



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DAS ETAPAS DE LIQUEFAÇÃO, SACARIFICAÇÃO E
FERMENTAÇÃO DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE ETANOL DE MILHO:
ESTUDOS PARA OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO**

PAULO GABRIEL FERREIRA DE AZEVEDO

São Carlos/SP

2025

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DAS ETAPAS DE LIQUEFAÇÃO, SACARIFICAÇÃO E
FERMENTAÇÃO DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE ETANOL DE MILHO:
ESTUDOS PARA OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO**

PAULO GABRIEL FERREIRA DE AZEVEDO

Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como requisito para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Antonio José Gonçalves da Cruz

São Carlos/SP

2025

FICHA CATALOGRÁFICA

Azevedo, Paulo Gabriel Ferreira de

Modelagem e simulação das etapas de liquefação, sacarificação e fermentação do processo de produção de etanol de milho: estudos para otimização do processo / Paulo Gabriel Ferreira de Azevedo -- 2025.

211f.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de São Carlos, campus São Carlos, São Carlos

Orientador (a): Antonio José Gonçalves da Cruz

Banca Examinadora: Alice Medeiros de Lima, Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro

Bibliografia

1. Etanol. 2. Modelagem. 3. Otimização. I. Azevedo, Paulo Gabriel Ferreira de. II. Título.

Ficha catalográfica desenvolvida pela Secretaria Geral de Informática (SIn)

DADOS FORNECIDOS PELO AUTOR

Bibliotecário responsável: Arildo Martins - CRB/8 7180



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Folha de Aprovação

Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Paulo Gabriel Ferreira de Azevedo, realizada em 29/08/2025.

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Antonio Jose Gonçalves da Cruz (UFSCar)

Profa. Dra. Alice Medeiros de Lima (UFU)

Prof. Dr. Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro (UFSCar)

O Relatório de Defesa assinado pelos membros da Comissão Julgadora encontra-se arquivado junto ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

AGRADECIMENTOS

Muitas pessoas contribuíram para que eu chegasse até aqui e esse texto não será o suficiente para eu agradecer a todas elas.

Começo agradecendo a meus pais, Maria das Graças e Paulo de Azevedo, pelo suporte, afeto, cuidado e por torcer por mim desde sempre, mesmo eu tendo que reexplicar várias vezes, ao longo desses dois anos, o que eu vim fazer em São Carlos. Amo vocês, obrigado por tudo e por tanto! Em seguida, agradeço aos meus irmãos, Graciele e Marcos, que sempre fizeram parte da minha história. Sou muito grato por tê-los na minha vida, cada um com sua particularidade e seu jeitinho de lidar comigo. Também não poderia deixar de mencionar aquele que toda noite, durante esses dois longos anos, fazia questão de falar comigo por ligação, nem que seja para dar um boa noite: meu sobrinho, Paulo, que tornava meus finais de dia mais felizes e descontraídos.

Também agradeço a Maurício, pessoa mais que especial na minha vida. Apesar da distância física, sempre foi muito presente, em todos os momentos, sejam bons ou ruins. Sou muito grato pela parceria, afeto e o cuidado.

Agradeço, também, aos amigos que fiz em São Carlos, do Kyatera e aos agregados. Foram muitos dias de debates aleatórios pós almoço, joguinhos e memes (claro!). Além da ajuda na pesquisa, evidentemente. Muitas das ideias presentes nesse trabalho foram frutos das discussões que tive com eles. Agradeço especialmente a Karoll (Kar) e Wilhamis (Sor), dois amigos que eu não esperava encontrar nessa jornada, mas que eu certamente quero levar para vida. Jamais esquecerei dos perrengues e do tempo que passamos juntos.

Agradeço ao Prof Antonio pela orientação, sempre atencioso, compreensível e disposto a me ajudar quando precisava. Eu sempre dizia às pessoas que tive sorte na escolha que fiz para orientação e esses dois anos mostraram que isso é verdade.

Por fim, agradeço à Laura e o Prof Mansur (*in memoriam*) coordenador do PRH 39 pelo suporte nesses dois anos, aos professores do PPGEQ, que contribuíram na minha formação, e a todos que, de alguma forma, contribuíram com essa jornada. Obrigado!

APOIO FINANCEIRO

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Além disso, agradeço também o apoio financeiro do Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – PRH-ANP, suportado com recursos provenientes do investimento de empresas petrolíferas na Cláusula de PD&I da Resolução ANP nº 918/2023 (PRH 39.1). Este projeto teve o apoio financeiro da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) (Processos 2024/11326-9 e 2024/10494-5) e Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações (MCTI) por meio da bolsa de mestrado acadêmico concedida pelo programa PRH 39.1 DEQ/UFSCar.

RESUMO

O uso do milho para produção de etanol de primeira geração tem crescido exponencialmente no Brasil, tornando essencial a otimização desse processo para aumentar sua competitividade em relação à cana-de-açúcar. Este estudo modela, simula e otimiza as etapas de liquefação (L), sacarificação (S) e fermentação (F) da produção de etanol de milho, avaliando quatro cenários: (i) L, S e F sequenciais (LSF), (ii) L e S simultâneos seguidos de F (SLSF), (iii) L separado e, S e F simultâneos (LSSF) e (iv) L, S e F simultâneos. Modelos matemáticos baseados em parâmetros cinéticos e dados da literatura foram implementados em Python, utilizando o Google Colaboratory. A propagação da incerteza da modelagem foi analisada pelo Método de Monte Carlo (10 mil amostras) para as concentrações de etanol. Uma usina operando por 330 dias/ano foi simulada para estimativa das despesas operacionais (OPEX), com receitas provenientes de etanol, óleo de milho e DDGS (grãos secos destilados com solúveis). O método de diferencial evolutivo foi empregado para maximização do saldo anual. Usando as concentrações iniciais da literatura, foram obtidas as concentrações dos componentes. A maior incerteza da concentração final de etanol foi de 7,45% no cenário SLSF. No âmbito da otimização, o cenário SSF apresentou a menor concentração final de etanol ($115 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$), mas a menor concentração inicial de amido ($239 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$), e o menor saldo anual (R\$ 27 milhões). O milho representou o maior custo do processo (média de 73% do custo total). O DDGS contribuiu com cerca de 31% da receita total em todos os cenários. A análise de sensibilidade indicou que a variação dos preços do etanol, do milho e do DDGS foram as variáveis que mais impactaram os indicadores econômicos da simulação, com destaque para o cenário SSF, com variação de aproximadamente 600% do seu saldo anual. Por fim, o cenário LSF apresentou melhores resultados econômicos.

Palavras-chave: Etanol; milho; modelagem; otimização.

ABSTRACT

The use of corn for first-generation ethanol production has been increasing exponentially in Brazil, making the optimization of this process essential to enhance its competitiveness relative to sugarcane. This study models, simulates, and optimizes the liquefaction (L), saccharification (S), and fermentation (F) stages of corn ethanol production, evaluating four process configurations: (i) sequential L, S, and F (LSF), (ii) simultaneous L and S followed by F (SLSF), (iii) separate L with simultaneous S and F (LSSF), and (iv) simultaneous L, S, and F. Mathematical models based on kinetic parameters and literature data were implemented in Python using Google Colaboratory. Uncertainty propagation in the modeling was analyzed using the Monte Carlo Method (10,000 samples) for ethanol concentrations. A plant operating 330 days per year was simulated to estimate the OPEX, with revenues derived from ethanol, corn oil, and DDGS (Dried Distillers Grains with Solubles). The differential evolution method was employed to maximize the annual net profit. Using initial concentrations reported in the literature, the concentrations of the process components were obtained. The highest uncertainty in final ethanol concentration was 7.45%, observed in the SLSF scenario. In terms of optimization, the SSF scenario resulted in the lowest final ethanol concentration ($115 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$), the lowest initial starch concentration ($239 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$), and the lowest annual net profit (R\$ 27 million). Corn accounted for the highest share of the total product cost averaging 73%. DDGS contributed approximately 31% of the total revenue across all scenarios. The sensitivity analysis indicated that variations in the prices of ethanol, corn, and DDGS were the factors that had the greatest impact on the economic indicators of the simulation, with particular emphasis on the SSF scenario, which showed an approximate 600% variation in its annual net balance. Finally, the LSF scenario presented better economic results.

Keywords: Ethanol; corn; modelling; optimization.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Produção de milho no Brasil entre as safras de 2010/11 e 2023/24, com previsão para a safra 2024/25.....	6
Figura 2. Volume de etanol de milho produzido no Brasil nas últimas safras e seu percentual frente ao volume total.	7
Figura 3. Cadeia produtiva do etanol de milho no Brasil.	8
Figura 4. Fluxograma genérico com os processos prévios à fermentação na produção de etanol usando o milho e a cana-de-açúcar.....	11
Figura 5. Fluxograma simplificado do processo de produção de etanol de milho.	12
Figura 6. Esquemas de atuação do inibidor num sistema enzimático: A - inibição competitiva, B - inibição não competitiva e C - inibição anticompetitiva.....	21
Figura 7. Fluxograma metodológico geral do trabalho.	35
Figura 8. Fluxograma metodológico da etapa 1 do trabalho	36
Figura 9. Perfis da variação da vazão de enchimento e do volume da dorna de fermentação ao longo do tempo.....	44
Figura 10. Fluxograma metodológico da etapa 2 do trabalho.	46
Figura 11. Arranjo dos modelos para o cenário LSF.	47
Figura 12. Arranjo dos modelos para o cenário SLSF.	47
Figura 13. Arranjo dos modelos para o cenário LSSF.	48
Figura 14. Arranjo dos modelos para o cenário SSF.	48
Figura 15. Cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF arranjados com os modelos de liquefação (L), sacarificação (S), fermentação (F), liquefação e sacarificação simultâneas (L+S), sacarificação e fermentação simultâneas (S+F) e os três processos simultâneos (L+S+F), com suas respectivas temperaturas, pH e tempos de processo.	49
Figura 16. Esquema de propagação de incerteza do valor da variável de saída em função das variáveis de entrada e dos erros dos parâmetros do modelo em cada processo.....	52
Figura 17. Esquema do algoritmo de Monte Carlo para estimar a incerteza da variável de saída em cada cenário.	53
Figura 18. Fluxograma metodológico da etapa 3 do trabalho.	55
Figura 19. Fluxograma completo do processo simulado.	56
Figura 20. Fluxograma dos processos específicos simulados em cada cenários.	60
Figura 21. Fluxograma metodológico da Etapa 4 do trabalho.	76
Figura 22. Fluxograma do algoritmo de otimização implementado.	77
Figura 23. Fluxograma metodológico da etapa 5 do trabalho.	79
Figura 24. Perfis de concentrações dos processos de liquefação (a), sacarificação (b), enchimento da fermentação (c) e da fermentação (d) no cenário LSF na usina simulada nas condições iniciais.....	81
Figura 25. Perfis de concentrações dos processos de liquefação e sacarificação simultâneas (a), enchimento da fermentação (b) e da fermentação (c) no cenário SLSF na usina simulada nas condições iniciais.....	82

Figura 26. Perfis de concentrações dos processos de liquefação (a), enchimento da sacarificação e fermentação simultâneos (b) e processo de sacarificação e fermentação simultâneos (c) no cenário LSSF na usina simulada nas condições iniciais.	83
Figura 27. Perfis de concentrações do processo de liquefação, sacarificação e fermentação simultâneos no cenário SSF na usina simulada nas condições iniciais. a) primeiras 2 horas; b) processo completo.	84
Figura 28. Perfis de concentrações (valores médios na linha sólida e desvios padrões na linha pontilhada) dos processos de liquefação (a), sacarificação (b) e fermentação (c) no cenário LSF obtidos via Método de Monte Carlo com 10000 pontos.	90
Figura 29. Histogramas, valores médios e curva normal ajustada da distribuição dos valores das concentrações finais dos principais componentes de saída do processo de liquefação (a - glicose, b - maltose e c - dextrinas), sacarificação (d - glicose) e fermentação (e - etanol) do cenário LSF. A distribuição foi dada em função da densidade de probabilidade da frequência dos eventos.	91
Figura 30. Perfis de concentrações (valores médios na linha sólida e desvios padrões na linha pontilhada) dos componentes nos processos de L+S (a) e F (b) no cenário SLSF.	93
Figura 31. Histogramas, valores médios e curva normal ajustada da distribuição dos valores das concentrações finais dos principais componentes de saída do processo de L+S (a - glicose) e F (b - etanol) do cenário SLSF.	93
Figura 32. Perfis de concentrações (valores médios na linha sólida e desvios padrões na linha pontilhada) dos componentes nos processos de L (a) e S+F (b – primeiros 30 minutos, c – processo completo) no cenário LSSF.	94
Figura 33. Histogramas, valores médios e curva normal ajustada da distribuição dos valores das concentrações finais dos principais componentes de saída dos processos de L (a – glicose, b – maltose, c - dextrinas) e S+F (d - etanol) do cenário LSSF.	95
Figura 34. Perfis de concentrações (valores médios na linha sólida e desvios padrões na linha pontilhada) dos componentes nos processos de L+S+F (a – primeiras 3h, b – processo completo) e o histograma, valor médio e curva normal ajustada da distribuição do valor da concentração final do principal componente de saída dos processos (c – etanol) do cenário SSF.	96
Figura 35. Perfis de concentrações dos processos de liquefação (a), sacarificação (b), enchimento da fermentação (c) e da fermentação (d) no cenário LSF na usina simulada nas condições otimizadas.	105
Figura 36. Perfis de concentrações dos processos de liquefação e sacarificação simultâneas (a), enchimento da fermentação (b) e da fermentação (c) no cenário SLSF na usina simulada nas condições otimizadas.	106
Figura 37. Perfis de concentrações dos processos de liquefação (a), enchimento da sacarificação e fermentação simultâneos (b) e processo de sacarificação e fermentação simultâneos (c) no cenário LSSF na usina simulada nas condições otimizadas.	107
Figura 38. Perfis de concentrações do processo de liquefação, sacarificação e fermentação simultâneos no cenário SSF na usina simulada nas condições iniciais. a) primeira hora; b) processo completo.	108

Figura 39. Diagrama de ocupação de dornas do cenário LSF simulado nas condições ótimas.....	113
Figura 40. Diagrama de ocupação de dornas do cenário SLSF simulado nas condições ótimas.....	113
Figura 41. Diagrama de ocupação de dornas do cenário LSSF simulado nas condições ótimas.....	114
Figura 42. Diagrama de ocupação de dornas do cenário SSF simulado nas condições ótimas.....	114
Figura 43. Custos _{SLAB} dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF considerando operação e supervisão.....	116
Figura 44. Custos com utilidades em milhões de R\$ por ano para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, antes (SI) e depois da otimização (*).	117
Figura 45. Custos com matérias-primas e insumos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF na simulação inicial e após a otimização. AA+GA é a soma dos custos com α -amilase e glicoamilase e insumos é a soma dos custos com amônia, NaOH, CaO e ácido sulfúrico.	121
Figura 46. Receitas com etanol, DDGS e óleo de milho geradas nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados e na simulação inicial.	124
Figura 47. Custos de operação, utilidades, matéria-prima e logísticos (transporte e estoque do milho) e as receitas com etanol, DDGS e óleo de milho, para os cenários LSF (a), SLSF (b), LSSF (c) e SSF (d) na simulação inicial (SI) e otimizados (*).	126
Figura 48. Saldos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF na simulação inicial (SI) e otimizados (*), e as variações do custo (♦) e da receita (●) totais antes e depois da otimização para cada cenário.....	127
Figura 49. Relação da variação da variável de saída em função da variável de entrada, para o cenário LSF otimizado. As variáveis de entrada foram: a) $C_{amido,0}$, b) $C_{amilase,0}$, c) $C_{glicoamilase,0}$, d) $C_{células,0}$, e) preço do etanol, f) preço do DDGS, g) preço do óleo, h) preço do milho, i) preço das células, j) preço da α -amilase, k) preço da glicoamilase, l) preço da eletricidade, m) preço do vapor, n) preço da água de resfriamento, o) preço da água de processo, p) n° de dornas, q) volume das dornas e r) quantidade de milho processado por dia.....	134
Figura 50. Relação da variação da variável de saída em função da variável de entrada, para o cenário SLSF otimizado. As variáveis de entrada foram: a) $C_{amido,0}$, b) $C_{amilase,0}$, c) $C_{glicoamilase,0}$, d) $C_{células,0}$, e) preço do etanol, f) preço do DDGS, g) preço do óleo, h) preço do milho, i) preço das células, j) preço da α -amilase, k) preço da glicoamilase, l) preço da eletricidade, m) preço do vapor, n) preço da água de resfriamento, o) preço da água de processo, p) n° de dornas, q) volume das dornas e r) quantidade de milho processado por dia.....	136
Figura 51. Relação da variação da variável de saída em função da variável de entrada, para o cenário LSSF otimizado. As variáveis de entrada foram: a) $C_{amido,0}$, b) $C_{amilase,0}$, c) $C_{glicoamilase,0}$, d) $C_{células,0}$, e) preço do etanol, f) preço do DDGS, g) preço do óleo, h) preço do milho, i) preço das células, j) preço da α -amilase, k) preço da glicoamilase, l) preço da eletricidade, m) preço do vapor, n) preço da água de resfriamento, o) preço da água	

de processo, p) n° de dornas, q) volume das dornas e r) quantidade de milho processado por dia.	138
Figura 52. Relação da variação da variável de saída em função da variável de entrada, para o cenário SSF otimizado. As variáveis de entrada foram: a) $C_{amido,0}$, b) $C_{amilase,0}$, c) $C_{glicoamilase,0}$, d) $C_{células,0}$, e) preço do etanol, f) preço do DDGS, g) preço do óleo, h) preço do milho, i) preço das células, j) preço da α -amilase, k) preço da glicoamilase, l) preço da eletricidade, m) preço do vapor, n) preço da água de resfriamento, o) preço da água de processo, p) n° de dornas, q) volume das dornas e r) quantidade de milho processado por dia.	140
Figura 53. Relação da variação do saldo em função da variação da $C_{amido,0}$ (a), da $C_{amilase,0}$ (b), da $C_{glicoamilase,0}$ (c) e da $C_{células,0}$ (d) nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados.	142
Figura 54. Variação dos preços de etanol e de milho no Brasil em relação ao preço de janeiro de 2020 até dezembro de 2024.	146
Figura 55. Dados das concentrações de células (a), de glicose (b) e de etanol (c) no processo de fermentação reportados por Birol et al. (1998).	163
Figura 56. Dados das concentrações de células (a), de glicose (b) e de etanol (c) no processo de fermentação reportados por Krishnan et al. (1998).	163
Figura 57. Partição do modelo de fermentação para ajuste dos parâmetros, conforme Mesquita et al. (2021).	164
Figura 58. Curvas modeladas com os parâmetros ajustados e os dados experimentais de Krishnan et al. (1995) para $C_{substrato,0}$ de 102,0 g·L ⁻¹ (a), 161,8 g·L ⁻¹ (b), 207,4 g·L ⁻¹ (c) e 289,2 g·L ⁻¹ (d).	168
Figura 59. Resíduos, em percentual, entre as curvas modeladas com os parâmetros ajustados e os dados experimentais de Krishnan et al. (1995) para $C_{glicose,0}$ de 102,0 g·L ⁻¹ (a), 161,8 g·L ⁻¹ (b), 207,4 g·L ⁻¹ (c) e 289,2 g·L ⁻¹ (d).	169
Figura 60. Detalhamento do processo da unidade 1: recepção, moagem e solubilização do milho.	173
Figura 61. Detalhamento do processo da unidade 2: destilação e geração da vinhaça bruta.	176
Figura 62. Detalhamento do processo da unidade 3: secagem do DDGS e produção do óleo de milho.	178
Figura 63. Detalhamento do processo da unidade 4: desidratação.	181
Figura 64. Dados de consumo de vapor na unidade de destilação em função da concentração de etanol no vinho e curva ajustada aos dados.	187

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Indicadores agrícolas, de processos e ambientais entre o processo de produção de etanol usando milho e cana-de-açúcar.....	10
Tabela 2. Comparação de algumas características entre as metodologias de moagem a seco e moagem úmida do milho no processo de produção de etanol.....	14
Tabela 3. Alterações nas expressões de K_m e de V_{MAX} da equação de Michaelis-Menten para cada tipo de inibição.....	21
Tabela 4. Descritores usados em cada processo para busca dos modelos cinéticos....	36
Tabela 5. Valores dos parâmetros para a liquefação a 80 °C e pH 7.....	38
Tabela 6. Valores dos parâmetros e constantes para a sacarificação a 65 °C e pH 5,5.	40
Tabela 7. Valores dos parâmetros e constantes para a fermentação a 30 °C e pH 6....	41
Tabela 8. Razão mássica entre o componente i e j.	50
Tabela 9. Valores médios e desvios dos parâmetros e das constantes para a liquefação usados no método de Monte Carlo.	53
Tabela 10. Valores médios e desvios dos parâmetros e das constantes para a sacarificação usados no método de Monte Carlo.....	54
Tabela 11. Valores médios e desvios dos parâmetros e das constantes para a fermentação usados no método de Monte Carlo.....	54
Tabela 12. Razão da quantidade de insumos químicos demandados no processo em relação à quantidade de milho processada.	67
Tabela 13. Valores unitários das matérias-primas, insumos químicos e produtos usados na usina simulada.	69
Tabela 14. Valores unitários das utilidades usadas na usina simulada.....	70
Tabela 15. Número de operadores/turno para os equipamentos dos processos gerais da usina simulada.	71
Tabela 16. Número de operadores/turno para os equipamentos dos processos específicos da usina simulada em cada cenário.	72
Tabela 17. Regiões de busca das variáveis no processo de otimização.	78
Tabela 18. Concentrações dos componentes nos processos de liquefação (L), sacarificação (S) e fermentação (F) do cenário LSF na simulação inicial, em $g \cdot L^{-1}$	84
Tabela 19. Concentrações dos componentes nos processos de liquefação e sacarificação simultâneas (L+S) e fermentação (F) do cenário SLSF na simulação inicial, em $g \cdot L^{-1}$	85
Tabela 20. Concentrações dos componentes nos processos de liquefação (L) e sacarificação e fermentação simultâneas (S+F) do cenário LSSF na simulação inicial, em $g \cdot L^{-1}$	85
Tabela 21. Concentrações dos componentes nos processos de liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas (L+S+F) do cenário SSF na simulação inicial, em $g \cdot L^{-1}$	86

Tabela 22. Tempos das operações de enchimento (I), de processo (II), de esvaziamento (III) e de limpeza (IV) das dornas em cada processo nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF na simulação inicial, em minutos.....	86
Tabela 23. Média e desvio padrão (Std) das concentrações finais dos componentes de saída nos processos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF gerados na análise de Monte Carlo.....	97
Tabela 24. Indicadores técnicos e econômicos estimados na simulação inicial para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF e os valores da literatura.	99
Tabela 25. Valores das concentrações iniciais dos componentes na simulação inicial ($C_{inicial}$), na simulação otimizada ($C_{inicial}^*$) e suas variações percentuais para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF.....	101
Tabela 26. Valores da função objetivo (saldo) na simulação inicial, nos cenários otimizados e suas variações percentuais para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF ..	102
Tabela 27. Tempo dos processos presentes nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF na simulação inicial ($t_{processoSI}$) e na condição otimizada ($t_{processo}^*$), e sua variação percentual antes e após a otimização.	108
Tabela 28. Alguns indicadores técnicos relacionados à modelagem cinética dos processos presentes nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados e suas variações com os cenários da simulação inicial.	110
Tabela 29. Tempo de ciclo e número de ciclos estimados para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados e suas respectivas variações com os resultados da simulação inicial.	115
Tabela 30. Tags dos trocadores de calor responsáveis pelo resfriamento da dorna de fermentação, a vazão da água de resfriamento, os tempos do processo de fermentação no ano, em horas, e o consumo total de água de resfriamento por cada trocador, em cada cenário, antes e depois da otimização.....	118
Tabela 31. Quantidades das matérias-primas e insumos demandadas nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF após a otimização e suas variações em relação à simulação inicial.	120
Tabela 32. Quantidades dos produtos nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF após a otimização e suas variações em relação à simulação inicial.....	123
Tabela 33. Principais resultados relacionados à cinética dos processos e dos diagramas de ocupação de dornas dos cenários antes (SI) e depois (*) da otimização.....	129
Tabela 34. Principais resultados relacionados aos consumos de utilidades, de MPs e produção de produtos dos cenários antes (SI) e depois (*) da otimização, em base anual.	130
Tabela 35. Principais resultados financeiros dos cenários antes (SI) e depois (*) da otimização, em base anual.....	131
Tabela 36. Valores médios, de desvio padrão e intervalos de confiança dos parâmetros estimados para o processo de fermentação a 30 °C.....	167
Tabela 37. Média e desvio padrão percentuais dos resíduos entre a curva modelada com os parâmetros ajustados e os dados experimentais de Krishnan et al. (1995).....	169
Tabela 38. Equipamentos dos processos gerais, TAGs e suas respectivas funções. .	171

