UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

MODELAGEM DA FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA DE UMA USINA SUCROALCOOLEIRA

Lucas Hideki Okajima

Trabalho de Graduação apresentado ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos

Orientador: Prof. Felipe Fernando Furlan

São Carlos - SP

2023

BANCA EXAMINADORA

Trabalho de Graduação apresentado no dia 29 de Agosto de 2023 perante a seguinte banca examinadora:

Orientador: Felipe Fernando Furlan – DEQ/UFSCar

Convidado: Antônio Carlos Luperni Horta, DEQ/UFSCar

Professor da Disciplina: Ruy de Sousa Junior, DEQ/UFSCar

AGRADECIMENTOS

Eu agradeço a todos meus familiares que me apoiaram todos esses anos na faculdade, em especial meus pais, minha mãe Mayumi e meu pai Marcos e meu irmão Junior. Agradeço meus avós maternos e paternos pela eterna sabedoria e apoio por toda graduação e por estarem sempre dispostos a ajudar em qualquer coisa que fosse necessária. Também agradeço a todos os amigos que fiz na minha graduação pelos bons momentos e longa amizade. Finalmente agradeço a todos os professores e orientadores da UFSCar que muito me ensinaram e daqui em frente também carrego comigo parte de sua sabedoria.

RESUMO

Diante dos desafios impostos por uma iminente crise climática se faz necessária a busca por fontes de energia alternativas que tenham viabilidade econômica e ambiental. Nesse paradigma a produção de etanol via fermentativa é de grande interesse. Esse combustível pode ser obtido por diversas fontes vegetais, como a cana-de-açucar, o milho, a beterraba e materiais lignocelulósicos em geral. A produção de etanol a partir da cana-deaçucar e do milho já está bastante consolidada industrialmente. Porém, ainda existem melhorias possíveis, principalmente para a etapa de fermentação. Nesse sentido, a modelagem desse processo pode ser de grande valia para o estudo e a avaliação desta etapa, visando sua melhoria. O objetivo desse trabalho foi a realização da simulação do sistema de fermentação de uma usina sucroalcooleira, tendo como base uma usina da região do noroeste do estado de São Paulo. Várias variáveis de processo utilizadas nesse trabalho foram baseadas nos parâmetros usuais de funcionamento da usina. A simulação foi realizada no software de simulação EMSO. Os resultados da simulação foram comparados aos dados obtidos da indústria. O modelo obteve sucesso em simular as condições de fermentação. Em seguida foram feitas modificações nos parâmetros de alimentação para avaliar as mudanças em outros parâmetros da fermentação como a velocidade de crescimento de levedura e tempo total de fermentação. Esse trabalho pode ser expandido para cobrir mais parâmetros relevantes a fermentação como a temperatura e a formação de subprodutos junto ao etanol.

ABSTRACT

In the face of the challenge of climate change, the search for alternative energy sources that are economically and environmentally viable is necessary. In this paradigm, the production of ethanol through fermentation is of great interest, making the modeling and study of this process attractive. The objective of this work was to simulate the fermentation system of a sugarcane and alcohol plant, based on a plant located in the northwest region of the state of São Paulo. Several process variables used in this study were based on the usual operating parameters of the plant. The simulation was carried out using the EMSO simulation software. The simulation results were compared to industry data as a basis for comparison. The model was successful in in simulating the fermentation conditions. Subsequently, modifications were made to the feed parameters to evaluate changes in other fermentation parameters such as yeast growth rate and total fermentation time. This work can be expanded to cover more relevant fermentation parameters such as temperature and the formation of by-products alongside ethanol.

SUMÁRIO

Banca Examinadora	i
Dedicatória	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Abstract	v
Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas e Quadros	vii
1- INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	1
2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	2
2.1- Produção de etanol no Brasil	2
2.2- Bioquímica da fermentação alcoólica	3
2.3-Modelos cinéticos de crescimento celular	4
2.4-Processo Melle-Boinot	8
3- METODOLOGIA	10
3.1- Simulador de processos EMSO	10
3.2- Modelagem matemática	12
3.3- Modelagem dos equipamentos	13
3.3.1- Modelagem da dorna	13
3.3.2-Modelagem da centrífuga	16
3.3.3-Modelagem da cuba de tratamento de fermento	17
4- RESULTADOS E DISCUSSÃO	19
4.1-Parâmetros de uma usina sucroalcooleira	19
4.2-Simulação do processo de fermentação	20
4.3-Simulação dos três tempos de alimentação	22
5- CONCLUSÕES E SUGESTÕES	27
5.1- CONCLUSÕES	27
5.2- SUGESTÕES	27
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	28

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1.	Esquema simplificado da fermentação anaeróbia na Saccharomyces cerevisiae	3
Figura 2.2	Exemplo de um sistema de fermentação com o sistema Belle- Boinot.	9
Figura 3.1	Simulação no EMSO no modo texto	11
Figura 3.2	Simulação em modo de interface gráfica no EMSO	11
Figura 4.1	Gráfico do volume dentro da dorna versus tempo	20
Figura 4.2	Fotografia do perfil de volume dentro de uma dorna de fermentação	20
Figura 4.3	Gráfico dos parâmetros Ce e Cs versus o tempo	21
Figura 4.4	Gráfico do parâmetro µ versus o tempo	22
Figura 4.5	Volume da dorna versus o tempo para 3 tempos de alimentação	23
Figura 4.6	Curvas de Cs versus tempo para os diferentes tempos de alimentação	23
Figura 4.7	Cx versus o tempo para 3 tempos de alimentação	24
Figura 4.8	μ versus o tempo para 3 tempos de alimentação	25
Figura 4.9	Ce versus o tempo para 3 tempos de alimentação	25

LISTA DE TABELAS E QUADROS

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1.	Parâmetros cinéticos utilizados na simulação	13
Tabela 3.2.	Tabela com as equações dos estados da dorna	15
Tabela 3.3.	Tabela com as equações dos estados da cuba de tratamento de fermento	18
Tabela 4.1.	Parâmetros de processo de uma usina sucroalcooleira para a fermentação	19

1- INTRODUÇÃO

O etanol de origem biológica também chamado de bioetanol pode ser utilizado como combustível na área de transporte como substituto de derivados de petróleo. Sua utilização ajuda na redução de emissão de CO_2 de maneira dupla, substituindo combustíveis fósseis e reabsorvendo o CO_2 produzido na combustão no crescimento da cana-de-açúcar (MUSSATO et al., 2010).

