

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INOVAÇÕES TECNOLÓGICAS
MESTRADO EM INOVAÇÕES TECNOLÓGICAS

JAIZA OGLIARI DE SIQUEIRA BARROS

**ANÁLISE MULTIVARIADA APLICADA NAS INTERFERÊNCIAS DAS
SOBRAS DE AÇÚCARES REDUTORES RESIDUAIS TOTAIS NAS
DORNAS DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA**

CAMPO MOURÃO

2018

JAIZA OGLIARI DE SIQUEIRA BARROS

**ANÁLISE MULTIVARIADA APLICADA NAS INTERFERÊNCIAS DAS
SOBRAS DE AÇÚCARES REDUTORES RESIDUAIS TOTAIS NAS
DORNAS DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Inovações Tecnológicas, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, como parte das exigências para a obtenção do título de Mestre em Inovações Tecnológicas.

Orientador: Prof. Dr. Wyrllen Everson de Souza

CAMPO MOURÃO

2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

B277 Barros, Jaiza Ogliari de Siqueira

Análise multivariada aplicada nas interferências das sobras de açúcares redutores residuais totais nas dornas de fermentação alcoólica / Jaiza Ogliari de Siqueira Barros. – Campo Mourão, 2018.

75 f. : il. color. ; 30 cm.

Orientador: Wyrllen Everson de Souza

Dissertação (Mestrado) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Inovações Tecnológicas, Campo Mourão, 2018.

Inclui bibliografia.

1. Álcool. 2. Fermentação. 3. Inovações tecnológicas – Dissertações. I. Souza, Wyrllen Everson de, orient. II. Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Inovações Tecnológicas. III. Título.

CDD (22. ed.) 658.514

Biblioteca da UTFPR - Câmpus Campo Mourão

Bibliotecária/Documentalista:

Andréia Del Conte de Paiva – CRB-9/1525



TERMO DE APROVAÇÃO

ANÁLISE MULTIVARIADA APLICADA NAS INTERFERÊNCIAS DA SOBRA DE AÇÚCARES REDUTORES RESIDUAS TOTAIS NAS DORNAS DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA.

Por

JAIZA OGLIARI DE SIQUEIRA BARROS

Essa dissertação foi apresentada às quatorze horas, do dia vinte dois de setembro de dois mil e dezoito, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Inovações Tecnológicas, Linha de Pesquisa Inovações Tecnológicas em Gestão da Produção e Qualidade, no Programa de Pós-Graduação em Inovações Tecnológicas - PPGIT, da Universidade Tecnológica Federal do Paraná. A candidata foi arguida pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

Prof. Dr. Wyrllen Everson de Souza (Orientador – PPGIT)

Prof.^a Dr.^a Magda Cardoso Mantovani (Membro Interno – PPGIT)

Prof.^a Dr.^a Solange Regina Dos Santos (Membro Externo – UNESPAR-CM)

A via original com as assinaturas encontra-se na secretaria do programa.

DECICATÓRIA

A Deus.

Ao meu filho.

Ao meu esposo.

Aos meus pais.

Aos meus irmãos.

AGRADECIMENTOS

É chegado o momento da concretização de um sonho pessoal que por muitas vezes foi adiado devido aos vários rumos que a vida toma. Apesar das adversidades que vivenciei, posso agora me realizar tanto pessoalmente como profissionalmente. Me faltam palavras para dar ênfase a todos que auxiliaram direta ou indiretamente durante o percurso da realização deste mestrado.

Primeiramente, agradeço a Deus por me dar saúde e sabedoria para concluir este curso, dando força nos momentos que mais necessitei e fazendo com que eu pudesse assimilar e discernir os conhecimentos obtidos.

Agradeço ao meu filho, João Gabriel, que foi uma fonte de inspiração e que, mesmo tão pequeno, foi o maior responsável por não me deixar desistir, pois a cada dificuldade era o amor que tenho por ele que me fez seguir em frente e pensar na possibilidade de um futuro melhor. Desculpo-me pela ausência neste período.

Ao meu esposo, Ricardo, pois foram 2 anos de viagens frequentes e sempre pude contar com sua companhia, fazendo com que estes momentos fossem especiais principalmente por ele assumir o meu papel durante a minha ausência na educação junto ao nosso filho.

Agradeço muito aos meus pais, José Ogliari e Fátima, e aos meus irmãos José Adolfo e Mariza, por nos acolher e por todo o amor e tempo despendido para nos ajudar durante este período, principalmente quanto à dedicação de todos com o João Gabriel.

Agradeço ao querido amigo Paulo Vítor, pelas inúmeras vezes que pude contar com suas opiniões para o desenvolvimento dos trabalhos ao longo deste curso e a minha amiga Adriana Ribeiro pelas palavras de incentivo e ajuda na criação do meu filho.

Agradeço aos colaboradores da Usina Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha que participaram do desenvolvimento deste estudo. Ao meu amigo Carlos Curioni, a quem carinhosamente sempre chamei de chefe, pelo ponta pé inicial para que eu tentasse ingressar no mestrado. Ao gerente da unidade, Maurício Honda, por permitir que me ausentasse da empresa onde trabalho para assistir as aulas aos finais de semana, sempre me motivando a buscar novos conhecimentos e pelo apoio na implantação destes.

Aos meus amigos de sala, Jusley e André Ronix, pelo companheirismo durante o período letivo.

Ao meu orientador, Dr. Wyrllen Everson de Souza, por ter apostado em mim e pela parceria no desenvolvimento deste estudo, que indicou melhorias efetivas na planta industrial além de quebrar paradigmas existentes.

RESUMO

BARROS, Jaiza Ogliari de Siqueira. **Análise multivariada aplicada nas interferências das sobras de açúcares redutores residuais totais nas dornas de fermentação alcoólica**: 2018. 74 f. Dissertação (Mestrado em Inovações Tecnológicas) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Campo Mourão, 2008.

Diante da ascensão da utilização do etanol como base para diversos produtos, houve necessidade de aumento da produção para atendimento da demanda, provocando maior competitividade no mercado e necessitando uma reestruturação nos processos industriais envolvidos, com foco em otimização para redução dos custos. O processo fermentativo para obtenção do etanol ocorre através da metabolização de açúcares redutores pelas células de leveduras pré-selecionadas. Isso incorre em diversas ações a serem tomadas por se tratar de um processo dinâmico, necessitando de estudos aprofundados unindo diversas áreas para melhoria contínua do setor. Para o desenvolvimento deste estudo foram coletados dados do processo de fermentação da Usina Santa Terezinha – Unidade Cidade Gaúcha, diariamente, durante as safras dos anos de 2016 e 2017. O estudo utilizou-se do método de Análise Fatorial para agrupar as variáveis em fatores e através da Regressão Logística foi possível constatar que o maior responsável pelas sobras de ARRT nas dornas de fermentação são as variáveis pertencentes ao fator denominado qualidade do mosto, apresentando uma variância de 24,31%, seguido do fator denominado qualidade da alimentação com 11,53% e do fator qualidade da fermentação com 9,14%. Tais resultados permitem a criação de planos de ação para correção ou melhorias significativas no processo fermentativo estudado, resultando em prospectos favoráveis às próximas safras, possibilitando ganhos financeiros para a empresa.

Palavras-chave: Fermentação. Rendimento. Otimização. Análise Fatorial.

ABSTRACT

BARROS, Jaiza Ogliari de Siqueira. **Multivariate analysis applied the interferences of leftovers of total residual reducing sugars in alcoholic fermentation tanks.** 2018. 74 p. Dissertação (Mestrado em Inovações Tecnológicas) - Federal Technology University - Parana. Campo Mourão, 2018.

In face of the growing use of bioethanol for several purposes, there has been an increase on the market demand and competitiveness, which in turn requires a revision of industrial processes, with a focus on optimization and cost reduction. The bioethanol fermentation process occurs through the metabolization of reducing sugar by pre-selected yeast types. Since bioethanol fermentation is a complex and dynamic process, it calls for comprehensive studies to continuously improvement of the biofuel sector. In this study, data on the fermentation process of the Santa Terezinha Sugarcane Mill - Gaucha City Unit was collected daily during the 2016 and 2017 harvest periods. First, a factor analysis was used to group explanatory variables. Then, a logistic regression was used to investigate the relationship between the fermentation tanks' ARRT by-products/leftovers and the explanatory variables. The most important explanatory variables were the sugarcane must quality (24.31%), nutrition/food/feeding quality (11.53%) and fermentation quality (9.14%). These results support the formulation of action plans to correct or/and improve the studied fermentation process, which may result in promising prospects for future harvests and possible financial gains for sugarcane companies.

Keywords: Fermentation. Yield. Optimization. Factor Analysis.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	10
1.1 Objetivos	12
1.1.1 Objetivos Específicos.....	12
2 REVISÃO DE LITERATURA	13
2.1 Fermentação	13
2.1.1 Fatores que Influenciam no Rendimento da Fermentação.....	15
2.1.1.1 Qualidade do mosto.....	15
2.1.1.2 Glicerol.....	17
2.1.1.3 Acidez e pH.....	17
2.1.1.4 Floculação	18
2.1.1.5 Bastonetes e viabilidade.....	18
2.1.1.6 Concentração de fermento.....	19
2.1.1.7 Etanol.....	19
2.1.1.8 Velocidade da alimentação.....	20
2.2 Métodos de Resolução	20
2.2.1 Análises	20
2.2.1.1 °Brix	20
2.2.1.2 Pureza	21
2.2.1.3 Açúcares redutores totais (ART)	21
2.2.1.4 Bastonetes.....	21
2.2.1.5 Viabilidade celular e brotamento.....	22
2.2.1.6 Açúcares redutores residuais totais (ARRT)	22
2.2.1.7 Floculação	22
2.2.1.8 Glicerol.....	23
2.2.1.9 Concentração do fermento.....	23
2.2.1.10 Teor alcoólico (°GL)	23
2.2.1.11 Acidez sulfúrica	24
2.3 Regressão Logística	24
2.3.1 Modelo de Regressão Logística	24
2.3.2 Modelo de Regressão Logística Simples	25
2.3.3 Modelo de Regressão Logístico Múltiplo	28
2.4 Avaliação da Função de Classificação	29
2.4.1 Critério TPM (<i>Total Probability of Misclassification</i>)	29
2.4.2 Abordagem de Lachenbruch.....	31
2.5 Análise Fatorial	32
2.5.1 Modelo Fatorial Ortogonal	33
2.5.2 Método das Componentes Principais via Matriz de Covariância	35
2.5.3 Método das Componentes Principais via Matriz de Correlação Amostral	37
2.5.4 Rotação Ortogonal de Fatores	38
2.5.4.1 Critério varimax	39

2.5.4.2 Critério quartimax	39
2.5.4.3 Critério orthomax	40
2.5.5 Determinação dos Escores Fatoriais	40
2.5.5.1 Método dos mínimos quadrados ponderados	41
3 MATERIAL E MÉTODO	42
3.1 Material	42
3.1.1 Histórico	42
3.1.2 Usina de Açúcar Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha	43
3.1.3 Coleta de Dados	43
3.1.4 Processo Fermentativo	44
3.1.4.1 Mel final	44
3.1.4.2 Mosto	45
3.1.4.3 Levedo tratado	46
3.1.4.4 Vinho bruto	46
3.1.4.5 Vinho deslevedurado	47
3.1.5 Fluxograma do Processo de Fermentação	47
3.2 Método	48
3.2.1 Aplicação do Método de Reconhecimento e Classificação de Padrões	49
3.2.1.1 Regressão logística	49
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	50
4.1 Fatores	54
4.1.1 Fator 1 – Qualidade do Mosto	54
4.1.2 Fator 3 – Qualidade da Alimentação na Dorna	57
4.1.3 Fator 4 – Qualidade da Fermentação	60
4.1.4 Fatores com P Valor Maior que 0,05	63
4.1.4.1 Fator 2	63
4.1.4.2 Fator 5	64
4.2 Perspectivas de ganho.....	66
5 CONCLUSÃO.....	67
REFERÊNCIAS	68

1 INTRODUÇÃO

O etanol é um composto orgânico de origem vegetal, fonte de energia renovável utilizado como combustível em veículos. Segundo Souza (2013), ele é obtido através da fermentação de açúcares, hidratação do etileno (hidrocarboneto alceno) ou redução ao acetaldeído. Possui como fórmula química C_2H_5OH , e também pode ser chamado de álcool etílico.

Segundo Cinelli (2012), no início do século XX, tornou-se conhecido o potencial do álcool para ser utilizado como combustível para diferentes motores de combustão, especialmente em automóveis, o que levou ao desenvolvimento de vários métodos para obtenção de etanol em larga escala.

De acordo com Ferreira (2005), a indústria de álcool se desenvolveu na Europa no século XIX e, no final deste século iniciou-se a produção de etanol no Brasil. A França e a Alemanha contribuíram para o desenvolvimento das técnicas de fermentação alcoólica, com a construção de aparelhos para destilação. O etanol era utilizado em produtos farmacêuticos, produção de alguns produtos químicos, em bebidas e para combustão.

Sousa (2011) acrescenta que o Brasil é líder na produção e exportação de etanol a partir da cana-de-açúcar, pois possui menores custos de produção, balanço energético inigualável, possibilidade de ampliação da produção e domínio tecnológico nas áreas agrícola e industrial.

Segundo Goldemberg *et al.* (2007), o etanol é obtido através do processo de fermentação, podendo utilizar como matéria prima a cana-de-açúcar, milho, trigo, beterraba, mandioca, entre outros.

Segundo NOVACANA (2016), o Brasil é o segundo maior produtor de etanol no mundo, perde para os Estados Unidos com etanol produzido a partir do milho. Embora o Brasil seja essa potência na produção de etanol, o país teve um elevado aumento nos custos de produção nas últimas safras, devido a turbulência econômica e política que levou a aceleração da inflação do país.

Bastos (2007) acrescenta que o etanol é produzido desde os tempos antigos pela fermentação dos açúcares encontrados em produtos vegetais (cereais, beterraba e cana-de-açúcar). Ainda hoje, boa parte do etanol industrial é obtido por meio da fermentação, embora também seja feita sinteticamente de fontes como o eteno derivado do petróleo.

Para Ferreira (2005), a fermentação é definida como um fenômeno natural, durante o qual certas matérias primas orgânicas complexas são transformadas em substâncias simples. Ela se deve à ação de leveduras, fungos e bactérias que secretam enzimas indispensáveis para a degradação dessas matérias, que serão utilizadas por eles para a fermentação e para seu desenvolvimento.

Cinelli (2012) enfatiza que, historicamente, os microorganismos mais comumente utilizados na fermentação alcoólica têm sido as leveduras do gênero *Saccharomyces*, sendo a principal espécie a *Saccharomyces cerevisiae*. Este tipo de levedura pode ser utilizada como aditivo em alimentos para consumo humano e, portanto, ideal para a produção de bebidas alcoólicas e fermento de pão.

Steinle (2013), acrescenta que durante o processo de fermentação podem surgir diversos fatores, que influenciam na produção de álcool, devido ao fato de interferirem na atividade celular da levedura. Entre os principais fatores que podem vir a afetar na produção de etanol destacam-se: qualidade do mosto (proveniente de caldo ou melaço), aeração e agitação, nutrientes, concentração de açúcares e levedura, temperatura, pH, acidez, contaminação bacteriana, entre outros.

Fermentação é o processo produtivo realizado para a obtenção do etanol que ocorre através do desdobramento do substrato, rico em açúcares que são transformados por ação de leveduras, sendo constituído por qualquer produto que contenha carboidratos como fonte de carbono, tais como sacarose, glicose, celulose, amido, dentre outros utilizados como matéria prima (FREITA, 2013, p. 16).

A produção de etanol no Brasil é derivada, em escala industrial, exclusivamente da cana-de-açúcar, cujo cultivo é favorecido pelo clima, resultando em matéria prima de menor custo (ANDRIETA *et al.*, 2006, p. 2).

Diante deste contexto, considerando a necessidade de manter-se competitiva e permanecer no mercado, é necessário que a produção de etanol seja otimizada, ou seja, que seja convertido em etanol o máximo possível de açúcar presente na fermentação; para isso passa a ser primordial uma análise criteriosa do processo fermentativo a fim de identificar possíveis ganhos.

Este trabalho está organizado da seguinte maneira: o primeiro capítulo traz uma sucinta e objetiva apresentação deste estudo, explanando as variáveis adotadas no setor sucroenergético, seguida de seus objetivos e sua aplicação neste mercado. O segundo capítulo apresenta, através de uma revisão literária, um embasamento

teórico da pesquisa, ressaltando a relevância do presente estudo para posteriormente sua aplicação.

O local onde a pesquisa foi desenvolvida, bem como os procedimentos adotados serão apresentados no terceiro capítulo.

No capítulo 4 serão apresentados os resultados obtidos neste estudo, seguido das considerações finais e as referências que foram consultadas para o desenvolvimento deste trabalho.

1.1 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é estudar e determinar quais os fatores interferem na fermentação que podem causar queda de produção de etanol, avaliados como a sobra de ARRT (Açúcares Redutores Residuais Totais) na dorna, pois este é um parâmetro que possui influência direta no rendimento da fermentação.

1.1.1 Objetivos Específicos

1 Levantar, por meio de estudos bibliográficos, os fatores que mais interferem no processo de fermentação;

2 Coletar os dados referentes às interferências citadas;

3 Complementar, via análises laboratoriais os fatores não encontrados nos dados coletados;

4 Criar critérios de correlação para utilização dos dados;

5 Descartar os dados que não atendem aos critérios de correlação;

6 Através da utilização de um modelo estatístico, correlacionar estes parâmetros com a sobra de ARRT na dorna de fermentação;

7 Interpretar os dados obtidos e elencar os de maior relevância para uma maior ênfase no controle da fermentação;

8 Atender à meta proposta pela consultoria contratada pela empresa estudada, onde determinou-se valores iguais ou abaixo de 0.7 % em sobras de ARRT nas dornas de fermentação.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Fermentação

O etanol é uma substância orgânica obtida da fermentação alcoólica de açúcares. De acordo com Chieppe Júnior (2012), no Brasil, tal substância é também utilizada como combustível de motores de explosão, constituindo assim um mercado em ascensão para um combustível obtido de maneira renovável e para o estabelecimento de uma indústria de química de base sustentada na utilização de biomassa de origem agrícola renovável.