Tabela 39. Equipamentos dos processos específicos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, TAGs e suas respectivas funções.	172
Tabela 40. Potências, tempos de uso e energias consumidas pelas bombas nos processos gerais otimizados para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF.....	186
Tabela 41. Resultados de vazão, tempo de uso e consumo total de vapor pelos trocadores nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados.....	188
Tabela 42. Resultados de vazão, tempo de uso e consumo total de vapor pelos trocadores nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados.....	190

SUMÁRIO

1.INTRODUÇÃO	1
2.OBJETIVOS	4
2.1. Objetivo Geral	4
2.2. Objetivos Específicos	4
3.REVISÃO DA LITERATURA.....	5
3.1. Etanol de milho: vantagens, cenário brasileiro, insegurança alimentar e etanol de cana-de-açúcar	5
3.1.1. Etanol de milho e de cana-de-açúcar.....	10
3.2. Etanol de milho: processo de produção	12
3.2.1. Limpeza, moagem e solubilização	12
3.2.2. Hidrólises enzimática: liquefação e sacarificação	15
3.2.3. Fermentação alcoólica	21
3.2.4. Destilação e purificação do etanol	25
3.3. Arranjos da liquefação, sacarificação e fermentação.....	28
3.4. Estudos de simulação e otimização de etanol de milho	29
4.METODOLOGIA	34
4.1. Definição dos modelos cinéticos	35
4.1.1. Modelos de liquefação	37
4.1.2. Modelos de sacarificação.....	38
4.1.3. Modelos de fermentação.....	40
4.1.4. Balanços de massa dos processos.....	41
4.2. Modelagem dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF	46
4.2.1. Arranjo dos modelos	46
4.2.2. Resolução numérica	49
4.2.3. Incerteza dos modelos	51
4.3. Ambiente de simulação da usina.....	55
4.3.1. Descrição dos processos específicos	57
4.3.2. Descrição dos processos gerais	61
4.3.3. Resolução do balanço de massa	64
4.3.4. Cálculos das utilidades	64
4.3.5. Estimativas de custos, de receitas e de saldo da usina	67

4.3.6.	Indicadores técnicos e econômicos estimados	74
4.4.	Otimização dos cenários	75
4.5.	Análise de sensibilidade	78
	5.RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	80
5.1.	Simulação inicial: comportamento cinético, análise da incerteza dos modelos e indicadores técnicos	80
5.1.1.	Comportamento cinético dos processos	80
5.1.2.	Avaliação das incertezas dos modelos	89
5.1.3.	Indicadores técnicos na simulação inicial	97
5.2.	Otimização dos cenários	100
5.3.	Simulação otimizada: comportamento cinético, diagramas de ocupação de dornas, estimativas econômicas e indicadores	103
5.3.1.	Comportamento cinético dos processos	104
5.3.2.	Diagrama de ocupação de dornas	112
5.3.3.	Estimativas de custos, receitas e saldos.....	115
5.4.	Análise de sensibilidade	132
	6.CONCLUSÕES	147
	7.SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	149
	8.REFERÊNCIAS.....	150
	9.APÊNDICES	162
9.1.	Apêndice A – Ajuste dos parâmetros do modelo do processo de fermentação	162
9.2.	Apêndice B – Balanços de massa e energia do processo para os diferentes cenários	169
9.2.1.	Balanço de massa – processos gerais.....	173
9.2.1.	Balanço de energia/utilidades – processos gerais e específicos	182
9.3.	Apêndice C – Equações dos indicadores calculados na simulação	190

1. INTRODUÇÃO

As mudanças climáticas que o planeta Terra tem sofrido nos últimos anos são evidentes. São exemplos dessas transformações: o aumento da temperatura média da superfície terrestre, o descongelamento de calotas polares e a alteração de biomas. Assim, ações que visam mitigar, ou até mesmo erradicar, esses problemas têm sido amplamente discutidos pelas autoridades políticas e ambientais ao redor do mundo. O uso de fontes de energia fóssil contribui de forma relevante para a intensificação dos problemas supramencionados; todavia, o uso de energia renovável surge como uma das soluções nesse âmbito (ONU Brasil, 2022). Dentro dessa classe surge o etanol, um biocombustível líquido que pode ser feito de biomassas lignocelulósicas, amiláceas ou que contenham açúcares fermentescíveis (Kumar; Singh, 2019).

O Brasil é o segundo maior produtor mundial de etanol, sendo esse o biocombustível mais produzido no país, com um volume aproximadamente cinco vezes superior ao do biodiesel, o segundo mais produzido (UNICADATA, 2024). Esses dados destacam a importância do etanol no mercado nacional e internacional de biocombustíveis. A cana-de-açúcar tem sido historicamente a principal biomassa utilizada, representando mais de 90% da matéria-prima para produção de etanol no Brasil nos últimos anos (ANP, 2024). No entanto, a forte dependência dessa cultura apresenta desafios, como sua alta biodegradabilidade (Misra *et al.*, 2016) que impede o armazenamento prolongado (Milanez *et al.*, 2014), limitando a flexibilidade operacional das usinas.

Diante disso, a diversificação de matérias-primas torna-se estratégica, e o milho surge como uma alternativa promissora. Embora sua colheita também ocorra em períodos sazonais, o grão pode ser estocado ao longo do ano, garantindo maior disponibilidade para produção contínua (Elias, 2018). O Brasil já investe nessa rota tecnológica, evidenciado pelo crescimento exponencial da produção de etanol de milho nos últimos anos (UNICADATA, 2024).

Não obstante, a produção de etanol a partir do milho é um processo mais complexo em comparação ao da cana-de-açúcar, principalmente devido às etapas prévias à

fermentação. Enquanto a cana-de-açúcar é naturalmente rica em açúcares fermentescíveis, permitindo sua fermentação após etapas de limpeza, moagem, extração e concentração do caldo (Basso *et al.*, 2011), o mesmo não se aplica ao milho. Esse grão contém amido como principal fonte de carboidratos (Zhang *et al.*, 2021), um polissacarídeo composto por unidades de glicose que não pode ser diretamente fermentado (Białas; Czerniak; Szymanowska-Powalowska, 2014). Assim, antes da fermentação, o amido deve ser hidrolisado por meio dos processos de liquefação e sacarificação, o que adiciona etapas, custos e tempo ao processo produtivo (Ziero *et al.*, 2021). Dessa forma, a otimização dessas etapas, bem como do próprio processo fermentativo, é essencial para aumentar a competitividade da produção de etanol de milho em relação à rota tradicional da cana-de-açúcar.

A liquefação baseia-se na hidrólise do amido, um polímero de glicose, por meio da enzima α -amilase. Nessa hidrólise, ocorre a quebra randômica das ligações α -1,4-glicosídicas presentes no amido, gerando a redução do tamanho da cadeia polimérica e formando uma mistura de oligossacarídeos de cadeias menores (Kwiatkowski *et al.*, 2006; Białas; Czerniak; Szymanowska-Powalowska, 2014). Na etapa de sacarificação, a enzima glicoamilase é adicionada. Essa enzima atua não apenas nas ligações α -1,4-glicosídicas, mas também nas α -1,6-glicosídicas, com uma taxa de hidrólise menor para as últimas. Nessa etapa, ocorre a hidrólise dos oligossacarídeos formados na liquefação e, ainda, do amido residual da hidrólise anterior, formando moléculas de glicose (Kwiatkowski *et al.*, 2006; Presečki; Blažević; Vasić-Rački, 2013a; Kumar; Singh, 2019). Então, o processo segue para a fermentação, onde a levedura *Saccharomyces cerevisiae*, em seu processo anaeróbico de produção de energia, consome glicose, produz mais células de leveduras e forma, dentre outros compostos, o etanol e o dióxido de carbono (CO₂), sendo o primeiro o produto de interesse do processo estudado no presente trabalho (Cripwell *et al.*, 2020).

As etapas de liquefação, sacarificação e fermentação podem ser realizados em diferentes configurações de processo (Devos e Colla, 2022). Podem-se citar:

- LSF (*Liquefaction, Saccharification and Fermentation*): liquefação, sacarificação e fermentação separadas e sequenciais;

- SLSF (*Simultaneous Liquefaction, Saccharification, and Fermentation*): liquefação e sacarificação simultâneas, seguidas da fermentação separada;
- LSSF (*Liquefaction and Simultaneous Saccharification, Fermentation*): liquefação separada, seguida de sacarificação e fermentação simultâneas, e
- SSF (*Simultaneous Liquefaction, Saccharification, Fermentation*): os três processos simultaneamente.

Cada cenário possui suas vantagens e desvantagens. O cenário SSF, por exemplo, é vantajoso no tocante ao número de equipamentos, posto que os processos de liquefação, hidrólise e fermentação ocorrem simultaneamente, o que demanda menos equipamentos para sua implementação (Kroumov; Módenes; Tait, 2006). No entanto, como as temperaturas ótimas das atividades das enzimas e das células são distintas, o processo SSF necessariamente precisa comprometer a atividade de algumas dessas espécies (geralmente o processo ocorre numa temperatura que favorece as células em detrimento das enzimas) (Białas; Czerniak; Szymanowska-Powłowska, 2014). Portanto, a comparação entre esses cenários é interessante para definição e entendimento da melhor configuração da usina de etanol de milho.

Como mencionado, no Brasil a produção de etanol de milho tem crescido exponencialmente, sobretudo na região centro-oeste. Portanto, a investigação da configuração mais adequada para esse processo poderá torná-lo mais competitivo frente à rota que usa cana-de-açúcar. Assim, diante do exposto, o presente trabalho se dispôs a estudar o processo de produção de etanol de milho, comparando os cenários mencionados, conforme os objetivos descritos na seção 2.

Os trabalhos da literatura que abordam a modelagem e simulação do processo de produção de etanol de milho utilizam planejamento fatorial, ou usam equações cinéticas e modelos logísticos em apenas uma das etapas do processo, e não abordam a otimização do processo. Dessa forma, o presente trabalho foi proposto com o objetivo de preencher essa lacuna.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo Geral

Modelar e simular as etapas de liquefação, sacarificação e fermentação do processo de produção de etanol a partir do milho, em diferentes configurações operacionais, utilizando modelos cinéticos implementados em Python e dados da literatura, com o objetivo de otimizar o processo e aprimorar sua viabilidade econômica.

2.2. Objetivos Específicos

Considerando o desenvolvimento do trabalho e o objetivo geral apresentado, tem-se os seguintes objetivos específicos:

- Reunir modelos cinéticos das etapas de liquefação, sacarificação e fermentação, utilizando informações da literatura para realizar o ajuste de parâmetros e estimativa das incertezas;
- Modelar os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF a partir de modelos e parâmetros da literatura utilizando a linguagem Python;
- Simular uma usina de produção de etanol de milho configurada nos quatro cenários avaliados usando a plataforma *Google Colaboratory* (Google Colab), empregando informações técnicas e econômicas da literatura para calcular as despesas operacionais (OPEX) e receitas de cada cenário simulado;
- Implementar um ambiente de otimização usando o Google Colab e avaliar por meio de simulações os diferentes cenários investigados;
- Avaliar os cenários otimizados com base nas respostas operacionais e econômicas obtidas utilizando dados da literatura;
- Realizar estudo de sensibilidade das principais variáveis do processo, empregando a simulação realizada e usando os parâmetros ótimos como caso base.

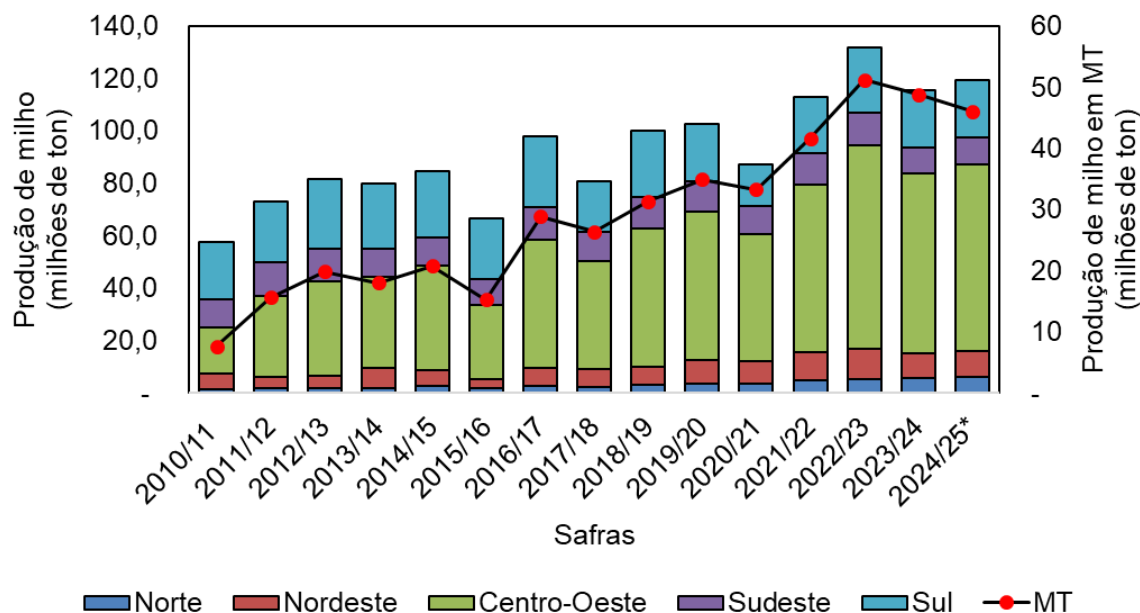
3. REVISÃO DA LITERATURA

3.1. Etanol de milho: vantagens, cenário brasileiro, insegurança alimentar e etanol de cana-de-açúcar

O milho é um grão composto principalmente pelo endosperma (83% do grão), o pericarpo (5%) e o gérmen (11%). Do ponto de vista químico, ele é composto majoritariamente de amido, de proteínas e de fibras, sendo que o primeiro corresponde à 72% do grão e os dois últimos, 9,5%. Mais de 98% do amido presente no grão de milho situa-se na região do endosperma (Kumar; Singh, 2019). Mohanty e Swain (2019) apontaram que, diante do seu percentual de conteúdo amiláceo, fibroso, proteico e oleico, o milho pode ser aplicado em diversos setores industriais além do alimentício, como os de produtos químicos, de combustível, de fibras e até de adoçantes.

No Brasil, segundo a Conab (2025), a produção de milho na safra 2023/24 se aproximou dos 120 milhões de toneladas, valor este 14% menor em comparação com a safra anterior (2022/23) que ultrapassou os 130 milhões de toneladas. Para a próxima safra, o setor prevê aumento de 3,3%, conforme ilustra a Figura 1. Além disso, o estado de Mato Grosso se destaca na produção desse grão, representando quase metade da produção nacional na última safra (42%).

Figura 1. Produção de milho no Brasil entre as safras de 2010/11 e 2023/24, com previsão para a safra 2024/25.



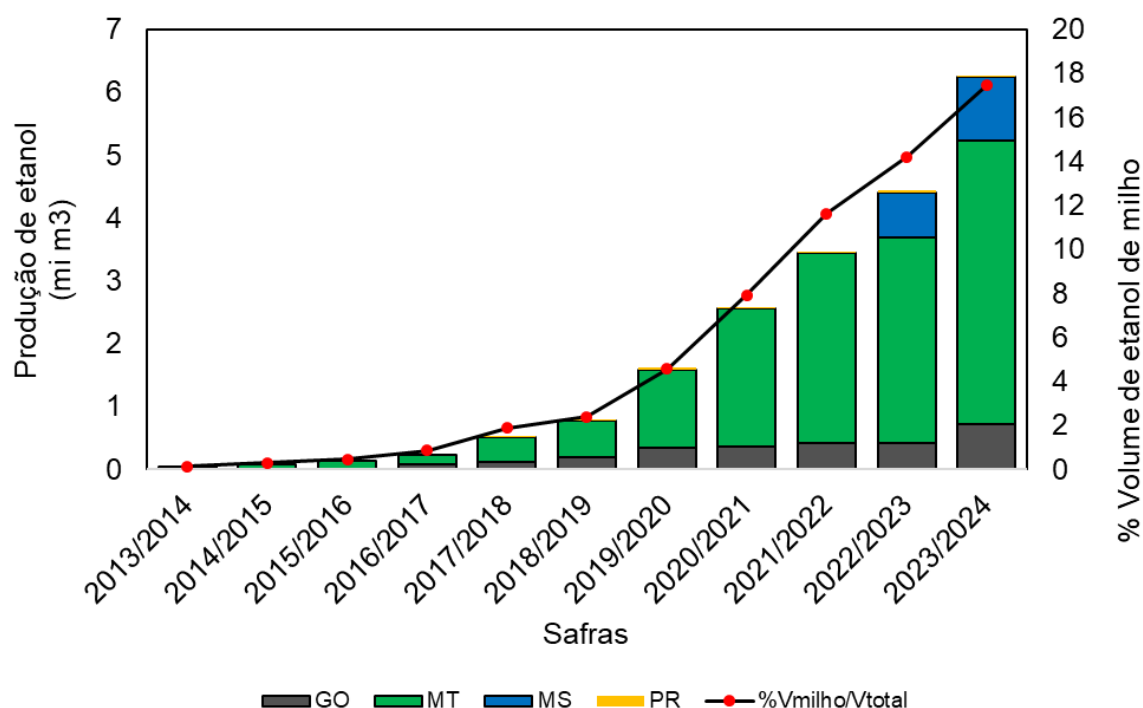
Fonte: CONAB (2025)

No que tange à produção de etanol de milho, o amido é parte essencial empregada no processo. Ele é um polissacarídeo formado por monômeros de glicose (Neves, 2021). As ligações entre os monômeros de glicose podem se dar de modo a constituir dois polímeros, a amilose e a amilopectina. O primeiro é caracterizado como um polímero linear e de baixo grau de polimerização. Sua linearidade é baseada em suas ligações α -1,4-glicosídicas. O amido comum é composto por 15 a 30% de amilose (Kumar; Singh, 2019). A amilopectina, por outro lado, é um polímero ramificado, pois seus componentes ligam-se entre si por ligações α -1,6-glicosídicas. Além disso, esse polímero possui grau de polimerização próximo de 2 milhões unidades de glicose (Eckert *et al.*, 2018; Kumar; Singh, 2019). A amilopectina e a amilose podem ser hidrolisadas por enzimas, mas em regiões distintas do grânulo de amido, isto é, a região do amido a ser hidrolisada depende do polímero presente nessa região (Uthumporn, Zaidul e Karim, 2010).

A produção de etanol utilizando o milho tem apresentado um notório crescimento no Brasil nos últimos anos, como pode ser observado na Figura 2. O aumento na última safra foi de quase 2 milhões de metros cúbicos comparado com a safra anterior,

ultrapassando os 6 milhões de metros cúbicos na safra 2023/2024. A Figura 2 mostra também o aumento da relevância do volume de etanol de milho frente ao de cana-de-açúcar, sendo que, de acordo com UNICADATA (2024), na última safra quase 1/5 do volume total de etanol produzido no país veio do milho. Depreende-se que a produção do etanol via milho cresce de maneira acelerada no Brasil, numa taxa maior que a produção via cana-de-açúcar. Além disso, o estado do Mato Grosso tem se destacado nesse âmbito, representando aproximadamente 72% da produção total de etanol de milho no país. Em contrapartida, de acordo com Eckert *et al.* (2018), esse estado possui distância média de 1000 km entre as usinas e os postos, o que contribui para o encarecimento desse produto.

Figura 2. Volume de etanol de milho produzido no Brasil nas últimas safras e seu percentual frente ao volume total.

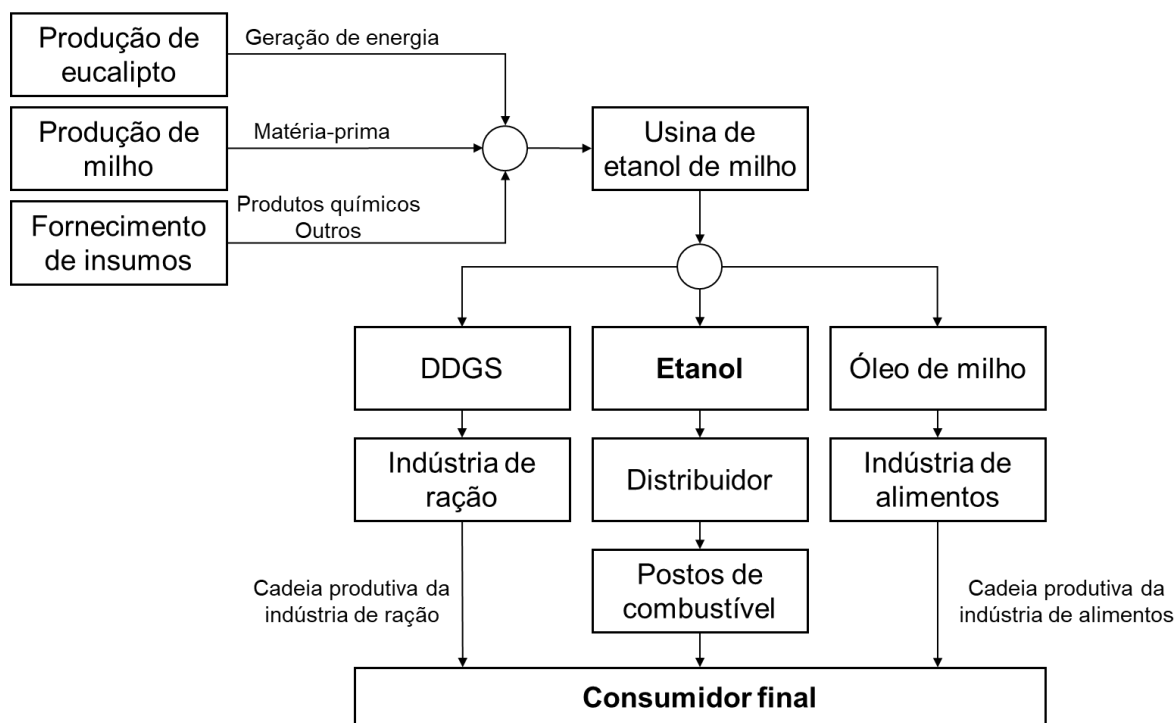


Fonte: UNICADATA (2024)

Segundo Neves (2021), no Brasil a cadeia de produção de etanol de milho envolve diversos setores, como pode ser observado na Figura 3. Essa indústria pode gerar até quase 500 mil litros de etanol, mais de 300 toneladas de DDGS (*Dried Distillers Grains*

with Soluble) e quase 13 toneladas de óleo para cada 1000 toneladas de milho processada. Se aliada à produção de etanol de cana-de-açúcar, ainda pode ofertar aproximadamente 60 MWh de energia para consumidores intermediários ou finais.

Figura 3. Cadeia produtiva do etanol de milho no Brasil.



Fonte: adaptado de Neves (2021)

As usinas produtoras de etanol de milho apresentam-se em duas configurações distintas: usinas *full* ou *flex*. A primeira é caracterizada por produzir etanol exclusivamente com o milho, enquanto a segunda também usa a cana-de-açúcar (Neves, 2021). No segundo caso, se o uso do milho e da cana-de-açúcar para a produção de etanol for paralela, essa usina é chamada de *flex full* (Alcantara *et al.*, 2020). Essas diferentes configurações possuem distintas vantagens. Quanto a investimentos, Sobrinho (2012) enfatiza que a usina *flex* necessita de um investimento menor que a *full*, pois a primeira pode se aproveitar da infraestrutura já existente do processamento da cana-de-açúcar para o processamento do milho. Além disso, nas usinas *flex* pode haver o aproveitamento da energia gerada no processamento da cana-de-açúcar, com seu bagaço. Quanto à receita, essas usinas apresentam configurações parecidas: receita majoritária com o

etanol, mas com influência significativa dos coprodutos. Contudo, as usinas *flex* podem apresentar distintas configurações ótimas para maximizar sua receita (Milanez *et al.*, 2014; CONAB, 2018). Neves (2021) relata que a produção de etanol de milho no Brasil começou numa usina *flex*, em 2012, no estado do Mato Grosso, onde foram aproveitadas as instalações de uma usina de cana-de-açúcar, o alto volume de produção do milho e o barateamento desse grão naquele período.