Nas destilarias brasileiras o etanol é produzido em processos em batelada alimentada ou contínuos em processos em que é envolvido o reciclo do fermento. Esses processos atingem graus alcoólicos entre 8 a 11 °GL, o processo em batelada alimentada tem tempo de residência entre 6 a 11 horas e operam com a temperatura entre 32 a 35 C° (SONEGO et al., 2014). O processo em batelada é o mais utilizado industrialmente. Este se inicia com o preparo de uma suspensão de células de levedura, com concentração de 30% em massa que representa entre 25 a 30 % do volume total da fermentação em tanques. Esse inóculo é adicionado às dornas de fermentação. A fermentação se inicia com a adição do mosto de cana, com concentração de ATR de 18 a 22 % (m/m). Após o processo de fermentação a levedura é separada por centrifugação, obtendo uma suspensão concentrada de células de 60 a 70 % (m/m), essa suspensão é tratada com ácido sulfúrico e reutilizada no próximo ciclo de fermentação (BASSO et al., 2011);

O comportamento da fermentação alcoólica foi descrito por diversos modelos matemáticos desenvolvidos em estudos anteriores (AIBA et al., 1968; ANDREWS, 1968; LEVENSPIEL, 1980). Esses modelos ajudam no desenvolvimento e entendimento do processo de fermentação alcoólica, contribuindo com ganhos em produtividade de etanol e redução de custos (ROCHA et al., 2014). A fermentação alcoólica é um problema que pode ser analisado utilizando técnicas de modelagem, simulação e otimização. A análise desses processos como um todo pode ser útil na identificação de melhorias no processo (ROYMEL, 2019).

O objetivo desse trabalho se propõe a realizar a simulação de um processo de fermentação industrial no software EMSO e analisar os resultados obtidos e compará-los com dados de uma usina sucroalcooleira do noroeste do estado de São Paulo.

2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Produção de etanol no Brasil

Em 1973 o Brasil importava cerca de 80% do petróleo consumido no país, diante ao primeiro choque do petróleo o governo brasileiro busca por formas alternativas de produção de combustíveis renováveis. Dos programas propostos o de maior êxito foi o Programa Nacional do Álcool – Proálcool, lançado em 1975 que visava a produção de etanol anidro de cana-de-açúcar, utilizando destilarias anexas às usinas, visando a adição de etanol anidro na gasolina (MICHELLON et al., 2008). Posteriormente, na década de 1980, surgiram linhas de produção de montadoras para os carros movidos a etanol hidratado, abrindo uma nova possibilidade do uso do etanol produzido. Finalmente, na primeira década dos anos 2000 foram introduzidos os automóveis "flex", que podem utilizar qualquer proporção entre etanol hidratado e gasolina (BASSO et al., 2011).

Esse processo de substituição da gasolina por etanol evoluiu sobremaneira nos últimos 50 anos. No primeiro levantamento da safra 22/23 do CONAMA, a estimativa de produção de etanol a partir da cana-de-açúcar é 27,53 milhões de litros. A região do Centro-Sul é de destaque com a produção de 91,4% da produção nacional do etanol a partir da cana de açúcar. O estado de maior produção é o estado de São Paulo com 12,3 bilhões de litros de etanol (CONAB 2023).

No Brasil, tradicionalmente a produção de etanol é conjunta a produção de açúcar. Inicialmente a produção de etanol era uma maneira de processar o melaço resultante do processo de produção de açúcar, mas, com o aumento da importância econômica do etanol, as usinas passaram a utilizar uma mistura de caldo e melaço como substrato na fermentação (BASSO et al., 2011).

O etanol pode ser produzido via sintética química ou microbiológica, a rota sintética é através da hidratação do etileno e a rota microbiológica utiliza principalmente a levedura *Saccharomyces cerevisiae*. Atualmente o processo industrial mais utilizado mundialmente na produção de etanol é a rota microbiológica via fermentação alcoólica, utilizada tanto na produção de etanol com cana-de-açúcar quanto milho. Nesse processo açúcares são convertidos em etanol, energia, biomassa celular, CO₂ e outros subprodutos do processo de fermentação pela levedura (LOPES et al., 2016).

2.2 Bioquímica da fermentação alcoólica

A grande maioria do etanol bicombustível é produzido pela fermentação. Algumas espécies de fungos (ex. *Saccharomyces cerevisiae*) ou bactérias (ex. *Zymomonas mobilis*) metabolizam açúcares em condições anaeróbias e produzem etanol e dióxido de carbono (BAEYENS et al., 2015). A Figura 2.1 exemplifica a sequência de produtos e subprodutos gerados pela via metabólica da fermentação alcoólica. Inicialmente ocorre a conversão da sacarose em glicose e frutose através da hidrólise catalisada pela enzima invertase. Após uma série de reações esses produtos são convertidos em piruvato e por fim o piruvato é convertido em etanol e dióxido de carbono. Nesse processo também são formados outros subprodutos como glicerol e ácidos orgânicos (RODRIGUES, 2019).



Figura 2.1 - Esquema simplificado da fermentação anaeróbia na Saccharomyces cerevisiae

Fonte: adaptado de RODRIGUES, 2019

2.3 Modelos cinéticos de crescimento celular

A modelagem da fermentação alcoólica permite descrever o processo fermentativo a partir de equações matemáticas. A simulação a partir de modelos possibilita a análise entre parâmetros e variáveis. Possibilita também um maior entendimento do processo, sendo útil no controle e otimização do processo de fermentação (RIVERA et al., 2006). Os principais parâmetros envolvidos na cinética de crescimento celular são: a velocidade específica de crescimento celular (μ), a concentração de substrato limitante (Cs), a concentração de células (Cx) e a concentração de produtos (Cp). A maior parte dos modelos também utiliza o conceito de μ_{max} que é a velocidade específica máxima de crescimento celular. Na sequência são apresentados os principais modelos usados para descrever o crescimento celular em fermentações alcoólicas.