Missawa (2009) define fermentação como sendo a oxidação incompleta do açúcar, gerando como subproduto um composto orgânico oxidável. Inicialmente a sacarose, que é o açúcar de reserva, sofre hidrólise pela enzima invertase sendo convertida em glicose e frutose. Ambas entram na via glicolítica e, através de uma sequência de reações, são convertidas em piruvato. Este, primeiramente é descarboxilado pela enzima piruvato descarboxilase, formando acetaldeído e liberando CO₂. Posteriormente, o acetaldeído é reduzido a etanol, sendo essa reação catalisada pela enzima álcool desidrogenase. A fermentação alcoólica pode ser traduzida pela seguinte reação:



De acordo com Guidini (2013), com a estequiometria, a conversão de 1 grama de glicose deveria produzir 0,51 gramas de etanol e 0,49 gramas de dióxido de carbono. No entanto, a síntese celular e de produtos secundários limitam o rendimento estequiométrico a valores inferiores a 100% desta conversão.

Para que ocorra a fermentação alcoólica, as moléculas de açúcar são adicionadas ao fermento por meio de uma solução denominada mosto. Segundo Vasconcelos (2010), o mosto pode ser composto por caldo de cana-de-açúcar, melaço (subproduto da fábrica de açúcar obtido no processo de cristalização da sacarose) ou misto (mistura de melaço e caldo de cana-de-açúcar).

Silva (2007) salienta que a fermentação se inicia logo após a adição do fermento ao caldo (mosto). Todavia, existem três fases da fermentação depois da adição do fermento: na fase inicial os organismos vão se adaptando ao novo ambiente e começam a crescer; nesta fase, o mosto, mesmo sem ter sido oxigenado, contém

ainda, uma determinada quantidade de oxigênio para facilitar o início do desenvolvimento das leveduras. O aumento de temperatura nesta fase é insignificante e não se nota formação de bolhas, que caracterizam o desprendimento de gás carbônico na produção do etanol. Após 30 minutos, as leveduras começam a se reproduzir rapidamente e o número de organismos aumenta exponencialmente. Dióxido de carbono (CO₂) é liberado em grandes quantidades, com borbulhamento intenso. Com o prosseguimento da fermentação, o fermento tende a se aglomerar (floculação). Essa fase é conhecida como “fermentação principal” ou “tumultuosa”. É nessa fase que se detecta um aroma agradável e característico. Também, a temperatura e o teor alcoólico amentam, com correspondente redução no teor de açúcar do mosto. A última fase é a estacionária; o alimento começa a ficar escasso e a taxa de crescimento das leveduras é reduzida. A produção de gás carbônico diminui e o fermento precipita.

Para Silva (2007), fermentação alcoólica é a transformação de açúcares em etanol e gás carbônico através da ação de um determinado grupo de organismos unicelulares denominados leveduras. Na produção de etanol, os tipos de leveduras mais utilizados são do gênero *Saccharomyces*, pois estes organismos são desenvolvidos para propiciar fermentação uniforme, rápida e com alto rendimento em etanol.

Vasconcelos (2010) destaca que, para se obter uma boa fermentação é primordial que haja uma adequada seleção do microrganismo agente da fermentação alcoólica. A levedura selecionada precisa ter uma alta velocidade fermentativa, dominância e permanência durante a safra, boa capacidade fermentativa, elevada conversão de açúcares em etanol, pequena produção de glicerol, baixa formação de espumas, tolerância a altas concentrações de substrato e etanol, resistência a acidez e a temperaturas elevadas (36 a 38°C), estabilidade genética, boa eficiência fermentativa (elevado rendimento em etanol), alta produtividade e elevadas velocidades específicas de crescimento celular, de produção de etanol e de consumo de substrato.

Segundo Goldemberg *et al.* (2008), apud Missawa (2009), para que a produção de etanol seja viável, o processo fermentativo precisa englobar as seguintes características:

- Obtenção do máximo rendimento de etanol;
- minimização na síntese de outros produtos (glicerol e ácido láctico);

- minimização do tempo de fermentação;
- baixa contaminação bacteriana (ações preventivas, como por exemplo, tratamento ácido do fermento);
- manutenção de alta viabilidade do fermento (70 a 80%);
- minimização de produtos químicos (ácidos, antibióticos, antiespumante);
- minimização dos gastos com manutenção (limpeza, vazamentos);
- minimização de gastos de energia e água;
- automatização das operações manuais (temperatura, Brix, pH).

2.1.1 Fatores que Influenciam no Rendimento da Fermentação

Diversos são os fatores que influenciam para que haja uma alta conversão de etanol durante a fermentação. Para Souza *et. al* (2013), o fermento utilizado no processo de fermentação deverá apresentar alta velocidade de fermentação, tolerância ao álcool produzido, resistência à acidez e à temperatura elevada, estabilidade genética e isento de outros microrganismos competitivos, que possam diminuir a eficiência de transformação do açúcar do mosto em álcool.

Chieppe Júnior (2012) destaca alguns itens que influenciam o processo de fermentação, tais como a temperatura da fermentação, velocidade de alimentação, produção de glicerol e biomassa, infecção, formação de espumas, floculação, entre outros.

Segundo Amorim (2005), a levedura realiza a fermentação dos açúcares com o objetivo de conseguir a energia química necessária à sua sobrevivência, o etanol é apenas um subproduto deste processo. Se o homem pretende se beneficiar desta atividade metabólica, ele deve buscar conhecimento que propiciem às leveduras, condições ideais para que ela trabalhe a seu favor, isto é, com maior eficiência na produção de etanol.

2.1.1.1 Qualidade do mosto

Mosto é o termo empregado para definir um líquido açucarado apto a fermentar. (SOUZA, 2013, p.20)

Ribeiro *et al.* (1999) destaca que a quantidade de açúcar presente no mosto deve ser controlada para que a fermentação não sofra inibição temporária pela excessiva concentração de açúcares.

Daré (2008) ressalta que o excesso de açúcar exerce efeito de inibição sobre o metabolismo da levedura, a forma de alimentação de mosto nas dornas tem influência direta na eficiência da fermentação, sendo este controle importante para que o processo fermentativo não sofra interrupção ou tenha sua velocidade reduzida por excesso de mosto.

Steinle (2013) acrescenta que o aumento na concentração de açúcar eleva a velocidade da fermentação, resultando em perdas da atividade de transporte de açúcar e produzindo menos etanol.

Para Neves (2003), uma menor concentração de nutrientes durante o enchimento, promove o aumento na velocidade específica de crescimento das células, seguido por um decréscimo gradual, em que se estabelece um estado praticamente constante.

Portanto, observa-se a importância de alimentar o fermento na dorna em condições ideais, de modo que não falte ou haja excesso de açúcar para a levedura, já que ambos os casos contribuem para um menor rendimento no processo de fermentação.

A quantidade de açúcar presente no mosto é denominada de ART (Açúcares redutores totais) e sua quantificação é determinada através de análises de titulação. Uma outra forma de medir a concentração de açúcar do mosto é através do °Brix, porém este mede a quantidade de sólidos solúveis presentes na solução, sendo que nem sempre um sólido solúvel é açúcar. O °Brix acaba sendo mais utilizado no processo para acompanhamento das concentrações de açúcares no mosto por se tratar de um método simples e fácil de quantificação, que normalmente é feito instantaneamente por meio de automatização.

A pureza do mosto é outro fator importante para a fermentação, pois trata-se de uma medida em porcentagem da quantidade de sacarose que está presente na solução.

2.1.1.2 Glicerol

De acordo com Gutierrez (1991) durante a fermentação alcoólica as leveduras produzem, além de etanol e gás carbônico, compostos secundários como glicerol, álcoois superiores, ácido pirúvico e succínico, sendo que o glicerol pode ser considerado como o mais importante componente do ponto de vista quantitativo.

O quadro 1 ilustra em termos quantitativos os produtos e subprodutos da fermentação alcoólica.

Quadro 1 – Proporção dos produtos formados na fermentação alcoólica

Produtos e subprodutos da fermentação alcoólica	
Produtos/Subprodutos	%
Etanol	45 a 49
Gás carbônico	43 a 47
Glicerol	2 a 5
Ácido succínico	0,5 a 1,5
Ácido acético	0 a 1,4
Ácido málico	0 a 0,3
Biomassa	0,7 a 1,7
Óleo fúsel	0,2 a 0,6
Butileno Glicol	0,2 a 0,6

Fonte: AMORIM; BASSO & ALVES (1996).

Quanto menor a produção de glicerol no processo de fermentação alcoólica melhor, pois o desejável é que a levedura utilize a energia disponível (açúcar) para metabolizar etanol e, ao produzir glicerol, parte desta energia é desviada.

2.1.1.3 Acidez e pH

Segundo Amaral (2009) as fermentações se desenvolvem numa ampla faixa de valores de pH, sendo a adequada valores entre 4 e 5. Os mostos industriais geralmente possuem pH entre 4,5 e 5,5.

Segundo Steinle (2013), normalmente as bactérias se desenvolvem em pH entre 4 e 8, enquanto leveduras, de 3 a 6. Sendo assim, o pH pode ser usado para selecionar preferencialmente as leveduras sobre as bactérias e, conseqüentemente, reduzir a contaminação bacteriana.

Na tentativa de se obter um pH favorável a levedura na fermentação, utiliza-se ácido sulfúrico no processo de fermentação, com o intuito de favorecer o desenvolvimento das leveduras e impedir o desenvolvimento das bactérias.

Para se obter um bom processo fermentativo, faz-se necessário o controle da acidez. No estudo realizado por Monteiro e Carvalho (2011), foi possível constatar que a acidez em nível elevado possui influência direta sobre o rendimento na produção de etanol e que concentrações de bactérias acima de $3,0 \times 10^6$ apresentam uma maior influencia tanto no aumento da acidez, como na queda do rendimento.

2.1.1.4 Floculação

De acordo com Alcarde (2001), a floculação é um fenômeno apresentado por leveduras, as quais se unem em agregados denominados flocos, constituídos por várias células. Um dos motivos da ocorrência da floculação pode ser a presença de bactérias contaminantes.

Narendranath *et. al* (1997), ressalta que a floculação impede a levedura de converter todo o açúcar fermentescível presente no mosto em etanol; a perda em produção de etanol pode chegar a 17% e enfatiza que a floculação da levedura acontece quando há uma alta presença de bactérias no meio.

Monteiro e Carvalho (2011), acrescentam que durante o processo fermentativo a presença de bactérias contaminantes, interfere negativamente na produção e na qualidade, pois, além de consumir parte do substrato adicionado ao meio para produção de etanol, as bactérias também produzem metabólicos tóxicos que inibem as leveduras, o que favorece a floculação, ocasionando perdas da eficiência na fermentação.

2.1.1.5 Bastonetes e viabilidade

Segundo Steinle (2013), a fermentação industrial, devido à dimensão do processo, não é conduzida em condições ideais de assepsia, o que permite que a contaminação por bactérias esteja sempre presente e, dependendo de sua intensidade, compromete o rendimento do processo fermentativo.

Segundo Narendranath *et. al* (1997), a contaminação bacteriana é o fator de maior causa na redução da produção de etanol durante o processo fermentativo em fermentações com leveduras *Saccharomyces cerevisiae*. Dentre os contaminantes, as bactérias de ácido lático são as mais problemáticas devido à sua tolerância a altas temperaturas e baixo pH e sua capacidade de crescer rapidamente.

No estudo desenvolvido por Nobre (2005), pode-se constatar que a contaminação bacteriana na fermentação pode provocar a queda na viabilidade celular das leveduras devido às toxinas e ácidos orgânicos excretado no meio, além disso outro fator responsável pela redução na viabilidade celular da levedura foi a acidez do meio juntamente com a presença de bactérias.

2.1.1.6 Concentração de fermento

Segundo Souza *et al.* (2013), antes de iniciar o processo de fermentação, há a necessidade da adição nas dornas de fermentação de uma população inicial de leveduras, que devem apresentar determinadas características que garantam o rendimento fermentativo, durante a fermentação alcoólica. Essa massa de células usada para iniciar o processo fermentativo denomina-se pé-de-cuba e deve ser em quantidade adequada para que o processo ocorra de modo satisfatório.

Lima in Naves (2010), ressalta que se a concentração de fermento na dorna for elevada o processo de fermentação se torna mais rápido, seguido de aumento na temperatura, maior produtividade e maior controle sobre bactérias contaminantes, além de restringir o crescimento da própria levedura (brotamento). Por outro lado, o elevado teor de levedura exige energia de manutenção maior, isto é, maior consumo de açúcar para manter as células vivas.

2.1.1.7 Etanol

De acordo com Silva *et al.* (2008), durante o processo de fermentação alcoólica origina-se uma série de compostos que podem atuar como inibidores potenciais, entre eles podem ser citados os metabólicos secundários contaminantes totais e, até mesmo, o etanol produzido no processo.

Alexandre *et al.* (2001) acrescenta que o etanol constitui o principal fator de stress durante a fermentação, por ser tóxico à célula em concentrações altas. Do ponto de vista fisiológico, o etanol inibe o crescimento e viabilidade celular da levedura, diminui o rendimento fermentativo, aumenta a permeabilidade da membrana, entre outros.

2.1.1.8 Velocidade da alimentação

De acordo com Andrade (2016), nos processos de fermentação por batelada, o tempo de fermentação tem uma atuação na velocidade de alimentação de mosto, tendo como uma das consequências, reflexos sob o rendimento.

Na empresa em que se desenvolveu este estudo, a fermentação ocorre em batelada, sendo assim a velocidade de alimentação será analisada através da variável vazão do mosto, pois como todas as dornas trabalham sempre com o mesmo nível final, altera-se o tempo de alimentação aumentando ou diminuindo a vazão de mosto.

2.2 Métodos de Resolução

2.2.1 Análises

2.2.1.1 °Brix

De acordo com Santos (2008), a determinação do °Brix é o parâmetro mais utilizado nas indústrias de açúcar e álcool, trata-se de uma medida do índice de refração das soluções diluídas de açúcar, fornecendo a massa de sólidos em porcentagem.

Segundo Ferreira (2005), a determinação do °Brix, porcentagem em peso de sólidos solúveis presente na solução, é feita através de refratômetros.

Para a mensuração do °Brix utilizados neste trabalho, utilizou-se um refratômetro modelo Rudolph J57, com leitura de amostras a 20°C.

2.2.1.2 Pureza

Santos (2008), define pureza como sendo a porcentagem de sacarose (Pol) contida nos sólidos solúveis (Brix).

Sendo assim, a análise de Pol é necessária para que se realize o cálculo da pureza. Para CTC (2005), Pol é a porcentagem em massa de sacarose aparente contida em uma solução açucarada, sendo que sua mensuração se faz através do método de polarimetria.

2.2.1.3 Açúcares redutores totais (ART)

De acordo com Steinle (2013), o teor de ART representa todos os açúcares da cana na forma de açúcares redutores ou açúcar invertido. O teor de ART pode ser determinado analiticamente por oxirredutometria, colorimetria, cromatografia, após a inversão ácida da sacarose.

Para a determinação da porcentagem de açúcares redutores totais contidas na amostra, utilizou-se a titulometria de *Lane & Eynon*, também conhecido como Método de *Fehling*, que segundo Dornemann (2016) consiste na redução completa dos íons cúpricos do reagente de *Fehling* (solução de ácido tartárico com cobre alcalino) a óxido cuproso, causado pelos açúcares redutores. Esta reação forma um precipitado vermelho de óxido cuproso. A solução inicial é azul, devido ao óxido cúprico e a amostra é gotejada em titulação até que a solução adquira coloração vermelho tijolo.

A leitura do ponto final da titulação é relativamente grosseira e depende da sensibilidade e da prática do analista.

2.2.1.4 Bastonetes

A mensuração das bactérias presentes na fermentação (bastonetes) foi realizada por análise microscópica. Segundo Borzani (2001), quando observadas ao microscópio, a maior parte das bactérias apresenta-se na forma esférica, cilíndricas

ou espiralada. Os métodos mais indicados para se estimar a população bacteriana de uma amostra coletada são contagem direta ao microscópio óptico e plaqueamento.

2.2.1.5 Viabilidade celular e brotamento

De acordo com Nobre (2005), o método utilizado para determinar a população e brotamento de células de levedura *S. cerevisiae* é o de coloração diferencial das células por meio de uma solução, fazendo com que as células viáveis permanecem incolores, enquanto as não viáveis são coradas pela solução. Os resultados são expressos em porcentagem, sendo que a viabilidade representa a relação entre células vivas e total das células contadas enquanto o brotamento corresponde à relação entre brotos vivos e total de células vivas contadas.

2.2.1.6 Açúcares redutores residuais totais (ARRT)

Os Açúcares Redutores Residuais Totais (ARRT) são substâncias redutoras totais presentes no vinho bruto (mistura de mosto e fermento) que não foram aproveitadas pelo processo de fermentação, ou por serem não fermentescíveis ou por simplesmente não terem sido consumidos pela levedura. (CTC, 2005).

O método utilizado para mensurar o percentual de ARRT é o Método de *Fehling* e, assim como na análise de ART, a leitura do ponto final da titulação é relativamente grosseira e depende da sensibilidade e da prática do analista.

2.2.1.7 Floculação

A análise de floculação segue o método da FERMENTEC (2003), onde o percentual de floculação é determinado por decantação, sendo a leitura realizada de modo visual, através da diferença do volume total e o volume depositado.

2.2.1.8 Glicerol

O glicerol reage com Adenosina Trifosfato (ATP), catalisada pela Glicerol Kinase, formando Adenosina-5-difosfato (ADP) e Glicerol-1-Fosfato (G-1-P) que é oxidado pela Glicerol Fosfato Oxidase a Fosfato de Dihidroacetona (DAP) e Peróxido de Hidrogênio. Este reage com 4-Aminoantipirina (4-AAP) e n-etil-n (3 sulfopropil) m-Ansidina (ESPA), formando quinoneimina, composto colorido, cuja absorbância é medida a 540 nm (CTC, 2005).