Quando se avalia o uso de matérias-primas alimentícias para produção de combustíveis, torna-se necessário avaliar como esse uso impacta na segurança alimentar. Com o objetivo de avaliar se a produção de etanol de milho afeta o preço desse grão nos Estados Unidos, Kocak *et al.* (2022) utilizaram modelos não-lineares e dados mensais oriundos do período de 1985 a 2020 daquele país. As variáveis utilizadas foram o preço do milho versus a produção de etanol oriundo dessa biomassa, sendo que os autores também consideraram dados de preço do petróleo, o tamanho da população e a taxa câmbio nesse período. Os resultados indicaram que há um efeito crescente entre o preço do milho e a produção de etanol usando esse grão; isto é, a produção de etanol de milho contribuiu no aumento do custo desse grão, o que pode diminuir o acesso da população a esse alimento.

Nesse âmbito, Subramaniam *et al.* (2019) investigaram as implicações da produção de biocombustíveis na segurança alimentar de 51 países no período entre 2011 e 2016. Os autores relacionaram variáveis como a produção de biocombustíveis, o crescimento populacional, crédito à agricultura, desemprego, dentre outros. Os resultados reportados pelos autores indicaram que o aumento da produção de biocombustíveis aumentou a insegurança alimentar no período estudado. De acordo com os autores, esse resultado é reflexo da competição por commodities agrícolas, como soja e milho, e por recursos de produção, como terra e água. Por fim, os autores recomendaram que políticas nacionais de biocombustíveis sejam redesenhadas, visando criar um ambiente em que os dois setores se beneficiem com suas respectivas produções.

O Comitê de Segurança Alimentar Mundial (CFS, 2013) recomenda que políticas de fomento à bioenergia devem seguir em conjunto com políticas voltadas para o âmbito

agrícola e alimentar, de modo a não se desconsiderar suas interconexões. Das diversas ações recomendadas por esse comitê, podem-se citar o apoio da participação de pequenos produtores nas ações de transformação energética e a promoção da Pesquisa e Desenvolvimento voltada melhorar a eficiência dos biocombustíveis em termos de uso dos recursos.

3.1.1. Etanol de milho e de cana-de-açúcar

O processo produtivo usando o milho e a cana-de-açúcar possuem distinções e similaridades. Apesar da cana-de-açúcar ser a principal biomassa usada na produção de etanol no Brasil, conforme observado na Figura 2, o milho é destaque nos Estados Unidos (Iglesias; Sesmero, 2015). A Tabela 1 exibe alguns indicadores que comparam esses dois processos de produção. Pode-se observar que, com o milho, se produz mais etanol por unidade de área colhida e por unidade de biomassa processada. Entretanto, com a cana-de-açúcar, o balanço energético (a relação entre a energia demandada para produção e retorno energético gerado para a quantidade de combustível produzida) é cerca de 4 vezes maior comparado ao do milho.

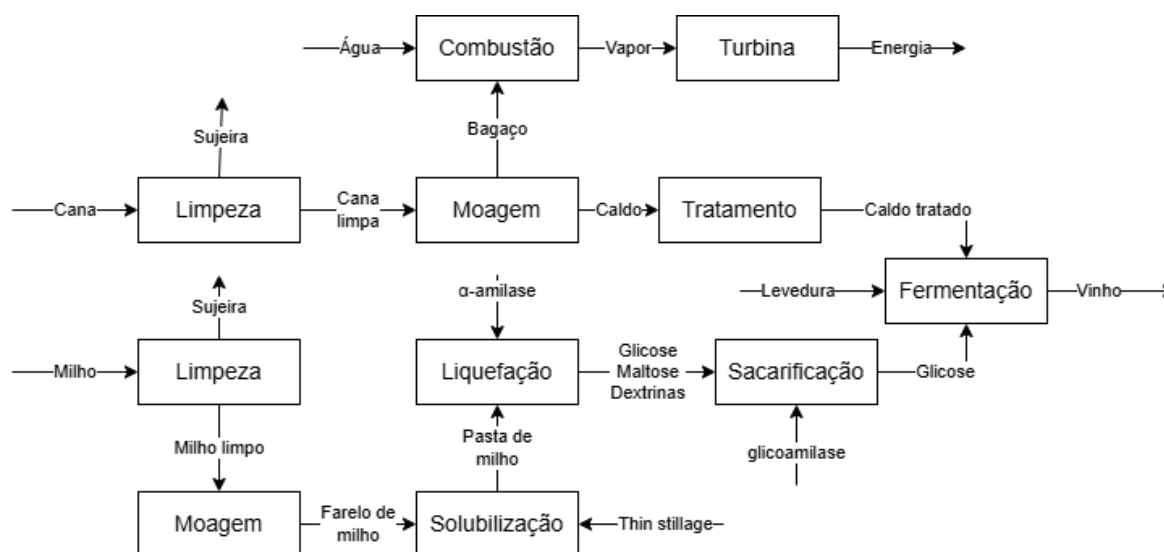
Tabela 1. Indicadores agrícolas, de processos e ambientais entre o processo de produção de etanol usando milho e cana-de-açúcar.

Indicador	Unidade	Milho	Cana	Referência
Produtividade agrícola	L·ha ⁻¹	7000	4000	Milanez <i>et al.</i> (2014)
Custos de colheita	mil R\$.ha ⁻¹	12 a 15,4	5,3	Milanez <i>et al.</i> (2014)
Energia produzida por tonelada de matéria-prima	kJ·t ⁻¹	90	391	Luz <i>et al.</i> (2023)
Volume de etanol por tonelada de matéria-prima	L·t ⁻¹	388	89	Luz <i>et al.</i> (2023)
Redução de emissão de gases de efeito estufa	%	21	61	Milanez <i>et al.</i> (2014)
Balanço energético	J·J ⁻¹	1,9 a 2,3	9	Milanez <i>et al.</i> (2014)
Consumo de água por tonelada de matéria-prima	t·t ⁻¹	5,2	1,65	Donke <i>et al.</i> (2016)

Fonte: autor (2025)

Uma das principais diferenças entre as matérias-primas é quanto à disponibilidade do açúcar fermentescível. A glicose, substância convertida à etanol, é mais facilmente obtida usando a cana-de-açúcar que o milho. Iglesias e Sesmero (2015) descrevem que, previamente à fermentação, a cana-de-açúcar precisa ser processada para extração do seu caldo, que é rico em sacarose, sendo este um dímero de glicose e frutose que é hidrolisado e fermentado pela *Saccharomyces cerevisiae* (Lopes *et al.*, 2016). De acordo com Andrietta (2009), esse processo baseia-se na abertura das células da cana via moagem, seguido do tratamento do caldo extraído, via ajuste de pH, decantação, filtração e concentração. Por outro lado, para o milho, conforme Ziero *et al.* (2021), além da extração do amido via moagem e da solubilização da pasta formada, há o processo de conversão desse amido em açúcares fermentáveis por meio da hidrólise enzimática. Essa distinção é ilustrada na Figura 4, que apresenta um fluxograma genérico dos processos de etanol de milho usando cana-de-açúcar e milho até a etapa de fermentação.

Figura 4. Fluxograma genérico com os processos prévios à fermentação na produção de etanol usando o milho e a cana-de-açúcar.



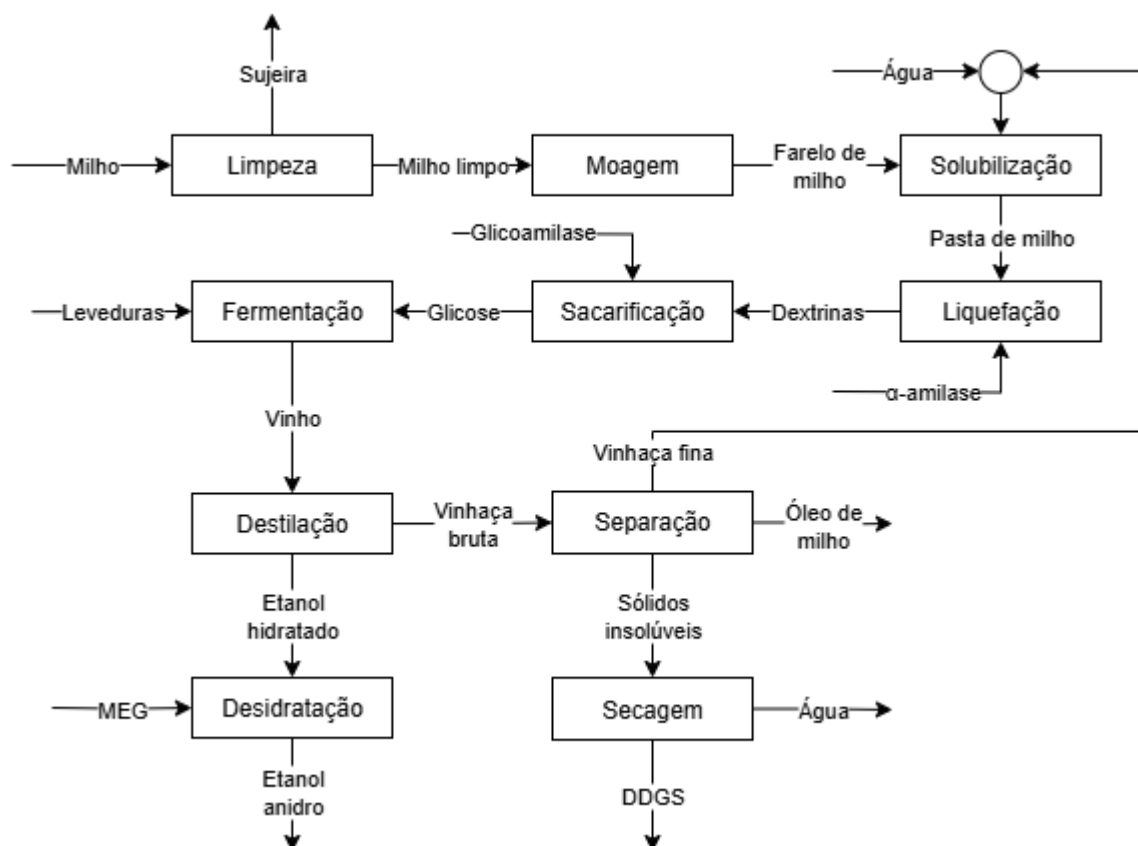
Fonte: adaptado de Bothast e Schlicher (2005), Donke *et al.* (2016) e Iglesias e Sesmero (2015)

O presente trabalho foca no processo usando o milho, que será detalhado na próxima seção.

3.2. Etanol de milho: processo de produção

O processo simplificado de produção de etanol oriundo do milho está presente na Figura 5. Para melhor entendimento desse processo, o presente trabalho o dividirá em 4 etapas: (i) limpeza, moagem e solubilização, (ii) hidrólises enzimáticas, (iii) fermentação alcoólica e (iv) destilação e purificação do etanol.

Figura 5. Fluxograma simplificado do processo de produção de etanol de milho.



Fonte: Adaptado de Bothast e Schlicher (2005), Donke *et al.* (2016) e Iglesias e Sesmero (2015).

3.2.1. Limpeza, moagem e solubilização

A limpeza do milho contribui na diminuição de problemas em telas ou outros equipamentos e com poeira, sendo comum o uso de peneiras ou sopradores para remoção de impurezas mais grossas e de fácil remoção (Singh *et al.*, 2020). No entanto, na etapa de limpeza, um dos grandes desafios é reduzir os materiais classificados como BCFM (*Broken Corn and Foreign Material*), ou seja, pedaços de grãos de milho

quebrados ou outros materiais desconhecidos). BCFM é todo material que passa, junto com o grão de milho, no processo de peneiramento, uma das etapas da limpeza do grão, e se mistura com o este. Assim, a limpeza efetiva do grão, com a remoção dos BCFM, pode ser feita em duas etapas: (i) emprego do "*Carter Dockage Tester*", que se utiliza de peneiras vibratórias e duas (ou mais) correntes de ar de maneira simultânea para remoção mais efetiva das impurezas, e (ii) remoção manual das impurezas residuais (USDA, 2016). Após isso, o milho limpo é enviado para o processo de moagem.

Quanto às tecnologias de moagem, há duas rotas: a moagem úmida e a moagem seca. De acordo com Bothast e Schlicher (2005), a maioria dos processos são a seco, representando 67%. No método a seco, o grão de milho é moído com o intuito de romper as estruturas do grão e facilitar o acesso das enzimas ao amido, formando o farelo de milho, que assim segue para a solubilização (Reis; Rajendran; Hu, 2017). Milanez *et al.* (2014) informam que a moagem a seco tem a vantagem de demandar menor custo inicial de investimento, e Reis, Rajendran e Hu (2017) apontam que esse método é mais simples e direto, posto que logo após a moagem o farelo está pronto para as etapas posteriores. Para Bothast e Schlicher (2005) o método a seco é usado quando se visa maximizar o capital de retorno financeiro por unidade de volume de etanol. Por outro lado, Reis, Rajendran e Hu (2017) informam que essa rota diminui a flexibilidade em relação aos coprodutos formados no processo. Oliveira e Cruz (2023) concluíram que a moagem a seco pode contribuir com o aumento de sólidos suspensos no meio fermentativo, afetando a atividade celular, reduzindo, assim, a produtividade volumétrica da fermentação.

Na moagem a úmido, o milho é inicialmente macerado num período de 6h em solução de dióxido de enxofre (SO₂), com concentração de 2.000 ppm, sendo este composto usado para controle microbiológico. Esse processo contribui na solubilização de alguns componentes, facilitando sua separação do grão. Ao final dessa etapa, aproximadamente 46% dos sólidos solúveis são removidos (Ramírez *et al.*, 2009). Dentre os componentes separados estão o amido, as fibras, o glúten e os gérmenes. O óleo de milho é produzido do germen removido e o seu conteúdo residual é misturado à fibra e à casca do milho para produção de ração animal. Além disso, o glúten separado também

se torna ração animal, rica em proteínas. Por fim, a solução de amido obtida é diretamente hidrolisada nos processos enzimáticos sequenciais (Bothast; Schlicher, 2005). McAloon *et al.* (2000) informam que a moagem via úmida requer mais energia e é mais complexa que a via seca. Milanez *et al.* (2014) pontuaram que essa metodologia demanda maior custo de capital e operacional. Reis, Rajendran e Hu (2017) sinalizaram quanto ao custo de tratamento da água residuária desse processo, que é mais complexo quando se compara com a rota de moagem a seco. A Tabela 2 exibe uma comparação entre as rotas úmida e seca de moagem.

Tabela 2. Comparação de algumas características entre as metodologias de moagem a seco e moagem úmida do milho no processo de produção de etanol.

Característica	Moagem a seco	Moagem a úmido
Complexidade	Menor	Maior
Coprodutos	Limitados	Mais variados
Custo	Menor	Maior
Pureza do amido	Menor	Maior
Uso de SO ₂	Não usa	Usa
Sólidos solúveis na fermentação	Maior	Menor

Fonte: adaptado de Reis, Rajendran e Hu (2017), Ramírez *et al.* (2009), Bothast e Schlicher (2005), Milanez *et al.* (2014) e McAloon *et al.* (2000).

Além da moagem úmida convencional, utilizando compostos sulfurados, há também a tecnologia E-milling, que se utiliza de enzimas na solução de moagem. Ramírez *et al.* (2009) estudaram a viabilidade econômica do processo de produção de etanol considerando o processo de moagem via tecnologia E-milling, comparando com a moagem úmida tradicional. O estudo visou avaliar e comparar as eficiências da moagem com o uso de enzimas, bem como o impacto da implementação dessa técnica nos custos operacionais. Para isso, os autores usaram o software *SuperPro Designer* para simular o processo nesses dois cenários. O resultado desse estudo mostrou que o uso de enzimas na moagem úmida, em substituição à solução de SO₂, reduziu o tempo

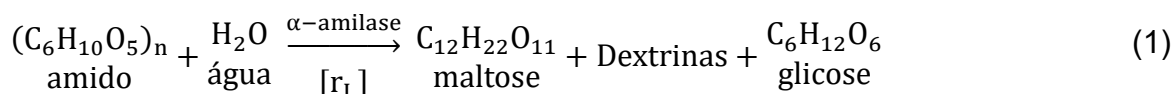
necessário de embebição do milho durante a moagem, além da melhoria da eficiência dos processos posteriores de obtenção dos coprodutos do processo.

Após a moagem a seco, rota adotada no presente trabalho, a solubilização da farinha de milho gerada é necessária para os posteriores processos de hidrólise. A solubilização é adotada nesse estágio porque, após a moagem, o pericarpo do milho, parte impermeável à água, é removido (Singh, 2009). A solubilização consiste em misturar o milho moído com líquidos que podem ser de diversas origens, como água de processo, água de reposição, água reciclada, condensado de água dos evaporadores ou a fase pesada da coluna de destilação que separa o etanol hidratado, produzindo uma suspensão de milho (Reis; Rajendran; Hu, 2017). Essa etapa ocorre entre 80 e 85°C. Parte da carga enzimática usada na liquefação pode ser adicionada ainda na solubilização, cerca de 1/3 da carga total (Kumar; Singh, 2019). Białas, Czerniak e Szymanowska-Powałowska (2014) informam que a adição de α -amilase nessa etapa contribui na redução da viscosidade da solução, reduzindo problemas operacionais, como bombeamento. Cripwell *et al.* (2020) informam que adição prévia da enzima facilita a hidrólise do amido porque esse processo se inicia antes da liquefação, mesmo que ainda numa atividade enzimática pouco abaixo da ótima. Ainda para a etapa de liquefação, há o ajuste do pH na etapa de solubilização de modo que fique de acordo com o pH adequado para atuação enzimática, entre 7 e 5,5, segundo Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013b) e Kumar e Singh (2019). A pasta solubilizada é enviada para os processos de hidrólise.

3.2.2. Hidrólises enzimática: liquefação e sacarificação

Após a solubilização, a pasta de amido segue para a liquefação, onde a enzima α -amilase é inserida para catalisar a hidrólise do amido. Essa etapa ocorre em tanques agitados que operam entre 85 e 95°C, pH de 6,5 e tem duração aproximada de 50 minutos (Kwiatkowski *et al.*, 2006; Białas; Czerniak; Szymanowska-Powałowska, 2014). A atuação da α -amilase na liquefação se dá com a hidrólise aleatória das ligações α -1,4-glicosídicas presentes no amido, formando as dextrinas, uma mistura de oligossacarídeos de cadeias menores que o amido inicial, maltose ($C_{12}H_{22}O_{11}$) (Białas; Czerniak; Szymanowska-Powałowska, 2014) e uma pequena fração de glicose ($C_6H_{12}O_6$)

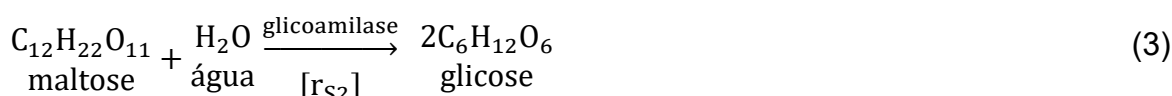
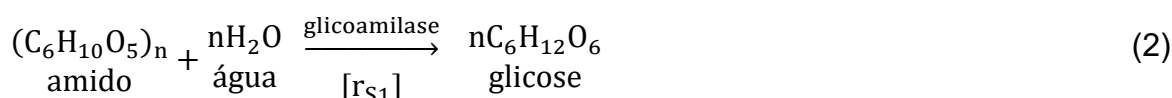
(Presecki; Blažević; Vasicracki, 2013b), conforme Equação (1) (não balanceada devido às frações não determinadas dos oligossacarídeos que compõem as dextrinas). A α -amilase é uma enzima que pertence ao grupo das endoenzimas, sendo que ela hidrolisa as ligações α -1,4-glicosídicas, mas sua ação em ligações α -1,6-glicosídicas (que formam a estrutura ramificada da amilopectina no amido) é desprezível, tornando necessário o uso de uma segunda enzima para hidrólise total do amido à glicose. Esse processo promove a diminuição da viscosidade do meio, facilitando as operações dos equipamentos (Kumar e Singh, 2019). Kwiatkowski *et al.* (2006) informam que a quantidade de α -amilase usada na liquefação é na proporção de 0,082% m/m (massa de enzima por massa de milho).



Antes da liquefação, há o aumento da temperatura do meio (pasta de amido solubilizada) com o intuito de aumentar a solubilidade do amido no meio aquoso, ao mesmo tempo em que o aumento da temperatura contribui para a desativação da enzima, além do comportamento inibidor apresentado pelo substrato e os produtos. Por isso, nesse estágio é comum a adição de íons de cálcio, como cloreto de cálcio ($CaCl_2$), visando contribuir para a estabilidade enzimática frente a essas condições (altas temperaturas e inibições pelo substrato e pelos produtos formados) (Presecki; Blažević; Vasic-Racki, 2013b).

Dado que o objetivo é a produção de etanol, necessita-se de açúcares fermentescíveis para que a levedura *Saccharomyces cerevisiae* produza o etanol, o que não se aplica às dextrinas formadas na liquefação (Bothast; Schlicher, 2005). Portanto, o amido liquefeito (parcialmente hidrolisado) segue para a etapa de sacarificação, que consiste na hidrólise da dextrina, da maltose e do amido residual (mesmo em baixas taxas) em glicose através da ação da enzima glicoamilase (Białas; Czerniak; Szymanowska-Powałowska, 2014), conforme Equações (2), (3) e (4). Segundo Kumar e Singh (2019), para o processo de sacarificação, o amido liquefeito é resfriado e, de acordo com Kwiatkowski *et al.* (2006), o pH é ajustado para 4,5 com o uso de ácido sulfúrico; ademais, os autores informaram que a glicoamilase é adicionada até a

concentração de 0,11% g/g (massa de glicoamilase por massa de amido liquefeito) e o processo ocorre a 61°C. A glicoamilase atua na quebra das ligações α -1,4-glicosídicas e α -1,6-glicosídicas, sendo sua taxa de atuação na quebra da primeira 50 vezes maior que na segunda ligação (Kumar; Singh, 2019). Como produto, há formação de glicose, sendo que Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a) enfatizaram que a formação desse monômero via hidrólise do amido não pode ser completa sem a adição da glicoamilase.



De acordo com Satyanarayana *et al.* (2004), além da rota enzimática, o processo de hidrólise do amido à glicose também pode ser químico, utilizando ácidos inorgânicos. No entanto, o processo enzimático oferece maiores vantagens quanto ao rendimento do processo, ao controle da amilólise, da especificidade da reação e dos produtos gerados. Em contrapartida, essa rota exige uma variação significativa de pH entre as etapas de liquefação e sacarificação. Conforme descrito por Kwiatkowski *et al.* (2006), a liquefação envolve a adição de amônia e óxido de cálcio (óxido básico), enquanto a sacarificação requer a adição de ácido sulfúrico, resultando, respectivamente, em condições marcadamente alcalinas e ácidas. De acordo com Satyanarayana *et al.* (2004), essas variações severas podem contribuir com a formação de produtos indesejados, como oligossacarídeos ramificados, tais como panose e isomaltose.

3.2.2.1. Cinética enzimática

A cinética dos processos de liquefação e sacarificação seguem o comportamento enzimático, portanto essa seção visa entender a cinética enzimática. Segundo Pelley (2012), enzimas são biocatalisadores que podem aumentar a taxa de reação na ordem de 10^6 para 10^{11} , sendo que elas não são alteradas na reação que catalisam, embora passem sobre modificações, como desativação. Bhagavan (2002) enfatizam que as

enzimas são altamente seletivas, sendo que algumas somente catalisam apenas uma reação, como a enzima Piruvato quinase, que participa de uma das etapas da glicólise.

Pelley (2012) informa que, para o estudo da cinética enzimática, a medida da velocidade da reação é dada pelo método das velocidades iniciais, de modo a garantir a baixa interferência da reação estudada no sentido inverso. De acordo com Fogler (2002), esse método consiste numa série de experimentos variando a concentração inicial do reagente, um dado $C_{A,0}$ por exemplo, e, a cada experimento, a taxa de reação ($r_{A,0}$) é medida, sendo esta a variação da concentração do reagente (no exemplo, o composto A) no tempo. Essa técnica tem o objetivo de calcular a ordem da reação e a constante cinética, numa dada temperatura. Segundo Pelley (2012), a ordem da reação enzimática oferece informações quanto a interação dessa enzima com o substrato: (i) reação de ordem zero ($n = 0$) indica que a enzima está saturada de um dado substrato, de modo que o aumento da concentração deste não afeta na atividade enzimática, (ii) reação de primeira ordem ($n = 1$) indica que a taxa de reação é diretamente proporcional à adição do substrato, varia linearmente, e, por fim, (iii) reação de segunda ordem ($n = 2$) indica que a enzima pode estar interagindo com dois substratos.