2.3.1 Modelos sem inibição

• Modelo de Monod (1942):

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_s}{K_s + C_s}$$
(2.1)

No modelo de Monod o Ks é a constante de saturação (g.L⁻¹) e Cs a concentração de substrato limitante. Esse modelo se destaca, pois, serviu como modelo para outros modelos de crescimento celular como os descritos a seguir:

• Modelo de Moser (1958):

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_s^u}{K_s + C_s^u}$$
(2.2)

No modelo de Moser o expoente u é um parâmetro adimensional.

• Modelo de Contois (1959):

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_s}{K_s \cdot C_x + C_s}$$
(2.3)

No modelo de Contois Cx é a concentração de células no meio de cultura.

2.3.2 Modelos com inibição

a) Inibição por substrato

• Modelo de Andrews (1968):

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_s}{K_s + C_s + \frac{C_s^2}{K_{IS}}}$$
(2.4)

O modelo de Andrews considera a inibição pelo substrato, representada pelo parâmetro KIS.

• Modelo de Wu (1988):

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_s}{K_s + C_s + \frac{C_s^V}{K_{IS}}}$$
(2.5)

O modelo de Wu considera a inibição pelo substrato, flexibilizando esse efeito, em relação ao modelo de Andrews, ao incluir o expoente v ao termo C_s^{v} . A constante K_{IS} continua representando inibição por substrato, porém tem agora unidades dependentes de v.

b) Inibição por produto:

• Modelo de Aiba-Shoda-Nagatani (1968):

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_s}{K_s + C_s} \cdot e^{-K_p \cdot C_p}$$
(2.6)

O modelo de Aiba-Shoda-Nagatani considera a inibição pelo produto, representado pelo termo exponencial negativo com constante Kp. Verifica-se que o valor final da velocidade específica de crescimento decresce exponencialmente com o aumento da concentração de produto (Cp).

• Modelo de Levenspiel (1980):

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_{s}}{K_{s} + C_{s}} \cdot \left(1 - \frac{C_{P}}{C_{P}^{*}}\right)^{n}$$
(2.7)

Diferentemente do modelo de Aiba-Shoda-Nagatani, o modelo de Levenspiel considera uma concentração máxima de produto, C_P^* , na qual o crescimento celular cessa. Nesse modelo, n é o expoente que regula a forma do efeito de inibição.

• Modelo Hoppe-Hansford (1982)

$$\mu = \mu_{max} \cdot \frac{C_s}{K_s \cdot C_x + C_s} \cdot \frac{K_{IP}}{K_{IP} + C_P}$$
(2.8)

Outra forma de representar o efeito inibitório do produto é apresentada no modelo de Hoppe-Hansford, onde K_{IP} é a constante de inibição pelo produto. Nesse modelo, o efeito inibitório é representado de forma análoga à inibição não-competitiva de cinéticas enzimáticas.

c) Inibição celular:

• Modelo Lee-Pollard-Coulman (1983):

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_{s}}{K_{s} + C_{s}} \cdot \left(1 - \frac{C_{X}}{C_{X}^{*}}\right)^{m}$$
(2.9)

O modelo de Lee-Pollard-Coulman (1983) representa a inibição celular de forma análoga ao modelo de inibição pelo produto de Levenspiel, onde Cx* é a concentração crítica de células, para a qual o crescimento celular cessa, e m é um parâmetro adimensional que regula a forma do efeito de inibição.

d) Inibição mista

• Modelo de Andrews/Levenspiel:

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_s}{K_s + C_s + \frac{C_s^2}{K_{IS}}} \cdot \left(1 - \frac{C_P}{C_P^*}\right)^n$$
(2.10)

O modelo de Andrews/Levenspiel considera ao mesmo tempo a inibição por substrato e a inibição por produto. Essa equação será utilizada nas simulações para representar o crescimento da levedura *S. Cerevisae*.

• Modelo de Andrews/Lee – Pollard – Coulman/Levenspiel:

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{C_{s}}{K_{s} + C_{s} + \frac{C_{s}^{2}}{K_{IS}}} \cdot \left(1 - \frac{C_{X}}{C_{X}^{*}}\right)^{m} \cdot \left(1 - \frac{C_{P}}{C_{P}^{*}}\right)^{n}$$
(2.11)

O modelo de Andrews/Lee – Pollard – Coulman/Levenspiel leva em consideração a inibição por substrato, por células e por produto em uma equação.

2.4 Processo Melle-Boinot

Cerca de 75% das destilarias operam utilizando o processo Melle-Boinot com reciclo de fermento, nesse processo o fermento no final da fermentação é separado por centrifugação e reutilizado no próximo ciclo de fermentação. Essa reutilização de células reduz a necessidade de cultivo adicional de levedura, assim menos substrato é desviado para a formação de biomassa. Como o cultivo ocorre com alta concentração de levedura, o tempo de fermentação é reduzido, cerca de 6 a 10 horas, comparado com a fermentação do milho que é de 40 a 50 horas (BASSO et al., 2011).

