al. Ethanol production in Brazil: the industrial process and its impact on yeast fermentation. **Biofuel production-recent developments and prospects**, v. 1530, p. 85-100, 2011.
- CAMPANI, G. **Otimização do controle do oxigênio dissolvido em biorreator airlift pressurizado**: aplicação em cultivos de *Escherichia coli* recombinante. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Centro de ciências exatas e de tecnologia, Universidade Federal de São Carlos. São Carlos, 2018.
- CAMPANI, G. et al. A hierarchical state estimation and control framework for monitoring and dissolved oxygen regulation in bioprocesses. **Bioprocess and biosystems engineering**, v. 42, n. 9, p. 1467-1481, 2019.
- DE VRIJE, T. et al. “In situ” removal of isopropanol, butanol and ethanol from fermentation broth by gas stripping. **Bioresource technology**, v. 137, p. 153-159, 2013.
- DOCHAIN, D.; COUENNE, F.; JALLUT, C. Enthalpy based modelling and design of asymptotic observers for chemical reactors. **International Journal of Control**, v. 82, n. 8, p. 1389-1403, 2009.
- EZEJI, T. C. et al. Improving performance of a gas stripping-based recovery system to remove butanol from *Clostridium beijerinckii* fermentation. **Bioprocess and biosystems engineering**, v. 27, n. 3, p. 207-214, 2005.
- FONSECA, G.C. **Modelagem e simulação de uma destilaria autônoma de produção de etanol de primeira geração (E1G)**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Centro de ciências exatas e de tecnologia, Universidade Federal de São Carlos. São Carlos, 2014.

- FURLONG, V. B. et al. Estimation of Biomass Enzymatic Hydrolysis State in Stirred Tank Reactor through Moving Horizon Algorithms with Fixed and Dynamic Fuzzy Weights. **Processes**, v. 8, n. 4, p. 407, 2020.
- GAYKAWAD, S. S. et al. Vapour permeation for ethanol recovery from fermentation off-gas. **Biochemical Engineering Journal**, v. 124, p. 54-63, 2017.
- GODOY, A. et al. Continuous and batch fermentation processes: advantages and disadvantages of these processes in the Brazilian ethanol production. **International sugar journal**, v. 110, n. 1311, 2008.
- GONZALEZ, J. et al. Sliding mode observer-based control for a class of bioreactors. **Chemical Engineering Journal**, v. 83, n. 1, p. 25-32, 2001.
- GUDI, R. D.; SHAH, S. L.; GRAY, M. R. Multirate state and parameter estimation in an antibiotic fermentation with delayed measurements. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 44, n. 11, p. 1271-1278, 1994.
- HAMER, G. Stripping in sparged fermentation systems. I. Two component model systems. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 7, n. 2, p. 199-214, 1965.
- HASELTINE, E. L.; RAWLINGS, J. B. Critical evaluation of extended Kalman filtering and moving-horizon estimation. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 44, n. 8, p. 2451-2460, 2005.
- HASHI, M.; TEZEL, F. H.; THIBAUT, J. Ethanol recovery from fermentation broth via carbon dioxide stripping and adsorption. **Energy & fuels**, v. 24, n. 9, p. 4628-4637, 2010.
- HENSON, M. A.; SEBORG, D. E. **Nonlinear process control**. Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall PTR, 1997.
- HULHOVEN, X.; WOUWER, A. V.; BOGAERTS, P. Hybrid extended Luenberger-asymptotic observer for bioprocess state estimation. **Chemical engineering science**, v. 61, n. 21, p. 7151-7160, 2006.
- JANA, A. K. A nonlinear exponential observer for a batch distillation. In: **2010 11th International Conference on Control Automation Robotics & Vision**. IEEE, 2010. p. 1393-1396.
- JULIER, S.; UHLMANN, J.; DURRANT-WHYTE, H. F. A new method for the nonlinear transformation of means and covariances in filters and estimators. **IEEE Transactions on automatic control**, v. 45, n. 3, p. 477-482, 2000.
- JULIER, S. J.; UHLMANN, J. K. Unscented filtering and nonlinear estimation. **Proceedings of the IEEE**, v. 92, n. 3, p. 401-422, 2004.
- KALMAN, R. E. A new approach to linear filtering and prediction problems. 1960.