2.2.1.9 Concentração do fermento

Para análise da concentração da levedura, expressa em porcentagem, o vinho bruto (mistura de mosto e fermento) é adicionado a uma centrífuga para que ocorra a separação do fermento, em seguida faz-se a leitura da quantidade decantada e aplica-se uma equação. Este método de análise é segundo os padrões FERMENTEC (2003).

2.2.1.10 Teor alcóolico (°GL)

Segundo a Revista de Farmacopeia Homeopática Brasileira (2011), alcoometria é a determinação do grau alcoólico das misturas de água e álcool etílico. O grau alcoólico volumétrico de uma mistura de água e etanol é expresso pelo número de volume de etanol, à temperatura de 20°C, contido em 100 volumes dessa mistura à mesma temperatura. O instrumento que determina o grau alcoólico é um densímetro, denominado alcoômetro, e indica o volume de álcool etílico contido em 100 volumes de uma mistura feita exclusivamente de álcool etílico e água.

Para as análises de teor alcóolico da dorna, seguiu-se a metodologia CTC (2005), cujo valores foram obtidos por densimetria eletrônica.

2.2.1.11 Acidez sulfúrica

Para as análises referentes à acidez sulfúrica foi utilizado a metodologia FERMENTEC (2003), onde realiza-se uma análise de titulação com hidróxido de sódio até que o pH seja 8.5.

2.3 Regressão Logística

Segundo Lima (2002) a função Logística surgiu em 1845, ligada a problemas de crescimento demográfico. Em tais aspectos esta função desempenha um papel importante. A partir da década de 30, esta metodologia passou a ser aplicada no âmbito da biologia.

Este método, assim como a regressão linear e múltipla, estuda a relação entre uma variável resposta e uma ou mais variáveis independentes. A diferença entre estas técnicas de regressão se deve ao fato de que na regressão logística as variáveis dependentes estão dispostas em categorias discriminatórias enquanto na regressão linear estas variáveis são dados contínuos. Outra diferença é que na regressão logística a resposta pode ser entendida como uma probabilidade de ocorrência $p \in [0,1]$, enquanto na regressão linear obtém-se um valor numérico $p \in \mathfrak{R}$.

2.3.1 Modelo de Regressão Logística

Seja uma variável aleatória Y (dicotômica) e $\underline{X}' = [X_1, X_2, \dots, X_p]$ um vetor de dimensão p , composto de variáveis aleatórias independentes e ainda tomando-se n observações independentes de Y e X_i com $i=1, 2, \dots, p$, pode-se escrever o modelo de Regressão Logística, na forma:

$$P(\tilde{X}) = \frac{e^{\underline{\beta}'\underline{X}}}{1 + e^{\underline{\beta}'\underline{X}}} = \frac{1}{1 + e^{-\underline{\beta}'\underline{X}}} \quad (2.1)$$

onde: $\underline{\beta}' = [\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p]$ e $\underline{X}' = [1, X_1, \dots, X_p]$

Segundo Johson & Wichern (1998), esse modelo é o mais apropriado no caso da variável dependente ser dicotômica, pois a Regressão Logística estima diretamente a probabilidade de ocorrência de um evento. Estes autores, também salientam que a estimação dos parâmetros deve ser feita pelo método da máxima verossimilhança, sendo mais recomendado quando dispõe-se de observações individuais da ocorrência ou não de determinado evento.

2.3.2 Modelo de Regressão Logística Simples

Seja a amostra aleatória composta de n pares de observações (X_i, Y_i) com $i = 1, 2, \dots, n$, onde os Y_i 's representam os valores observados de uma variável dicotômica, e os X_i 's representam os valores observados de uma única variável independente.

Assim o modelo $P(X) = \frac{e^{\beta X}}{1 + e^{\beta X}}$, torna-se:

$$P(Y = 1 | X) = P(X) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X}} = \frac{1}{1 + e^{-(\beta_0 + \beta_1 X)}} \quad (2.2)$$

Essa expressão fornece a probabilidade condicional de que Y seja igual a 1, dado o valor de X , ou seja, $P(Y = 1 | X)$. Neste caso é necessário estimar os valores dos parâmetros β 's. Então com isso determinando o modelo de Regressão Logística a probabilidade condicional de que Y seja igual a 0, é:

$$P(Y = 0 | X) = 1 - P(Y = 1 | X) \quad (2.3)$$

Portanto para as n observações têm-se:

$$P(Y_i = 1 | X_i) = P(X_i) \quad \text{e} \quad P(Y_i = 0 | X_i) = 1 - P(X_i) \quad (2.4)$$

O método da Máxima Verossimilhança é o melhor método para se estimar os parâmetros do modelo de Regressão Logística, ou seja, fornece estimativas para os parâmetros que maximizam a probabilidade de obter o conjunto observado de dados.

Uma forma conveniente para expressar a contribuição da função de verossimilhança para os pares (X_i, Y_i) é através da formula:

$$F(X_i) = P(X_i)^{Y_i} [1 - P(X_i)]^{1 - Y_i} \quad (2.5)$$

Desde que, assumindo que as observações são independentes, a função de verossimilhança é obtida como o produto dos termos dados na equação (2.6) como segue:

$$l(\beta) = \prod_{i=1}^n F(X_i) = \prod_{i=1}^n [P(X_i)^{Y_i}][1 - P(X_i)]^{1-Y_i} \quad (2.6)$$

Os estimadores de Máxima Verossimilhança destes parâmetros são escolhidos de forma a maximizar essa função, ou seja, deseja-se determinar o estimador para β que maximize a expressão anterior. Analisando essa função do ponto de vista matemático é mais fácil trabalhar com o logaritmo da mesma. Assim, tem-se a função de log-verossimilhança dada por:

$$L(\beta) = \ln(l(\beta)) = \ln \left[\prod_{i=1}^n F(X_i) \right] = \ln \left[\prod_{i=1}^n [P(X_i)^{Y_i}][1 - P(X_i)]^{1-Y_i} \right] \quad (2.7)$$

Assim:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^n [Y_i \ln(P(X_i))] + (1 - Y_i) \ln[1 - P(X_i)] \quad (2.8)$$

Então:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^n \left[Y_i \ln \frac{e^{\underline{\beta}' X}}{1 + e^{\underline{\beta}' X}} + (1 - Y_i) \ln \left(1 - \frac{e^{\underline{\beta}' X}}{1 + e^{\underline{\beta}' X}} \right) \right] \quad (2.9)$$

Temos:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^n \left[Y_i \ln \frac{e^{\underline{\beta}' X}}{1 + e^{\underline{\beta}' X}} + (1 - Y_i) \ln \left(\frac{1}{1 + e^{\underline{\beta}' X}} \right) \right] \quad (2.10)$$

Mas:

$$\ln \left(\frac{e^{\underline{\beta}' X}}{1 + e^{\underline{\beta}' X}} \right) = \ln e^{\underline{\beta}' X} - \ln(1 + e^{\underline{\beta}' X}) = \underline{\beta}' X - \ln(1 + e^{\underline{\beta}' X}) \quad (2.11)$$

E:

$$\ln \left(\frac{1}{1 + e^{\underline{\beta}' X}} \right) = \ln 1 - \ln(1 + e^{\underline{\beta}' X}) = -\ln(1 + e^{\underline{\beta}' X}) \quad (2.12)$$

Substituindo temos:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^n [Y_i(\underline{\beta}' X - \ln(1 + e^{\underline{\beta}' X})) + (1 - Y_i)(-\ln(1 + e^{\underline{\beta}' X}))] \quad (2.13)$$

Assim:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^n [Y_i \beta' X - Y_i \ln(1 + e^{\beta' X}) - \ln(1 + e^{\beta' X}) + Y_i \ln(1 + e^{\beta' X})] \quad (2.14)$$

Concluindo:

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^n [Y_i \beta' X - \ln(1 + e^{\beta' X})] \quad (2.15)$$

É possível demonstrar a concavidade global da função de log-verossimilhança sendo, portanto, apenas necessário anular o vetor das primeiras derivadas desta função em relação a β para obter os estimadores de máxima verossimilhança. Assim, para determinar o valor de β que maximiza $L(\beta)$ deve-se derivar $L(\beta)$ em relação a β_0 e β_1 e igualar o conjunto de resultados a zero. Desta forma tem-se a seguir as chamadas equações de verossimilhança, que são derivadas da expressão anterior em relação a β .

$$\frac{\partial L(\beta)}{\partial \beta_0} = \sum_{i=1}^n \left(Y_i - \frac{e^{\beta' X}}{1 + e^{\beta' X}} \right) = \sum_{i=1}^n [Y_i - P(X_i)] = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial L(\beta)}{\partial \beta_1} = \sum_{i=1}^n \left(X_i \cdot Y_i - X_i \frac{e^{\beta' X}}{1 + e^{\beta' X}} \right) = \sum_{i=1}^n X_i [Y_i - P(X_i)] = 0 \quad (2.17)$$

Temos que:

$$\sum_{i=1}^n Y_i = \sum_{i=1}^n \frac{e^{\beta' X}}{1 + e^{\beta' X}} = \sum_{i=1}^n P(X_i) \quad (2.18)$$

O que reflete no fato da soma dos valores observados de Y ser igual a soma dos valores esperados (preditos), mediante a aplicação do modelo obtido. Esta propriedade é importante, pois ajuda avaliar o ajuste do modelo.

O valor de β dado pela solução das equações anteriores é chamado de estimador de máxima verossimilhança denotado por $\hat{\beta}$. $P(X_i)$, representa uma estimativa da probabilidade condicional que Y é igual a 1, sendo que X é igual a X_i

2.3.3 Modelo de Regressão Logístico Múltiplo

Considerando-se uma amostra de n pares de observações independentes (\underline{X}_i, Y_i) , $i = 1, 2, \dots, p$, da mesma forma como ocorreu no caso univariado, item anterior; o ajuste do modelo requer que se obtenha uma estimativa do vetor $\underline{\beta}' = [\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p]$. O método de estimação usado no caso multivariado será o mesmo do univariado, ou seja, o da máxima verossimilhança. A função de máxima verossimilhança é aproximadamente idêntica à dada na equação, com uma mudança, sendo que $P(X)$ é definido por:

$$P(Y = 1 | \underline{X}) = P(\underline{X}_i) = \frac{e^{\underline{\beta}' \underline{X}}}{1 + e^{\underline{\beta}' \underline{X}}} \quad (2.19)$$

Estimar-se-á $(p+1)$ equações de verossimilhança, as quais são obtidas por derivadas da função log-verossimilhança com respeito à $(p+1)$ parâmetros. As equações de verossimilhança resultantes podem ser representadas como:

$$\sum_{i=1}^n [Y_i - P(X_i)] = 0 \quad (2.20)$$

e

$$\sum_{i=1}^n X_{ij} [Y_i - P(X_i)] = 0 \quad (2.21)$$

para $j = 1, 2, \dots, p$

Da mesma forma como ocorreu com o modelo univariado, as soluções das equações de verossimilhança requer a utilização de um método iterativo na busca dos parâmetros estimados $\hat{\beta}'$.

2.4 Avaliação da Função de Classificação

2.4.1 Critério TPM (*Total Probability of Misclassification*)

Uma das formas de avaliar o desempenho de um procedimento de reconhecimento de padrões, consiste no cálculo da taxa de erro de classificação (*Total Probability of Misclassifications* - TPM) dado por:

$$TPM = p_1 \int_{R_2} f_1(\underline{X}) d\underline{X} + p_2 \int_{R_1} f_2(\underline{X}) d\underline{X} \quad (2.22)$$

onde p_1 e p_2 são as probabilidades de uma observação pertencente a Π_1 ou a Π_2 , respectivamente.

O valor mínimo dessa quantidade, obtido pela escolha adequada das regiões R_1 e R_2 , é chamado de taxa ótima de erro (*Optimum Error Rate* - OER). A OER é dada por:

$$OER = p_1 \int_{R_2} f_1(\underline{X}) d\underline{X} + p_2 \int_{R_1} f_2(\underline{X}) d\underline{X} \quad (2.23)$$

onde as regiões são determinadas por:

$$R_1 = \frac{f_1(\underline{X})}{f_2(\underline{X})} \geq \frac{p_2}{p_1} \text{ e } R_2 = \frac{f_1(\underline{X})}{f_2(\underline{X})} < \frac{p_2}{p_1} \quad (2.24)$$

Assim a OER é a taxa de erro mínimo para a regra de classificação TPM. O desempenho da função de classificação da amostra pode, a princípio, ser avaliada pelo cálculo da taxa real de erro (*Actual Error Rate* - AER)

$$AER = p_1 \int_{\hat{R}_2} f_1(\underline{X}) d\underline{X} + p_2 \int_{\hat{R}_1} f_2(\underline{X}) d\underline{X} \quad (2.25)$$

onde: \hat{R}_1 e \hat{R}_2 representam as regiões de classificação determinadas pelos tamanhos das amostras n_1 e n_2 , respectivamente.

A AER indica o desempenho da função de classificação da amostra em amostras futuras. Da mesma forma que a taxa OER, não pode, em geral, ser calculada, porque depende das f.d.p's $f_1(\underline{X})$ e $f_2(\underline{X})$ que são desconhecidas. Entretanto, uma estimativa da quantidade ligada à taxa de erro real pode ser calculada, a qual será discutida na seqüência.

Há medidas de desempenho que não dependem das f.d.p's e podem ser calculadas por qualquer procedimento de classificação. Por exemplo, a medida, chamada de taxa de erro aparente (*Apparent Error Rate - APER*), é definida como a fração das observações usadas no treinamento das amostras que são incorretamente classificadas pela função de classificação amostral.

A APER pode ser facilmente calculada pela matriz de confusão, a qual mostra a classificação real versus a classificação prevista. Para n_1 observações de Π_1 e n_2 observações de Π_2 , a matriz de confusão tem a forma dada na tabela a seguir:

Tabela 1 – Tabela de classificação

		Classificação Prevista	
		Π_1	Π_2
Real	Classificação		
	Π_1	$n_{1/1}$	$n_{1/2}$
	Π_2	$n_{2/1}$	$n_{2/2}$

Fonte: *Applied multivariate statistical analysis*

onde:

- $n_{i/j}$ = números de observações de Π_i classificadas em Π_j e consideradas corretas se $i = j$ ou incorreta se $i \neq j$;
- $n_{1/1}$ = número de itens de Π_1 classificadas corretamente como item de Π_1 ;
- $n_{1/2}$ = número de itens de Π_1 classificados incorretamente como item de Π_2 ;
- $n_{2/2}$ = número de itens de Π_2 classificados corretamente como item de Π_2 ;
- $n_{2/1}$ = número de itens de Π_2 classificados incorretamente como item de Π_1 .

A taxa aparente de erro (*Apparent Error Date – APER*) é dada por:

$$APER = \frac{n_{1/2} + n_{2/1}}{n_1 + n_2} \quad (2.26)$$

Essa taxa deve ser interpretada como a proporção de observações incorretamente classificadas.

A APER é intuitivamente atraente e de cálculo fácil. Infelizmente, é tendenciosa para subestimar a AER, e o problema não desaparece a menos que os tamanhos das amostras n_1 e n_2 sejam grandes. Essencialmente, uma avaliação ótima

ocorre porque os dados usados para construir a função de classificação são também usados para sua avaliação.

A taxa de erro estimada pode ser contida, pois são melhores que a taxa de erro aparente, mantendo-se relativa facilidade de cálculo, e não requer a função de distribuição de probabilidade. Um procedimento é dividir a amostra total em uma parte da amostra para treinamento e outra parte para validação. A parte da amostra para um treinamento é usada para construir a função de classificação, e a parte para validação é usada para sua avaliação.

A taxa de erro é determinada pela proporção de classificação errada dentro da amostra considerada. Embora este método supere o problema da tendenciosidade por não usar os mesmos dados para construir e julgar a função de classificação, ele sofre de dois defeitos principais:

- é necessário uma grande amostra;
- a função de avaliação não é a função de interesse. E ainda, quase todos os dados devem ser usados para a construção da função de classificação, pois o valor da informação pode ser perdido.

Uma segunda abordagem que funciona muito bem é o procedimento proposto por Lachenbruch (1975).

2.4.2 Abordagem de *Lachenbruch*

O método de *Lachenbruch*, segundo Johnson & Wichern (1998), é uma abordagem estatística empregada para avaliar o desempenho da regra de reconhecimento de padrão e estimar a probabilidade de classificação correta e incorreta em cada grupo, ou seja, uma forma de avaliar a eficiência da regra de classificação.

O algoritmo do referido procedimento é:

1. Inicie com as observações do grupo Π_1 , omita uma observação desse grupo, e construa uma função de classificação usando as $(n_1 - 1)$ e n_2 observações;
2. Classifique a observação retirada, usando a função construída no passo 1;

3. Repita o passo 1 e 2 até que todas as observações de Π_1 sejam classificadas.

Seja $n_{1/2}$ o número de observações reconhecidas erroneamente nesse grupo.

Repita os passos de 1 a 3 para as n_2 observações do grupo Π_2 .

Seja $n_{2/1}$ o número de observações reconhecidas erroneamente nesse grupo.

Assim as estimativas das probabilidades de classificação incorreta são:

$$P(2/1) = \int_{R_2} f_1(\underline{X}) d\underline{X} = \frac{n_{2/1}}{n_1} \quad (2.27)$$

classificar em Π_2 , quando a observação pertence a Π_1 ,

$$P(1/2) = \int_{R_1} f_2(\underline{X}) d\underline{X} = \frac{n_{1/2}}{n_2} \quad (2.28)$$

classificar em Π_1 , quando a observação pertence a Π_2 ,

Desta forma a proporção esperada de erro (probabilidade estimada) é dada por:

$$\hat{E}(AER) = \frac{n_{1/2} + n_{2/1}}{n_1 + n_2} \quad (2.29)$$

2.5 Análise Fatorial

A Análise Fatorial foi introduzida por Spearman (1904), foi inicialmente usada nas áreas de psicologia e ciências sociais, na tentativa de identificar os fatores relacionados com a inteligência humana e ligá-los, de algum modo, à etnia. Devido a subjetividade e falta de unicidade de suas soluções, tem sido alvo de críticas ao longo dos anos (HILLS; KACHIGAN, 1977, 1991 apud MINGOTI, 2005). Porém, é uma das técnicas multivariadas mais conhecidas e tem sido muito utilizada na Química (OZERENKO; GYUL'MALIEV; GAGARIN, 2007), na Educação (MARQUES, 2010a), na Geologia (QUEIROZ et al., 2008), na Economia (ESQUARCINI, 2005), na Agricultura (CHIGUTI, 2005), na Engenharia de Produção (MÜLLER; CHAVES NETO, 2007), entre outras.