A fermentação se inicia com a adição de mosto contendo cerca de 18 a 22 % em açúcares totais redutores (ATR) ao pé de cuba. O pé de cuba é uma suspensão com cerca de 30% de fermento em massa, preparados em tanques de 300 a 3.000 m³ denominados cubas de tratamento. A alimentação das dornas dura de 4 a 6 horas e a fermentação se completa entre 6 a 10 horas. No final da fermentação a levedura é separada por centrifugação em um "creme de levedura" contendo 70% em massa de levedura e o vinho. O creme de levedura é diluído com água e tem seu pH reduzido até 1,8 a 2,5 com ácido sulfúrico para reduzir a contaminação bacteriana. Após o tratamento ácido por cerca de 2 horas a levedura na cuba está pronta para ser realocada para uma dorna para ser utilizada na próxima fermentação (BASSO et al., 2011). Um exemplo da configuração do sistema Belle-Boinot é apresentado na Figura 2.2:



Figura 2.2 - Exemplo de um sistema de fermentação com o sistema Belle-Boinot

Fonte: adaptado de LOPES et al. (2016)

3 METODOLOGIA

3.1 Simulador de processos EMSO

O software empregado na realização das simulações foi o EMSO academic beta versão 0.10.11, distribuído pelo projeto ALSOC (Ambiente Livre para Simulação, Otimização e Controle de processos). Este programa tem origem do esforço colaborativo para a criação e desenvolvimento de um programa de simulação de processos nacional, esse programa tem origem na Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS) (ALSOC, 2010).

Uma das principais características do EMSO é a acessibilidade aos modelos matemáticos já desenvolvidos pelos integrantes do grupo ALSOC e também a possibilidade de desenvolvimento de novos modelos para utilização própria. Também é possível adicionar outras rotinas na forma de *plugins* além de utilizar diferentes tipos de *solvers* para diferentes tipos de cálculos (SOARES, 2003).

O EMSO utiliza uma linguagem orientada a objetos baseados em equações que permite a propriedade de herança e composição de modelos. Esses modelos podem ser escritos na forma de texto como na Figura 3.1 ou também pela forma de blocos de equipamentos a serem utilizados em simulações. As simulações podem ser efetuadas de maneira simples com a ligação de cada conexão de entrada e saída dos modelos na interface gráfica como exemplificado na Figura 3.2.



Figura 3.1 - Simulação no EMSO no modo texto

Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 3.2 - Simulação em modo de interface gráfica no EMSO



Fonte: Elaborada pelo autor

3.2 Modelagem matemática

Nesse trabalho foram simuladas dornas de fermentação que podem ser modeladas como reatores de batelada alimentada. Foram utilizados na simulação balanços de massa diferenciais para os principais componentes, balanço de massa para as células (X), balanço de massa para o substrato (S), balanço de massa para o etanol (E) e o balanço de massa total, que se transforma em um balanço volumétrico pela consideração de densidade constante (V). Na batelada alimentada existem dois momentos distintos, quando está ocorrendo a alimentação do mosto no reator (F \neq 0) e quando a alimentação cessa e a etapa de batelada ocorre (F=0). A seguir são demonstradas as equações do balanço utilizadas das equações 3.1 a 3.4:

$$\frac{dC_X}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V}\right) \cdot C_X \tag{3.1}$$

$$\frac{dC_S}{dt} = (C_M - C_S) \cdot \frac{F}{V} - \frac{1}{Y_{XS}} \cdot \mu \cdot C_X$$
(3.2)

$$\frac{dC_E}{dt} = \frac{Y_{ES}}{Y_{XS}} \cdot \mu \cdot C_X - \frac{F}{V} \cdot C_E$$
(3.3)

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = \mathrm{F} \tag{3.4}$$

Onde C_X é a concentração de células no meio (g.L⁻¹), t é o tempo (h), μ é a velocidade específica de crescimento celular (h⁻¹), C_S é a concentração de substrato no meio (g.L⁻¹), C_M é a concentração de substrato na vazão de mosto (g.L⁻¹), Y_{XS} é o coeficiente de rendimento de substrato à células (gx.gs⁻¹), Y_{ES} é o coeficiente de rendimento de substrato a etanol (ge.gs⁻¹), C_E é a concentração de etanol no meio e V é o volume ocupado do reator (L).

A estimativa do parâmetro μ é de grande importância na simulação do crescimento da levedura dentro das dornas de fermentação, assim foi escolhido um modelo cinético adequado que represente bem o comportamento da levedura. Foi escolhido o modelo cinético de Andrews-Levenspiel que considera a inibição por substrato e produto, mostrado na equação 2.10. Os parâmetros cinéticos Y_{XS} , Y_{ES} , μ_{max} , K_S , K_{IS} , C_{EM} e n dos balanços de massa e do cálculo do μ foram obtidos a partir de experimentos de batelada alimentada realizados em laboratório. Esses parâmetros são dependentes da temperatura que são realizados os experimentos, assim foram escolhidos os parâmetros obtidos na temperatura mais próxima das condições industriais, com a qual a simulação será comparada. Os valores dos parâmetros cinéticos utilizados estão na tabela 3.1:

Parâmetros	Valor
T(C°)	34
$Y_{XS} (gx.gs^{-1})$	0,0381±0,0018
Y_{ES} (ge.gs ⁻¹)	0,458±0,002
μ_{max} (h ⁻¹)	0,220±0,002
$K_{S}(g.L^{-1})$	78,55±2,75
K_{IS} (g.L ⁻¹)	170,5±7,5
C_{EM} (ge.L ⁻¹)	93,8±27,8
n	0,119±0,031

Tabela 3.1 - Parâmetros cinéticos utilizados na simulação

Fonte: Veloso (2019)

3.3 Modelagem dos equipamentos

Na realização da simulação do processo de fermentação se faz necessário a escolha e modelagem dos principais equipamentos utilizados no processo Melle-Boinot. Os equipamentos escolhidos para compor a simulação foram a dorna de fermentação, a centrífuga e a cuba de tratamento de fermento.

3.3.1 Modelagem da dorna

No código o balanço de massa dentro da dorna de fermentação foi adaptado das equações 3.1 a 3.3.

$$diff(V) = In \ pe \ cuba.Fvol + In \ mosto.Fvol - Outlet.Fvol$$
(3.3.1.1)

Onde In_pe_cuba.Fvol é a vazão de entrada na dorna para o enchimento do pé de cuba. In_mosto.Fvol é a vazão de entrada do mosto na dorna e Outlet.Fvol é a vazão de saída da dorna.