- KANDEPU, R.; IMSLAND, L.; FOSS, B. A. Constrained state estimation using the unscented Kalman filter. In: **2008 16th Mediterranean Conference on Control and Automation**. IEEE, 2008. p. 1453-1458.
- KUJAWSKA, A. et al. ABE fermentation products recovery methods—a review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 48, p. 648-661, 2015.
- LIMA, F. V.; RAWLINGS, J. B. Nonlinear stochastic modeling to improve state estimation in process monitoring and control. **AIChE journal**, v. 57, n. 4, p. 996-1007, 2011.
- LIMA, F. V. et al. Covariance and state estimation of weakly observable systems: Application to polymerization processes. **IEEE Transactions on Control Systems Technology**, v. 21, n. 4, p. 1249-1257, 2012.
- LÓPEZ-NEGRETE, R.; BIEGLER, L. T. A moving horizon estimator for processes with multi-rate measurements: A nonlinear programming sensitivity approach. **Journal of Process Control**, v. 22, n. 4, p. 677-688, 2012.
- LU, C. et al. Fed-batch fermentation for n-butanol production from cassava bagasse hydrolysate in a fibrous bed bioreactor with continuous gas stripping. **Bioresource technology**, v. 104, p. 380-387, 2012.
- LY, H. V.; BLOCK, D. E.; LONGO, M. L. Interfacial tension effect of ethanol on lipid bilayer rigidity, stability, and area/molecule: a micropipet aspiration approach. **Langmuir**, v. 18, n. 23, p. 8988-8995, 2002.
- MARKANA, A.; PADHIYAR, N.; MOUDGALYA, K.. Multi-criterion control of a bioprocess in fed-batch reactor using EKF based economic model predictive control. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 136, p. 282-294, 2018.
- MAIORELLA, B.; BLANCH, H. W.; WILKE, C. R. By-product inhibition effects on ethanolic fermentation by *Saccharomyces cerevisiae*. **Biotechnology and bioengineering**, v. 25, n. 1, p. 103-121, 1983.
- MESBAH, A. et al. A comparison of nonlinear observers for output feedback model-based control of seeded batch crystallization processes. **Journal of Process Control**, v. 21, n. 4, p. 652-666, 2011.
- MOHANA, S.; ACHARYA, B. K.; MADAMWAR, D. Distillery spent wash: treatment technologies and potential applications. **Journal of Hazardous Materials**, v. 163, n. 1, p. 12-25, 2009.
- MOHD ALI, J. et al. Review and classification of recent observers applied in chemical process systems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 76, p. 27-41, 2015.
- MORANDIN, M. et al. Synthesis and parameter optimization of a combined sugar and ethanol production process integrated with a CHP system. **Energy**, v. 36, n. 6, p. 3675-3690, 2011.
- OGATA, K. **Modern control engineering**. Prentice hall, 2010.

- PARK, C. H.; GENG, Q. Separation Purif. **Methods**, v. 21, p. 127-174, 1992.
- PEREIRA, R. D. et al. A New Methodology to Calculate the Ethanol Fermentation Efficiency at Bench and Industrial Scales. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 57, n. 48, p. 16182-16191, 2018.
- PHAM, C. B. et al. Simultaneous ethanol fermentation and stripping process coupled with rectification. **Journal of fermentation and bioengineering**, v. 68, n. 1, p. 25-31, 1989.
- PONCE, G. H. S. F. et al. Sugarcane molasses fermentation with in situ gas stripping using low and moderate sugar concentrations for ethanol production: Experimental data and modeling. **Biochemical engineering journal**, v. 110, p. 152-161, 2016.
- PRASAD, V. et al. Product property and production rate control of styrene polymerization. **Journal of Process Control**, v. 12, n. 3, p. 353-372, 2002.
- PUROHIT, J. L.; PATWARDHAN, S. C.; MAHAJANI, S. M. DAE-EKF-based nonlinear predictive control of reactive distillation systems exhibiting input and output multiplicities. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 38, p. 13699-13716, 2013.
- RAÏSSI, T.; RAMDANI, N.; CANDAU, Y. Bounded error moving horizon state estimator for non-linear continuous-time systems: application to a bioprocess system. **Journal of Process control**, v. 15, n. 5, p. 537-545, 2005.
- RAJAMANI, M. R.; RAWLINGS, J. B. Improved state estimation using a combination of moving horizon estimator and particle filters. In: **2007 American Control Conference**. IEEE, 2007. p. 4443-4444.
- RAO, C. V.; RAWLINGS, J. B. Constrained process monitoring: Moving-horizon approach. **AIChE journal**, v. 48, n. 1, p. 97-109, 2002.
- RAWLINGS, J. B.; MAYNE, D. Q.; DIEHL, M. **Model predictive control: theory, computation, and design**. Madison, WI: Nob Hill Publishing, 2017.
- RENEWABLE FUELS ASSOCIATION. **Annual Fuel Ethanol Production**. 2020. Disponível em: <https://ethanolrfa.org/statistics/annual-ethanol-production/>. Acesso em: 27 abril 2021.
- RINCÓN, F. D. et al. Robust Calorimetric Estimation of Semi-Continuous and Batch Emulsion Polymerization Systems with Covariance Estimation. **Macromolecular Reaction Engineering**, v. 8, n. 6, p. 456-466, 2014.
- RHUDY, M. B.; SALGUERO, R. A.; HOLAPPA, K. A Kalman filtering tutorial for undergraduate students. **International Journal of Computer Science & Engineering Survey**, v. 8, n. 1, p. 1-18, 2017.
- RODRIGUES, K.C.S. **Fermentação alcoólica extrativa com remoção de etanol por arraste com CO₂ e recuperação por absorção**. Tese (Doutorado em

Engenharia Química) – Centro de ciências exatas e de tecnologia, Universidade Federal de São Carlos. São Carlos, 2019.