Em 1913, Michaelis e Menten propuseram um modelo para descrever a cinética enzimática pela primeira vez. Sua equação relaciona a taxa inicial da hidrólise em função da concentração do substrato, com base na Equação (5), equação química que descreve a interação entre a enzima (E) e o substrato (S) a uma dada constante k_1 , formando um produto intermediário ES, que por sua vez, numa reação dada constante cinética k_2 , forma o produto (P) e a enzima E é restaurada do processo (Bhagavan, 2002). A primeira reação com reversibilidade evidencia o equilíbrio entre ES e os compostos E e S, sendo que esse equilíbrio só é possível quando $k_{-1} \gg k_2$ (EUN, 1996).



A cinética de Michaelis-Menten segue algumas hipóteses (Bhagavan, 2002):

1) No meio reacional, a concentração do substrato [S] é maior do que a da enzima [E]. No entanto, [S] não é tão elevada a ponto de converter todas as moléculas da enzima na

forma do complexo enzima-substrato [ES], mas deve ser suficientemente alta para evitar uma redução rápida que leve a $[S] < [E]$. Em estudos enzimáticos, é comum que o substrato esteja em excesso, uma vez que a enzima é utilizada em concentrações muito baixas. Nessas condições, a concentração de [ES] atinge rapidamente um estado quase constante, de modo que sua taxa de formação se iguale à sua taxa de decomposição, permitindo a aplicação da cinética em estado estacionário;

2) Apenas as velocidades iniciais da reação são mensuradas, dessa forma, durante o intervalo de tempo considerado, a concentração do substrato [S] não sofre uma depleção significativa à medida que a concentração do produto [P] aumenta;

3) A concentração do complexo enzima-substrato [ES] permanece constante durante o período de medição, o que implica que: (i) um tempo suficiente transcorreu desde a mistura da enzima com o substrato para que [ES] se estabilize; (ii) o tempo decorrido ainda não foi suficiente para que a formação de [ES] seja afetada pela redução da concentração de substrato; e (iii) a constante de velocidade k_2 é menor que k_{-1} , garantindo a formação do complexo [ES]. Caso contrário, se $k_2 > k_{-1}$, o complexo [ES] se degradaria na mesma velocidade em que é formado, impedindo o estabelecimento do estado estacionário.

Fazendo um balanço de formação e de consumo de [ES], pode-se obter a equação da taxa inicial v (Equação (6)) (Abedi *et al.*, 2011).

$$v = \frac{[S] \cdot V_{MAX}}{K_m + [S]} \quad (6)$$

sendo V_{MAX} a velocidade inicial máxima, entendida como o valor de v quando [S] tende ao infinito, e K_m a constante de Michaelis-Menten, que é dada pela razão entre as constantes da Equação (5), conforme Equação (7). Quando a taxa v atinge metade do V_{MAX} , isto é, quando $v = V_{MAX}/2$, tem-se como consequência que a concentração do substrato [S] é dada pelo valor de K_m .

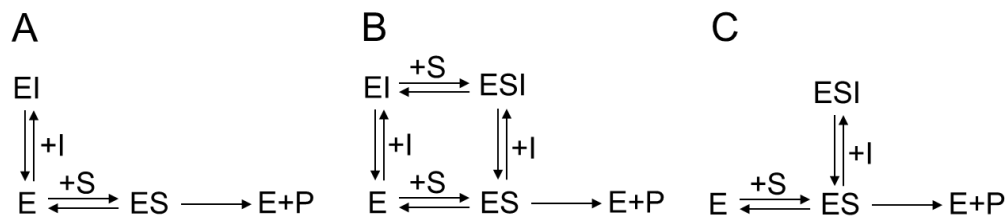
$$K_m = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} \quad (7)$$

Baseado na Equação (6), Bhagavan (2002) informou que diversas informações sobre o processo enzimático podem ser avaliadas, dentre elas: (i) K_m independe das concentrações da enzima e do substrato, seu valor varia conforme alteração dos componentes enzima-sustrato, (ii) diferente de K_m , V_{MAX} depende da concentração da enzima e, quando em meios de saturação do substrato, também depende da concentração deste, (iii) K_m e V_{MAX} variam com a temperatura e pH, e (iv) num meio em que a enzima interage com vários substratos, o valor de K_m calculado para cada uma dessas interações dão informação sobre a afinidade da enzima com esses substratos, posto que quanto menor o valor de K_m , maior o valor de v , indicando maior afinidade dessa enzima com o referido substrato.

Apesar da descrição matemática da cinética enzimática dada pela Equação (6), Parmentier *et al.* (2007) informam que tem sido cada vez mais comum a observação de comportamentos atípicos nesse âmbito, sendo que os autores citaram a autoativação, inibição do substrato, heteroativação, inibição parcial e inibição do substrato-dependente como alguns desses comportamentos não descritos pela equação de Michaelis-Menten da forma como escrita na Equação (6). Para o presente trabalho, de todos os fenômenos mencionados, o de inibição é o principal.

A inibição ocorre quando há presença de uma dada substância [I] que compete com o substrato [S], diminuindo a taxa de formação do complexo [ES] (Figura 6) (Parmentier *et al.*, 2007). Os tipos de inibição são: (i) competitiva, que ocorre quando o inibidor se liga ao mesmo sítio ativo da enzima que se ligaria o substrato, de modo que a ligação E-I impede a ligação E-S; (ii) a não competitiva é dada quando o inibidor se liga à enzima, mas num sítio ativo diferente daquele para o substrato, permitindo a formação tanto do EI como do ES; e, por fim (iii) a inibição anticompetitiva, que ocorre quando o inibidor liga-se apenas ao complexo intermediário ES, ou seja, ele depende da interação inicial da enzima E com o substrato S (EUN, 1996). A depender do tipo de inibição, as constantes da equação de Michaelis-Menten (Equação (6)) sofrem alterações, conforme exibido na Tabela 3, sendo ω_i a influência da concentração do inibidor [I] e sua constante cinética (K_i) (Equação (8)).

Figura 6. Esquemas de atuação do inibidor num sistema enzimático: A - inibição competitiva, B - inibição não competitiva e C - inibição anticompetitiva.



Fonte: Adaptado de Pelley (2012) e Eun (1996)

Tabela 3. Alterações nas expressões de K_m e de V_{MAX} da equação de Michaelis- Menten para cada tipo de inibição.

Tipo de inibição	$V_{MAX,i}$	$K_{m,i}$
Competitiva	Sem alteração ($V_{MAX,i} = V_{MAX}$)	$K_{m,i} = K_m \cdot \omega_i$
Não competitiva	$V_{MAX,i} = V_{MAX}/\omega_i$	Sem alteração ($K_{m,i} = K_m$)
Anticompetitiva	$V_{MAX,i} = V_{MAX}/\omega_i$	$K_{m,i} = K_m/\omega_i$

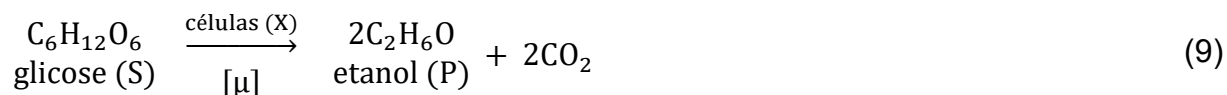
Fonte: Bhagavan (2002).

$$\omega_i = 1 + \frac{[I]}{K_i} \quad (8)$$

3.2.3. Fermentação alcoólica

Após a hidrólise do amido para a produção de glicose, esse mosto é levado ao processo de fermentação, onde a *Saccharomyces cerevisiae* fermenta a glicose à etanol com a liberação de CO_2 , de acordo com a Equação (9). Segundo Eckert *et al.* (2018), a *Saccharomyces cerevisiae* é um microrganismo que se ajusta às condições do meio: quando há oxigênio a levedura produz água, CO_2 e apresenta alto crescimento, mas em condições com baixa concentração de oxigênio, produz etanol e CO_2 . Após o contato das células de levedura com o mosto fermentável, esses autores dividem a fermentação em três etapas: (i) a pré-fermentação, que é a etapa de ambientação e adaptação das células

às condições do meio, (ii) a fermentação, caracterizada pela alta produção de CO₂, aumento da concentração de etanol e maior taxa de crescimento celular e, por fim, (iii) a pós-fermentação, com a redução da atividade fermentativa.



Em larga escala industrial, sobretudo no cenário brasileiro, o processo de fermentação pode ser realizado nos modos batelada alimentada ou contínuo. A fermentação em modo batelada alimentada demanda maior custo de investimento, mas apresenta resultados mais interessantes que em modo contínuo, como maior eficiência de fermentação, vinho com menor percentual de contaminação microbiológica, o que contribui com o menor gasto com antibióticos e ácido sulfúrico para assepsia do tanque fermentativo (Lopes *et al.*, 2016), possibilidade de controle individual de cada fermentação, melhor controle das paradas de limpeza (Singh, 2009). Por outro lado, segundo Singh (2009), a fermentação contínua reduz as demandas de tempo de enchimento, limpeza e esvaziamentos dos reatores, bem como permite o processamento continuado por meses, sem interrupção ou paradas. Hjersted e Henson (2006) informam que uma das maiores vantagens da fermentação via batelada alimentada é o controle dos nutrientes oferecidos às células de levedura, que podem ser ajustados de modo a criar um meio favorável para esses microrganismos, sendo que Kumar e Singh (2019) afirmaram que a disponibilidade nutricional para as células é um dos fatores que mais afetam a taxa de fermentação e a performance celular.

A fermentação ocorre, em média, a 32°C, o que demanda o resfriamento do mosto advindo da sacarificação (Kwiatkowski *et al.*, 2006). O tempo de fermentação para o etanol de milho é maior que no caso da cana-de-açúcar, e isso deve-se à concentração inicial de células usada, que é cerca de 3 a 4 vezes menor no primeiro caso que no segundo. A baixa concentração celular é uma estratégia usada diante da impossibilidade do reciclo das células no processo de produção de etanol usando o milho, uma vez que esta matéria-prima contribui para a alta concentração de sólidos no meio. Assim, para o processo usando a cana-de-açúcar, após a fermentação é comum a centrifugação para

retirada das células, tratamentos destas e seu reciclo. Entretanto, para o milho, o vinho obtido na fermentação já segue para o processo de destilação, somente após isso, as células, os nutrientes e os sólidos se tornam o coproduto DDGS (Lopes *et al.*, 2016). O resfriamento da dorna de fermentação deve ser contínuo para manter a temperatura dentro do ideal para as células, sendo que Kwiatkowski *et al.* (2006) informam que a energia liberada nesse processo é de 1.200 kJ/kg de etanol produzido.

3.2.3.1. Modelos cinéticos de fermentação

De acordo com Koren e Duvnjak (1993), equações cinéticas para descrever o crescimento celular, a taxa de formação de produto e de consumo de substrato, num processo de fermentação, são necessárias para quantificar e analisar o processo de fermentação. Para isso, emprega-se a Equação de Monod, que é capaz de representar matematicamente o crescimento de um tipo de cultura, uma colônia de microrganismos, bem como a interação desses microrganismos com diferentes substratos (Galinha; Sanches; Crespo, 2018). A Equação (10) descreve o modelo de Monod, com base no reportado por Zentou *et al.* (2019).

$$\mu = \frac{\mu_{MAX} \cdot S}{K_S + S} \quad (10)$$

sendo μ e μ_{MAX} as velocidades de crescimento celular específico e de crescimento celular máximo, respectivamente, ambos em unidade de inverso do tempo (como h^{-1}), K_S a constante de Monod e S a concentração do substrato, ambos em unidade de concentração (como $g \cdot L^{-1}$).

Tal como visto para os modelos de Michaelis-Menten, o modelo de Monod também pode ser modificado visando considerar efeitos inibitórios, tanto de produtos como de substratos. Nesse âmbito, Koren e Duvnjak (1993) estudaram a cofermentação da glicose e da frutose, em vários graus de mistura, utilizando a levedura *Saccharomyces cerevisiae*, e, para esse fim, utilizaram a Equação (11) para descrever a velocidade específica de crescimento celular, μ , que considera os fenômenos de inibição desses substratos, bem como do produto. Nota-se que os autores usaram termos lineares nas constantes de inibição.

$$\mu = \left(\frac{\mu_{MAX} \cdot S_G}{K_S + S_G} \right) \cdot \left(1 - \frac{S_{GF}}{S_{MAX}} \right) \cdot \left(1 - \frac{P}{P_{MAX}} \right) \quad (11)$$

sendo S_G e S_{GF} as concentrações de glicose e de glicose+frutose, respectivamente, em $g \cdot L^{-1}$, e S_{MAX} e P_{MAX} as constantes de inibição pelo substrato e pelo produto, respectivamente, em $g \cdot L^{-1}$. De acordo com os autores, as constantes de inibição são os valores nos quais não há crescimento celular; ou seja, se $S_{GF} \rightarrow S_{MAX}$ ou $P \rightarrow P_{MAX}$, tem-se que $\mu \rightarrow 0$ e o crescimento celular tende a estagnar.

Apesar dos termos de primeiro grau na Equação (11), alguns trabalhos também contemplam o fenômeno de inibição via termos de grau diferente de um, como Phisalaphong, Srirattana e Tanthapanichakoon (2006). Nesse trabalho, os autores utilizaram modelos de Monod modificados no processo de fermentação de melaço de cana-de-açúcar utilizando a levedura *Saccharomyces cerevisiae*, com o objetivo de avaliar a variação dos parâmetros desses modelos com a temperatura. A Equação (12) exhibe o modelo de velocidade de crescimento celular, μ , usado pelos autores.

$$\mu = \mu_{MAX} \cdot \left(\frac{S}{K_S + S + \frac{S^2}{K_S^i}} \right) \cdot \left(1 - \frac{P}{P_{m,S}} \right) \quad (12)$$

sendo K_S^i e $P_{m,S}$ as constantes de inibição pelo substrato e pelo produto no crescimento celular em $g \cdot L^{-1}$. Com isso, nota-se que a influência das constantes de inibição pelo substrato se dá com o quadrado da concentração deste.

A velocidade específica de crescimento celular, μ , é usada para calcular as taxas de crescimento celular (r_X) (Equação (13)), de formação de produto (r_P) (Equação (14)) e de consumo de substrato (r_S) (Equação (15)), tal como feito por Koren e Duvnjak (1993). Esses autores usaram os rendimentos teóricos de produto e de células em função do consumo de substrato, Y_{ps} ($g_{produto} \cdot g_{substrato}^{-1}$) e Y_{xs} ($g_{células} \cdot g_{substrato}^{-1}$) respectivamente. As taxas foram dadas em $g \cdot L^{-1} \cdot h^{-1}$.

$$r_X = \mu \cdot X \quad (13)$$

$$r_S = \frac{1}{Y_{XS}} \cdot \mu \cdot X = \frac{1}{Y_{XS}} \cdot r_X \quad (14)$$

$$r_P = \frac{Y_{PS}}{Y_{XS}} \cdot \mu \cdot X = \frac{Y_{PS}}{Y_{XS}} \cdot r_X \quad (15)$$

sendo X, S e P as concentrações de células, substrato e produto, nessa ordem, em g·L⁻¹.

3.2.4. Destilação e purificação do etanol

Nessa etapa, o etanol, presente no vinho formado na fermentação, é concentrado, separando esse componente da água e dos sólidos presentes na mistura. De acordo com Kumar e Singh (2019), a concentração de etanol no vinho fica entre 14% e 20% (v/v), sendo que os autores relatam que esse valor varia de acordo com a eficiência da fermentação e o quantitativo de sólidos. A separação da água e do etanol numa coluna de destilação, que se baseia na diferença de volatilidade dos componentes separados (Kujawska *et al.*, 2015). Os gases gerados na fermentação, majoritariamente CO₂, em grande parte são expelidos durante a fermentação, mas após esse processo eles são separados por lavagem numa coluna de absorção, onde se recupera cerca de 98% do etanol evaporado (Quintero *et al.*, 2008). Prévio a esse processo, Kwiatkowski *et al.* (2006) descrevem o processo de aquecimento da corrente usando o efluente gerado na liquefação, que necessariamente precisa ser resfriado para a sacarificação num processo do cenário LSF, como detalhado na seção 3.2.2.

De acordo com Reis, Rajendran e Hu (2017), no processo de etanol de milho, a destilação ocorre em duas colunas. A primeira permite a concentração do etanol até a concentração entre 60 e 80% (v/v), sendo que a água desse processo pode ser usada na etapa de solubilização, conforme descrito na seção 3.2.1, para formação da pasta de amido para liquefação. A segunda coluna permite a concentração do etanol até 95,6% (etanol hidratado), alcançando o ponto de azeotropia da mistura etanol-água. De acordo com Kwiatkowski *et al.* (2006), o produto de fundo da primeira coluna é rico em água e materiais não-fermentáveis, como óleo, proteínas, fibras e compostos químicos residuais, sendo que McAloon *et al.* (2000) informam que esse produto de fundo tem menos que

0,1% de etanol em massa e Kumar e Singh (2019) informam que esse produto de fundo se chama “*whole stillage*” ou vinhaça bruta.

Segundo Bothast e Schlicher (2005), a vinhaça bruta é importante em processos de fabricação de ração para gado, aves e peixes. De acordo com Reis, Rajendran e Hu (2017), essa mistura contém entre 6 e 16% de sólidos, possui um perfil ácido e viscoso, além de um curto tempo de validade. Bothast e Schlicher (2005) informaram que seu período de degradabilidade é entre 1 e 2 semanas. Daí, vinhaça bruta é inicialmente centrifugada para separação das fases sólida e líquida (Quintero *et al.*, 2008), sendo que Kwiatkowski *et al.* (2006) informam que esse processo remove 83% de água da fase sólida (WDGS, *wet distillers grains with solubles*, grãos úmidos de destilado com sólidos), enquanto a fase líquida, de acordo com Kumar e Singh (2019), é chamada de “*thin stillage*” ou vinhaça fina e possui nutrientes solúveis que ajudaram as leveduras durante o processo de fermentação. O WDGS, até então com cerca de 65% de umidade, passa por um processo de secagem até 10 a 12% de umidade e forma o DDGS, que é amplamente usado em ração animal. Segundo Kumar e Singh (2019), o processo de secagem do WDGS é importante para aumentar a vida útil desse composto, reduz problemas no transporte desse produto e facilita as condições de seu armazenamento, de modo que Bothast e Schlicher (2005) afirmam que esse problema é intensificado em dias quentes no período do verão.

Quanto à vinhaça fina, fase líquida da vinhaça bruta, Reis, Rajendran e Hu (2017) citam vários compostos de valor agregado que podem ser extraídos:

- (i) Glicerol: esse composto pode ser isolado da vinhaça fina através de métodos mais sofisticados, como a ultrafiltração ou a diálise desse meio. No entanto, operações mais simples como destilação ou evaporação também podem ser usadas, aproveitando-se das diferenças entre o ponto de ebulição do glicerol e dos demais componentes presentes na vinhaça fina. A concentração de glicerol na vinhaça fina é de $14 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$;
- (ii) Ácidos orgânicos: ácido láctico, por exemplo, pode ser obtido através de cristalização seletiva ou eletrodíálise. A primeira técnica baseia-se na precipitação dos ácidos orgânicos a partir da solução aquosa da vinhaça fina com a utilização de um óxido

- metálico para formação de complexos, seguido da acidificação do meio para desassociação desses ácidos e obtenção de suas formas livres. Já a segunda técnica é dependente de uma anterior que se obtenha uma corrente rica em glicerol;
- (iii) Oligômeros de glicano: extração e purificação enzimática, que quebram a matriz dos compostos da vinhaça fina, tornando-os mais acessíveis aos processos de cristalização e filtração que se seguem;
 - (iv) Aminoácidos e minerais: uso de extração líquida-sólida com solventes adequados, além da troca iônica para purificação dos minerais.

Apesar das opções listadas, os autores afirmam que essas técnicas possuem diversas desvantagens, tais como o custo com essas tecnologias, o gasto com energia e recursos, a complexidade das técnicas, os desafios com a comercialização de produtos com alta especificidade e a existência de alternativas de menor custo. Portanto, com base nesse último item, a produção de óleo de milho, usando a vinhaça fina se mostra como uma alternativa mais viável. Reis, Rajendran e Hu (2017) informam que o processo de extração do óleo de milho pode ser feito via extração por solvente, utilizando solventes orgânicos. Kumar e Singh (2019) informam sobre a necessidade da concentração da vinhaça fina, formando um xarope, e, só então, o óleo é extraído. Ademais, eles ainda informam que esse óleo tanto pode ser usado para alimentação ou como matéria-prima na produção de biodiesel.

Como dito, o aumento da concentração de etanol nas etapas de destilação é limitado pelo ponto de azeotropia em 96,5% de etanol em água. Assim, peneiras moleculares podem usadas no processo de desidratação dessa mistura (Quintero *et al.*, 2008), produzindo o etanol anidro. Kumar e Singh (2019) citam que o etanol anidro possui 100% de etanol, enquanto a Resolução nº 907/2022 da ANP (ANP, 2022) estabelece o mínimo de 98% de etanol (v/v). O montante de água removido do processo de desidratação é reciclado na segunda coluna de destilação (ou coluna de retificação) (Quintero *et al.*, 2008). Além de peneiramento molecular, o uso de colunas extrativas também é uma alternativa viável para concentração do etanol hidratado à anidro. De acordo com Gil, García e Rodríguez (2014) esse processo baseia-se na adição de um agente separador que modifica as propriedades de equilíbrio do sistema etanol-água,

permitindo a recuperação de etanol em concentrações mais altas. Esses autores estudaram o uso de etilenoglicol e glicerina como solventes extrativos, ambos solventes escolhidos devido suas capacidades de perturbar o estado de azeotropia da mistura etanol-água, além de suas disponibilidades. Vale ressaltar que os autores apontaram a alta viscosidade da glicerina como uma desvantagem no seu uso, sobretudo em termos de gasto energético para seu bombeamento.

3.3. Arranjos da liquefação, sacarificação e fermentação

As etapas de liquefação, sacarificação e fermentação podem ser realizadas de distintas configurações: (i) liquefação, sacarificação e fermentação individuais e sequencialmente (LSF), (ii) liquefação e sacarificação simultâneas, seguidas da fermentação (SLSF), (iii) liquefação, seguida da sacarificação e fermentação simultâneas (LSSF) e (iv) os três processos em simultâneo (SSF) (Devos; Colla, 2022).

O uso de determinado cenário é decidido com base na necessidade do processo, pois cada cenário tem suas vantagens e desvantagens. Presecki, Blažević e Vasic- Racki (2013a) informaram que quando as enzimas α -amilase e glicoamilase atuam conjuntamente na hidrólise do amido, há uma sinergia entre elas, de modo que a taxa de hidrólise resultante pode ser maior que a soma das taxas de hidrólise para as enzimas em suas respectivas atuações separadamente. De acordo com Cripwell *et al.* (2020), essa sinergia é dada pelo fato de a α -amilase ser uma enzima que gera terminais não-reduzidos no amido, enquanto a glicoamilase hidrolisa as dextrinas nesses pontos. Além disso, há também atuação da glicoamilase na estrutura do amido, que gera poros que vão da superfície do grânulo do amido, até seu centro, o que permite que a α -amilase atue de modo mais efetivo na região interna do amido, melhorando a eficiência da hidrólise. Essa vantagem, portanto, pode ser avaliada nos cenários SLSF e SSF.

Quintero *et al.* (2008) descrevem o cenário LSSF em seu trabalho. A etapa de liquefação ocorre separadamente, prévia ao processo simultâneo de sacarificação e fermentação, e dura 5 minutos. Na etapa de liquefação, os autores informam que 99% do amido foi liquefeito. Assim, o amido liquefeito é alimentado num tanque com uma mistura da glicoamilase e das leveduras. Esse processo simultâneo teve duração de 48h.

Segundo Kroumov, Módenes e Tait (2006), a SSF é uma rota mais econômica por reduzir o tempo e os equipamentos no processo, além da possibilidade de reduzir a concentração das enzimas usadas, posto que diminuiria a inibição sobre elas. Em contrapartida, Białas, Czerniak e Szymanowska-Powałowska (2014) apontam que uma desvantagem da SSF é a diferença de temperatura para a atuação das enzimas e da levedura, daí a impossibilidade do estabelecimento da condição ótima para ambas as espécies. Essa desvantagem também ocorre nos cenários LSSF. Nesses casos, a temperatura do sistema é definida de modo a garantir a condição ótima das células, em detrimento das enzimas.