 $diff(V*Cs) = In_pe_cuba.Fvol * In_pe_cuba.Cs + In_mosto.Fvol * In_mosto.Cs - Outlet.Fvol * Outlet.Cs - mi*Cx/Y_{XS}*V$ (3.3.1.2)

onde In_pe_cuba.Cs é a concentração de substrato na vazão que entra da cuba de tratamento, In_mosto.Cs é a concentração de substrato do mosto, Outlet.Cs é a concentração de substrato na saída da dorna.

 $diff(V*Cx) = In_pe_cuba.Fvol * In_pe_cuba.Cx + In_mosto.Fvol * In_mosto.Cx - Outlet.Fvol * Outlet.Cx + mi*Cx*V$ (3.3.1.3)

onde In_pe_cuba.Cx é a concentração de levedura na vazão que entra da cuba de tratamento, In_mosto.Cx é a concentração de levedura no mosto, Outlet.Cx é a concentração de levedura na saída da dorna.

$$diff(V^*Ce) = In_pe_cuba.Fvol * In_pe_cuba.Ce + In_mosto.Fvol * In_mosto.Ce - Outlet.Fvol * Outlet.Ce + mi^*Cx/Yxs^*Yes^*V$$
(3.3.1.4)

onde In_pe_cuba.Ce é a concentração de etanol na vazão que entra da cuba de tratamento, In_mosto.Ce é a concentração de etanol no mosto, Outlet.Ce é a concentração de etanol na saída da dorna.

Na tabela 3.2 estão dispostas as equações dos estados da dorna e as condições para a troca de cada estado:

Equações anvas	Condição para troca
	de estado
In_mosto.Fvol = $0 * m^3/h'$	when
Outlet.Fvol = $0 *'m^3/h'$	In_pe_cuba.Fvol <
mi = 0 * '1/s'	0.001 * 'm^3/h'
diff(Clock)= $0 * '1/s'$	switchto "Espera"
In_mosto.Fvol = $0 * m^3/h'$	when Clock < 0.001
$Outlet.Fvol = 0 *'m^{3/h'}$	switchto "Alim"
mi = 0 * '1/s'	
diff(Clock)= -1/TimeEspera	
In_mosto.Fvol = 420 * 'm^3' /TimeAlim;	when $V > 660 *$
Outlet.Fvol = $0 *'m^3/h'$	'm^3' switchto
mi = mimax*Cs/(Ks+Cs+Cs*(Cs/Kis))*Cetn	"AlimP"
diff(Clock) = 1/TimeEspera	
In_mosto.Fvol= $0 * m^3/h'$	when $Cs < 1 *'g/l'$
$Outlet.Fvol = 0 *'m^{3/h'}$	switchto "Descarga"
mi = mimax*Cs/(Ks+Cs+Cs*(Cs/Kis))*Cetn	
diff(Clock) = $0 * '1/s';$	
In_mosto.Fvol = $0 *'m^3/h'$	when $V < 0.1*'m^{3'}$
$Outlet.Fvol = 660*'m^{3}/h'$	switchto "Parada"
mi = mimax*Cs/(Ks+Cs+Cs*(Cs/Kis))*Cetn	
diff(Clock) = $0 * '1/s'$	
In_mosto.Fvol = $0 *'m^3/h'$	when
$Outlet.Fvol = 0*'m^3/h'$	In_pe_cuba.Fvol >
mi = mimax*Cs/(Ks+Cs+Cs*(Cs/Kis))*Cetn	0.001 * 'm^3/h'
diff(Clock) = $0 * '1/s'$	switchto "Ench"
	In_mosto.Fvol = 0 * 'm^3/h' Outlet.Fvol = 0 *'m^3/h' mi = 0 * '1/s' diff(Clock)= 0 * '1/s' In_mosto.Fvol = 0 * 'm^3/h' Outlet.Fvol = 0 *'m^3/h' mi = 0 * '1/s' diff(Clock)= -1/TimeEspera In_mosto.Fvol = 420 * 'm^3' /TimeAlim; Outlet.Fvol = 0 *'m^3/h' mi = mimax*Cs/(Ks+Cs+Cs*(Cs/Kis))*Cetn diff(Clock) = 1/TimeEspera In_mosto.Fvol= 0 *'m^3/h' Outlet.Fvol = 0 *'m^3/h' Outlet.Fvol = 0 *'m^3/h' Mi = mimax*Cs/(Ks+Cs+Cs*(Cs/Kis))*Cetn diff(Clock) = 0 *'1/s'; In_mosto.Fvol = 0 *'m^3/h' Outlet.Fvol = 660*'m^3/h' Mi = mimax*Cs/(Ks+Cs+Cs*(Cs/Kis))*Cetn diff(Clock) = 0 *'1/s' In_mosto.Fvol = 0 *'m^3/h' Outlet.Fvol = 0 *'m^3/h' Mi = mimax*Cs/(Ks+Cs+Cs*(Cs/Kis))*Cetn diff(Clock) = 0 *'1/s'

Tabela 3.2 - Tabela com as equações dos estados da dorna

3.3.2 Modelagem da centrífuga

Na modelagem da centrífuga foi considerado que a vazão da saída da dorna de fermentação entra na centrífuga que separa em duas correntes, uma corrente entra para a dorna volante e a outra vai para a cuba de tratamento de fermento.

$$InletC.Fvol = OutletV.Fvol+OutletU.Fvol$$
(3.3.2.1)

Onde InletC.Fvol é a vazão de entrada na centrífuga, OutletV.Fvol é a vazão de saída da centrífuga que vai para a dorna volante, OutletU.Fvol é a vazão de saída da centrífuga que vai para a cuba de tratamento.

$$OutletU.Fvol = InletC.Fvol*InletC.Cx/OutletU.Cx$$
(3.3.2.2)

Onde InletC.Cx é a concentração de levedura na entrada da centrífuga, OutletU.Cx é a concentração de levedura na saída da centrífuga que vai para a cuba de tratamento.

$$OutletV.Cs = InletC.Cs \tag{3.3.2.3}$$

Onde InletC.Cs é a concentração de substrato que entra na centrífuga, OutletV.Cs é a concentração de substrato na vazão que vai para a dorna volante.

$$OutletV.Ce = InletC.Ce \tag{3.3.2.4}$$

Onde OutletV.Ce é a concentração de etanol que vai para a dorna volante, InletC.Ce é a concentração de etanol que entra na centrífuga.

$$InletC.Cs / (rho(1) - InletC.Cx) = OutletU.Cs / (rho(2) - OutletU.Cx)$$
(3.3.2.5)

Onde rho(1) é a densidade da água, rho(2) é a densidade do creme de levedura, InletC.Cx é a concentração de células que entra na centrífuga, OutletU.Cs é a concentração de substrato que sai da centrífuga para a cuba de tratamento, OutletU.Cx é a concentração de levedura que sai da centrífuga para a cuba de tratamento.

onde OutletU.Ce é concentração de etanol que vai para cuba de tratamento.