ROMANENKO, A.; CASTRO, J. A. A. M. The unscented filter as an alternative to the EKF for nonlinear state estimation: a simulation case study. **Computers & chemical engineering**, v. 28, n. 3, p. 347-355, 2004.

ROMANENKO, A.; SANTOS, L. O.; AFONSO, P. Unscented Kalman filtering of a simulated pH system. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 43, n. 23, p. 7531-7538, 2004.

RUIZ, L. **Economia de milhões de reais - Cana online: a vez da vinhaça**. São Paulo: Paiva e Baldin: n. 25, 71-77 p. 2015.

SONEGO, J. L. S. et al. Extractive batch fermentation with CO₂ stripping for ethanol production in a bubble column bioreactor: experimental and modeling. **Energy & fuels**, v. 28, n. 12, p. 7552-7559, 2014.

SONEGO, J. L. S. et al. Extractive fed-batch ethanol fermentation with CO₂ stripping in a bubble column bioreactor: experiment and modeling. **Energy & Fuels**, v. 30, n. 1, p. 748-757, 2016.

SONEGO, J. L. S. et al. Optimization of fed-batch fermentation with in situ ethanol removal by CO₂ stripping. **Energy & Fuels**, v. 32, n. 1, p. 954-960, 2018.

SUI, D.; FENG, L.; HOVD, M. Robust output feedback model predictive control for linear systems via moving horizon estimation. In: **2008 American Control Conference**. IEEE, 2008. p. 453-458.

TAYLOR, F. et al. Continuous fermentation and stripping of ethanol. **Biotechnology progress**, v. 11, n. 6, p. 693-698, 1995.

TAYLOR, F. et al. Effects of ethanol concentration and stripping temperature on continuous fermentation rate. **Applied microbiology and biotechnology**, v. 48, n. 3, p. 311-316, 1997.

TAYLOR, F. et al. Kinetics of continuous fermentation and stripping of ethanol. **Biotechnology letters**, v. 20, n. 1, p. 67-72, 1998.

TAYLOR, F. et al. Continuous high-solids corn liquefaction and fermentation with stripping of ethanol. **Bioresource technology**, v. 101, n. 12, p. 4403-4408, 2010.

THATIPAMALA, R.; ROHANI, S.; HILL, G. A. Effects of high product and substrate inhibitions on the kinetics and biomass and product yields during ethanol batch fermentation. **Biotechnology and bioengineering**, v. 40, n. 2, p. 289-297, 1992.

VACHHANI, P.; NARASIMHAN, S.; RENGASWAMY, R. Robust and reliable estimation via unscented recursive nonlinear dynamic data reconciliation. **Journal of process control**, v. 16, n. 10, p. 1075-1086, 2006.

VARSHNEY, D.; BHUSHAN, M.; PATWARDHAN, S. C. Robust State Estimation and Parameter Estimation for Linear and Nonlinear Direct Feed-through Systems with Correlated Disturbances. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 58, n. 26, p. 11532-11552, 2019.

WAN, E. A.; VAN DER MERWE, R. The unscented Kalman filter for nonlinear estimation. In: **Proceedings of the IEEE 2000 Adaptive Systems for Signal Processing, Communications, and Control Symposium (Cat. No. 00EX373)**. Ieee, 2000. p. 153-158.

WANG, J.; ZHAO, L.; YU, T. On-line estimation in fed-batch fermentation process using state space model and unscented Kalman filter. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, v. 18, n. 2, p. 258-264, 2010.

WHEALS, A. E. et al. Fuel ethanol after 25 years. **Trends in biotechnology**, v. 17, n. 12, p. 482-487, 1999.

YIN, X.; LIU, J. Distributed moving horizon state estimation of two-time-scale nonlinear systems. **Automatica**, v. 79, p. 152-161, 2017.

ZHU, B. et al. Robust adaptive unscented Kalman filter and its application in initial alignment for body frame velocity aided strapdown inertial navigation system. **Review of Scientific Instruments**, v. 89, n. 11, p. 115102, 2018.

ZHANG, Q. et al. Substrate and product inhibition on yeast performance in ethanol fermentation. **Energy & Fuels**, v. 29, n. 2, p. 1019-1027, 2015.