Segundo Hair *et al.* (2009), a Análise Fatorial é um método estatístico multivariado cujo propósito principal é definir a estrutura subjacente em uma matriz de

$$\underbrace{\underline{X} - \underline{\mu}}_{(p \times 1)} = \underbrace{\underline{L}}_{(p \times m)} \cdot \underbrace{\underline{F}}_{(m \times 1)} + \underbrace{\underline{\varepsilon}}_{(p \times 1)} \quad (2.31)$$

onde L é a matriz de ordem $p \times m$ contendo os pesos ℓ_{ij} denominados também como carregamento. Assim, ℓ_{ij} é o peso da i -ésima variável no j -ésimo fator, então a matriz L é chamada de matriz de cargas fatoriais. O i -ésimo fator específico ε_i é associado somente com a variável resposta X_i . Os p desvios $X_1 - \mu_1, X_2 - \mu_2, \dots, X_p - \mu_p$ são representados pelas $p+m$ variáveis aleatórias $F_1, F_2, \dots, F_m, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_p$, as quais não são observáveis.

Com tantas quantidades não observáveis e para tornar útil o modelo fatorial, algumas pressuposições sobre os vetores \underline{F} e $\underline{\varepsilon}$ devem ser feitas, tais como

$$E(\underline{F}) = \underline{0}_{m \times 1}, \quad \text{Cov}(\underline{F}) = E(\underline{F}\underline{F}') = \underline{I}_{m \times m} \quad (2.32)$$

$$E(\underline{\varepsilon}) = \underline{0}_{p \times 1}, \quad \text{Cov}(\underline{\varepsilon}) = E(\underline{\varepsilon}\underline{\varepsilon}') = \underline{\Psi}_{p \times p} = \begin{bmatrix} \psi_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \psi_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \psi_p \end{bmatrix} \quad (2.33)$$

e ainda \underline{F} e $\underline{\varepsilon}$ são independentes, então

$$\text{Cov}(\underline{\varepsilon}\underline{F}) = E(\underline{\varepsilon}\underline{F}') = \underline{0}_{p \times m} \quad (2.34)$$

Essa suposição e a relação em (2.33) constituem o modelo fatorial ortogonal. A estrutura de covariância para o modelo fatorial ortogonal, pode ser obtida da seguinte forma:

$$\Sigma = V(\underline{X}) = E[(\underline{X} - \underline{\mu})(\underline{X} - \underline{\mu})'] \quad (2.35)$$

porém de (2.33) obtém-se

$$\begin{aligned} \Sigma &= E[(\underline{L}\underline{F} + \underline{\varepsilon})(\underline{L}\underline{F} + \underline{\varepsilon})'] \\ \Sigma &= E[\underline{L}\underline{F}\underline{F}'\underline{L}' + \underline{\varepsilon}\underline{F}'\underline{L}' + \underline{L}\underline{F}\underline{\varepsilon}' + \underline{\varepsilon}\underline{\varepsilon}'] \\ \Sigma &= \underline{L}E(\underline{F}\underline{F}')\underline{L}' + E(\underline{\varepsilon}\underline{\varepsilon}')\underline{L}' + \underline{L}E(\underline{F}\underline{\varepsilon}') + E(\underline{\varepsilon}\underline{\varepsilon}') \end{aligned} \quad (2.36)$$

logo

$$\Sigma = \underline{L}\underline{L}' + \underline{\Psi} \quad (2.37)$$

Desta forma, a covariância entre as variáveis e os fatores é calculada por:

$$\begin{aligned}
\text{Cov}(\underline{X}, \underline{F}) &= E[(\underline{X} - \underline{\mu})(\underline{F} - E(\underline{F}))'] \\
\text{Cov}(\underline{X}, \underline{F}) &= E[(L\underline{F} + \underline{\varepsilon})\underline{F}'] \\
\text{Cov}(\underline{X}, \underline{F}) &= E[L\underline{F}\underline{F}' + \underline{\varepsilon}\underline{F}'] \\
\text{Cov}(\underline{X}, \underline{F}) &= LE(\underline{F}\underline{F}') + E(\underline{\varepsilon}\underline{F}')
\end{aligned} \tag{2.38}$$

ou seja,

$$\text{Cov}(\underline{X}, \underline{F}) = L \tag{2.39}$$

Sendo assim, por $\Sigma = LL' + \Psi$ obtém-se

$$V(X_i) = \ell_{i1}^2 + \dots + \ell_{im}^2 + \psi_i \tag{2.40}$$

$$\text{Cov}(X_i, X_k) = \ell_{i1}\ell_{k1} + \dots + \ell_{im}\ell_{km} \tag{2.41}$$

e de (2.39) resulta que a covariância entre a i -ésima variável e o j -ésimo fator é:

$$\text{Cov}(X_i, F_j) = \ell_{ij} \tag{2.42}$$

A parte da variância que a i -ésima variável contribui para os m fatores comuns é chamada de comunalidade, que é dada por:

$$h_i^2 = \ell_{i1}^2 + \dots + \ell_{im}^2 \tag{2.43}$$

e ψ_i são as variâncias específicas.

2.5.2 Método das Componentes Principais via Matriz de Covariância

Usando a decomposição espectral pode-se fatorar a matriz de covariância Σ

Sejam $(\lambda_i, \underline{e}_i)$ pares de autovalores autovetores da matriz Σ , com $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$

Então:

$$\Sigma = \lambda_1 \underline{e}_1 \underline{e}_1' + \lambda_2 \underline{e}_2 \underline{e}_2' + \dots + \lambda_p \underline{e}_p \underline{e}_p' \tag{2.44}$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} \underline{e}_1 & \sqrt{\lambda_2} \underline{e}_2 & \dots & \sqrt{\lambda_p} \underline{e}_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} \underline{e}_1 \\ \sqrt{\lambda_2} \underline{e}_2 \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_p} \underline{e}_p \end{bmatrix} \tag{2.45}$$

o qual ajusta a estrutura de covariância prescrita para a análise do modelo fatorial, tendo m fatores ($m=p$) e a variância específica $\psi_i = 0$ para todo $i=1,2,\dots,p$. A matriz de carga tem a j -ésima coluna dada por $\sqrt{\lambda_j} \cdot \underline{e}_j$. Desta maneira pode-se escrever,

$$\underline{\Sigma} = \underset{(p \times p)}{\underline{L}} \cdot \underset{(p \times p)}{\underline{L}'} + \underset{(p \times p)}{\underline{0}} = \underline{L}\underline{L}' \quad (2.46)$$

entretanto, nesse caso a representação de Σ é exata, isto é, o número de fatores comuns é igual ao número de variáveis. Na prática deve-se optar por modelos que expliquem a estrutura da covariância usando poucos fatores comuns. Para isso, eliminam-se os últimos $(p-m)$ autovalores, que pouco contribuem para Σ . Negligenciando esta contribuição, obtém a aproximação

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} \cdot \underline{e}_1 & & & \\ & \sqrt{\lambda_2} \cdot \underline{e}_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & \sqrt{\lambda_m} \cdot \underline{e}_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} \cdot \underline{e}_1 \\ \sqrt{\lambda_2} \cdot \underline{e}_2 \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_m} \cdot \underline{e}_m \end{bmatrix} = \underset{p \times m}{\underline{L}} \underset{m \times p}{\underline{L}'} \quad (2.47)$$

A representação anterior considera que os fatores específicos $\underline{\varepsilon}$ definidos no modelo fatorial ortogonal são de menor importância e podem ser ignorados na fatoração de Σ . Se os fatores específicos forem incluídos no modelo, a contribuição deles pode ser estimada tomando-se os elementos da diagonal de $\Sigma - \underline{L}\underline{L}'$, onde $\underline{L}\underline{L}'$ é dado em (2.47).

Considerando-se os fatores específicos, encontramos a aproximação

$$\Sigma = \underline{L}\underline{L}' + \Psi \quad (2.48)$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} \cdot \underline{e}_1 & & & \\ & \sqrt{\lambda_2} \cdot \underline{e}_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & \sqrt{\lambda_m} \cdot \underline{e}_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} \cdot \underline{e}_1 \\ \sqrt{\lambda_2} \cdot \underline{e}_2 \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_m} \cdot \underline{e}_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \psi_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \psi_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \psi_p \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

onde $\psi_i = \sigma_i^2 - \sum_{j=1}^m \ell_{ij}^2$, com $i=1,2,\dots,p$

A representação (2.49) quando aplicada a matriz de covariância amostral S ou a matriz de correlação amostral R é conhecida como a solução por componentes principais do modelo fatorial.

2.5.3 Método das Componentes Principais via Matriz de Correlação Amostral

Realizando a decomposição espectral da matriz de correlação R , obtêm os pares de autovalores autovetores $(\lambda_i, \underline{e}_i)$, onde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p$. Sejam $m < p$ o número de fatores comuns. Então a matriz estimada das cargas fatoriais $\hat{\ell}_{ij}$ é dada por:

$$\hat{L} = (\sqrt{\lambda_1} \cdot \underline{e}_1 \quad \sqrt{\lambda_2} \cdot \underline{e}_2 \quad \dots \quad \sqrt{\lambda_m} \cdot \underline{e}_m) \quad (2.50)$$

As variâncias específicas estimadas são os elementos da matriz diagonal $\underline{S} = \hat{L}\hat{L}'$, então

$$\hat{\Psi} = \begin{bmatrix} \hat{\psi}_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \hat{\psi}_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \hat{\psi}_p \end{bmatrix}, \text{ com } \psi_i = s_{ii}^2 - \sum_{j=1}^m \hat{\ell}_{ij}^2 \quad (2.51)$$

e as comunalidades são estimadas por:

$$\hat{h}_i^2 = \hat{\ell}_{i1}^2 + \dots + \hat{\ell}_{im}^2 \quad (2.52)$$

A matriz residual pode ser obtida pela aproximação de S pela solução por componentes principais, sendo calculada por:

$$S - (\hat{L}\hat{L}' + \hat{\Psi}) \quad (2.53)$$

onde os elementos da diagonal principal são zero, e os outros elementos também são pequenos, quando escolhe-se o número de fatores m apropriado. Analiticamente, tem-se a soma dos quadrados das entradas de

$$S - (\hat{L}\hat{L}' + \hat{\Psi}) \leq \hat{\lambda}_{m+1}^2 + \dots + \hat{\lambda}_p^2 \quad (2.54)$$

Conseqüentemente, um pequeno valor para o somatório dos quadrados dos autovalores pode ser negligenciado, implicando um pequeno valor para a soma dos quadrados dos erros da aproximação.

Geralmente a contribuição dos primeiros fatores comuns para a variância amostral das variáveis pode ser grandes. A contribuição para a variância amostral s_{ii} do primeiro fator comum é ℓ_{i1} , $i = 1, 2, \dots, p$. Para o primeiro fator, a soma dos quadrados das cargas fatoriais é:

$$\hat{\ell}_{11}^2 + \hat{\ell}_{21}^2 + \dots + \hat{\ell}_{p1}^2 = \left(\sqrt{\hat{\lambda}_1} \hat{e}_1 \right)' \left(\sqrt{\hat{\lambda}_1} \hat{e}_1 \right) = \hat{\lambda}_1 \quad (2.55)$$

Desde que \hat{e}_1 tenha tamanho unitário. Em geral a proporção da variância total amostral no j -ésimo fator é dada por:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\hat{\lambda}_j}{s_{11} + s_{22} + \dots + s_{pp}} & \text{para análise fatorial de S} \\ \frac{\hat{\lambda}_j}{p} & \text{para análise fatorial de R} \end{array} \right. \quad (2.56)$$

O critério dado (anterior) geralmente é usado para determinar o número de fatores comuns apropriado. Quanto maior o número de fatores, maior é a proporção da variância amostral explicada pelo modelo. Existem algumas maneiras de determinar o número de fatores adequados, pode-se destacar o critério de Kaiser e o Scree-plot.

2.5.4 Rotação Ortogonal de Fatores

Geralmente, a interpretação dos fatores obtidos na Análise Fatorial pode não ser uma tarefa fácil, devido a ocorrência de coeficientes \hat{l}_{ij} de grandeza numérica similar e não desprezível em fatores distintos. Quando isto ocorre, utiliza-se uma transformação ortogonal dos fatores originais, na tentativa de encontrar uma estrutura mais simples para ser interpretada. Para isso, utiliza-se uma matriz ortogonal T que pode ser obtida por diferentes critérios, sendo que após a rotação dos fatores, a estrutura de variância é preservada (RENCHER, 2002). A seguir são apresentados três critérios de rotação: varimax, orthomax e quartimax. Neste trabalho foram testados os três critérios, porém o critério varimax produziu melhores resultados, e é o único utilizado nas interpretações de cada Análise Fatorial aplicada ao conjunto de dados.

2.5.4.1 Critério varimax

De acordo com Mingoti (2005) o critério de rotação varimax é um método proposto por Kaiser (1958), cujo objetivo principal é a busca da matriz T , tendo como base encontrar para um determinado fator fixo, um grupo de variáveis Z_i altamente correlacionadas com o fator e outro grupo que tenha correlação desprezível ou moderada com o fator. Para cada fator fixo, a solução é obtida através da maximização da variação dos quadrados das cargas fatoriais originais das colunas da matriz \hat{L} .

Seja

$$V = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^m \left[\sum_{i=1}^p \tilde{l}_{ij}^4 - \frac{1}{p} \left(\sum_{i=1}^p \tilde{l}_{ij}^2 \right)^2 \right] \quad (2.57)$$

onde $\tilde{l}_{ij} = \frac{\hat{l}_{ij}}{\hat{h}_i}$, sendo \hat{h}_i a raiz quadrada da comunalidade da variável $Z_i, i = 1, 2, \dots, p$. O critério varimax seleciona os coeficientes \tilde{l}_{ij} que maximizam V . Os coeficientes finais da matriz transformada são obtidos por: $\hat{L}^* = \hat{L}T$. O critério varimax é um dos mais utilizados na prática e, em geral, produz resultados mais simples que outros métodos.

2.5.4.2 Critério quartimax

Esse método busca a simplificação das linhas de uma matriz de cargas fatoriais. Segundo Hair et al. (2009) o critério quartimax de rotação deixa muitas variáveis com cargas fatoriais altas em um único fator, não sendo bem sucedido na produção de estruturas mais simples.

Seja V_Q a quantidade definida por:

$$V_Q = \frac{1}{pm} \left[\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^p \hat{l}_{ij}^{*4} - \frac{1}{pm} \left(\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^p \hat{l}_{ij}^{*2} \right)^2 \right] \quad (2.58)$$

onde \hat{l}_{ij}^* é o coeficiente da i -ésima variável no j -ésimo fator após a rotação. O critério quartimax seleciona os coeficientes \hat{l}_{ij}^* que maximizam a quantidade V_Q (MINGOTI, 2005).

2.5.4.3 Critério orthomax

É considerado uma média ponderada dos métodos varimax e quartimax (MINGOTI, 2005). Considere

$$V_M = \sum_{j=1}^m \left[\sum_{i=1}^p \hat{I}_{ij}^{*4} - \frac{\gamma}{p} \left(\sum_{i=1}^m \hat{I}_{ij}^{*2} \right)^2 \right] \quad (2.59)$$

onde \hat{I}_{ij}^* é o coeficiente da i -ésima variável no j -ésimo fator após a rotação, $0 \leq \gamma \leq 1$.

O critério orthomax seleciona os coeficientes \hat{I}_{ij}^* que maximizam a quantidade V_M .

Para $\gamma = 1$, este critério reproduz o critério varimax sem o escalonamento das cargas fatoriais pelas comunalidades e, para $\gamma = 0$, ele se reduz ao método quartimax.

2.5.5 Determinação dos Escores Fatoriais

Após a identificação e interpretação dos fatores L_j , $j=1,2,\dots,m$ relacionados com as variáveis Z_i , $i=1,2,\dots,p$ (i -ésima variável padronizada pela média e desvio padrão), é necessário calcular os escores para cada elemento amostral, de modo a utilizar esses valores para outras análises de interesse. Para cada elemento amostral k , $k=1,2,\dots,n$, o seu escore no fator L_j é calculado por:

$$\hat{F}_{jk} = w_{j1}Z_{1k} + w_{j2}Z_{2k} + \dots + w_{jp}Z_{pk} \quad (2.60)$$

onde Z_{ik} , são valores observados das variáveis padronizadas Z_i para o k -ésimo elemento amostral e w_{ji} , $i=1,2,\dots,p$, são os pesos de ponderação de cada variável Z_i no fator L_j . De acordo com Mingoti (2005), existem três métodos para a determinação dos coeficientes w_{ji} :

- ✓ método dos mínimos quadrados ponderados;
- ✓ método de regressão;
- ✓ método ad hoc.

Neste trabalho foram testados os três métodos, porém foi implementado apenas o método dos mínimos quadrados ponderados, uma vez que este apresentou um melhor resultado.

2.5.5.1 Método dos mínimos quadrados ponderados

O modelo fatorial assemelha-se a um modelo de regressão linear múltipla. Desta maneira pode-se estimar o vetor \underline{F} através do método dos mínimos quadrados ponderados usando-se as matrizes \hat{L} e $\hat{\Psi}$ estimadas pelo método da máxima verossimilhança. Sendo assim, \hat{F}_j pode ser obtido por:

$$\hat{F}_{jk} = (\hat{L}'\hat{\Psi}^{-1}\hat{L})^{-1}\hat{L}'\hat{\Psi}^{-1}Z_k = WZ_k \quad (2.61)$$

onde $Z_k = (Z_{1k} \ Z_{2k} \ \dots \ Z_{pk})'$ é o vetor de observações do k-ésimo elemento amostral padronizado e $W_{m \times p}$ é a matriz de ponderação que gera os coeficientes w_{ji}

Neste trabalho, as matrizes \hat{L} e $\hat{\Psi}$ foram estimadas pelo método das componentes principais. Neste caso, Johnson e Wichern (2007) sugere que a estimação dos escores seja feita usando o método dos mínimos quadrados ordinários, desde que os resíduos ε tenham a mesma variância, o que nem sempre ocorre (MINGOTI, 2005).