3.4. Estudos de simulação e otimização de etanol de milho

Nessa seção, alguns trabalhos que envolvem a simulação e/ou otimização dos processos que envolvem a produção de etanol de milho são listados e avaliados.

Luz *et al.* (2023) avaliaram a produção de etanol a partir de cana-de-açúcar e de milho no Brasil, considerando as plantas de etanol em diferentes estratégias: de primeira geração (caldo da cana-de-açúcar), integração entre primeira e a segunda geração (caldo e bagaço da cana-de-açúcar) e novamente primeira geração (amido do milho). Os autores concluíram que o etanol de milho é uma estratégia interessante para suprir o mercado de biocombustíveis no país. Além disso, o preço máximo de compra de milho encontrado foi de US\$ 7,73, valor já presente na realidade brasileira, de acordo com os autores. Diante disso, os autores afirmam que plantas *flex* são boas alternativas para diminuição dos custos associados ao investimento.

Oliveira e Cruz (2023) avaliaram e compararam a simulação de uma usina de cana-de-açúcar e uma *flex*, com o uso do milho em períodos de entressafra da cana. Essa comparação foi feita do ponto de vista técnico, econômico e ambiental. No processo de etanol de milho, os cenários LSF, SLSF e SSF foram implementados e simulados. Os autores concluíram que 20% mais etanol foi produzido quando o processo com o milho foi incorporado à produção com cana-de-açúcar. No entanto, os autores verificaram que a planta *flex* tem 30% a mais de intensidade de carbono.

Slavic *et al.* (2023) fizeram um planejamento fatorial de experimentos visando definir parâmetros ótimos para maximizar o percentual de hidrólise do amido cru, não gelatinizado. Os autores afirmam que a dispensa do processo de gelatinização do amido (no presente trabalho apresentado como solubilização) simplifica o processo e reduz custos. As variáveis independentes usadas no planejamento fatorial foram as concentrações das enzimas, o pH do meio, e os tempos de adição da enzima e de processo (encubação). Os autores encontraram o percentual ótimo de hidrólise do amido de 90%, com 8h de incubação, pH de 4,5 e 60°C. Além disso, os autores também usaram a levedura *Saccharomyces cerevisiae* para produzir etanol, alcançando a concentração de 129,2 g·L⁻¹, com produtividade volumétrica de 2,94 g·L⁻¹·h⁻¹.

Sumikawa e Lima (2021) analisaram a integração do milho na produção de etanol em usinas que usam a cana-de-açúcar já existentes no Brasil, objetivando avaliar a produção de etanol via milho em períodos de entressafra da cana-de-açúcar (4 meses), ou seja, uma usina do tipo *flex*. Para isso, os autores utilizaram o simulador de processos Aspen Plus para simular a usina e realizar cálculos de balanço de massa, de energia e de utilidades. Foram observadas diversas melhoras com a integração do milho à usina da cana-de-açúcar, sendo destaque o aumento de 50% do volume de produção, de modo que os autores afirmam que esse aumento contribuiu para a diminuição da dependência de fontes fósseis no processo. Assim, os autores concluíram que a integração do processamento de milho nas usinas de cana traz vantagens econômicas e ambientais significativas.

Ziero *et al.* (2021) analisaram a viabilidade tecnológica das estratégias e do potencial de mercado para a geração de bioenergia e bioprodutos em um sistema de produção baseado no milho. O estudo aponta que a expansão sustentável da produção de etanol à base de milho e cana-de-açúcar poderia afetar a segurança alimentar e diminuir a pecuária extensiva e o desmatamento de novas áreas de pastagem no sul da Amazônia Brasileira. Além disso, os autores informam que um sistema de produção de etanol de milho gera menos gases de efeito estufa que as usinas tradicionais. A análise SWOT (*Strengths, Weaknesses, Opportunities, and Threats*; ou seja, Forças, Fraquezas, Oportunidades e Ameaças) foi feita, e, a partir dela, foi concluído que o desenvolvimento

econômico desse setor pode gerar empregos diretos e indiretos, e que contribuiria para a transição energética do país. Por fim, os autores informaram a relevância da integração do setor agroindustrial, dado o perfil múltiplo e diverso desse setor.

Donke *et al.* (2016) avaliaram o desempenho ambiental e energético da produção de etanol a partir de três matérias-primas diferentes, a cana-de-açúcar, o milho e o sorgo, em uma planta multifuncional no estado de Mato Grosso. A técnica da Análise de Ciclo de Vida foi empregada. Os autores concluíram que as performances energética e ambiental tem alta influência do cultivo dessas matérias-primas, com destaque para a cana-de-açúcar. Quanto aos fatores ambientais, os autores verificaram que o aumento da proporção do uso de culturas amiláceas, como o milho, contribui para a diminuição do retorno energético de investimento e da contaminação por formação de oxidantes fotoquímicos.

Białas, Czerniak e Szymanowska-Powalowska (2014) estudaram o cenário SSF com a farinha de amido de milho, utilizando a levedura *Saccharomyces cerevisiae*, α -amilase e glicoamilase com o objetivo de avaliar a concentração final de etanol variando a concentração inicial de amido, a dosagem enzimática e o pH do mosto. Os autores ajustaram um modelo de superfície usando planejamento experimental, bem como usaram modelos cinéticos de Michaelis-Menten e Monod. A concentração máxima de etanol obtida foi de $110,36 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$ com a concentração enzimática ótima de $2,05 \text{ ml} \cdot \text{kg}^{-1}$ e pH ótimo de 5,0.

Jang e Chou (2013) estudaram um modelo não estruturado para descrever o cenário LSSF, usando a levedura *Saccharomyces cerevisiae*. Com os modelos, os autores criaram uma metodologia de otimização visando maximizar a produtividade de etanol variando a concentração inicial de amido. Os autores concluíram que o modelo proposto representou bem o processo, além de observarem que a relação entre a concentração inicial ótima de amido e a concentração de glicose é constante, independente da concentração inicial de células.

Gupta *et al.* (2012) estudaram a hidrólise enzimática em mosto com alta concentração de açúcar utilizando um reator de batelada e batelada alimentada. Na

modelagem da sacarificação, os autores consideraram a presença dos sólidos insolúveis. Ensaio de fermentação usando *Saccharomyces cerevisiae* também foram feitos, à 30°C. Os autores concluíram que o uso da operação em modo batelada alimentada se mostrou mais adequado que a batelada, com concentração final de etanol de 52,38 g·L⁻¹, enquanto o processo em batelada atingiu apenas 34,78 g·L⁻¹. Além disso, os autores afirmaram que o ajuste do processo aos regimes cinéticos adequados pode aumentar ainda mais as taxas de conversão das reações.

Karuppiah *et al.* (2008) propuseram uma abordagem de otimização de superestrutura limitada para projetar plantas ótimas de etanol de milho. O objetivo foi a minimização do custo da planta, que tinha contribuição o custo com capital, com energia e demais custos relacionados aos rendimentos dos processos. A modelagem do trabalho teve como objetivo a conexão da rede de processo e as operações em cada etapa. Com essa técnica, os autores observaram que há possibilidade de otimização em 40%, comparando com uma planta em sua condição padrão.

Hjersted e Henson (2006) discutiram a otimização da fermentação de *Saccharomyces cerevisiae* em reatores de batelada alimentada, utilizando modelos dinâmicos de balanço de fluxo. O objetivo da modelagem e da otimização era a maximização da velocidade específica de crescimento celular, isto é, o μ , visando maximizar a produtividade e o rendimento de etanol. Para isso, programação linear foi aplicada, tendo como variáveis de busca a concentração inicial de glicose, o fluxo de alimentação, a concentração de oxigênio do meio e o tempo. Uma das conclusões do estudo é que, na condição ótima, o comportamento do processo é de haver o consumo do oxigênio para crescimento celular e, posteriormente, a produção de etanol. Assim, o trabalho sugere a exploração de mecanismos regulatórios do metabolismo das células.

Diante do exposto, a contribuição do presente trabalho foi unir modelos da literatura, que descrevem a hidrólise e a fermentação do processo de etanol de milho, arranjá-los de modo a criar os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF e, por fim, otimizá-los para maximização do saldo da planta. Interessante ressaltar que os trabalhos da literatura ou modelaram os processos usando planejamento fatorial, ou apenas usam equações cinética em umas das etapas do processo, ou não otimizam. Assim, o presente trabalho

contribui com a junção desses procedimentos: modelagem cinética da liquefação, sacarificação e fermentação, simulação dos três processos e otimização.

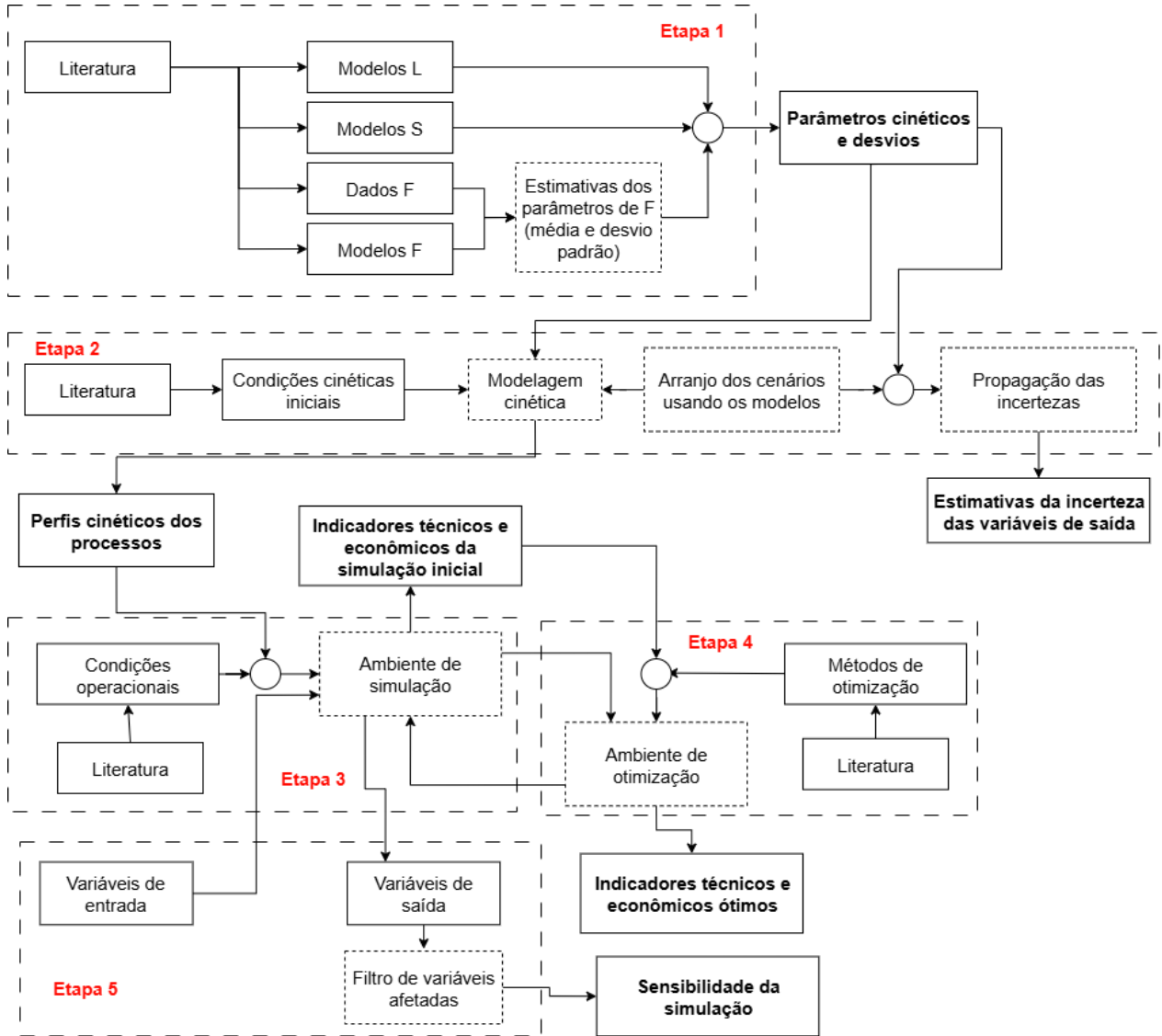
4. METODOLOGIA

Com base nos objetivos, a metodologia do trabalho foi baseada nos seguintes passos: (i) modelar cineticamente os processos de liquefação, sacarificação e fermentação, (ii) usar os modelos para gerar fluxos de processos para descrever os cenários estudados, (iii) usar os diferentes cenários para simular a usina em condições conhecidas (definidas na literatura), (iv) validar a simulação calculando indicadores e comparando os valores da literatura, (v) otimizar a usina simulada pela manipulação de uma variável econômica e, por fim, (vi) avaliar como os indicadores-chaves da usina otimizada variam com a perturbação de algumas variáveis de entrada. Portanto, a metodologia do trabalho foi desenvolvida em 5 etapas, são elas:

1. Busca na literatura dos modelos cinéticos aplicados aos processos estudados no presente projeto (liquefação, sacarificação e fermentação);
2. Modelagem dos processos nos quatro cenários distintos (LSF, SLSF, LSSF e SSF) utilizando a linguagem Python;
3. Simulação dos cenários definindo condições técnicas e operacionais dos processos;
4. Estudo e emprego de rotas de otimização com base nas simulações empregadas e suas respectivas respostas;
5. Estudo de sensibilidade da usina otimizada.

Cada etapa será detalhada nas próximas seções. A Figura 7 ilustra, de maneira genérica, o fluxograma metodológico geral do trabalho. As caixas em negrito são os resultados de cada etapa e as caixas pontilhadas são as ações executadas e/ou ambientes criados. Dessa figura, pode-se observar que a entrega final do trabalho são os parâmetros ótimos da usina simulada em cada cenário.

Figura 7. Fluxograma metodológico geral do trabalho.



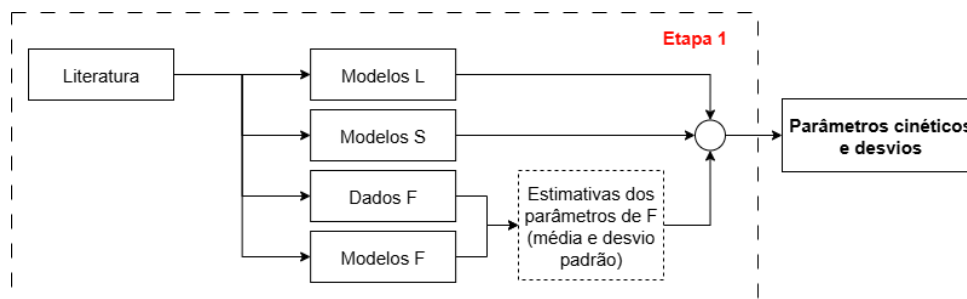
Legenda: F – fermentação; L – liquefação; S – Sacarificação

Fonte: autor (2025)

4.1. Definição dos modelos cinéticos

Essa etapa teve como objetivo a busca na literatura por modelos cinéticos que descrevem os processos de liquefação, sacarificação e fermentação, bem como os parâmetros desses modelos com seus respectivos erros. Uma síntese dessa etapa pode ser vista no fluxograma metodológico da etapa 1 do trabalho (Figura 8).

Figura 8. Fluxograma metodológico da etapa 1 do trabalho



Legenda: F – fermentação; L – liquefação; S – Sacarificação

Fonte: autor (2025)

O módulo de busca avançada da plataforma *Scopus* foi usado, usando os descritores presentes na Tabela 4. Os termos "TITLE" e "ABS" foram usados para buscar os termos citados nos títulos e nos resumos dos trabalhos, respectivamente, e os asteriscos permitem encontrar trabalhos que usam os termos independentemente do final da palavra (usando o termo "model*", retornam-se resultados como "modelling", "models", "model" etc.). Por fim, operadores booleanos ("AND" e "AND NOT ") foram usados para filtrar os resultados de interesse. Os critérios de escolha dos trabalhos foram: (i) selecionar trabalhos que descrevem os processos estudados através de modelos cinéticos, descartando aqueles que usam modelos logísticos, ou com planejamento fatorial ou quaisquer outros tipos, e (ii) após escolhidos esses trabalhos, selecionar aqueles que informam as incertezas e/ou erros dos parâmetros ajustados, posto que no presente trabalho a avaliação da incerteza no resultado foi avaliada.

Tabela 4. Descritores usados em cada processo para busca dos modelos cinéticos.

Processo	Descritor usado
L	"TITLE (starch AND liquefaction)"
S	"TITLE (starch AND saccharific* AND model* AND NOT simul*)"
F	"TITLE (glucose AND ferment* AND model*) AND ABS (cerevisiae)"

Fonte: autor (2025)

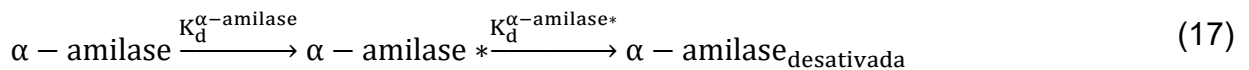
4.1.1. Modelos de liquefação

A busca para o modelo de liquefação encontrou 6 trabalhos. Os trabalhos mais recentes foram de Abedi *et al.* (2023) e de Peng *et al.* (2019). Os primeiros autores estudaram a hidrólise do amido de milho, usando cinética de 1ª ordem, enquanto os segundos estudaram a hidrólise da alga *Chlorella pyrenoidosa* em solvente etanol- água. Portanto, foi utilizado o modelo proposto por Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013b), que estudaram a liquefação do amido em pH 7 e temperatura de 80 °C, utilizando uma enzima obtida da bactéria *Bacillus licheniformis* e comercializada como Termomyl, além de considerarem fatores como inibição e desativação da enzima. Como visto anteriormente, na liquefação há hidrólise do amido (C₆H₁₀O₅) pela α-amilase e, para modelagem, foram consideradas a formação de glicose (C₆H₁₂O₆), maltose (C₁₂H₂₂O₁₁) e dextrinas (demais oligossacarídeos além da maltose), com uma taxa de reação r_L , conforme Equação (1) apresentada na seção 3.2.2. A velocidade da reação r_L é definida conforme cinética de Michaelis-Menten considerando inibição dos produtos principais (glicose e maltose) (Equação (16)).

$$r_L = \frac{C_{\alpha\text{-amilase}} \cdot C_{\text{amido}} \cdot V_{mL}}{K_{mL} + C_{\text{amido}} \cdot \left(1 + \frac{C_{\text{glicose}}}{K_{iL}^{\text{glicose}}} + \frac{C_{\text{maltose}}}{K_{iL}^{\text{maltose}}} \right)} \quad (16)$$

sendo $C_{\alpha\text{-amilase}}$ a concentração volumétrica da enzima α-amilase em L·L⁻¹ (volume da enzima/volume do meio reacional), C_{amido} , C_{glicose} e C_{maltose} as concentrações de amido, de glicose e de maltose, respectivamente, em g·L⁻¹, V_{mL} a atividade enzimática máxima em g·L⁻¹·min⁻¹, K_{mL} a constante de Michaelis-Menten em g·L⁻¹ e K_{iL}^{glicose} e K_{iL}^{maltose} as constantes de inibição da glicose e da maltose na liquefação, respectivamente, em g·L⁻¹.

Visando considerar a desativação da enzima α-amilase, os autores consideraram a formação de uma enzima intermediária (α-amilase*), conforme Equação (17).



sendo $K_d^{\alpha\text{-amilase}}$ e $K_d^{\alpha\text{-amilase}^*}$ as constantes de desativação da enzima nativa e do estado intermediário, respectivamente, em min⁻¹. Assim, o V_{mL} será a soma das atividades da α-

amilase e da α -amilase* (Equação (18)). Para as concentrações de α -amilase e de α -amilase*, os autores consideraram uma cinética de 1ª ordem, baseada na Equação (17) (Equações (19) e (20)).

$$V_{mL} = V_{mL}^{\alpha\text{-amilase}} \cdot C_{\alpha\text{-amilase}} + V_{mL}^{\alpha\text{-amilase}*} \cdot C_{\alpha\text{-amilase}*} \quad (18)$$

$$\frac{dC_{\alpha\text{-amilase}}}{dt} = -k_d^{\alpha\text{-amilase}} \cdot C_{\alpha\text{-amilase}} \quad (19)$$

$$\frac{dC_{\alpha\text{-amilase}*}}{dt} = k_d^{\alpha\text{-amilase}} \cdot C_{\alpha\text{-amilase}} - k_d^{\alpha\text{-amilase}*} \cdot C_{\alpha\text{-amilase}*} \quad (20)$$

Os valores dos parâmetros usados nas Equações (16), (18), (19) e (20) foram obtidos de Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013b) e são apresentados na Tabela 5.

Tabela 5. Valores dos parâmetros para a liquefação a 80 °C e pH 7.

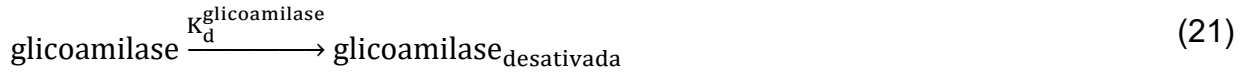
Parâmetro	Unidade	Valor
K_{mL}	$g \cdot L^{-1}$	17,1
$K_{iL}^{glicose}$	$g \cdot L^{-1}$	47,2
$K_{iL}^{maltose}$	$g \cdot L^{-1}$	12,2
$K_d^{\alpha\text{-amilase}}$	min^{-1}	0,046
$K_d^{\alpha\text{-amilase}*}$	min^{-1}	0,00097
$V_{mL}^{\alpha\text{-amilase}}$	$g \cdot L^{-1} \cdot min^{-1}$	5402,4
$V_{mL}^{\alpha\text{-amilase}*}$	$g \cdot L^{-1} \cdot min^{-1}$	2640,84

Fonte: Fonte: Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013b)

4.1.2. Modelos de sacarificação

Para o modelo da sacarificação, os 5 trabalhos mais recentes encontrados foram descartados por não abordarem a sacarificação envolvendo o amido de milho. Daí, o trabalho de Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a) foi selecionado. Nesse trabalho, os autores estudam os processos de liquefação e sacarificação simultâneas, o que descreve o cenário SLSF; todavia, para o presente trabalho e visando descrever apenas o processo de sacarificação, os modelos presentes nesse artigo foram adaptados. Como visto anteriormente, na sacarificação os oligossacarídeos formados na liquefação são

convertidos em glicose, inclusive o amido residual que, mesmo numa taxa de hidrólise menor que na liquefação, ainda pode ser considerado, sendo essa hidrólise dada pela ação da glicoamilase. Essas reações estão descritas nas Equações de (2) a (4), presentes na seção 3.2.2, além da Equação (21), que representa a desativação da glicoamilase. O balanço de massa da glicoamilase consta na Equação (22).



$$\frac{dC_{\text{glicoamilase}}}{dt} = -k_d^{\text{glicoamilase}} \cdot C_{\text{glicoamilase}} \quad (22)$$

sendo $K_d^{\text{glicoamilase}}$ a constante de desativação da glicoamilase em min^{-1} .

Para hidrólise do amido residual (Equação (2)), tal como na liquefação, a taxa da reação (r_{S1}) foi definida baseada no modelo de Michaelis-Menten considerando as inibições pelo produto (glicose) e pela maltose. Para a taxa de hidrólise da maltose (r_{S2}) também foi aplicado o modelo de Michaelis-Menten, mas sem inibição e, por fim, para a taxa de hidrólise das dextrinas (r_{S3}) foi considerada uma cinética de 1ª ordem. As Equações de (23) a (25) exibem as equações cinéticas definidas por Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a).

$$r_{S1} = \frac{C_{\text{glicoamilase}} \cdot C_{\text{amido}} \cdot V_{mS1}}{K_{mS1} + C_{\text{amido}} \cdot \left(1 + \frac{C_{\text{glicose}}}{K_{iS1}^{\text{glicose}}} + \frac{C_{\text{maltose}}}{K_{iS1}^{\text{maltose}}} \right)} \quad (23)$$

$$r_{S2} = \frac{C_{\text{glicoamilase}} \cdot C_{\text{maltose}} \cdot V_{mS2}}{K_{mS2} + C_{\text{maltose}}} \quad (24)$$

$$r_{S3} = K_{S3} \cdot C_{\text{glicoamilase}} \cdot C_{\text{dextrinas}} \quad (25)$$

sendo $C_{\text{glicoamilase}}$ a concentração volumétrica da enzima glicoamilase em $\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$ (volume da enzima/volume de meio reacional), K_{mS1} e K_{mS2} as constantes de Michaelis-Menten para as hidrólises do amido residual e da maltose, respectivamente, ambas em $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$, K_{iS1}^{glicose} e K_{iS1}^{maltose} as constantes de inibição da glicose e da maltose na sacarificação, respectivamente, em $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$, K_{S3} a constante de 1ª ordem da hidrólise das dextrinas em min^{-1} e V_{mS1} e V_{mS2} as máximas atividades enzimáticas da glicoamilase nas hidrólises do

amido e da maltose, respectivamente, em $\text{g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$. Os valores dos parâmetros das Equações de (23) a (25) foram retirados dos trabalhos de Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a) e Oliveira e Cruz (2023) e estão presentes na Tabela 6.