3.3.3 Modelagem da cuba de tratamento de fermento

Na modelagem da cuba de tratamento de fermento foi considerado que a cuba enche com a saída de creme de levedura da centrífuga e purga qualquer excesso de fermento que entra na cuba,

diff(V*Outlet.Cs) = Inlet.Fvol * Inlet.Cs - Outlet.Fvol * Outlet.Cs - Outlet_purga.Fvol * Outlet_purga.Cs (3.3.3.1)

onde Outlet.Cs é a concentração de substrato na corrente que sai da cuba, Inlet.Fvol é a vazão da corrente que entra na cuba, Inlet.Cs é a concentração de substrato que entra na cuba, Outlet.Fvol é vazão da corrente que sai da cuba para a dorna, Outlet_purga.Fvol é a vazão de purga e Outlet_purga.Cs é a concentração de substrato na purga.

diff(V*Outlet.Cx) = Inlet.Fvol * Inlet.Cx - Outlet.Fvol * Outlet.Cx - Outlet_purga.Fvol * Outlet_purga.Cx (3.3.3.2)

onde Outlet.Cx é a concentração de levedura na corrente que sai da cuba, Inlet.Cx é a concentração de células da corrente que entra na cuba, Outlet.Cx é a concentração de levedura que sai da cuba para a dorna, Outlet_purga.Cx é a concentração de levedura que sai junto com a purga.

diff(V*Outlet.Ce) = Inlet.Fvol * Inlet.Ce - Outlet.Fvol * Outlet.Ce - Outlet_purga.Fvol * Outlet_purga.Ce (3.3.3.3)

onde Outlet.Ce é a concentração de etanol na corrente que saí da cuba, Inlet.Ce é a concentração de etanol na corrente que entra na cuba, Outlet.Ce é a concentração de etanol que sai da cuba para a dorna, Outlet_purga.Ce é a concentração de etanol que sai junto coma purga.

onde Inlet_agua.Fvol é a vazão de água que entra para diluir a cuba

$$Outlet.Cs = Outlet_purga.Cs$$
(3.3.3.5)

$$Outlet.Ce = Outlet_purga.Ce$$
(3.3.3.6)

$$Outlet.Cx = Outlet_purga.Cx$$
(3.3.3.7)

Na Tabela 3.3 estão dispostas as equações de estado da cuba de tratamento de fermento e a condição de troca de estados:

Estados	Equações ativas	Condição para troca de estado
Ench	Outlet.Fvol = $0 *'m^3/h'$	when Inlet.Fvol $< 0.1 * \text{'m}^3/\text{h'}$
(Enchimento)	Inlet_agua.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	switchto "Para"
	Outlet_purga.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	
Para	Outlet.Fvol = $0*'m^3/h'$	when Outlet.Cx <= Cxpe_cuba
	Inlet_agua.Fvol = $1000 * 'm^3/h'$	switchto "Esvaz"
	Outlet_purga.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	
Esvaz	Outlet.Fvol = Vpe_cuba/Tpe_cuba	when Vdorna > Vpe_cuba
(Esvazia)	Inlet_agua.Fvol = $0 * m^3/h'$	switchto "Purga"
	Outlet_purga.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	
Purga	Outlet_purga.Fvol = 1000 *	when $V < 0.1 * m^3$ switchto
	'm^3/h'	"Espera"
	Outlet.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	
	Inlet_agua.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	
Espera	Outlet.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	when Inlet.Fvol > 1 * m^3/h'
	Inlet_agua.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	switchto "Ench"
	Outlet_purga.Fvol = $0 * 'm^3/h'$	
	1	1

Tabela 3.3 - Tabela com as equações dos estados da cuba de tratamento de fermento

4- RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Parâmetros de uma usina sucroalcooleira

A simulação de base foi realizada utilizando parâmetros de processo baseados em uma indústria do polo noroeste do estado de São Paulo para melhor recriar o ambiente industrial. Os parâmetros utilizados estão na tabela 4.1:

Parâmetros	Valores
Temperatura	34 C°
BRIXº mosto	21
Pureza mosto	90%
Tempo total de fermentação	9,5 h
Tempo de espera	1 h
Tempo de alimentação	5 h
Tempo de descarga	0,5 h
Fração de fermento para a cuba	70%
Fração de fermento para volante	0,5%
Concentração de levedura no pé de cuba	40 g.L^{-1}
Concentração de etanol no pé de cuba	5 g.L ⁻¹
Volume pé de cuba	240 m ³
Volume utilizado da dorna	660 m ³

Tabela 4.1 - Parâmetros de processo de uma usina sucroalcooleira para a fermentação

4.2 Simulação do processo de fermentação

A partir desses parâmetros de processo foi realizada a simulação do processo de fermentação, iniciando com a carga do reator no tempo igual a 0 até um tempo final de 11 horas. O gráfico do volume de processo está representado pela Figura 4.1.



Figura 4.1 - Gráfico do volume dentro da dorna versus tempo:

Esse gráfico pode ser comparado com uma foto do perfil de volume da dorna de fermentação de uma usina, como ilustrado pela Figura 4.2:





Fonte: acervo pessoal

Comparando o gráfico obtido pela simulação e a fotografia do perfil de volume da dorna de fermentação de uma usina sucroalcooleira é possível observar que ambas possuem um perfil próximo de uma da outra. O valor do término da fermentação após a descarga do reator foi de 10,80 h.