Desta forma, \hat{F}_j é estimado por:

$$\hat{F}_{jk} = (\hat{L}'\hat{L})^{-1}\hat{L}'Z_k = WZ_k \quad (2.62)$$

Os escores fatoriais finais ponderados servem para criar um indicador a partir de todos os escores fatoriais obtidos na Análise Fatorial. De acordo com Furtado et al. (2003) os escores fatoriais finais ponderados podem ser calculados da seguinte maneira:

$$\hat{E} = \frac{\sum_{i=1}^m \hat{\lambda}_i \hat{F}_i}{\sum_{i=1}^m \hat{\lambda}_i} \quad (2.63)$$

onde \hat{F}_i são os escores fatoriais do i-ésimo e m é o número de fatores extraídos.

3 MATERIAL E MÉTODO

3.1 Material

3.1.1 Histórico

A Usina de Açúcar Santa Terezinha Ltda. foi constituída no início dos anos 60. Iniciou-se com a transformação de um pequeno engenho de aguardente em fábrica de açúcar.

Nos anos de 1979 e 1981, a empresa utilizou de financiamentos através do Programa Nacional do Álcool – PROÁLCOOL para ampliação do seu parque industrial. Este programa auxiliou a implantação de muitas destilarias e cooperativas de produção de etanol pelo país. No entanto, o Programa entrou em crise, onde as empresas que estavam desestruturadas tiveram que ser vendidas ou fechadas. Neste contexto, o Grupo inicia sua fase de expansão, adquirindo no ano de 1987 a unidade de Paranacity, 1989 a unidade de Tapejara e a Unidade de Ivaté, no ano de 1993. Em todas foi necessária a reforma do seu complexo industrial, para que pudessem operar novamente, bem como realizar o plantio da cana necessária, tendo implantado a fábrica de açúcar no período de 1994/1996.

Com o mercado cada vez mais exigente e objetivando aumentar a competitividade, a empresa construiu em Maringá o Terminal Logístico, tendo iniciado suas operações em 2002, possuindo armazéns graneleiros para açúcar e demais grãos, um terminal de calcário, misturadora de adubos e tanques para estocagem de líquidos (inflamáveis e outros). Fazendo parte do seu complexo logístico, construiu também em Paranaguá, um terminal rodoferroviário de fertilizantes, que iniciou suas atividades em 2003.

No mesmo ano, iniciou-se o projeto de implantação de uma nova unidade na cidade de Terra Rica, por meio de aquisição da Fazenda São José, localizada naquele município, tendo iniciado o plantio de cana para mudas no mês de janeiro de 2004, efetuando sua primeira safra a partir de maio de 2007.

Dando continuidade ao processo de expansão do Grupo e aproveitando o momento favorável de crescimento do setor sucroalcooleiro, em 2006 a Usina Santa

Terezinha adquire a Destilaria de Álcool da Cocamar, localizada na cidade de São Tomé, fundando uma nova empresa, a Usina São Tomé S/A e, em 2008, arrenda as instalações industriais da Cocarol, localizada na cidade de Rondon, que também passa a fazer parte da Usina São Tomé S/A. No ano de 2009 assume também, por meio de arrendamento, as instalações industriais da Usaciga, localizada em Cidade Gaúcha, totalizando assim 8 unidades no Grupo. Posteriormente, no ano de 2015, o grupo adquire a Unidade de Umuarama e Goioerê em 2016.

Toda essa expansão e sucesso provêm de uma direção profissional e qualificada, composta pelos pioneiros e sucessores da família Meneguetti, juntamente com seu quadro de colaboradores.

3.1.2 Usina de Açúcar Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha

A Usina Santa Terezinha - Unidade de Cidade Gaúcha foi adquirida pelo grupo no ano de 2010. Sua atividade é voltada para a fabricação de açúcar VHP, totalizando 75% da sua produção. Além da fabricação de açúcar VHP, a unidade produz etanol hidratado e energia elétrica, que é utilizada para seu consumo interno sendo seu excedente vendido para a concessionária.

Espera-se desta unidade para o ano de 2018 uma moagem de 1.600.284 toneladas de cana-de-açúcar, uma produção de 3.400.276 sacas de açúcar VHP, 31.092.000 litros de etanol hidratado e venda 64.500.000 kW de energia elétrica para a concessionária estatal local.

3.1.3 Coleta de Dados

Os dados utilizados para a elaboração deste trabalho foram coletados durante as safras de 2016 e 2017 na Usina Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha. A coleta dos dados teve início em 16 de março de 2016 e término em 16 de dezembro de 2017, somando 640 dias corridos. Os dados utilizados no estudo foram relacionados conforme o período vigente de cada safra, totalizando 543 dias, porém sendo filtrados apenas os dias efetivos de produção, ou seja, dias em que a planta industrial estava operando em condições normais, em um total de 299 dias efetivos.

Os dados do processo de fermentação utilizados neste estudo foram:

- Mosto: Brix, ART, pureza e acidez;
- mel final: Brix, pureza e acidez;
- vinho bruto: quantidade de fermento, bastonetes, floculação, brotamento, viabilidade e teor alcoólico;
- vinho deslevedurado: Glicerol e ARRT;
- *software* de controle: Vazão do mosto e tempo de fermentação.

Os parâmetros utilizados para a obtenção dos resultados analíticos seguem as normas internas vigentes, baseadas nos procedimentos determinados por instituições do ramo, como por exemplo o CTC (Centro de Tecnologia Canavieira). A determinação da frequência analítica e formação das amostras é delimitada de acordo com a necessidade atual do processo fermentativo, podendo ser alterada durante esse processo, visando dar ênfase aos pontos em deficiência ou que estão sob estudo de viabilidade, como testes de produtos químicos, por exemplo.

3.1.4 Processo Fermentativo

O processo de fermentação alcoólica se inicia com a preparação do mosto, que na empresa em questão trata-se de uma mistura açucarada constituída apenas de mel esgotado (mel final) e água. Esse mosto é utilizado na alimentação do levedo que é adicionado a dorna, recebendo nome de vinho bruto (mistura do levedo com o mosto). Ao término do processo de fermentação o vinho bruto é encaminhado às centrífugas, onde será separado o levedo, que após receber um tratamento retornará novamente ao processo, do vinho, recebendo o nome de vinho deslevedurado. Este vinho é destinado à destilação, onde será retirado o etanol.

3.1.4.1 Mel final

O mel final utilizado na preparação do mosto é proveniente da fábrica de açúcar, e é obtido na centrifugação de massa para a fabricação do açúcar, constituído em maior proporção por açúcares solúveis, chamados de açúcares redutores (glicose e frutose). O mel final é a matéria prima utilizada no processo de fermentação.

Para as análises referente ao mel final as coletas foram realizadas a cada duas horas, guardadas sob condições adequadas de modo que não houvesse alteração na amostra e as análises realizadas uma vez por dia.

Para a determinação da acidez utilizou-se o método de titulação, onde o mel final é diluído em água e, através da aplicação de hidróxido de sódio 0,1M alterado seu pH para 8,5 em seguida, utiliza-se o volume de NaOH 0,1 M consumido para a alteração do pH para aplicação na equação para a determinação da acidez.

A concentração de sólidos solúveis presente no mel (°Brix) foi determinada por refratômetro, trata-se de um instrumento óptico utilizado para medir o índice de refração de uma substância, de forma que o mesmo possui relação direta com a Pureza, já que a mesma é obtida através do quociente de Pol e °Brix.

3.1.4.2 Mosto

O processo de fermentação ocorre dentro das dornas de fermentação, se iniciando com a adição do mosto ao levedo tratado de forma constante e controlada. A junção do levedo com o mosto recebe o nome de vinho bruto.

Dentre os fatores analisados referentes ao mosto, o único que se pode ter controle é o °Brix do mosto, sendo este padronizado em valores próximos a 28 °Brix e sua vazão. A padronização do °Brix é obtida através da adição de água para que a concentração do mel diminua de aproximadamente 85° Brix para 28 °Brix, já a vazão do mosto é realizada de forma automatizada, sendo que esta varia de acordo com a demanda do processo.

Os valores referentes a Pureza, Açúcares Redutores Totais e Acidez são parâmetros não alteráveis, pois são características presentes na matéria prima recebida para a fermentação.

Para as análises de °Brix do mosto foram realizadas coletas de 2 em 2 horas e este volume foi composto para a realização das análises de ART, pureza e acidez a cada 8 horas.

Para as análises de °Brix, Pol e Pureza do mosto utilizou-se a mesma metodologia do mel final e para a determinação do ART utilizou-se a metodologia de titulação pelo método de *Fehling*.

Em relação a vazão do mosto, estes valores são médias diárias retiradas dos registros do *software* de controle do processo.

3.1.4.3 Levedo tratado

O levedo tratado é proveniente das cubas, recebe este nome pois antes de iniciar a operação de fermentação, recebe um tratamento químico para garantir condições adequadas para o processo.

Ao término do processo fermentativo, o vinho bruto é encaminhado para o processo de centrifugação, cujo objetivo é separar o levedo do vinho, que nesta etapa, já sem o levedo passa a receber o nome de vinho centrifugado ou deslevedurado.

O levedo é encaminhado à cuba, onde irá ser tratado para retornar a dorna e iniciar um novo processo de fermentação, já o vinho deslevedurado será encaminhado ao processo de destilação, onde será por meio de ebulição separado o etanol do restante do vinho, chamado de vinhaça.

Antes de se iniciar um novo processo fermentativo foram realizadas análises microbiológicas do levedo, três vezes ao dia para contagem de bastonetes, brotamento e viabilidade da levedura. Para a constatação de floculação o método utilizado foi o de decantação, trata-se de análises primordiais para se garantir uma boa fermentação na próxima batelada.

3.1.4.4 Vinho bruto

Ao término do processo fermentativo, antes da dorna seguir para o processo de centrifugação foram analisados a quantidade de fermento presente na dorna, o percentual de álcool produzido e o tempo da operação, chamado de tempo de fermentação.

A metodologia utilizada para análise do percentual de fermento contido na dorna foi o método de centrifugação, através da leitura do volume decantado. O percentual de álcool produzido na dorna foi determinado por microdestilação sendo a leitura realizada no densímetro. O tempo de operação foi registrado pelo *software* de controle do processo.

3.1.4.5 Vinho deslevedurado

Foram analisados glicerol e ARRT, sendo este vinho coletado a cada duas horas, guardado sob condição adequada de modo que não houvesse alteração na amostra e a análise realizada uma vez por dia.

Para a mensuração de ARRT utilizou-se a metodologia de titulação pelo método de Fehling e para análise de glicerol a espectrofotometria.

3.1.5 Fluxograma do Processo de Fermentação

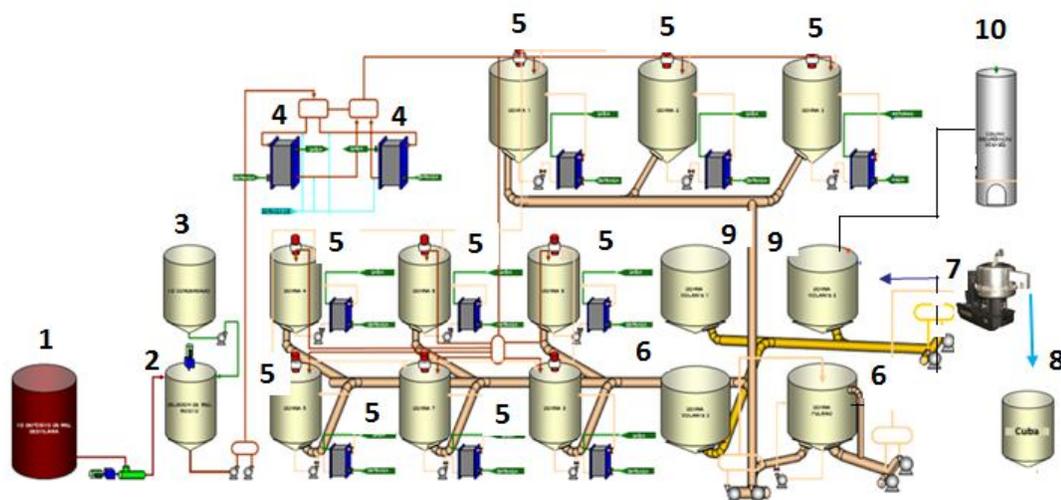
A figura 1 ilustra o processo de fermentação da Usina Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha.

Todo o mel final oriundo da fábrica de açúcar é encaminhado para o tanque de mel final (1), este é bombeado para a dorna diluidora (2) onde é diluído com água do tanque de água tratada (3) até se obter o °Brix desejado, denominado mosto. O mosto é bombeado para os trocadores de calor (4) para diminuir a temperatura a valores aproximados de 28°C e então segue para a alimentação do levedo nas dornas (5).

Ao término da alimentação, o processo de fermentação continua por mais três ou quatro horas até que não haja mais consumo de açúcar pelas leveduras, em seguida todo o conteúdo da dorna (5) denominado de vinho bruto é enviado para a dorna pulmão (6), que irá ser encaminhado para as centrífugas (7) onde será separado o fermento do vinho deslevedurado.

O levedo proveniente da centrífuga (7) segue para as cubas (8) onde será tratado e preparado para ser novamente reencaminhado para as dornas (5) e iniciar um novo processo de fermentação, já o vinho deslevedurado é direcionado à dorna volante (9) e então alimentar as colunas de destilação (10).

Figura 1 – Fluxograma do processo de fermentação



Fonte: Autoria própria.

3.2 Método

Na Análise Fatorial foi utilizada uma matriz de 299 linhas \times 16 variáveis. Neste caso a análise fatorial foi aplicada com o objetivo de eliminar variáveis com comunalidades baixas (abaixo de 0,7). Na Análise Fatorial interpretada foram consideradas comunalidades acima de 0,5. Para determinação do número de fatores foi utilizado o critério de Kaiser (número de fatores igual ao número de autovalores maiores que a unidade). O critério de rotação varimax foi utilizado, para facilitar a interpretação dos fatores, sendo que nesta Análise Fatorial, variáveis com comunalidades abaixo de 0,5 não foram incluídas no modelo. Outros critérios foram utilizados, porém não produziram fatores mais simples que o critério varimax. Quanto aos escores, eles foram obtidos utilizando-se os mínimos quadrados ponderados. Todos os cálculos foram realizados no programa *Statgraphics*.

3.2.1 Aplicação do Método de Reconhecimento e Classificação de Padrões

A classificação do ARRT foi dividida em dois conjuntos sendo um conjunto com ARRT menor que 0.7 e o outro conjunto com o ARRT maior que 0.7. O grupo zero (0) para ARRT menor que 0.7 e o grupo um (1) para ARRT maior que 0.7.

3.2.1.1 Regressão logística

A técnica de Regressão Logística, primeiramente aplica uma separação do bando de dados em uma matriz contendo as variáveis independentes do modelo e um vetor resposta que contém as variáveis independentes do modelo. Desta forma os parâmetros $\underline{\beta}' = [\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p]$ foram estimados, com a utilização do método da máxima verossimilhança, num contexto de mínimos quadrados não-lineares, aplicando-se o Algoritmo de Quase-Newton.

Foram gerados n modelos com ($n-1$ amostras), para testar e validar a técnica, esse processo é conhecido como método de Lachenbruch (*leave-one-out*). Ao final do processo é criado um modelo com as n amostras, e é esse modelo que é utilizado como modelo final para o Reconhecimento e Classificação de Padrões.

No modelo de Regressão Logística é necessário a utilização de uma faixa de corte com valores no intervalo $[0,1]$, que serve para determinar a classificação de uma nova amostra, foram testadas várias faixas de corte dentro do intervalo $[0,1]$, porém no sistema adotou-se como valor da faixa que apresentou a melhor classificação para o modelo.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A fim de analisar a influência das variáveis do processo de fermentação, inicialmente foi aplicado o método de Análise Fatorial com o intuito de agrupar as variáveis em fatores. Primeiramente foram aplicados dois testes (Teste de Esfericidade de *Bartlett* e *MSA de Kaiser-Meyer-Olkin*) os quais indicam se a Análise Fatorial é adequada ao conjunto de dados. O resultado do teste é dado na Tabela 2.

Tabela 2 - Resultados dos testes de esfericidade e KMO

Análise Fatorial	p-valor	MSA (KMO)	Número de Fatores	Variância Aplicada
1	≈ 0	0,81	5	72,163%

Fonte: Autoria própria.

Pode-se observar que os dois testes (Teste de Esfericidade de *Bartlett* e *MSA de Kaiser-Meyer-Olkin*) indicam a Análise Fatorial adequada ao conjunto de dados em cada Análise Fatorial feita. O valor de p no Teste de Esfericidade de *Bartlett* indica que a hipótese nula deve ser rejeitada, ou seja, a matriz de correlações pode ser considerada diferente da matriz identidade.

O objetivo da aplicação da análise fatorial é obter um pequeno número de fatores que respondem pela maior parte da variabilidade nas 16 variáveis. Como pode ser observado no quadro 2, os 5 fatores foram extraídos pois possuem autovalores maiores ou iguais a 1,0. Juntos eles respondem por 72,16% da variabilidade nos dados originais.