Tabela 6. Valores dos parâmetros e constantes para a sacarificação a 65 °C e pH 5,5.

Parâmetro	Unidade	Valor
$K_d^{\text{glicoamilase}}$	min^{-1}	0,015
V_{mS1}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$	96,79
K_{mS1}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	0,019
K_{iS1}^{glicose}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	4,34E-04
K_{iS1}^{maltose}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	0,0031
V_{mS2}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$	13261
K_{mS2}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	3,64
K_{S3}	min^{-1}	1008,84

Fonte: Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a) e Oliveira e Cruz (2023)

4.1.3. Modelos de fermentação

Para o processo de fermentação, os trabalhos encontrados usando os descritores especificados na Tabela 4 não cumpriram os critérios de seleção para serem usados no presente trabalho. Assim, foram buscados dados experimentais da literatura de fermentação de glicose, através da levedura *Saccharomyces cerevisiae*, com apresentação dos dados das concentrações da glicose, do etanol e das células ao longo do tempo. Além disso, modelos cinéticos de fermentação também foram investigados. Assim, dados cinéticos dos trabalhos de Krishnan *et al.* (1995) e de Birol *et al.* (1998) foram usados para ajustar os parâmetros do modelo de fermentação. A equação química que descreve a fermentação da glicose à etanol é dada pela Equação (9), apresentada na seção 3.2.3.

Assim, para o modelo da taxa de crescimento celular (μ_F), o presente trabalho utilizou o proposto por Mesquita *et al.* (2021) (Equação (26)). A metodologia para o ajuste dos parâmetros do modelo presente na Equação (26), bem como os cálculos dos erros desses parâmetros, constam no Apêndice A (seção 9.1).

$$\mu_F = \mu_{MAX} \cdot \left(\frac{C_{glicose}}{K_S + C_{glicose}} \right) \cdot \left(1 - \frac{C_{etanol}}{C_{PMAX}} \right) \cdot \exp \left(- \frac{C_{glicose}}{S_m} \right) \quad (26)$$

sendo μ_F e μ_{MAX} as velocidades específicas de crescimento celular no tempo t e a máxima, respectivamente, dadas em h^{-1} , K_S , S_m e C_{PMAX} as constantes de Monod, de inibição pelo substrato e de saturação pelo produto, respectivamente, dadas em $g \cdot L^{-1}$ e C_{etanol} a concentração de etanol (produto) em $g \cdot L^{-1}$. A Tabela 7 exhibe os valores dos parâmetros do modelo da Equação (26), obtidos no presente trabalho.

Tabela 7. Valores dos parâmetros e constantes para a fermentação a 30 °C e pH 6.

Parâmetro	Unidade	Valor
μ_{MAX}	h^{-1}	0,2480
K_S	$g \cdot L^{-1}$	13,220
S_m	$g \cdot L^{-1}$	2626,198
C_{PMAX}	$g \cdot L^{-1}$	117,147

Fonte: autor (2025), com dados de Birol *et al.* (1998) e Krishnan *et al.* (1995).

4.1.4. Balanços de massa dos processos

Os balanços de massa dos processos de liquefação (L), sacarificação (S), fermentação (F), liquefação e sacarificação simultâneas (L+S), sacarificação e fermentação simultâneas (S+F) e da liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas (L+S+F) foram feitos utilizando as taxas r_L (Equação (16)), r_{S1} (Equação (23)), r_{S2} (Equação (24)), r_{S3} (Equação (25)) e μ_F (Equação (26)). Todos os processos foram modelados considerando um processo em batelada, exceto o F e o S+F, posto que, para esses processos, foi considerada a formação do pé-de-cuba, com reação de fermentação durante o enchimento da dorna (processo melhor detalhado posteriormente), logo foram modelados como batelada alimentada. Os balanços de massa dos processos L e S foram feitos para o amido, a glicose, a maltose e as dextrinas. Esses componentes foram relacionados usando constantes de rendimento mássico. As Equações de (27) a (30) exhibe os balanços para o processo L, e as Equações de (31) a (34), para o processo S. Os sobrescritos “L” e “S” indicam que o balanço de massa se refere ao processo de liquefação e sacarificação, respectivamente, realizados para um processo em batelada.

$$\left(\frac{dC_{\text{amido}}}{dt}\right)_L = -r_L \quad (27)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{glicose}}}{dt}\right)_L = Y_{G/A} \cdot r_L \quad (28)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{maltose}}}{dt}\right)_L = Y_{M/A} \cdot r_L \quad (29)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{dextrinas}}}{dt}\right)_L = (1 - Y_{M/A} - Y_{G/A}) \cdot r_L \quad (30)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{amido}}}{dt}\right)_S = -r_{S1} \quad (31)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{glicose}}}{dt}\right)_S = Y_{G/A} \cdot r_{S1} + Y_{G/M} \cdot r_{S2} + Y_{G/D} \cdot r_{S3} \quad (32)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{maltose}}}{dt}\right)_S = -r_{S2} \quad (33)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{dextrina}}}{dt}\right)_S = -r_{S3} \quad (34)$$

sendo $Y_{G/A}$ ($0,064 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$) e $Y_{M/A}$ ($0,137 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$) os coeficientes de rendimento mássicos da formação de glicose e de maltose, respectivamente, pelo consumo de uma unidade de amido, e $Y_{G/D}$ ($1,071 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$) e $Y_{G/M}$ ($1,0526 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$) os coeficientes de rendimento mássicos da formação de glicose pelo consumo de uma unidade de dextrinas e de maltose, respectivamente. Essas constantes, assim como os demais parâmetros dos modelos mencionados, foram estimadas por Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a, 2023b).

Os balanços de massa dos componentes no processo L+S foram definidos como a soma dos balanços para o processo L e S, gerando as Equações de (35) a (38), para o processo realizado em batelada.

$$\left(\frac{dC_{\text{amido}}}{dt}\right)_{L+S} = -r_L - r_{S1} \quad (35)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{glicose}}}{dt}\right)_{L+S} = Y_{G/A} \cdot (r_L + r_{S1}) + Y_{G/M} \cdot r_{S2} + Y_{G/D} \cdot r_{S3} \quad (36)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{maltose}}}{dt}\right)_{L+S} = Y_{M/A} \cdot r_L - r_{S2} \quad (37)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{dextrinas}}}{dt}\right)_{L+S} = (1 - Y_{M/A} - Y_{G/A}) \cdot r_L - r_{S3} \quad (38)$$

Os balanços de massa dos componentes do processo de fermentação foram feitos para a glicose, as células e o etanol, considerando batelada alimentada, conforme Equações de (39) a (41). A variação do volume (V) foi definida em função da vazão de enchimento da dorna (F), conforme Equação (42).

$$\left(\frac{dC_{\text{glicose}}}{dt}\right)_F = -\left(\frac{1}{Y_{XS}}\right) \cdot \mu_F \cdot C_{\text{células}} + \left(\frac{F}{V}\right) \cdot (C_{\text{glicose}}^{\text{AL}} - C_{\text{glicose}}) \quad (39)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{etanol}}}{dt}\right)_F = \left(\frac{Y_{PS}}{Y_{XS}}\right) \cdot \mu_F \cdot C_{\text{células}} - \left(\frac{F}{V}\right) \cdot C_{\text{etanol}} \quad (40)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{células}}}{dt}\right)_F = \mu_F \cdot C_{\text{células}} - \left(\frac{F}{V}\right) \cdot C_{\text{células}} \quad (41)$$

$$\frac{dV}{dt} = F \quad (42)$$

sendo V dado em L, F dado em L·h⁻¹ e, C_{glicose}^{AL} é dado em g·L⁻¹ e representa a concentração de glicose na alimentação da dorna, ajustada para que, ao término do enchimento, a concentração no reator seja equivalente à concentração final obtida no processo anterior. A vazão F foi modelada baseando-se na função gaussiana, de modo que a vazão de enchimento obedecesse a uma curva normal entre os tempos 0 e o tempo de enchimento (Equação (43)). Essa modelagem permitiu descrever a vazão como aproximadamente nula quando $t \rightarrow 0^+$ e quando $t \rightarrow t_{\text{ench}}^-$, além de uma vazão volumétrica máxima quando $t = t_{\text{ench}}/2$. Dessa forma, o enchimento da dorna foi modelado de uma forma suave e garantiu o balanço de volume ao longo do tempo.

$$F(t) = \begin{cases} A(t) \cdot \lambda(t), & 0 \leq t \leq t_{\text{ench}} \\ 0, & t > t_{\text{ench}} \end{cases} \quad (43)$$

sendo t_{ench} o tempo de enchimento da dorna em h. A(t) (Equação (44)) é o fator de normalização, para garantir que, apesar da variação da vazão ao longo do tempo, o volume alcançado no final seja o volume da dorna. O λ (Equação (45)) é dado em função do pico da vazão, (a média, em $t_{\text{ench}}/2$) e do desvio padrão da curva gaussiana (em

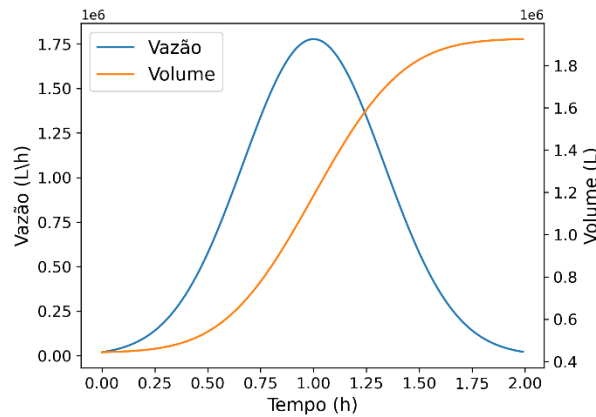
$t_{ench}/6$). A Figura 9 exibe os perfis de vazão e do volume ao longo do tempo, baseado na modelagem adotada no presente trabalho.

$$A = \frac{V_{dorna} - V_{cuba}}{\int_0^{t_{ench}} \lambda(t) dt} \quad (44)$$

$$\lambda(t) = \exp\left(-\frac{\left(t - t_{ench}/2\right)^2}{2 \cdot \left(t_{ench}/6\right)^2}\right) \quad (45)$$

sendo V_{dorna} e V_{cuba} o volume total da dorna e do pé-de-cuba (volume da dorna no início do processo de enchimento), nessa ordem, ambos em L. A diferença entre esses dois valores dá o volume da dorna a ser enchido.

Figura 9. Perfis da variação da vazão de enchimento e do volume da dorna de fermentação ao longo do tempo.



Fonte: autor (2025).

Os balanços de massa do processo S+F foram feitos somando as taxas desses processos individuais, como pode ser visto nas Equações de (46) a (51). Nesse processo, o enchimento da dorna foi modelado usando a mesma metodologia do processo de fermentação, usando as Equações de (42) a (45).

$$\left(\frac{dC_{amido}}{dt}\right)_{S+F} = \left(\frac{F}{V}\right) \cdot (C_{amido}^{AL} - C_{amido}) - r_{S1} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{dC_{\text{glicose}}}{dt} \right)_{S+F} &= \left(\frac{F}{V} \right) \cdot (C_{\text{glicose}}^{\text{AL}} - C_{\text{glicose}}) + Y_{G/A} \cdot r_{S1} + Y_{G/M} \cdot r_{S2} + Y_{G/D} \cdot r_{S3} \\ &\quad - \left(\frac{1}{Y_{\text{xs}}} \right) \cdot \mu_F \cdot C_{\text{células}} \end{aligned} \quad (47)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{maltose}}}{dt} \right)_{S+F} = \left(\frac{F}{V} \right) \cdot (C_{\text{maltose}}^{\text{AL}} - C_{\text{maltose}}) + Y_{M/A} \cdot r_{S1} - r_{S2} \quad (48)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{dextrinas}}}{dt} \right)_{S+F} = \left(\frac{F}{V} \right) \cdot (C_{\text{dextrinas}}^{\text{AL}} - C_{\text{dextrinas}}) + (1 - Y_{G/A} - Y_{M/A}) \cdot r_{S1} - r_{S3} \quad (49)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{etanol}}}{dt} \right)_{S+F} = \left(\frac{Y_{\text{ps}}}{Y_{\text{xs}}} \right) \cdot \mu_F \cdot C_{\text{células}} - \left(\frac{F}{V} \right) \cdot C_{\text{etanol}} \quad (50)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{células}}}{dt} \right)_{S+F} = \mu_F \cdot C_{\text{células}} - \left(\frac{F}{V} \right) \cdot C_{\text{células}} \quad (51)$$

sendo $C_{\text{amido}}^{\text{AL}}$, $C_{\text{maltose}}^{\text{AL}}$ e $C_{\text{dextrinas}}^{\text{AL}}$ as concentrações de amido, maltose e dextrinas, em $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$, alimentadas na dorna vindas do processo anterior.

Seguindo o mesmo padrão, o processo L+S+F também foi modelado pela soma das taxas, conforme as Equações de (52) a (57). Nesse caso, não foi considerado o enchimento da dorna, logo $F = 0$. As taxas de hidrólise são dadas em unidade de minutos, portanto, nesse processo, essas taxas foram convertidas para horas, por isso o produto por 60 (60 minutos em 1 hora).

$$\left(\frac{dC_{\text{amido}}}{dt} \right)_{L+S+F} = -(r_L + r_{S1}) \cdot 60 \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{dC_{\text{glicose}}}{dt} \right)_{L+S+F} &= (Y_{G/A} \cdot r_L + Y_{G/A} \cdot r_{S1} + Y_{G/M} \cdot r_{S2} + Y_{G/D} \cdot r_{S3}) \cdot 60 \\ &\quad - \left(\frac{1}{Y_{\text{xs}}} \right) \cdot \mu_F \cdot C_{\text{células}} \end{aligned} \quad (53)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{maltose}}}{dt} \right)_{L+S+F} = (Y_{M/A} \cdot r_L + Y_{M/A} \cdot r_{S1} - r_{S2}) \cdot 60 \quad (54)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{dextrinas}}}{dt}\right)_{L+S+F} = \left[(1 - Y_{M/A} - Y_{G/A}) \cdot r_L + (1 - Y_{M/A} - Y_{G/A}) \cdot r_{S1} - r_{S3}\right] \cdot 60 \quad (55)$$

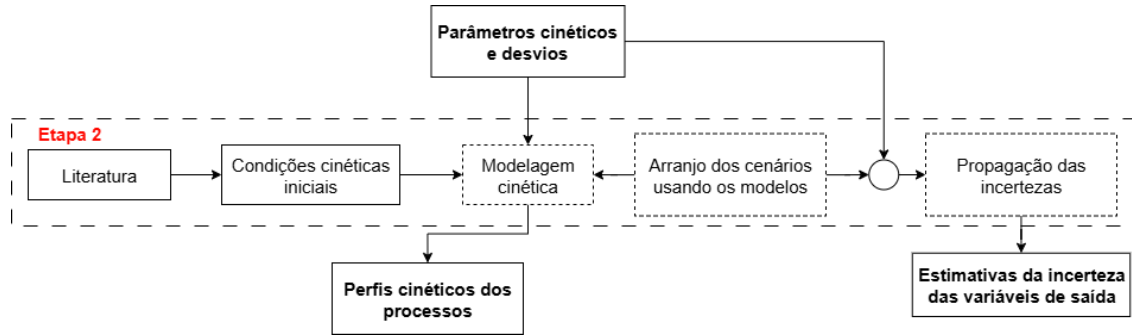
$$\left(\frac{dC_{\text{etanol}}}{dt}\right)_{L+S+F} = \left(\frac{Y_{ps}}{Y_{xs}}\right) \cdot \mu_F \cdot C_{\text{células}} \quad (56)$$

$$\left(\frac{dC_{\text{células}}}{dt}\right)_{L+S+F} = \mu_F \cdot C_{\text{células}} \quad (57)$$

4.2. Modelagem dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF

Essa etapa visa detalhar como os modelos dos processos descritos na seção 4.1 foram organizados para simular os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, como os sistemas de equações diferenciais foram numericamente resolvidos e como foi feita a avaliação da propagação da incerteza pelo arranjo dos modelos. Um fluxograma metodológico dessa etapa pode ser observado na Figura 10.

Figura 10. Fluxograma metodológico da etapa 2 do trabalho.

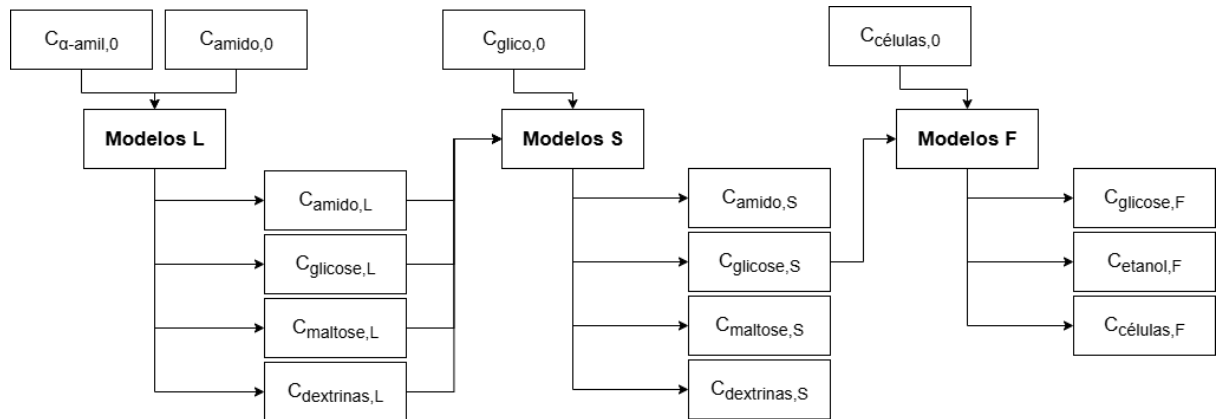


Fonte: autor (2025)

4.2.1. Arranjo dos modelos

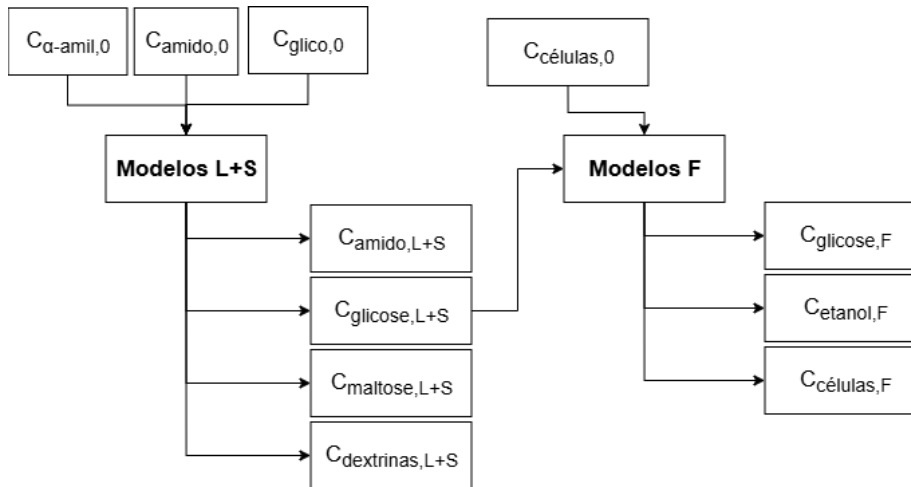
Os cenários foram arranjados aplicando os modelos de modo sequencial. A Figura 11, Figura 12, Figura 13 e Figura 14 mostram os arranjos feitos para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, respectivamente.

Figura 11. Arranjo dos modelos para o cenário LSF.



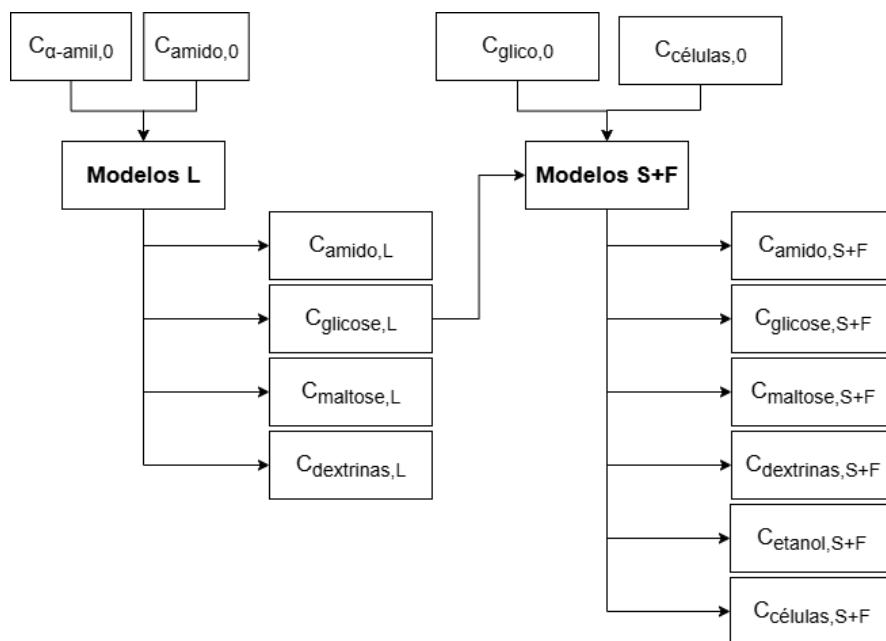
Fonte: autor (2025)

Figura 12. Arranjo dos modelos para o cenário SLSF.



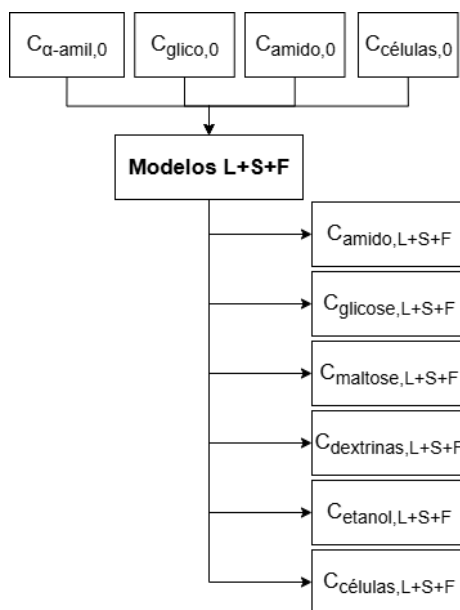
Fonte: autor (2025)

Figura 13. Arranjo dos modelos para o cenário LSSF.



Fonte: autor (2025)

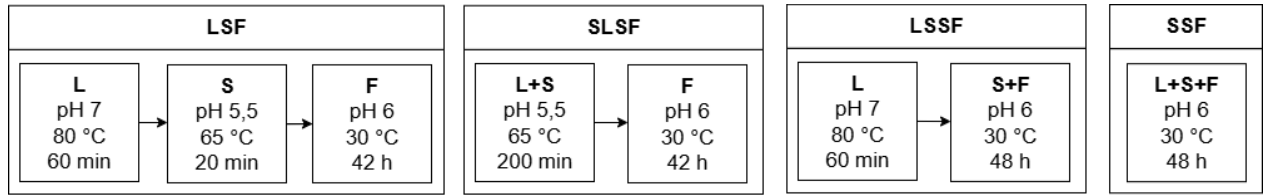
Figura 14. Arranjo dos modelos para o cenário SSF.



Fonte: autor (2025)

Como pode ser observado, a saída de um modelo é a entrada do seguinte. No cenário LSF, por exemplo, o modelo de liquefação retorna as concentrações de amido, de glicose, de maltose e de dextrinas, que, acrescentando a concentração inicial da glicoamilase, segue para o processo de sacarificação, que retorna as concentrações desses componentes, mas apenas a de glicose segue para a fermentação. A Figura 15 exhibe os arranjos dos cenários, com temperaturas, pH e tempos para cada processo em cada cenário.

Figura 15. Cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF arranjos com os modelos de liquefação (L), sacarificação (S), fermentação (F), liquefação e sacarificação simultâneas (L+S), sacarificação e fermentação simultâneas (S+F) e os três processos simultâneos (L+S+F), com suas respectivas temperaturas, pH e tempos de processo.