A Figura 4.3 mostra os valores obtidos na simulação para os parâmetros Ce e Cs ao longo do tempo de fermentação. Observando o gráfico, os valores de Cs formam uma curva que aumenta com a alimentação de mosto, até chegar em um platô, onde se mantém constante até o término da alimentação, onde ocorre a queda da concentração de Cs até próximo de zero, no final da fermentação. Os valores de Ce se comportam como uma curva com duas fases, a primeira é uma fase mais íngreme, correspondendo a fase de alimentação e a segunda fase mais horizontal, que compreende a fase final da fermentação após o término da alimentação. Comparando os resultados com outros estudos sobre a fermentação em batelada alimentada da *Saccharomyces cerevisae* é possível observar que os valores obtidos estão de acordo com a literatura (VELOSO, 2019).



Figura 4.3 - Gráfico dos parâmetros Ce e Cs simulados versus o tempo

Fonte: acervo pessoal

Na Figura 4.4 é possível observar o comportamento do parâmetro µ versus o tempo de fermentação. A velocidade de crescimento de levedura tem uma curva de aumento rápido com o início da alimentação e se mantém em um leve declínio constante, como a concentração de substrato Cs se mantém quase constante nessa fase, pode-se inferir que a leve queda se deve à inibição por produto. Após o término da fase de alimentação a velocidade de crescimento celular decai com o tempo, reflexo da queda do Cs e aumento do Ce, até próximo de zero no fim da fermentação.



Figura 4.4 - Gráfico do parâmetro µ simulado versus o tempo

Fonte: acervo pessoal

4.3 Simulação dos três tempos de alimentação

A partir da validação do modelo utilizado foram realizadas novas simulações modificando a variável tempo de alimentação procurando observar mudanças no comportamento das variáveis V, µ, Cx, Cs, Ce e o tempo de término da fermentação. O volume de mosto adicionado se manteve constante em todas as simulações, com um valor de 420 m³.

Analisando a Figura 4.5 é possível observar que um tempo menor de alimentação corresponde a um tempo de fermentação menor, mas não diretamente proporcional ao tempo de redução de alimentação. A curva com a alimentação inicial, de 5 horas, atinge o volume de 0 m³ em um tempo total de fermentação mais descarga de 10,6 horas, enquanto os tempos totais de fermentação e descarga para os tempos de alimentação de 4 horas e 3 horas respectivamente são de 10 horas e 9,6 horas. Assim conclui-se que mesmo tempos de alimentação significativamente menores não refletem no processo com um ganho de tempo total de dorna igualmente mais baixos.



Figura 4.5 - Volume da dorna versus o tempo totalpara 3 tempos de alimentação

Na Figura 4.6 é ilustrado o resultado das simulações para a variável Cs para três diferentes tempos de alimentação, o tempo utilizado inicialmente de 5 horas e dois tempos propostos 4 horas e 3 horas. No gráfico é possível observar que ocorre o comportamento esperado de picos mais altos para as alimentações mais altas, já que a alimentação de substrato é maior nessas condições. Pode-se observar uma mudança no perfil das curvas de concentração, possuindo menores fases de concentração constante.



Figura 4.6 - Curvas de Cs versus tempo para os diferentes tempos de alimentação

Na Figura 4.7 é ilustrado o resultado das simulações para a variável Cx para as três condições de tempo de alimentação diferentes. No comportamento do gráfico é possível

observar que para tempos de alimentação menores a concentração de células no meio diminui para patamares mais baixos, devido a diluição do fermento no meio. Quanto menor o tempo de alimentação mais acentuada foi a diluição.



Figura 4.7 - Cx versus o tempo para 3 tempos de alimentação

Fonte: acervo pessoal

Na Figura 4.8 é ilustrado o resultado das simulações para a variável μ para as três condições de tempo de alimentação diferentes. No gráfico pode-se observar que a velocidade de crescimento celular chega a patamares mais altos com os ápices dos valores para cada tempo de alimentação de 5 horas, 4 horas e 3 horas respectivamente foram de 6,72.10⁻², 7,55.10⁻² e 8,37.10⁻² h⁻¹. Esses valores mais elevados para os tempos de alimentação menores eram esperados pela elevação da concentração de Cs nas dornas simuladas com menores tempos de alimentação, com o efeito de diluição de Cx não sendo significativo o suficiente para abaixar os μ de maneira efetiva.



Figura 4.8 - µ versus o tempo para 3 tempos de alimentação

Fonte: acervo pessoal

Na Figura 4.9 é ilustrado o resultado das simulações para a variável Ce para os três valores de alimentação. Pelo gráfico não pode se observar mudanças significativas no perfil de produção de etanol, as curvas na fase de alimentação se sobrepuseram. Ao final da batelada, como o indicador para o final da fermentação ocorre quando a concentração de Cs chega a 1 g.L⁻¹, todas as três simulações terminaram com a mesma concentração de Ce.



Figura 4.9 - Ce versus o tempo para 3 tempos de alimentação



Analisando os gráficos e as informações obtidas conclui-se que realizando a mudança de redução do tempo de alimentação das dornas introduz mudanças na cinética da reação e principalmente no comportamento de Cs ao longo do tempo. Entretanto o ganho de tempo total de fermentação não decresce igualmente, por exemplo, uma redução de duas horas no tempo de alimentação resultou em apenas uma hora de redução de tempo total. Considerando os custos associados a realizar a alimentação em um tempo menor, bombas de maior vazão, adequação da tubulação e possível gasto com insumos (antiespumante), pode não ser financeiramente viável realizar a alimentação em tempo reduzido.