Quadro 2 – Análise Fatorial

(continua)

Fator	Autovalor	Variância aplicada(%)	Variância acumulada(%)
1	3,8901	24,313	24,313
2	3,19716	19,982	44,295
3	1,846	11,538	55,833
4	1,46362	9,148	64,981
5	1,14923	7,183	72,163
6	0,809765	5,061	77,224
7	0,60663	3,791	81,016

Quadro 2 – Análise Fatorial

(conclusão)

8	0,596086	3,726	84,741
9	0,541555	3,385	88,126
10	0,455565	2,847	90,973
11	0,429096	2,682	93,655
12	0,319132	1,995	95,650
13	0,240945	1,506	97,156
14	0,2285	1,428	98,584
15	0,145595	0,910	99,494
16	0,0810157	0,506	100,000

Fonte: Autoria própria.

A partir da aplicação da Análise Fatorial, o conjunto de 16 variáveis foram transformados em 5 fatores, utilizando a rotação *Varimax*, conforme descritos na Tabela 3.

Tabela 3 – Resultado da análise fatorial

	Fator 1	Fator 2	Fator 3	Fator 4	Fator 5
Brix do mosto	-0,25	0,21	0,85	0,08	-0,21
ART do mosto	-0,48	0,29	0,68	-0,01	-0,07
Pureza do mosto	0,86	0,28	0,08	0,03	0,16
Acidez do mosto	-0,8	0,22	0,2	0,03	-0,02
Teor alcoólico	0,25	0,42	0,35	0,62	-0,17
% fermento	-0,11	0,31	0,23	-0,62	-0,18
Bastonetes	0,16	-0,33	0,02	-0,007	0,73
Floculação	0,03	-0,76	0,02	0,008	0,15
Brotamento	-0,03	0,74	0,25	0,05	0,18
Viabilidade	0,11	-0,29	0,16	-0,21	-0,77
Tempo de fermentação	-0,02	-0,01	0,17	0,77	0,17
Vazão de mosto	0,34	0,14	-0,76	-0,05	-0,11
Pureza do mel final	0,85	0,28	-0,03	0,13	0,11
Acidez do mel final	-0,78	0,19	0,05	-0,11	0,06
Brix do mel final	-0,71	0,19	0,14	0,06	0,1
Glicerol	-0,04	0,47	-0,02	0,61	-0,11

Fonte: Autoria própria.

Os 5 fatores obtidos pela Análise Fatorial, feita pelo método das componentes principais e usando o critério de rotação *varimax*; a partir dos 5 fatores gerados, foi aplicado um modelo de regressão logística utilizando os 5 fatores como variáveis independentes e como variável dependente do resultado do ARRT, sendo que se o

ARRT for maior que 0,7, ele é classificado como 1 e com ARRT menor que 0,7, ele é classificado como 0. O resultado do modelo de regressão logística é descrito na tabela 4.

Tabela 4 – Análise de variância da regressão logística

Fonte de Variação	Desvio	Grau de Liberdade	P- Valor
Modelo	71,458	5	0
Resíduo	273,838	293	0,7829
Total (corr.)	345,296	298	

Fonte: Autoria própria.

Tabela 5 - Teste qui-quadrado dos fatores

Fator	Qui-quadrado	Grau de liberdade	P- Valor
Fator_1	22,6736	1	0
Fator_2	0,300154	1	0,5838
Fator_3	11,8516	1	0,0006
Fator_4	43,7053	1	0
Fator_5	0,0473339	1	0,8278

Fonte: Autoria própria.

O resultado da tabela 4, onde o p-valor do modelo é menor que 0.05, desta forma indica uma adaptação de um modelo de regressão logística para descrever a relação entre o ARRT e as 5 variáveis independentes. A equação do modelo ajustado é

$$f(y) = 1 / (1 + e^{-y})$$

onde $Y = 1,35718 - 0,731824 * FATOR_1 + 0,0899839 * FATOR_2 + 0,46618 * FATOR_3 + 1,00947 * FATOR_4 - 0,0352835 * FATOR_5$

Como o p-valor para o modelo na tabela 4, a análise de variância é menor que 0,05, existe uma relação estatisticamente significativa entre as variáveis no nível de confiança de 95,0%. Além disso, o p-valor para os resíduos é maior ou igual a 0,05, indicando que o modelo não é significativamente pior do que o melhor modelo possível para esses dados no nível de confiança de 95,0% ou superior.

Ao determinar se o modelo pode ser simplificado, observe na tabela 5 que o p-valor mais alto para os testes de razão de verossimilhança é 0,8278, pertencendo a Fator_5 e o Fator_2 tem um p-valor de 0,5838. Como o p-valor é maior ou igual a 0,05, esse termo não é estatisticamente significativo no nível de confiança de 95,0% ou

superior. Conseqüentemente, você deve considerar remover Fator_5 e o Fator_2 do modelo.

Assim foi aplicado novamente o modelo de regressão logística descartando os Fator_2 e Fator_5. Os dados do novo modelo são dados abaixo:

Tabela 6 – Análise de variância

Fonte de variação	Desvio	Grau de liberdade	P- Valor
Modelo	71,0907	3	0
Resíduo	274,206	295	0,8022
Total (corr.)	345,296	298	

Fonte: Autoria própria.

Porcentagem do desvio explicado pelo modelo = 20.5883

Porcentagem ajustada= 18.2715

Tabela 7 – Teste de razão de verossimilhança

Fator	Qui- quadrado	Grau de liberdade	P- Valor
Fator_1	22,7204	1	0
Fator_3	12,1583	1	0,0005
Fator_4	43,9552	1	0

Fonte: Autoria própria.

O resultado das tabelas 6 e 7 indicam uma adaptação de um modelo de regressão logística para descrever a relação entre ARRT e 3 variável (s) independente (s). A equação do modelo ajustado é

$$\text{ARRT} = \exp(y) / (1 + \exp(y))$$

Onde

$$Y = 1,35791 - 0,717639 * \text{FATOR}_1 + 0,472157 * \text{FATOR}_3 + 1,01108 * \text{FATOR}_4$$

Como o p-valor para o modelo na tabela 6 Análise de Variância é menor que 0,05, existe uma relação estatisticamente significativa entre as variáveis no nível de confiança de 95,0%. Além disso, o p-valor para os resíduos é maior ou igual a 0,05, indicando que o modelo não é significativamente pior do que o melhor modelo possível para esses dados no nível de confiança de 95,0% ou superior.

Como o p-valor é menor que 0,05 para todas as variáveis independentes, todos os termos são estatisticamente significativo no nível de confiança de 95,0%. Consequentemente, todas as variáveis independentes do modelo são significativas.

4.1 Fatores

Os fatores para composição da equação de modelo ajustado foram determinados conforme a resultante do modelo de regressão logística classificados como 0, pois compõem valores de ARRT menores que 0,7.

O fator 1, composto pelas variáveis pureza do mosto e pureza do mel final de ordem positiva e pelas variáveis acidez do mosto, acidez do mel final e °Brix do mel final de ordem negativa indicam que, para a normalização da equação de modelo ajustado, os valores de ordem positiva necessitam ser mais distantes de zero proporcionalmente aos valores de ordem negativa.

No fator 3, composto pelas variáveis °Brix do mosto e ART do mosto de ordem positiva e pela variável vazão do mosto de ordem negativa indicam que, para a normalização da equação de modelo ajustado, os valores de ordem positiva necessitam ser mais próximos de zero proporcionalmente aos valores de ordem negativa.

E no fator 4, composto pelas variáveis teor alcoólico, tempo de fermentação e glicerol de ordem positiva e pela variável percentual de fermento na dorna de ordem negativa indicam que, para a normalização da equação de modelo ajustado, os valores de ordem positiva necessitam ser mais próximos de zero proporcionalmente aos valores de ordem negativa.

4.1.1 Fator 1 – Qualidade do Mosto

Com uma variância explicada de 24,313%, demonstrado no quadro 2, este fator é composto pelas seguintes variáveis:

1. pureza do Mosto (Comunalidade 0,86 e Variância Específica 0,1377);
2. acidez do Mosto (Comunalidade 0,75 e Variância Específica 0,2490);

3. pureza do Mel Final (Comunalidade 0,83 e Variância Específica 0,1627);
4. acidez do Mel Final (Comunalidade 0,68 e Variância Específica 0,3173);
5. °Brix do Mel Final (Comunalidade 0,58 e Variância Específica 0,4194).

Na empresa estudada, a fermentação é constituída exclusivamente por mel final, que segundo Andrietta (2013), se comparado com caldo de cana-de-açúcar, possui menor quantidade de Açúcar Redutor Total (ART) e uma maior acidez sulfúrica.

Como o mel final é matéria prima principal na preparação do mosto, que tem como composição mel final e água, a elevada acidez do mel final resulta em um mosto de maior acidez. Tognete (2017), acrescenta que há relatos de redução na velocidade de fermentação, perda de rendimento e em alguns casos floculação em fermentações ocorridas a partir da utilização de mel esgotado, fato este que pode ser explicado através da elevação da acidez no vinho fermentado.

Um dos principais problemas das fermentações constituídas por mosto a base de mel final esgotado está, segundo Andrietta (2013), na presença de grande quantidade de substâncias com capacidade de inibir o desenvolvimento normal da célula de levedura, sendo que uma boa parte delas é gerada na fábrica de açúcar por destruição térmica dos açúcares redutores. Este fato se agrava ainda mais em tempos de preço alto do açúcar no mercado, pois as fábricas esgotam muito mais açúcar do mel e a unidade de fermentação passa a ser tratada com uma estação de tratamento de resíduo da fábrica de açúcar, processando tudo aquilo que não pode ser recuperado em açúcar. É previsível que o desempenho de uma unidade operando com essa matéria-prima seja diferente daquela obtida por uma que processa caldo de cana ou mel menos esgotado.

Andrietta (2013) comparou dois processos fermentativos, um deles utilizando mel pouco esgotado, ou seja, com pureza na faixa de 65% e acidez sulfúrica de 5,58g.L⁻¹ e o outro utilizando mel final esgotado com pureza de 52% e acidez sulfúrica de 10,86 g/L e, dentre os vários resultados obtidos, pode constatar uma produção de 0,4605 gramas de etanol para cada grama de ART na fermentação com o mel de maior pureza e menor acidez, enquanto para a fermentação de mel com menor pureza e maior acidez, esse valor foi de 0,4274 gramas de etanol para cada grama de ART. Pode-se também constatar que na fermentação com mel mais esgotado, houve uma maior produção de glicerol.

O estudo indicou uma relação entre as variáveis com relação a qualidade do mosto, onde verificou-se que quando há maiores níveis de pureza no mel final e mosto

o Brix do mel final é menor, contribuindo para menores sobras de ARRT nas dornas de fermentação. Esta relação se aplica pois o resultado da pureza é obtido através de cálculo, onde divide-se os valores analisados de pol (sacarose) pelos valores analisados de Brix (sólidos solúveis) resultando em um valor em percentual de volume de sacarose presente na solução. Com isso, pode-se afirmar que, segundo o estudo, quando os valores de Brix são menores os valores de pureza são inversamente proporcionais salientando a relação entre si. Diante dos resultados analisados no estudo, verifica-se que os maiores níveis de pureza indicam maiores taxas de conversão de açúcar em etanol na dorna de fermentação.

Também pode-se verificar no estudo que elevados níveis de acidez no mel final e mosto proporcionam maiores sobras de ARRT nas dornas de fermentação.

Relacionando os dados teóricos do estudo de Andrietta (2013) com os dados obtidos nas safras 2016 na Usina Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha temos os valores dispostos na tabela 8:

Tabela 8 – Comparativo entre mel final (esgotado) proposto por Andrietta (2013) e o utilizado na Usina

	Mel final	
	Pureza (%)	Acidez g/L
Andrietta	52	10,86
Usina	53,99	5,94

Fonte: Autoria própria.

Observa-se na tabela acima que o valor obtido nas safras 2016 e 2017 na Usina Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha com relação a pureza são muito próximos ao encontrado por Andrietta (2013), porém o valor referente a acidez sulfúrica é inferior.

No controle atual não há possibilidade instalada na planta para interferência na acidez do mel, com isso os esforços da equipe de engenharia da unidade foram voltados para ações que reduzissem a acidez sulfúrica pós formação do mosto. Foi realizado um levantamento onde foram elencados pontos que poderiam ter interferência direta na acidez do mosto, com isso atuou-se em alguns parâmetros como: melhoria no tratamento da água de diluição do mosto, controle do tempo de retenção no tanque diluidor de mel, equalização da distribuição de mel e eliminação de pontos mortos no bombeamento de mosto.

O estudo realizado neste trabalho indicou que pureza e a acidez do mel e mosto interferem diretamente para a sobra de ARRT na dorna, com isso os esforços

desprendidos pela equipe de engenharia da unidade tiveram ganhos diretos para contribuição na redução das sobras de ARRT pois com os valores da acidez do mel sendo inalterados sem o devido tratamento na formação do mosto esta sobra poderia ter sido maior causando uma menor conversão de açúcar em etanol.

4.1.2 Fator 3 – Qualidade da Alimentação na Dorna

Com uma variância explicada de 11,53%, demonstrado no quadro 2, este fator é composto pelas seguintes variáveis:

1. °Brix do Mosto (Comunalidade 0.88 e Variância Específica 0.1126);
2. ART do Mosto (Comunalidade 0.80 e Variância Específica 0.1959);
3. vazão do Mosto (Comunalidade 0.74 e Variância Específica 0.2584).

A preparação do mosto é de fundamental importância para se obter bom rendimento na fermentação. Para Vasconcelos (2010) mostos com baixas concentrações de açúcares aceleram o processo de fermentação, porém ocorre uma menor conversão de açúcar em etanol, favorecem o crescimento celular (brotamento), aumentam o consumo de vapor e água e produzem uma maior quantidade de vinhaça.

Em contrapartida, mostos com altas concentrações de açúcares conduzem a fermentações incompletas, demoradas, com perdas de açúcares, favorecendo incrustações nos aparelhos de destilação, tendo como consequência a queda de eficiência da destilação.

Gomes (2011) acrescenta que o controle da adição de açúcares é fundamental no desempenho da fermentação, pois tanto os açúcares redutores totais (ART) como o etanol, em determinadas concentrações, exercem efeito de inibição sobre o metabolismo das leveduras.

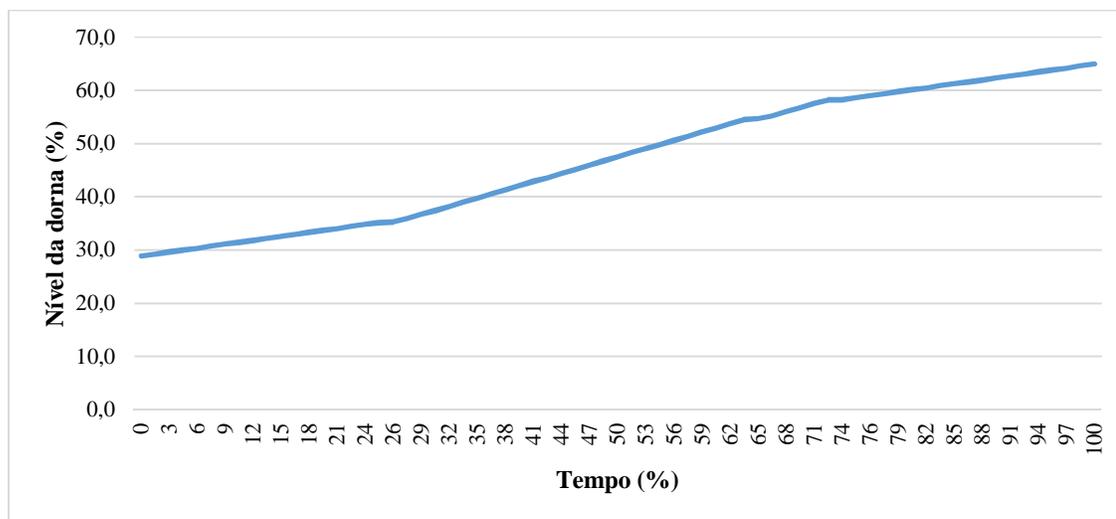
Este mesmo autor afirma que o aumento das concentrações de açúcares no mosto provoca um aumento nos açúcares residuais e a produtividade em etanol e a eficiência fermentativa decrescem. Neste mesmo estudo foi constatado que a fase de enchimento da dorna é de extrema importância para o desempenho da fermentação, pois é nessa fase que ocorre a maior conversão de açúcar em etanol.

De acordo com Amorim (2005), quando a velocidade de alimentação é muito lenta, a fermentação se torna mais demorada e se o enchimento for feito de forma rápida, a levedura receberá uma alta carga de açúcar, não conseguindo metabolizar

toda essa quantidade e sofrendo o que se chama de estresse osmótico. O autor acrescenta que essa situação faz com que se tenha uma queda no rendimento fermentativo, pois a levedura, por um mecanismo de defesa, desviará açúcar para produzir mais glicerol, em vez de álcool. Por isso, a velocidade de alimentação da dorna precisa ser controlada para que ela não desperdice o açúcar para fabricar glicerol, que não é benéfico ao processo.

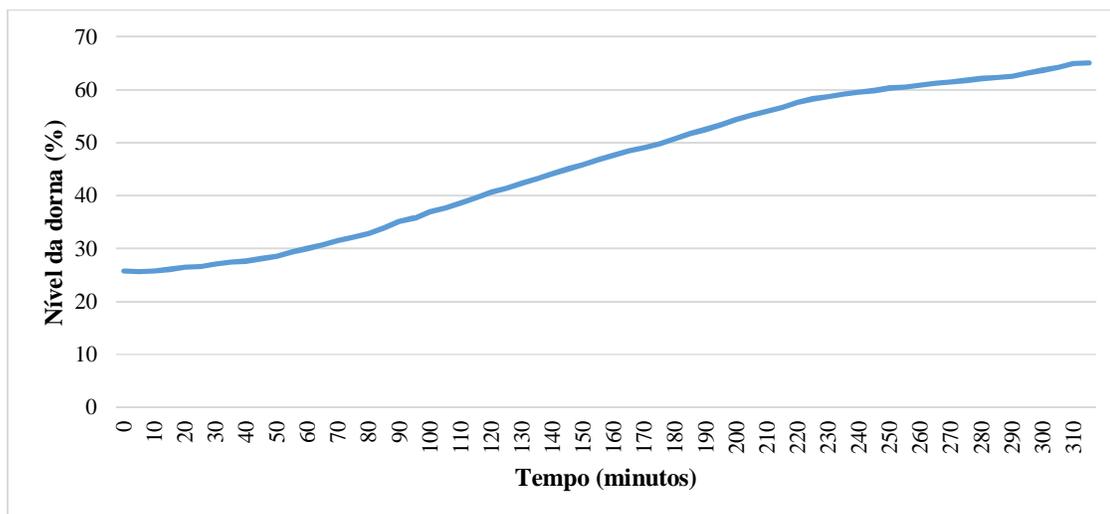
A velocidade de alimentação das dornas na Usina Santa Terezinha – unidade de Cidade Gaúcha é determinada através do tempo de alimentação, onde é realizada de forma automatizada de acordo com um modelo proposto que sugere uma vazão de alimentação dividida em três estágios, no primeiro estágio há uma vazão reduzida de mosto para que ocorra a adaptação do fermento ao meio, no segundo estágio há um aumento na vazão de mosto visando uma maior conversão de açúcar em etanol e no terceiro estágio diminui-se novamente a vazão de modo que ao término da alimentação o processo fermentativo esteja praticamente finalizado. O gráfico 1 ilustra a curva padrão de alimentação de mosto nas dornas utilizada atualmente pela empresa.