Fonte: autor (2025).

4.2.2. Resolução numérica

As equações diferenciais ordinárias estudadas no trabalho são de Problema de Valor Inicial (PVI), ou seja, necessitam de definição dos valores das variáveis dependentes (concentração) no tempo zero ($t=0$). A concentração inicial de amido ($C_{\text{amido},0}$) usada foi de $200 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$, conforme Oliveira e Cruz (2023), e a concentração final de etanol é a saída principal da modelagem. As concentrações de entrada (concentrações iniciais) dos demais componentes foram calculadas com base na concentração inicial do amido, através das Equações de (58) a (60). Essas equações foram deduzidas com base nas relações informadas por Kwiatkowski *et al.* (2006).

$$C_{\alpha\text{-amilase},0} = r_{\text{amilase}/\text{milho}} \cdot \frac{C_{\text{amido},0}}{r_{\text{amido}/\text{milho}} \cdot \rho_{\text{amilase}}} \quad (58)$$

$$C_{\text{glicoamilase},0} = r_{\text{glicoamilase}/\text{milho}} \cdot \frac{C_{\text{amido},0}}{r_{\text{amido}/\text{milho}} \cdot \rho_{\text{glicoamilase}}} \quad (59)$$

$$C_{\text{células},0} = r_{\text{células/mosto}} \cdot \frac{C_{\text{amido},0}}{r_{\text{amido/milho}}} \quad (60)$$

sendo $r_{i/j}$ as razões mássicas de processo entre os componentes i e j , presentes na Tabela 8, e ρ_{amilase} e $\rho_{\text{glicoamilase}}$ as densidades da α -amilase e da glicoamilase iguais a $1400 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (ChemSrc, 2024) e $1125 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Sunson Enzymes, 1999) a 20°C , respectivamente, e foram consideradas constantes com a temperatura. As concentrações iniciais dos demais componentes foram consideradas zero.

Tabela 8. Razão mássica entre o componente i e j .

Componente j	Componente i	Valor de $r_{i/j}$ ($\%\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$)
α -amilase	Milho	0,82
Glicoamilase	Milho	0,11
Células	Mosto	0,008
Amido	Milho	59,5

Fonte: Kwiatkowski *et al.* (2006).

A resolução das equações do modelo foi feita usando linguagem Python, na plataforma Google Colab. O sistema de equações diferenciais ordinárias foi resolvido usando a função "*odeint*" do pacote "*scipy.integrate*" do Python, usando 10 mil pontos. O número de pontos foi definido após simulações prévias, onde foram investigadas algumas saídas da simulação em função no número de pontos usados. Foram avaliados 10, 100, 1000, 10000 e 50000 pontos. Os resultados da simulação foram iguais quando se usou 10 mil e 50 mil pontos, sendo que o uso de 1000 pontos no cenário SSF também obteve os mesmos resultados. Diante disso, o valor de 10 mil foi adotado. Foi usado o método numérico padrão da função *odeint*, que utiliza o solver LSODA (*Livermore Solver for Ordinary Differential Equations with Automatic switching for stiffness*), do pacote ODEPACK do Fortran. A tolerância padrão do solver foi mantida ($1,49012\text{e-}08$). O intervalo da resolução numérica da variável independente (tempo) definido em cada processo é descrito e justificado na seção 4.3.1.

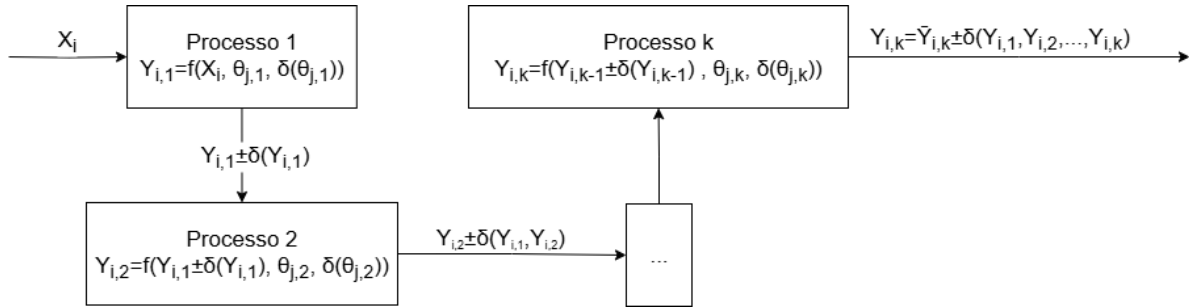
O Google Colab foi escolhido como IDE (*Integrated Development Environment* ou Ambiente de Desenvolvimento Integrado) diante do objetivo de usar um espaço em

nuvem para desenvolver a pesquisa, estratégia chamada e *Cloud Computing* ou Computação em Nuvem, do tipo PaaS (*Platform as a Service* ou Plataforma como serviço). Dessa forma, essa plataforma oferece benefícios como pacotes computacionais sempre atualizados, integração com inteligência artificial, uso de RAM (Memória de Acesso Aleatório) externa (dos Computadores Google), isentando o usuário do esforço computacional etc. Ao mesmo que essa plataforma possui algumas desvantagens, tais como a impossibilidade de execução com tempo indefinido (limitado a 12 h), forçando o usuário a dividir o código em várias células, limitação de hardware, necessidade da conexão com a internet e até mesmo problema com segurança da informação, já que o programa é implementado em nuvem. Ainda assim, todos os algoritmos do presente trabalho foram implementados nessa plataforma, dados os benefícios e a flexibilidade da Computação em Nuvem.

4.2.3. Incerteza dos modelos

Os cenários foram arranjados utilizando diferentes modelos e adequando-os em sequência. Esse procedimento gera uma propagação das incertezas dos parâmetros, impactando o resultado. Essa metodologia para o cenário LSF pode ser entendida observando a Figura 11, o cenário LSF é composto por três processos. Dada uma entrada da variável X_i (X a variável, como a concentração inicial de amido, e i o processo, como a liquefação), os desvios dos parâmetros irão gerar um conjunto de variável resposta ($Y_{i,1}$), que é função da entrada e dos parâmetros (valores médios dos parâmetros, $\bar{\theta}_j$, e seus erros, $\delta(\theta_j)$), de modo que a $Y_{i,1} = f(X_i, \theta_{j,1}, \delta(\theta_{j,1}))$. Assim, a saída do processo 1 é composto pelo seu valor médio ($\bar{Y}_{i,1}$) e seu erro ($\delta(Y_{i,1})$), de modo $Y_{i,1} = \bar{Y}_{i,1} \pm \delta(Y_{i,1})$, sendo essa a entrada do processo 2. Essa entrada no processo 2, gera uma saída do processo 2 que é função dos erros dos parâmetros dos processos 1 e 2. Isto é, a saída final, que seria no processo 3, leva consigo um erro propagado pelos desvios dos parâmetros de cada processo e dos erros das variáveis de saída de cada etapa. A Figura 16 exibe o esquema da propagação da incerteza dos valores das variáveis de saída em cada processo. Note que o valor de k varia a depender do cenário estudado (LSF, $k = 3$; SLSF e LSSF, $k = 2$; e SSF, $k = 1$).

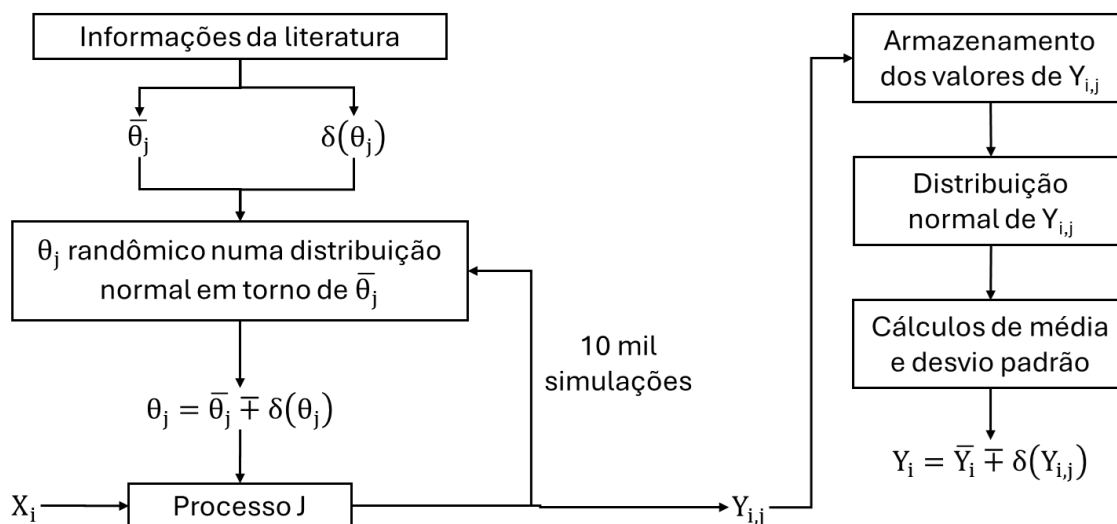
Figura 16. Esquema de propagação de incerteza do valor da variável de saída em função das variáveis de entrada e dos erros dos parâmetros do modelo em cada processo.



Fonte: autor (2025)

Para estimar essas incertezas e avaliar se a metodologia de arranjo dos modelos oferece resultados confiáveis, foi utilizado o Método de Monte Carlo. Os valores dos parâmetros, valores médios (θ_j) e seus erros ($\delta(\theta_j)$), são informados pela literatura. Com isso, foram gerados valores randômicos de θ_j seguindo uma distribuição normal em torno do seu valor médio ($\theta_j = \bar{\theta}_j \pm \delta(\theta_j)$). Esse valor de θ_j foi usado no processo com uma entrada X_i fixa, gerando um valor de saída $Y_{i,j}$ (saída i do processo j). Esse procedimento foi feito 10 mil vezes para gerar uma distribuição de saídas $Y_{i,j}$, que foram armazenados para cálculos da média e do desvio padrão. O esquema do algoritmo de Monte Carlo aplicado pode ser visto na Figura 17. Os valores dos erros dos parâmetros usados nessa análise estão apresentados na Tabela 9, Tabela 10 e Tabela 11.

Figura 17. Esquema do algoritmo de Monte Carlo para estimar a incerteza da variável de saída em cada cenário.



Fonte: autor (2025)

Tabela 9. Valores médios e desvios dos parâmetros e das constantes para a liquefação usados no método de Monte Carlo.

Parâmetro	Unidade	Média	Desvio padrão
K_{mL}	$g \cdot L^{-1}$	17,1	1,5
$K_{iL}^{glucose}$	$g \cdot L^{-1}$	47,2	4,1
$K_{iL}^{maltose}$	$g \cdot L^{-1}$	12,2	1,1
$K_d^{\alpha-amilase}$	min^{-1}	0,046	0,004
$K_d^{\alpha-amilase*}$	min^{-1}	0,00097	0,0008
$V_{mL}^{\alpha-amilase}$	$g \cdot L^{-1} \cdot min^{-1}$	5402,4	464,2
$V_{mL}^{\alpha-amilase*}$	$g \cdot L^{-1} \cdot min^{-1}$	2640,84	121,35
$Y_{G/A}$	$g \cdot g^{-1}$	0,064	0,02
$Y_{M/A}$	$g \cdot g^{-1}$	0,137	0,005

Fonte: Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013b).

Tabela 10. Valores médios e desvios dos parâmetros e das constantes para a sacarificação usados no método de Monte Carlo.

Parâmetro	Unidade	Média	Desvio padrão
$K_d^{\text{glicoamilase}}$	min^{-1}	0,015	0,0015 ^a
V_{mS1}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$	96,79	8,52
K_{mS1}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	0,019	0,017
K_{iS1}^{glicose}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	4,34E-04	1,06E-04
K_{iS1}^{maltose}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	0,0031	7,3E-04
V_{mS2}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$	13261	970
K_{mS2}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	3,64	0,39
K_{S3}	min^{-1}	1008,84	100,88 ^a
$Y_{G/M}$	$\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$	1,0526	0,1053 ^a
$Y_{M/D}$	$\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$	1,071	0,107 ^a

^a Valores não informados pela referência e foram calculados como 10% do seu valor médio.

Fonte: Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a).

Tabela 11. Valores médios e desvios dos parâmetros e das constantes para a fermentação usados no método de Monte Carlo.

Parâmetro	Unidade	Média	Desvio padrão
μ_{MAX}	h^{-1}	0,2480	0,0097
K_S	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	13,220	3,146
S_m	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	2626,198	0,697
C_{PMAX}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	117,147	0,131
Y_{xs}	$\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$	0,010	0,0002
Y_{ps}	$\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$	0,462	0,0098

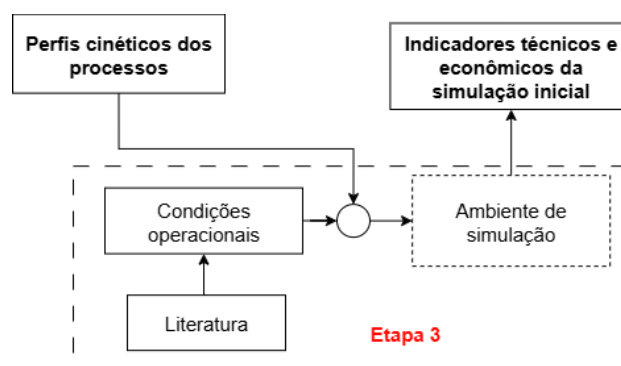
Fonte: O autor (2025), com dados de Birol *et al.* (1998) e Krishnan *et al.* (1995).

Foram feitas 10 mil iterações na simulação para obter os valores da variável de saída. Esse número de iterações foi definido após analisar a variação da distribuição da concentração final de etanol em cada cenário, em função do número de pontos. Foram avaliados 100, 1000, 10000 e 50000. Os dois primeiros não alcançaram resultados satisfatórios, enquanto o último demandou muito esforço computacional.

4.3. Ambiente de simulação da usina

Nessa etapa foram atribuídos os parâmetros técnicos e econômicos da usina simulada, conforme fluxograma metodológico presente na Figura 18. Foi feita a simulação de uma usina (todas as etapas do processo) de produção de etanol de milho do tipo full operando 24h por dia, durante 330 dias por ano. Toda a simulação foi feita no mesmo ambiente que a resolução do sistema dos modelos cinéticos; portanto, a esta também foi feita no Python, na plataforma Google Colab.

Figura 18. Fluxograma metodológico da etapa 3 do trabalho.

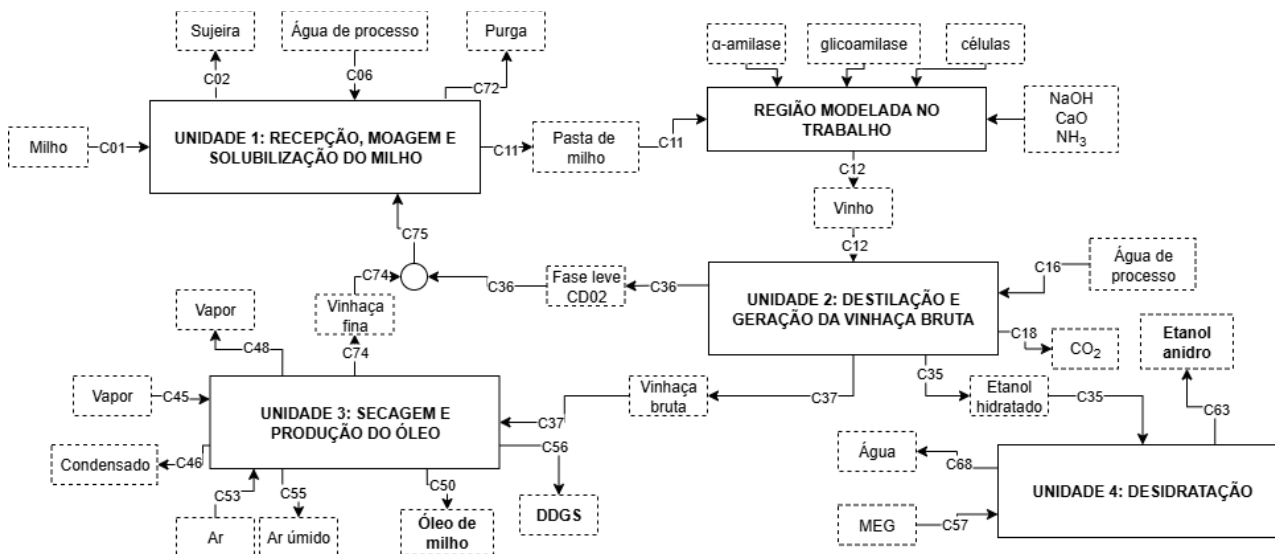


Fonte: autor (2025)

No presente trabalho, o processo de produção de etanol de milho foi separado em quatro unidades, além da região modelada (na qual se simula os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF). Essa distinção pode ser vista na Figura 19, que exhibe o processo em unidades e destaca os materiais que atravessam o volume de controle de cada unidade. Os produtos do processo estão destacados em negrito. Para fins de simulação, os processos foram divididos em *processos gerais* e *processos específicos*. Os processos gerais são aqueles que não variam com o cenário estudado, isto é, os processos presentes nas unidades 1, 2, 3 e 4. Já os processos específicos são aqueles que contemplam os processos de liquefação, sacarificação e fermentação, que vão variar a depender do cenário. Todas as correntes simuladas foram enumeradas, mas na Figura 19 apresentam-se apenas os números das correntes que transpassam os volumes de controle de cada unidade. Nas seções a seguir, apenas as principais correntes, dos processos gerais e específicos, serão detalhadas. Para cada unidade, as correntes internas foram estimadas e calculadas empregando os balanços de massa e energia para

o cálculo das demandas de insumos e utilidades. Esses cálculos completos, bem como os equipamentos em cada unidade, estão descritos no Apêndice B (seção 9.2).

Figura 19. Fluxograma completo do processo simulado.



Fonte: Adaptado de Oliveira e Cruz (2023), Kwiatkowski *et al.* (2006), McAloon *et al.* (2000) e Quintero *et al.* (2008)

A unidade 1 (detalhada na Figura 60) foi simulada para a recepção do milho e tratamento prévios às etapas de hidrólise e fermentação. Além disso, há o processo de solubilização, com a mistura do farelo de milho, obtido na etapa de moagem, água de processo e fase líquida da destilação e da secagem. Dessa unidade, é gerada a pasta de milho que segue para outras etapas específicas do processo, descritas na seção seguinte (seção 4.3.1). A unidade 2 (detalhada na Figura 61) é a unidade de destilação, que opera com duas colunas de destilação para geração do etanol hidratado e da vinhaça bruta. A vinhaça bruta, oriunda da primeira coluna de destilação, segue para a unidade 3 (detalhada na Figura 62), onde são produzidos o óleo de milho e o DDGS. Já o etanol hidratado segue para a unidade de desidratação, unidade 4 (detalhada na Figura 63), onde é formado o etanol anidro. Como dito anteriormente, cada unidade foi detalhada e suas correntes foram calculadas via balanço de massa, com cálculos detalhados no Apêndice B (seção 9.2).

4.3.1. Descrição dos processos específicos

Para os processos de liquefação, sacarificação e fermentação foi considerada a disponibilidade de 6 dornas, com 1481 m³ de volume útil (Oliveira; Cruz, 2023). As operações simuladas na usina, para cada dorna, foram: enchimento, processo (que pode ser de liquefação (L), sacarificação (S), fermentação (F), liquefação e sacarificação simultâneas (L+S), sacarificação e fermentação simultâneas (S+F), ou os três processos simultâneos (L+S+F)), esvaziamento e limpeza. Cada operação possui seu tempo definido.

Os tempos de enchimento das donas para os processos de L, S, L+S e L+S+F foram definidos como 1 h. Já para os processos S+F e F, o enchimento compreendeu a formação de pé-de-cuba e a alimentação da dorna. Essas etapas foram:

- Formação do pé-de-cuba: alimentação apenas de células, durante 1h, ocupando 30% do volume útil total da dorna. Esse processo se inicia antes da finalização da operação da dorna anterior, para garantir que o pé-de-cuba esteja formado para receber o mosto que vem da dorna anterior;
- Enchimento da dorna com o mosto: após ocupar 30% do volume útil da dorna com o pé-de-cuba, há a alimentação do mosto advindo da etapa anterior, com toda a célula já contida na dorna. Essa operação foi simulada com duração de 2h.

Os tempos de limpeza e de esvaziamento das dornas também foram consideradas, sendo 1h para ambos. Vale ressaltar que o tempo de esvaziamento pode alterar para as dornas que antecede às dornas de fermentação, pois as de fermentação são enchidas em 2h e o seu enchimento é conciliado com o esvaziamento da dorna anterior.

Para determinação dos tempos dos processos (L, S, F, L+S, S+F, L+S+F) dois critérios foram usados: (i) o processo ocorre até atingir a concentração mínima residual do principal reagente; ou, (ii) o processo ocorre até atingir 95% da concentração máxima do principal produto. A parada do processo obedecia ao evento que ocorresse primeiro. Além disso, nos casos em que os critérios de parada não fossem atingidos, tempos máximos também foram determinados com base nos trabalhos de Presecki, Blaževic e

Vasic-Racki (2013b), Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a), Białas, Czerniak e Szymanowska-Powałowska (2014) e Kwiatkowski *et al.* (2006). A concentração mínima residual e os tempos máximos definidos para cada etapa de processo foram:

- L: tempo no qual a concentração de amido atinge 2% da sua concentração inicial, posto que, nesse processo, esse é o único componente consumido (tempo máximo de 70 minutos);
- S: amido, maltose e dextrinas são consumidos nesse processo; no entanto, simulações prévias indicaram que a dextrina se apresenta em maior concentração e demora mais tempo para ser hidrolisada, logo esse componente foi selecionado como critério do tempo de processo, sendo estabelecido o critério de 2% da sua concentração inicial (tempo máximo de 20 minutos);
- F, S+F e L+S+F: tempo no qual a concentração de glicose atinge 1% da sua concentração inicial. Nos processos S+F e L+S+F, o percentual foi relativo à concentração máxima atingida pela glicose em qualquer tempo (tempo máximo de 100 horas);
- L+S: dependendo das concentrações iniciais de α -amilase e glicoamilase, o amido ou as dextrinas podem se tornar os componentes limitantes do processo. Por essa razão, foram estabelecidas concentrações residuais de 2% para ambos, e o tempo de processo foi definido com base no componente que atingiu a concentração residual por último (tempo máximo de 200 minutos);

Para representar o fluxo operacional dos processos específicos, foram elaborados diagramas de Gantt, os quais permitem a visualização simultânea de diferentes etapas ocorrendo em unidades distintas, de forma sequencial ou paralela. Em todos os cenários simulados, assume-se a disponibilidade de seis dornas, cujas funções específicas variam de acordo com a estratégia de produção adotada. No cenário LSF (liquefação e sacarificação sequenciais, seguidas de fermentação), o ciclo se inicia com a dorna 1, destinada à liquefação. Esta unidade passa pelas etapas de enchimento (de $t = 0$ até $t = t_{ench,L}$), liquefação ($t = t_{ench,L}$ até $t = t_{ench,L} + t_{proc,L}$), esvaziamento (realizado simultaneamente ao enchimento da dorna 2), e, por fim, limpeza. A dorna 2, por sua vez, recebe o material para a etapa de sacarificação e segue um fluxo análogo: enchimento, reação, esvaziamento e limpeza. O material resultante da sacarificação é transferido para

a fermentação, conduzida em uma das dornas designadas para essa etapa (dornas 3 a 6), sendo que o enchimento é precedido pela formação do pé-de-cuba. Esse mesmo raciocínio é aplicado aos demais cenários.