5- CONCLUSÕES E SUGESTÕES

5.1 Conclusões

Foram realizadas as simulações utilizando dados de uma usina sucroalcooleira e a sua validação comparando-as com os dados da literatura. Os resultados mostram boa aderência entre os dados simulados e o comportamento geral das fermentações em escala industrial. Foram realizadas simulações exploratórias considerando três perfís de alimentação, dados pelo tempo de alimentação a vazão constante de 5, 4 e 3h. A partir da análise do comportamento cinético nas dornas, verificou-se que essa redução no tempo de alimentação não foi totalmente traduzido em uma redução no tempo total de fermentação, visto que uma redução de 2h na alimentação resultou em uma redução de 1h no tempo total da fermentação. Assim, é necessário considerar os custos de projeto e execução de fermentações com tempos de alimentação reduzidos para verificar a viabilidade econômica de tais modificações. Ademais, não foi considerado o impacto da redução no tempo de alimentação no controle de temperatura da dorna. Esse efeito pode demandar o aumento da vazão de água de resfriamento, aumento na área de troca, entre outros fatores que também aumentariam o custo fixo e operacional da planta.

5.2 Sugestões

A partir dos resultados obtidos pelo presente trabalho, sugere-se as seguintes análises para trabalhos futuros:

- Avaliar o calor produzido nas dornas de fermentação, utilizando modelos de balanço de energia e trocadores de calor.
- Simular a fermentação utilizando modelos para outros subprodutos da reação de fermentação como CO2, glicerol e ácidos orgânicos.
- Realizar uma análise de viabilidade econômica sobre uma possível redução no tempo de alimentação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AIBA, S.; SHODA, M.; NAGATANI, M. Kinetics of product inhibition in alcohol fermentation. Biotechnology and Bioengineering, 1968. v. 10, n. 6, p. 845–864. ALSOC, <http://www.enq.ufrgs.br/trac/alsoc/wiki/EMSO>. Acesso em: Agosto de 2023 ANDREWS, J. F. A mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates. Biotechnology and Bioengineering, 1968. v. 10, n. 6, p. 707–723.

BAEYENS. J. et al. Challenges and opportunities in improving the production of bioethanol. Progress in Energy and Combustion Science, 2015. v. 47, 60–88.

BASSO, L. C.; BASSO, T. O.; ROCHA, S. N. Ethanol Production in Brazil: The Industrial Process and Its Impact on Yeast Fermentation. Biofuel Production-Recent Developments and Prospects, 2011. v. 1530, p. 85–100.

CARPIO, R. R.; Otimização do processo de produção de etanol de segunda geração em um sistema integrado à primeira geração, Rio de Janeiro, UFRJ/COPPE, 2019.

CONAB - Companhia Nacional de Abastecimento. **Boletim - Cana-de-açúcar - 1º levantamento - 2023/24**, 2023. v. 1 - Safra 2022/23, n. 1 - Quarto levantamento.

CONTOIS, D. E. Kinetics of bacterial growth: relationship between population density and specific growth rate of continuous cultures, Journal of General Microbiology, 1959. v. 21, p. 40-50.

HOPPE, G.K.; HANSFORD, G.S. Ethanol inhibition of continuous anaerobic yeast growth, Biotechnology Letters, 1982. v. 4, no 1, p. 39-44.

KUTYNA, D. R. et al. Adaptive evolution of Saccharomyces cerevisiae to generate strains with enhanced glycerol production. Applied Microbiology and Biotechnology, 2011. v. 93, p. 1175–1184.

LEE, J. M.; POLLARD, J. F.; COULMAN, G. A. - Ethanol fermentation with cell recycling: computer simulation, Biotechnology and Bioengineering, 1983. v. 25, p. 497-511.

LEVENSPIEL, O. The monod equation: A revisit and a generalization to product inhibition situations, Biotechnology and Bioengineering, 1980. v. 22, n. 8, p. 1671–1687.

LOPES, M. L.; PAULILLO, S. C. DE L.; GODOY, A.; et al. **Ethanol production in Brazil: a bridge between science and industry**. Brazilian Journal of Microbiology, 2016. v. 47, p. 64–76.

MONOD, J. Recherches sur la Croissance des Cultures Bacteriennes, Hermann & Cie., Paris, 1942.

MOSER, H. The dynamics of bacterial population maintained in the chemostat, Carnegie Institute of Washington, Washington, 1958.

MUSSATTO, S. I., et al. Technological trends, global market, and challenges of bioethanol production. Biotechnology Advances, 2010. v. 28(6), p. 817–830.

MICHELLON, E.; SANTOS, A.; JULIANO, R. Breve Descrição do Proálcool e perspectivas Futuras para o Etanol Produzido no Brasil. Estrutura, Evolução e dinâmica dos sistemas alimentares e cadeias agroindustriais., 2008. p. 1–16.

RIVERA, E. C. et al. Evaluation of optimization techniques for parameter estimation: Application to ethanol fermentation considering the effect of temperature. Process Biochemistry, 2006. v. 41, n. 7, p. 1682–1687.

ROCHA, M. et al. **Optimization of fed-batch fermentation processes with bio-inspired algorithms.** Expert Systems with Applications, 2014. v. 41, n. 5, p. 2186–2195.

RODRIGUES, K. C. S., Fermentação alcoólica extrativa com emoção de

etanol por arraste com co2 e recuperação por absorção, Tese (Doutorado em Engenharia) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, 2019.

RODRIGUES, K. C. S.; et al. **Real-time monitoring of bioethanol fermentation with industrial musts using mid-infrared spectroscopy**, Industrial & Engineering Chemistry Research. 2018. v. 57, p. 10823-10831.

SOARES, R. P. **Desenvolvimento de um simulador genérico de processos dinâmicos.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.

SONEGO, J. L. S.; et al. Extractive Batch Fermentation with CO 2 Stripping for Ethanol Production in a Bubble Column Bioreactor: Experimental and Modeling. Energy & Fuels, 2014. v. 28, n. 12, p. 7552–7559. SONEGO, J. L. S.; et al. Optimization of Fed- Batch Fermentation with in Situ

Ethanol Removal by CO₂ Stripping. Energy & Fuels, 2018. v. 32, n.1, p. 954–960.

VELOSO, I. I. K.; **Modelagem e otimização da fermentação alcoólica em batelada alimentada a baixa temperatura**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, 2019.