Gráfico 1- Curva padrão de alimentação



Fonte: Autoria própria.

Com a instalação da malha automatizada para alimentação das dornas, é possível se obter uma alimentação muito próximo ao padrão estabelecido. O gráfico 2 ilustra a curva de alimentação de uma dorna do processo de fermentação da empresa estudada do dia 20 de abril de 2017.

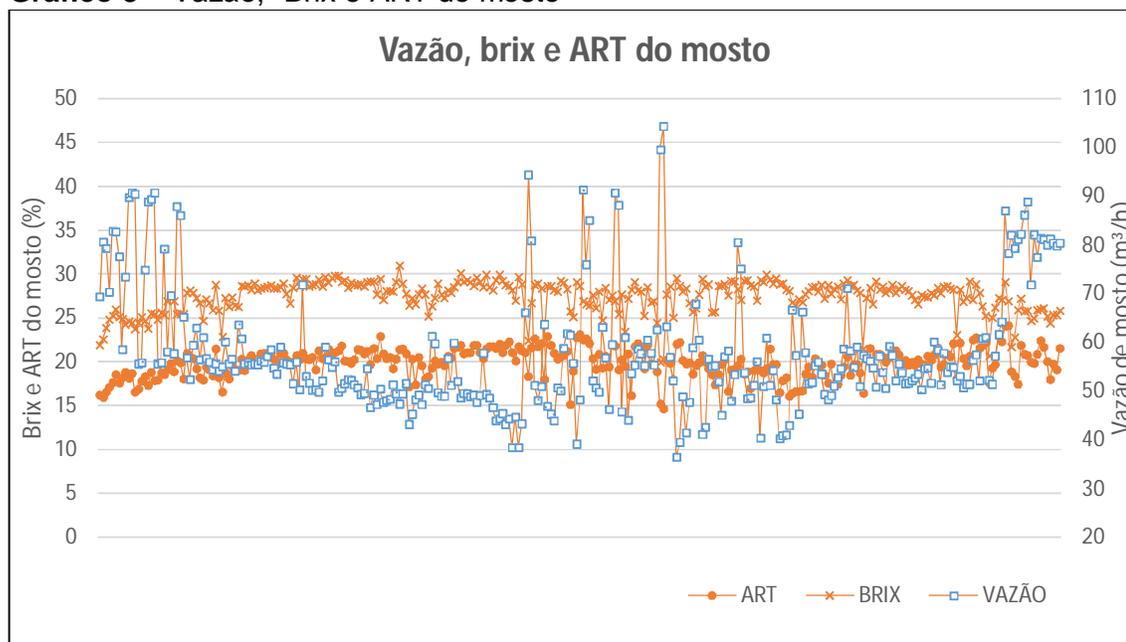
Gráfico 2 – Alimentação da dorna realizada de modo automático

Fonte: Autoria própria.

Este estudo mostrou que a sobra de ARRT na fermentação é influenciada pelas variáveis vazão, °Brix e ART do mosto, e que quando há variação do °Brix e ART do mosto, a vazão do mesmo precisa ser corrigida para que haja um equilíbrio entre as três variáveis, sendo o °Brix e ART do mosto inversamente proporcional à sua vazão, pois como já citado por diversos autores descritos neste trabalho, para se obter uma fermentação com um bom rendimento, se faz necessário que o levedo receba uma quantidade equilibrada de açúcar para que haja a máxima conversão em etanol.

Para isso é preciso que haja um equilíbrio entre as variáveis ART e °Brix com vazão do mosto. A variável °Brix é manipulada de acordo com a necessidade do processo, o supervisor responsável pelo setor é quem determina qual o valor deverá ser inserido no sistema para que seja alimentado às dornas, o ART é diretamente proporcional ao °Brix, visto que os açúcares redutores são sólidos solúveis, desta forma, ao aumentar ou diminuir o °Brix eleva-se ou reduz também o ART do mosto.

A mudança no °Brix deve ser tênue em relação a vazão de mosto, esta que é determinada pelo tempo de alimentação das dornas. Porém, em determinados momentos da alimentação há uma oscilação na quantidade de açúcar na dorna, onde a flutuação do °Brix, conseqüentemente do ART, não sendo compensada pela variação na vazão do mosto prejudica este controle. Também, de forma oposta pode-se haver uma redução considerável nas três variáveis envolvidas gerando falta de açúcar na dorna devido a premissa inicial adotada para alimentação, como demonstrado no gráfico 3.

Gráfico 3 – Vazão, °Brix e ART do mosto

Fonte: Autoria própria.

Diante dos fatos apresentados neste trabalho a equipe de engenharia da unidade irá propor algumas mudanças com ênfase na melhoria do controle analítico nas dornas com intuito de controle do ART relacionado ao °Brix. Em paralelo as ações da equipe de engenharia da unidade, haverá um estudo para melhoria da curva adotada para alimentação das dornas, juntamente com profissionais vinculados a automação industrial e consultores especializados. Com isso, espera-se a adoção de novos meios e métodos para um controle ideal da fermentação desde a formação do mosto até o final da alimentação.

4.1.3 Fator 4 – Qualidade da Fermentação

Com uma variância explicada de 9,14%, demonstrado no quadro 2, este fator é composto pelas seguintes variáveis:

- 1 teor alcoólico na dorna (Comunalidade 0.79 e Variância Específica 0.2052);
- 2 % fermento na dorna (Comunalidade 0.59 e Variância Específica 0.4034);
- 3 glicerol (Comunalidade 0.62 e Variância Específica 0.3783);
- 4 tempo de fermentação (Comunalidade 0.65 e Variância Específica 0.3404).

A correlação indicada nestes fatores estudados se dá com os itens: percentual de fermento na dorna, teor alcoólico na dorna, produção de glicerol e tempo de

fermentação na dorna. O estudo mostrou que a variável quantidade de fermento na dorna é inversamente proporcional às variáveis tempo de fermentação, produção de etanol e glicerol.

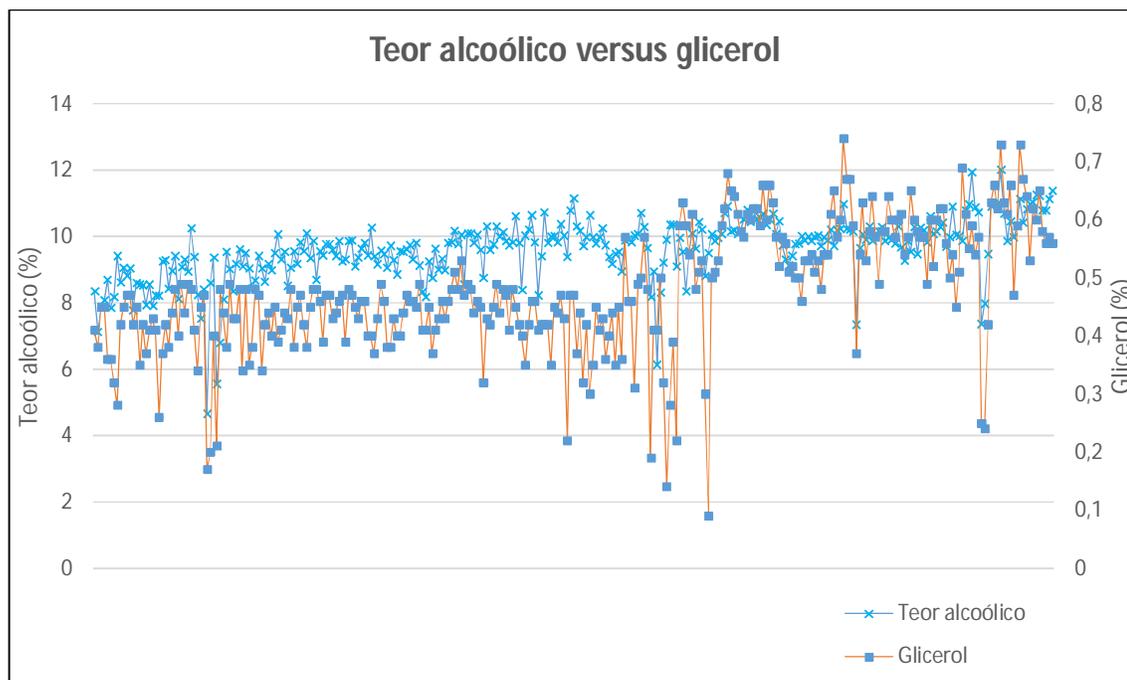
De acordo com Lima *et al.* (2001), quanto maior a quantidade de levedura no meio fermentativo, maior será o consumo de açúcares e conseqüentemente maior será a produção de etanol, porém até determinados intervalos, pois concentrações elevadas podem levar a competição por alimento, nutrientes, minerais e vitaminas.

O valor médio da concentração de fermento nas dornas nas safras de 2016 e 2017 na unidade estudada foi de 10,99 %, com os valores obtidos nas variáveis contrapostas constatou-se que a elevação na concentração de fermento na dorna gerou uma redução no teor alcoólico, indicando que a concentração de fermento ficou acima do ponto de saturação de conversão das células, havendo competição por alimento, reduzindo a eficiência da mesma.

Diante dos resultados a equipe de engenharia da unidade irá propor para a safra de 2018 o acompanhamento para determinar os limites da quantidade de fermento necessário para otimizar a produção de etanol. Com isso, o controle da quantidade de fermento pretende adequar a relação do volume de fermento necessário à dorna com o teor alcoólico pretendido.

Segundo Basso (2011), de todo o açúcar presente na fermentação de 84 a 92 % são convertidos em etanol e gás carbônico e de 2 a 9% em glicerol. Sendo assim, por uma relação matemática, pode-se concluir que quanto maior a produção de etanol, maior será a produção de glicerol.

Essa correlação é comprovada pelo gráfico 4, onde visualiza-se o aumento do glicerol e do teor alcoólico na dorna em sintonia.

Gráfico 4 - Teor alcoólico x glicerol na dorna

Fonte: Autoria própria.

Vanconcelos (2010) ressalta que o tempo de fermentação é de seis a nove horas, para processos de fermentação em batelada. Tempos elevados podem indicar altos índices de contaminações, baixas viabilidades das leveduras, baixas concentrações de leveduras no meio em fermentação, excesso de açúcar no mosto, entre outros fatores.

Juntamente aos resultados encontrados quanto a correlação glicerol/teor alcoólico, visualizou-se que nas safras 2016 e 2017 houve uma relação direta na concentração de fermento e tempo de fermentação na dorna, sendo eles inversamente proporcional um ao outro. Observa-se com isso que o controle realizado pelo equipe de engenharia da unidade quanto ao percentual de fermento na dorna é intrínseco ao tempo de fermentação da mesma, podendo-se afirmar que o tempo de fermentação é projetado, inicialmente, por uma premissa de quantidade de fermento na dorna estipulada pela equipe.

Na tabela 8 são demonstrados os valores obtidos nas safras dos anos de 2016 e 2017 para as variáveis explicadas no texto acima.

Tabela 8 – Valores obtidos nas safras de 2016 e 2017.

	Teor alc. (%)	Glicerol (%)	Conc. Ferm. (%)	Tempo ferm. (h)
2016	9,27	0,42	11,36	8,86
2017	10,06	0,54	10,63	9,6

Fonte: Autoria própria.

A tabela 8 demonstra que no ano de 2016 a concentração de fermento na dorna foi maior que no ano de 2017, enquanto o teor alcoólico se comportou de maneira inversa, indicando uma deficiência no processo. Esta deficiência se dá pois maiores volumes de fermento levam a uma competição ao meio tendo como consequência a menor conversão em etanol

4.1.4 Fatores com P Valor Maior que 0,05

4.1.4.1 Fator 2

Este fator é composto pelas seguintes variáveis:

1. floculação (Comunalidade 0,61 e Variância Específica 0,3897);
2. brotamento (Comunalidade 0,66 e Variância Específica 0,3343).

Este estudo indicou que os parâmetros de floculação e brotamento não causaram influência na sobra de ARRT nas dornas.

De acordo com Alcarde (2001), a floculação das leveduras é um dos problemas preponderantes que contribuem para a redução na conversão do açúcar em etanol, pois uma das suas principais causas é a contaminação bacteriana.

Segundo Amorim (2005), as bactérias se unem com as leveduras provocando floculação, que vão ao fundo da dorna, provocando na centrifugação entupimento de bicos, canalizações, ocorrendo perda elevada de levedura, resultando em queda no rendimento.

No processo de fermentação da Usina Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha a floculação é controlada, não afetando o rendimento do processo. Este controle é possível devido ao baixo nível de contaminação bacteriana com execução de ações diretamente relacionadas para tal, como a eliminação dos pontos mortos nas linhas de alimentação das dornas e o controle adequado nas concentrações de fermento no processo de centrifugação.

Tais medidas adotadas constantemente no processo favorecem ao aumento da multiplicação das células, ou seja, o brotamento.

Segundo Malta (2006) um dos principais fatores que contribuem para a multiplicação das leveduras é o oxigênio, em condições de anaerobiose induzem a formação de etanol e de gás carbônico.

Espinoza (2011) acrescenta que a aeração é necessária na fase de propagação, pois facilita a multiplicação da levedura.

Diante dos resultados obtidos quanto a floculação e favorecimento do brotamento, a equipe de engenharia da unidade toma ações que direcionam a maior produção de etanol. Analisa-se o arranjo físico instalado, o teor alcoólico pretendido na dorna e quais controles podem ser feitos quanto a concentração do fermento.

Na unidade o arranjo físico das dornas favorece a redução no brotamento pois as mesmas são fechadas, com isso não há entrada de ar durante o período em que o fermento está na dorna. Somando-se a este fator, a equipe de engenharia da unidade pode aumentar o teor alcoólico pretendido dentro da dorna, pois este é outro parâmetro que causa inibição do brotamento.

Conforme os dados indicam, os níveis de floculação são baixos favorecendo um maior brotamento, com isso, as ações direcionadas para a inibição do mesmo são tomadas com o objetivo de proporcionar que as células de levedura fiquem em um meio não favorável à sua reprodução, fazendo com que haja uma maior conversão dos açúcares em etanol.

4.1.4.2 Fator 5

Este fator é composto pelas seguintes variáveis:

1. bastonetes (Comunalidade 0,68 e Variância Específica 0,3164);
2. viabilidade (Comunalidade 0,76 e Variância Específica 0,2324).

O estudo indicou que no processo de fermentação da Usina Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha a contaminação bacteriana e a viabilidade do fermento não interferem para a sobra de ARRT nas dornas.

De acordo com Oliva-Neto & Yokoya (1994), como no Brasil, a maior parte da produção de etanol ocorre através do processo de fermentação com a reciclagem de células de levedura, quaisquer contaminante microbiano presente no processo,

também são reciclados e isso pode causar muitos problemas no processo, tais como a perda de açúcar e etanol, diminuições no crescimento (brotamento) e viabilidade da levedura bem como provocar a floculação da levedura.

Andrietta *et al.* (2006), ressalta que um processo de fermentação considerado sadio apresenta níveis de bactéria próximo a 10^5 UFC.ml⁻¹. Freitas & Romano (2013) acrescentam que níveis de contaminação acima de $5,0 \times 10^6$ UFL.ml⁻¹, causam prejuízos significativos e acima de 10^8 UFL.ml⁻¹ ocorrem queda no rendimento fermentativo, dificultando a operação de centrifugação e aumentando o consumo de ácido e antibiótico.

Makanjuola & Springham (1992) destacam que culturas de bactérias com níveis de 10^6 a 10^8 UFC. mL⁻¹, são considerados prejudiciais ao rendimento da fermentação e à viabilidade celular. No estudo realizado por Nobre *et al.* (2005), foi possível comprovar que a presença de alguns tipos de bactérias diminui significativamente a porcentagem de células vivas (viabilidade celular), podendo este valor variar de 59 a 80 %.

Segundo Narendranath *et al.*, 1997 quando existe a presença de bactérias na fermentação surge uma competição entre levedura e bactérias por certos nutrientes, as bactérias utilizam a glicose presente no meio para metabolizar ácido láctico e assim obter energia para seu crescimento e manutenção de suas células, e é a produção de ácido láctico que leva a uma redução na conversão de etanol, pois para cada grama de ácido láctico produzido, 0,51 gramas de etanol deixa de ser gerado.

Camolez e Mutton (2005) ressaltam que níveis elevados de bactérias presentes no processo de fermentação podem levar o aumento na acidez do meio e a formação de glicerol. Amaral (2009), acrescenta que a formação de glicerol está associada à manutenção do equilíbrio celular, o qual é alterado com a formação de ácidos orgânicos, biomassa e a presença de sulfito no mosto. A formação de glicerol também está relacionada a uma resposta ao estresse osmótico quando se trabalha com altas concentrações de açúcares ou sais no mosto.

Na tentativa de minimizar a proliferação de bactérias no processo no setor de fermentação da Usina Santa Terezinha – Unidade de Cidade Gaúcha nos últimos anos foram eliminados todos os pontos mortos que haviam nas linhas de alimentação de mosto nas dornas, centrifugação e tratamento do fermento, além disso diariamente é realizado assepsia com flegmaça nas linhas de alimentação de mosto e trocadores de calor, além do controle bacteriano com utilização de produtos químicos.

Ainda, quando ocorre interrupções na planta industrial, são executadas ações para controle bacteriano sem a utilização de produtos químicos (meios físicos), e também é realizado um pré tratamento na água utilizada na composição do mosto e tratamento do fermento.

Contudo, a média de bastonetes obtidas durante as safras de 2016 e 2017 foi de $1,5 \cdot 10^7$ UFC.ml⁻¹. lembrando que a planta em questão se trata de uma usina de açúcar onde o mosto é composto apenas por mel esgotado, mel este que possui acidez mais elevada em relação ao caldo, e assim acaba sendo mais vulnerável para que ocorra a contaminação bacteriana.

Este estudo indicou que a quantidade de bastonetes presente no processo de fermentação alcoólica da empresa onde se desenvolveu este trabalho não influenciou na sobra de Açúcares Redutores Residuais Totais nas dornas de fermentação e apesar de vários autores citarem que níveis de infecções acima de 10^6 UFC.ml⁻¹ afetam a viabilidade da levedura, a média de viabilidade obtida nas safras de 2016 e 2017 foi de 90,39%, o que demonstra também que neste processo a quantidade de bactérias está controlada, não afetando a viabilidade da levedura.

4.2 Perspectivas de ganho

Durante o período estudado, safras de 2016 e 2017, a média das sobras de Açúcares Redutores Residuais Totais (ARRT) nas dornas de fermentação foi de 0,79%, valor que não atendeu o parâmetro estipulado pela consultoria contratada pela empresa. O valor sugerido como base seria de 0,70%.

Baseando-se no parâmetro estipulado de 0,70% e obtendo-se 0,79% como resultado, houve uma perda de 0,09% no ARRT. O volume em ART perdido no período estudado foi de 11,29 toneladas, considerando a perda baseada no valor estipulado, o volume perdido seria de 10 toneladas, gerando uma redução de 1,29 toneladas em ART. Convertendo-se a redução do ART perdido em etanol seria possível, nas mesmas condições de processo, produzir 873.165.96 litros de etanol. Considerando o valor médio de venda de etanol no período estudado praticado pela Usina de Açúcar Santa Terezinha - Unidade de Cidade Gaúcha, este volume de etanol proporcionaria um ganho de R\$1.650.283,66.

5 CONCLUSÃO

Com base na utilização das premissas verificadas, o projeto obteve resultados satisfatórios quanto à redução das sobras de Açúcares Redutores Residuais Totais (ARRT) nas dornas de fermentação. Utilizando-se do método de Regressão Logística, foram evidenciadas algumas variáveis determinantes e, através da Análise Fatorial, enfatizou-se os fatores que proporcionaram ao conhecimento dos desvios que afetam direta ou indiretamente para o aumento das perdas na fermentação.

A proporção encontrada junto aos desvios relacionados a qualidade do mosto foi maior se comparado a qualidade de alimentação na dorna e a qualidade na fermentação. Porém, não há ação direta que possa ter resultados impactantes quanto à qualidade do mosto, pois trata-se de um fator onde a maior interferência está no mel final, sendo este gerado na fábrica de açúcar e enviado para o setor da destilaria como fonte de açúcares para a fermentação.

A análise quanto ao fator da qualidade da alimentação na dorna indicou que há melhorias a serem executadas na curva de alimentação vigente, de forma a equalizar a relação tempo e nível, considerando a quantidade de açúcar presente no mosto para proporcionar a melhor metabolização das células de levedura.

O estudo do fator da qualidade na fermentação indicou a necessidade de melhoria quanto a quantidade de fermento nas dornas. Há necessidade de delimitação quanto aos valores máximos e mínimos da quantidade de fermento na dorna para a otimização do processo de fermentação.

O projeto apontou oportunidades para melhorias no processo fermentativo; tais melhorias podem proporcionar ganhos significativos para a empresa, abrindo precedentes para novos estudos, principalmente com ênfase na qualidade do mel final.

Visando melhoria contínua nos processos industriais, as ações a serem executadas com base nesta pesquisa proporcionarão uma redução na sobra de açúcares nas dornas e conseqüentemente o aumento na produção de etanol, gerando menos resíduos processuais.

REFERÊNCIAS

ALCARDE, V. E. **Avaliação de parâmetros que afetam a floculação de leveduras e bactérias isoladas de processos industriais de fermentação alcoólica.** Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 2001.

ALEXANDRE H.; ANSANAY-GALEOTE, S.; DEQUIN, S.; BLONDIN, B. Global gene expression during short-term ethanol stress in *Saccharomyces cerevisiae*. **FEBS Letters**, Amsterdam, 2001. Disponível em: < https://ac.els-cdn.com/S0014579301025030/1-s2.0-S0014579301025030-main.pdf?_tid=0e2f86bf-396f-4c64-941d-dcd91a4c0d25a&acdnat=1541770071_8ce88db26df6b559022bfdba6b97d19>. Acesso em 10 jan. 2018

AMARAL, Flávia Silvério. **Influência conjunta do pH, temperatura e concentração de sulfito em fermentação alcoólica de mostos de sacarose.** Uberlândia: Universidade Federal de Uberlândia, 2009.

AMORIM, H.V. **Fermentação alcoólica: ciência e tecnologia.** Piracicaba: Fermentec, 2005.

AMORIM, Henrique.V.; BASSO, L.C.; ALVES, D.M.G. **Processo de Produção de Álcool – controle e monitoramento.** 2. Ed. Piracicaba: FERMENTEC/FEALQ/ESALQ-USP, 1996.

ANDRADE, N. D. Análise dos métodos Brix e cromatografia para a determinação de açúcares redutores residuais totais. Universidade de Rio Verde: Rio Verde, 2016. Disponível em: <<http://www.unirv.edu.br/conteudos/fckfiles/files/AN%C3%81LISE%20DOS%20M%C3%89TODOS%20BRIX%20E%20CROMATOGRÁFIA%20PARA%20A%20DETERMINA%C3%87%C3%83O%20DE%20A%C3%87%C3%9ACARES%20REDUTORES%20RESIDUAIS%20TOTAIS.pdf>> . Acesso em: 12 fev. 2018.

ANDRIETA, M.G.S; STECKELBERG, C; ANDRIETTA, S.R. **Bioetanol – Brasil, 30 anos de vanguarda.** V. 7. São Carlos, Multiciência. Construindo a História dos Produtos Naturais, 2006.

ANDRIETTA, Silvio. R. A influência da matéria prima sobre o desempenho da levedura (a levedura é aquilo que ela come). STAB, 2013. Disponível em: <http://www.stab.org.br/sem_agroind_stab_2013/materia_prima_influencia_sobre_a_levedura.pdf>. Acesso em 12 fev. 18.

BASSO, T.O. **Melhoramento da Fermentação Alcoólica em *Saccharomyces cerevisiae* por engenharia evolutiva.** São Paulo: Universidade de São Paulo, 2011.

Etanol, álcoolquímica e biorrefinarias. In: BNDS “Valéria Delgado Bastos”. **Biblioteca Digital.** 2007. Disponível em: <https://web.bndes.gov.br/bib/jspui/bitstream/1408/2527/1/BS%2025%20Etanol%2c%20Alcoolqu%C3%ADmica%20e%20Biorrefinarias_P.pdf>. Acesso em: 05 fev. 2018.

BORZANI, W; SCHMIDELL, W; LIMA, U. A; AQUARONE, E. **Biotecnologia industrial.** 1.ed. São Paulo: Blucher, 2001.

CAMOLEZ, M. A.; MUTTON, M. J. R. Influência de microrganismos contaminantes sobre o processo fermentativo. **STAB**, Piracicaba; v. 23, 2005.

CHIEPPE, J. B. J. **Tecnologia e fabricação do álcool.** Santa Maria: Unhumas: IFG; 2012.

CHIGUTI. **Aplicação da Análise Multivariada na Caracterização dos Municípios Paranaenses Segundo suas Produções Agrícolas.** Curitiba: UFPR, 2005.

CINELLI, B.A. **Produção de etanol a partir da fermentação simultânea à hidrólise do amido granular de resíduo agroindustrial.** Rio de Janeiro: Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012.

CTC – CENTRO DE TECNOLOGIA COOPERSUCAR. **Manual de Métodos Analíticos: Controle químico da fermentação.** Piracicaba: 2005.

DARÉ, R. M. **Avaliação de coeficientes de rendimento e modelagem do processo fermentativo de produção de etanol.** São Carlos: Universidade Federal de São Carlos, 2008.

DORNEMANN, G.M. **Comparação de métodos para determinação de açúcares redutores e não-redutores.** Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.

ESPINOZA, L. J. S. Tecnologia de Produção de Cachaça: Princípios do Processo de Cachaça de Qualidade. **FAZU em revista**, Uberaba, n. 8, p. 100-107, 2011.

ESQUARCINI, R. **Classificação e Ranqueamento dos Municípios Paranaenses Segundo suas Políticas Setoriais Através da Análise Multivariada**. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2005.

FARMACOPEIA HOMEOPÁTICA BRASILEIRA. **Anvisa**, 2011. Brasília, 2011.

FERMENTEC. **Métodos Analíticos para o Controle de Produção de Açúcar e Álcool**. 3ª edição. Piracicaba: 2003.

FERREIRA, E. **Contribuição para o Estudo da Otimização da Fermentação Alcoólica operando em Batelada-Alimentada**. Campinas: UNICAMP, 2005.

FREITA, L.A. **Avaliação tecnológica e microbiológica da fermentação etanólica de caldo de sorgo sacarino**. Jaboticabal: Universidade Estadual Paulista, 2013.

FREITAS, Marcela D.; ROMANO, Flavia P. Tipos de contaminações bacterianas presentes no processo de fermentação alcoólica. **Bionergia em revista: diálogos**, Piracicaba (SP), v.2, p. 29-37, dez. 2013.

GOMES, Elenice, M. S. **Influência das concentrações de açúcares nos mostos sobre o desempenho da fermentação etanólica conduzida em batelada alimentada com vazão variável de alimentação**. Maceió: Universidade Federal de Alagoas, 2011.

GOLDEMBERG, J. COELHO, S.T; GUARDABASSI, P. The sustainability of ethanol production from sugarcane. **Energy Policy**, São Paulo (SP), v. 36, n. 6, p. 2086 – 2097, jun. 2007.

GUIDINI, C.Z. **Fermentação alcoólica em batelada alimentada empregando *Saccharomyces cerevisiae* de características floculantes**. Uberlândia: Universidade Federal de Uberlândia, 2013.

GUTIERREZ, Luiz Eduardo. Produção de glicerol por linhagens de *Saccharomyces* durante fermentação alcoólica. 1999, Piracicaba. **Anais eletrônicos...** Piracicaba: ESALQ, 1999. Disponível em: < <http://www.scielo.br/pdf/aesalq/v48/05.pdf> >. Acesso em: 01 dez. 2017

HAIR, J. F. et al. **Applied Multivariate Statistical Analysis**. New York: Prentice Hall, 2009.

HILLS, M. **Applied Statistics**. [S.l.]: Book Review, 1977

JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W.; **Applied Multivariate Statistical Analysis**. 4. ed. New Jersey: Prentice-Hall, inc., 1998.

KACHIGAN, S. K. **Multivariate statistical analysis**. New York: Radius Press, 1991.

KAISER, H. F. **The varimax criterion for analytic rotation in factor analysis**. *Psychometrika*, v. 23, p. 187–200, 1958.

LACHENBRUCH, P. A. **Discriminant Analysis**. New York, Halfner: 1975

LIMA, J. D. **A análise Econômico-financeira de Empresas Sob a Ótica da Estatística Multivariada**. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2002.

LIMA, U. A.; BASSO, L.C.; AMORIM, H. V. Produção de Etanol. In: SCHMIDELL, W.; LIMA, U. A.; AQUARONE, E.; BORZANI, W. (Coord.). **Biotecnologia Industrial: Processos Fermentativos e Enzimáticos**, v. 3, São Paulo: Editora Edgard Blucher, 2001.

MAKANJUOLA, D.B., SPRINGHAM, D.G. Some effects of lactic acid bacteria on laboratory-scale yeast fermentation. **Enzyme Microbiology and Technology**, v.14, n.4, p. 350-357, 1992.

MALTA, Hélia Lucila. **Estudos de parâmetros de propagação de fermento (*Saccharomyces cerevisiae*) para produção de cachaça de alambique**. Belo Horizonte: UFMGI, 2006.

MARQUES, A. F. **Aplicação da análise multivariada na infraestrutura e no desempenhos das escolas públicas do ensino fundamental e médio pertencentes ao núcleo regional de educação de paranavaí**. *Acta Scientiarum*, v. 32, p. 75–81, 2010.

MINGOTI, S. A. **Análise de Dados Através de Métodos de Estatística Multivariada: Uma Abordagem Aplicada**. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2005.

MISSAWA, S.K. **Modificação de linhagens industriais de *Saccharomyces cerevisiae* para o aumento da produtividade de álcool e floculação condicional**. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 2009.

MONTEIRO, G; CARVALHO, R. A influência do teor de acidez e da contaminação bacteriana do mosto no rendimento fermentativo industrial para a produção de etanol. **FAZU em revista**, Uberaba, n.8, p. 47-54, 2011.

MÜLLER, S. I. M. G.; CHAVES NETO, A. Programa de técnicas integradas para análise e avaliação de fornecedores. RNTI - **Revista Negócios e Tecnologia da Informação**, v. 2, p. 95–104, 2007.

NARENDRANATH, N. V; HYNES; S. H; THOMAS, K. C; INGLEDEW, W. M. Effects of Lactobacilli on Yeast-Catalyzed Ethanol Fermentations. Canada: University of Saskatchewan. **Applied and environmental microbiology**, Saskatoon, Saskatchewan, Canada, v. 63, p. 4158 – 4163, nov.1997.

NAVES, R.F; FERNANDES, F.S; PINTO, O.G; NAVES, P.L.F. Contaminação microbiana nas etapas de processamento e sua influência no rendimento fermentativo em usina alcooleira. **Enciclopédia biosfera**, Centro Científico Conhecer. Goiânia, 2010.

NEVES, L. C. M. **Obtenção da enzima glicose 6-fosfato desidrogenase utilizando “*Saccharomyces cerevisiae*” W303-181**. São Paulo: Universidade de São Paulo, 2003.

NOBRE, Thais. P. **Viabilidade celular de *Saccharomyces cerevisiae* cultivada em associação com bactérias contaminantes da fermentação alcoólica**. Piracicaba: Universidade de São Paulo, 2005.

NOVANA. **Brasil torna-se o 2º maior comprador de etanol dos EUA, para surpresa das usinas no EUA**. Curitiba, abr. 2016. Disponível em:< <https://www.novacana.com/n/etanol/mercado/importacao/brasil-maior-comprador-etanol-eua-surpresa-usinas-eua-050416/>>. Acesso em: 17 jan. 2018

OLIVA-NETO, P.; YOKOYA, F. Evaluation of bacterial contamination in a fed-batch alcoholic fermentation process. **World Journal of Microbiology and Biotechnology**. V.28, n.1, p. 697-699, mar 1994.

OZERENKO, A.; GYUL'MALIEV, A.; GAGARIN, S. **Factorial analysis in selecting the zeolite catalyst for 2,6-dimethylnaphthalene synthesis**. **Coke and Chemistry**, v. 50, p. 200–206, 2007.

QUEIROZ, J. et al. **Geochemical characterization of heavy metal contaminated area using multivariate factorial kriging**. *Environmental Geology*, v. 55, p. 95–105, 008

RENCHER, A.C. **Methods of Multivariate Analysis**. New York: Wiley-Interscience, 2002.

RIBEIRO, C.A.F; BLUMER, S.A.G; HORII, J. **Fundamentos de Tecnologia sucroalcooleira**. 2. ed. Piracicaba: 1999.

SANTOS, F.A. **Análise de trilha dos principais constituintes orgânicos e inorgânicos sobre a dor do caldo em cultivares de cana-de-açúcar**. Viçosa: Universidade Federal de Viçosa, 2008.

SILVA, José A. ; *et al.* Aplicação da Metodologia de Planejamento Fatorial e Análise de Superfícies de Resposta para Otimização da Fermentação Alcoólica. **Revista Química Nova**, São Paulo (SP), v. 31, n. 5, 2008.

SILVA, J.S. **Produção de álcool na fazenda e em sistema cooperativo**. Viçosa: Universidade Federal de Viçosa: 2007

SOUSA, R. L; SCARABOLA, M. H; SILVA, E.M; PETRONI, T.F. Identificação de leveduras contaminantes em fermentação do tipo batelada em usina de álcool de Pereira Barreto – SP. In: ENCONTRO CIENTÍFICO DOS ESTUDANTES DA AEMS 2011, Três Lagoas. **Anais...Três Lagoas**. Faculdades Integradas de Três Lagoas.

SOUZA, L.M. ALCARDE, A.R; LIMA, F.V; BORTOLETTO, A.M. **Produção de cachaça de qualidade**. Piracicaba: ESALQ, 2013.

SOUZA, L. S. S. **Avaliação do processo de produção de etanol pela fermentação do caldo de mandioca (*Manihot esculenta Grantz*)**. Belém: Universidade Federal do Pará, 2013.

SPEARMAN, C. General intelligence objectively determined and measured. **American Journal of Psychology**, v. 15, p. 201–293, 1904.

STEINLE, L.A. **Fatores que interferem na fermentação alcoólica**. Sertãozinho: Universidade Federal de São Carlos. 2013.

TOGNETE, M. H. P. B. **A influência da matéria-prima e diferentes cepas de levedura no rendimento fermentativo de um processo de obtenção de etanol**. São José do Rio Preto: Universidade Estadual Paulista “Júlio Mesquita Filho. 2017.

VASCONCELOS, J.N. **Fermentação Etanólica**, In: Santos, F; BORÉM, A; CALDAS, C. Cana-de-açúcar – Bionergia, Açúcar e Álcool. Editora UFV, Minas Gerais, 2010.