A partir do diagrama de ocupação de dornas gerada para cada cenário, é determinado o tempo de ciclo (t_{ciclo}), definido como o intervalo necessário para que a Dorna 1 possa ser novamente enchida, sem comprometer as operações das dornas seguintes. Esse tempo representa o compasso geral do processo cíclico, e serve como base para o cálculo do número de ciclos anuais, de acordo com a Equação (61). As atribuições dos processos de cada dorna em cada cenário são exibidas no Quadro 1.

$$[n_{\text{ciclos}}] = \frac{D_{\text{op}} \cdot 24}{t_{\text{ciclo}}} \quad (61)$$

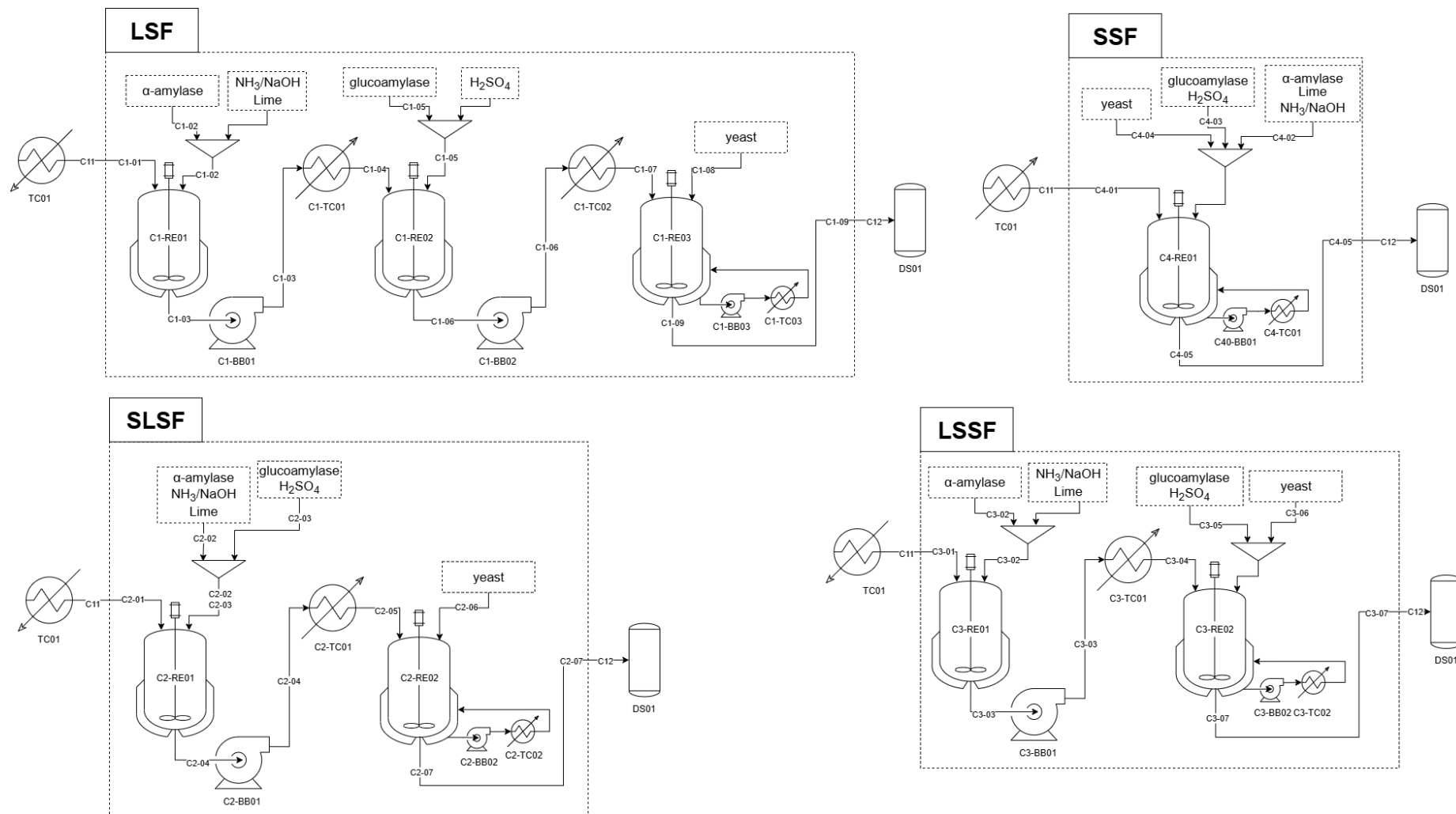
sendo D_{op} o número de dias de funcionamento da usina no ano (330 dias) e t_{ciclo} o intervalo de tempo de cada ciclo. O símbolo “*piso*” no termo “ n_{ciclos} ” é para indicar que esse termo está sendo arredondado para um número inteiro menor, de modo a garantir que o número de ciclos não seja fracionado.

Quadro 1. Alocação dos processos em cada dorna nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF.

Processo	LSF	SLSF	LSSF	SSF
Liquefação (L)	Dorna 1	Dorna 1	Dorna 1	Dornas de 1 a 6
Sacarificação (S)	Dorna 2		Dornas de 2 a 6	
Fermentação (F)	Dornas de 3 a 4	Dornas de 2 a 6		

A simulação da região dos processos específicos varia de acordo com os cenários avaliados. A Figura 20 exhibe os processos específicos simulados para os cenários LSF, SSF. Note que os processos específicos se iniciam após o trocador de calor TC01 (corrente C11, pasta de milho solubilizada) e finalizam até a coluna de desgaseificação DS01 (corrente C12, vinho da fermentação). Os equipamentos serão detalhados em seções posteriores. Diante dessa imagem, pode-se observar que os cenários (processos específicos) estão contidos numa parte específica do processo. Os processos antes e depois da região dos cenários modelados são os processos gerais.

Figura 20. Fluxograma dos processos específicos simulados em cada cenários.



Fonte: Adaptado de Oliveira e Cruz (2023), Kwiatkowski *et al.* (2006), McAloon *et al.* (2000) e Quintero *et al.* (2008)

As correntes de α -amilase, glicoamilase e de células foram calculadas visando suprir a necessidade dessas matérias-primas ao longo do ano de produção, bem como garantir a concentração inicial desses componentes definidos no input da simulação (conforme Equações (62) e (63)).

$$C_{k-n}(\text{enzimas}) = \frac{C_{\text{inicial,enz } i} \cdot V_{\text{dorna}} \cdot \rho_{\text{enz } i} \cdot ND_F \cdot n_{\text{ciclos}}}{1000 \cdot h_{\text{totais}}} \quad (62)$$

$$C_{k-n}(\text{células}) = \frac{C_{\text{inicial,células}} \cdot (V_{\text{dorna}} - V_{\text{cuba}}) \cdot ND_F \cdot n_{\text{ciclos}}}{1000 \cdot h_{\text{totais}}} \quad (63)$$

sendo k os cenários (1 - LSF, 2 – SLSF, 3 – LSSF e 4 - SSF), n as correntes (conforme Figura 20) e i as enzimas (i = α -amilase ou glicoamilase), C_{k-n} são as correntes (de enzimas ou de células) em $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$, $C_{\text{inicial,enzi}}$ a concentração inicial da enzima i no cenário k em $\text{L} \cdot \text{L}^{-1}$, $C_{\text{inicial,células}}$ a concentração inicial de células no cenário k em $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ e h_{totais} o tempo anual do processo em h (produto entre o número de ciclos e o tempo de cada ciclo). Em todos os casos, a corrente de saída do volume de controle dos processos específicos (corrente C12) é a soma das correntes que entram nessa região.

Os componentes amônia (NH_3), hidróxido de sódio (NaOH), óxido de cálcio (CaO , lime) e ácido sulfúrico (H_2SO_4) foram considerados insumos e suas correntes não entraram nos cálculos de balanço de massa.

4.3.2. Descrição dos processos gerais

Na Unidade 1, há a recepção do milho, moagem e sua solubilização, que ocorre com água e com a mistura dos efluentes vindos da segunda coluna de destilação da Unidade 2 e da vinhaça fina. Assim, a pasta de milho é formada e enviada para a unidade modelada no presente trabalho (explicada na Seção 4.3.1).

A quantidade de milho processada foi definida em 1100 toneladas por dia, em todas as simulações realizadas. Esse valor foi definido com base em simulações prévias e da alta variabilidade informada pela literatura: Donke *et al.* (2017) usaram 900 ton/dia, Oliveira e Cruz (2023) usaram 1826 ton/dia, Milanez *et al.* (2014) usaram 2710 ton/dia. De posse dessa definição, a corrente de milho (C01), em $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$, foi calculada usando a Equação (64). A quantidade de sujeira no milho foi definida como 0,3% m/m da

quantidade de milho (AspenTech, 2017), logo C02 é 0,3% de C01. A vazão da água de processo na corrente C06 foi definida de modo a suprir a quantidade de solvente necessária para atingir a concentração inicial de amido estabelecida pelo usuário na simulação, mas considerando a quantidade de reciclo das unidades 2 e 3, que formam a corrente C75. A corrente C72 foi definida como uma purga das unidades 2 e 3 e também se relaciona com a vazão da corrente C06. Ou seja, as correntes C06 e C72 são condicionadas entre si, entre a corrente C75 e a concentração inicial de amido (detalhes no apêndice B, seção 9.2).

$$C01 = \frac{\text{milho}_{\text{processado}} \cdot 10^3 \cdot D_{\text{op}}}{h_{\text{totais}}} \quad (64)$$

sendo C01 dado em $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$, $\text{milho}_{\text{processado}}$ a quantidade diária de milho processo em $\text{ton} \cdot \text{dia}^{-1}$ (definido da literatura) e 10^3 um termo de conversão (de ton para kg).

Na unidade 2, a corrente principal é a de etanol hidratado (C35), que segue para a unidade 4. Essa corrente foi calculada em função da concentração final de etanol (C_{etanol}^{C12} , obtida por meio da modelagem cinética dos cenários), da fração de etanol definida na Resolução n° 907 da ANP (ANP, 2022) ($f_{\text{ETOH-H,ANP}} = 0,9355 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$) e da relação entre a quantidade de etanol que sai da fermentação e chega na corrente de etanol hidratado (calculado de Oliveira e Cruz (2023)) ($f_{\text{ETOH,C12/C35}} = 0,9964 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$). No entanto, para essa corrente, foi feita uma avaliação se a quantidade de etanol no vinho satisfaz os rendimentos teóricos das hidrólises e da fermentação (Y_H e Y_F , respectivamente). Caso ultrapassasse, a corrente era calculada em função da quantidade amido no processo e das conversões obtidas pela modelagem. Esses cálculos estão descritos no sistema da Equação (65). Os valores de 1,111 e 0,511 são os rendimentos teóricos de hidrólise do amido à glicose e de fermentação da glicose à etanol, ambos em $\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$. Os rendimentos Y_H e Y_F foram calculados pelas Equações (66) e (67). As variações das concentrações foram calculadas de formas distintas para cada cenário k.

$$C35 = \begin{cases} \frac{C_{\text{etanol}}^{C12} \cdot C12}{\rho_{C12}} \cdot \frac{f_{\text{ETOH,C12/C35}}}{f_{\text{ETOH-H,ANP}}}, & \text{se } C35 < 1,111 \cdot 0,511 \cdot C03 \cdot r_{\text{amido/milho}} \\ Y_H \cdot Y_F \cdot f_{\text{ETOH,C12/C35}} \cdot C03 \cdot r_{\text{amido/milho}}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (65)$$

$$Y_{H,k} = \frac{\Delta C_{\text{glicose},k}}{\Delta C_{\text{amido},k}} \quad (66)$$

$$Y_{F,k} = \frac{\Delta C_{\text{etanol},k}}{\Delta C_{\text{glicose},k}} \quad (67)$$

sendo ρ_{C12} a massa específica do vinho, considerada como $1009 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Oliveira; Cruz, 2023).

Na unidade 3, as principais correntes são de produção de DDGS (C56) e de óleo de milho (C50). A vazão da corrente de DDGS, em $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$, foi calculada em função da quantidade de proteínas presente no milho (Oliveira; Cruz, 2023), da concentração de células ($C_{\text{células}}^{C12}$) presente no vinho (corrente C12) e da fração desses componentes (proteínas e células) presentes na corrente de DDGS (38,31%, conforme calculado para Oliveira e Cruz (2023)), de acordo com a Equação (68). Os valores de f_{poly5} , f_{poly6} , e f_{poly7} usados foram 0,0442, 0,0255 e 0,0493, respectivamente, todos em $\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$. Para a vazão de óleo, em $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$, foi usada a relação mássica entre sua produção e a quantidade de milho processado, sendo este fator $f_{\text{óleo/milho}} = 0,034$ (Oliveira; Cruz, 2023), como pode ser visto na Equação (69).

$$C56 \text{ (DDGS)} = \left(\frac{1}{0,3831} \right) \cdot \left[C01 \cdot (f_{\text{poly5}} + f_{\text{poly6}} + f_{\text{poly7}}) + \frac{C_{\text{células}}^{C12} \cdot C12}{\rho_{C12}} \right] \quad (68)$$

$$C50 \text{ (óleo)} = f_{\text{óleo/milho}} \cdot C01 \quad (69)$$

Na unidade 4, as correntes principais são a de etanol anidro (C63) e de alimentação de monoetilenoglicol (MEG, C57), agente usado no processo de desidratação simulado no presente trabalho. A corrente C63 foi calculada considerando a fração mássica de etanol na corrente de etanol hidratado (C35) definida pela ANP, $f_{\text{ETOH-H,ANP}} = 0,9355 \text{ g}\cdot\text{g}^{-1}$, a fração mássica de etanol na corrente de etanol anidro (C33) definida pela ANP, $f_{\text{ETOH-A,ANP}} = 0,993 \text{ g}\cdot\text{g}^{-1}$ e a relação entre a quantidade de etanol da corrente de etanol hidratado que não se perde no processo de desidratação, $f_{\text{ETOH,C35/C63}} = 0,9999 \text{ g}\cdot\text{g}^{-1}$. A C63 foi calculada via Equação (70). A corrente C57 foi definida para suprir a quantidade de MEG que não é recuperada no processo de destilação da CD04 presente na unidade 4 (detalhado no Apêndice B, seção 9.2). A quantidade necessária

de MEG por unidade mássica da corrente C35 foi definida como 1,1829, com base em Alves *et al.* (2014), e a quantidade definida de MEG recuperado foi de 95,27% usando dados de Oliveira *et al.* (2023).

$$C63 = f_{\text{ETOH-H,ANP}} \cdot C35 \cdot \frac{f_{\text{ETOH,C35/C63}}}{f_{\text{ETOH-A,ANP}}} \quad (70)$$

4.3.3. Resolução do balanço de massa

Para os cálculos de convergência de balanço de massa, foram feitos chutes iniciais de 1000 kg·h⁻¹ para as vazões das correntes C36, C71, C74 e C75. Os balanços de massas de cada unidade e do processo global foram equacionados (Equações de (71) a (76)) e a Equação (77) foi usada para avaliar a convergência do balanço de massa. Foram feitas iterações para o cálculo de BM_{check} e foi definida a tolerância de 10⁻¹⁰ e o máximo de 1000 iterações.

$$BM_{\text{unidade 1}} = C01 - C02 + C75 + C06 - C11 - C72 \quad (71)$$

$$BM_{\text{unidade 2}} = C12 + C16 - C18 - C35 - C36 - C37 \quad (72)$$

$$BM_{\text{unidade 3}} = C37 - C48 - C50 - C55 - C56 + C53 - C74 \quad (73)$$

$$BM_{\text{unidade 4}} = C57 - C63 - C68 + C35 \quad (74)$$

$$BM_{\text{unidade modelada}} = C01 + C_{\text{amilase}} + C_{\text{glicoamilase}} + C_{\text{células}} - C12 \quad (75)$$

$$BM_{\text{global}} = C01 - C02 + C06 - C72 + C_{\text{amilase}} + C_{\text{glicoamilase}} + C_{\text{células}} + C16 \\ - C18 - C48 - C50 - C55 - C56 + C53 + C57 - C63 - C68 \quad (76)$$

$$BM_{\text{check}} = BM_{\text{unidade 1}} + BM_{\text{unidade 2}} + BM_{\text{unidade 3}} + BM_{\text{unidade 4}} + BM_{\text{global}} \\ + BM_{\text{unidade modelada}} \quad (77)$$

4.3.4. Cálculos das utilidades

Foram estimados custos com água de resfriamento, vapor e eletricidade, que compuseram os custos com utilidades. O consumo de eletricidade foi estimado calculando a energia necessária para as principais bombas do processo, acrescido do consumo dos demais equipamentos, de modo que o consumo de energia para bombeamento fosse um percentual da energia total. Os percentuais foram calculados com base no trabalho de Oliveira e Cruz (2023) e foram 3,07% para o cenário LSF, 3,15%

para o SLSF, 3,27% para o LSSF e 2,55% para o SSF. Os cálculos feitos para cada bomba estão detalhados no Apêndice B (seção 9.2). A potência para uma corrente n foi calculada pela Equação (78), dada por Turton *et al.* (2012). O fator de acréscimo de potência ($f_{\text{acrescimo,pot}}$) foi definido como 1,5 e visa contemplar as perdas de carga existentes nas etapas que envolvem o bombeamento de correntes líquidas do processo (Peters; Timmerhaus, 1991). A eficiência (η) foi definida como 0,5 (AspenTech, 2017).

$$\text{Pot}_{\text{Cn}} = f_{\text{acrescimo,pot}} \cdot 1,67 \cdot \left(\frac{\text{Cn}}{\rho_{\text{Cn}} \cdot 6 \cdot 10^4} \right) \cdot \frac{\Delta P}{\eta} \quad (78)$$

sendo Pot_{Cn} a potência da bomba na corrente n em kW, 1,67 e $6 \cdot 10^4$ fatores de conversão de unidades, Cn a vazão mássica da corrente n em $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$, ρ_{Cn} a massa específica da corrente n em $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ e ΔP o gradiente de pressão no bombeamento em bar, calculado, em alguns casos, em função da altura do equipamento e da massa específica da corrente.

Para as bombas dos processos gerais, a energia foi calculada em função do termo h_{totais} ; para os processos específicos, no entanto, o cálculo considerou o ND_F , o tempo de enchimento da dorna de cada processo e o n_{ciclos} , já que nos processos específicos as bombas são usadas apenas para enchimento das dornas, exceto a bomba de recirculação de vinho. Para esta última, foi estimado o consumo para bombeamento do fluido para alimentação do trocador de calor e de retorno à dorna, com vazão de 50% da vazão de enchimento dessa dorna.

Para consumo de água de resfriamento, a vazão total necessária para cada corrente foi calculada pela Equação (79).

$$\dot{m}_{\text{AR,Cn}} = \frac{\text{Cn} \cdot \text{Cp}_{\text{Cn}} \cdot \Delta T_{\text{Cn}}}{\text{Cp}_{\text{AR}} \cdot \Delta T_{\text{AR}}} \quad (79)$$

sendo $\dot{m}_{\text{AR,Cn}}$ a vazão mássica de água de resfriamento para resfriar a corrente n, Cp_{Cn} e Cp_{AR} as capacidades caloríficas da corrente n (na maioria dos casos aproximado ao Cp_{AR}) e da água de resfriamento, respectivamente, em $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$, e ΔT_{Cn} e ΔT_{AR} os gradientes de temperatura da corrente n e da água de resfriamento em $^\circ\text{C}$. Cp_{AR} foi

definido como $4,2 \text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot^{\circ}\text{C}^{-1}$ para a água em 20°C , de acordo com Turton *et al.* (2012), e o ΔT_{AR} foi definido como 5°C , conforme AspenTech (2017), considerando a entrada da água de resfriamento a 20°C e saída a 25°C . Em todos os casos, as capacidades caloríficas foram consideradas constantes com a temperatura. No caso do resfriamento da dorna de fermentação, foi calculada a massa de glicose consumida, usando a taxa de consumo desse componente, e a energia liberada por unidade de consumo desse substrato, que é $1200 \text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ de glicose, segundo Kwiatkowski *et al.* (2006). A massa de água de resfriamento foi calculada em função da vazão necessária para cada unidade e o tempo dos processos. Para os processos gerais, tal como feito para o consumo de energia elétrica, a massa de água de resfriamento necessária é função de h_{totais} ; mas, para os processos específicos, usa-se os tempos dos processos específicos, que depende dos tempos de cada reação, do ND_F e do n_{ciclos} .

Calculada a massa de água de resfriamento necessário, foi simulado uma torre de resfriamento para recuperação dessa utilidade. Com base nos cálculos a partir das informações de Turton *et al.* (2012), foi estimado que 2,565% de toda água de resfriamento é perdida por evaporação e precisa ser reposta. Portanto, o custo com água de resfriamento está relacionado com a quantidade dessa utilidade que precisa ser reposta. Os cálculos e suposições feitos para a simulação da torre de resfriamento estão presentes no Apêndice B (seção 9.2).

A vazão mássica de vapor demandada foi calculada pela Equação (80).

$$\dot{m}_{\text{vap},Cn} = \frac{C_n \cdot C_{p_{Cn}} \cdot \Delta T_{Cn}}{H_{\text{vap}}} \quad (80)$$

sendo $\dot{m}_{\text{vap},Cn}$ a vazão mássica de vapor para aquecer a corrente n , em $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$, e H_{vap} o calor de condensação do vapor a 125°C , definido como $2188,5 \text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ (Van Wylen; Sonntag; Borgnakke, 1994). Os processos de aquecimento são todos na região dos processos gerais, portanto a massa de vapor necessária foi dada pelo produto entre as vazões mássicas para cada corrente e o termo h_{totais} . Para a quantidade de vapor na unidade 2 (destilação e geração da vinhaça bruta), a quantidade de vapor foi estimada através dos dados de Zarpelon *et al.* (2012), relacionando a quantidade necessária de

vapor em função da concentração de etanol no vinho (Apêndice B, seção 9.2). Para a unidade 3 (desidratação), foi usado o fator informado por Lopes *et al.* (2011), que informa que são necessários 0,8 kg de vapor por litro de etanol hidratado.

4.3.5. Estimativas de custos, de receitas e de saldo da usina

Diante da simulação realizada, foram estimados os custos com matérias-primas (C_{MP}), utilidades (C_{UT}), mão-de-obra (C_{LAB}), de estoque do milho (C_{EST}) e de transporte do milho (C_{TR}). As receitas consideradas foram de produção de etanol anidro, DDGS e óleo de milho.

Os C_{MP} e a receita com os produtos foram calculados através do produto entre a vazão de suas respectivas correntes, em $kg \cdot h^{-1}$, o termo h_{totais} , que dá o tempo anual de funcionamento da usina em horas (Equação (81)).

$$Q_{tde_n} = C_n \cdot h_{totais} \quad (81)$$

sendo Q_{tde_n} as quantidades anuais do componente n em kg ou L (caso etanol, onde o volume foi calculado usando sua massa específica a 20 °C). Como pode ser observado na Figura 20, o n pode variar dependendo do cenário. As quantidades de Amônia, NaOH, CaO e H_2SO_4 também foram contabilizados no C_{MP} . As quantidades desses insumos foram calculadas em função da quantidade de milho, de acordo com a Tabela 12 (Oliveira; Cruz, 2023). Ademais, custos com água de processo também foram considerados, através das vazões das correntes C06 e C16.

Tabela 12. Razão da quantidade de insumos químicos demandados no processo em relação à quantidade de milho processada.

Insumo	m_{insumo}/m_{milho} ($kg_{insumo} \cdot kg_{milho}^{-1}$)
Amônia	0,0020
NaOH	0,0502
CaO	0,020
H_2SO_4	0,0012

Fonte: Oliveira e Cruz (2023)

De posse das quantidades totais de cada componente da receita e do Custos_{RM}, os valores unitários desses componentes foram retirados da literatura, como apresentado na Tabela 13, para estimativa de seus custos e receitas no período anual. Para os valores unitários do milho e do etanol, foi feita uma média dos valores informados pela respectiva referência (CEPEA, 2024a; 2024b) entre janeiro de 2023 e setembro de 2024. Para o valor unitário do etanol, foi considerada a classificação "*etanol hidratado para combustível*", definida pela referência (CEPEA, 2024b). O valor unitário da levedura foi definido pela média das informações presentes nas colunas "*Produção*" e "*Vendas*" da tabela PIA (Pesquisa Industrial Anual - Empresa) da referência (IBGE, 2022). Os valores unitários da levedura, das enzimas e do H₂SO₄, que não foram informados para 2024, foram corrigidos pela inflação, usando o Índice Nacional de Preços ao Consumidor Amplo (IPCA) entre a média dos números-índice dos meses do ano reportado na referência até setembro de 2024 (sendo os índices 1,3756 para 2018/setembro de 2024; 1,1864 para 2021/setembro de 2024 e 1,0856 para 2022/setembro de 2024). Para o óleo de milho e o CaO, a conversão para real foi feita usando a média do valor de compra do dólar entre abril e setembro de 2024, informados pelo Banco Central do Brasil (BCB) (BCB, 2024). O componente "Enzimas" representa a α -amilase e a glicoamilase, que foram considerados com o mesmo valor, conforme a referência (Oliveira; Cruz, 2023). O custo da amônia foi para maio de 2025 na América do Sul. O custo unitário da água de processo foi calculado como a média das taxas aplicadas, para o ano de 2025, pelas companhias de águas dos estados de Mato Grosso (MT) (Aegea, 2025), Mato Grosso do Sul (MS) (Sanesul, 2025) e Goiás (GO) (SaneaGO, 2025), posto que esses estados são os que mais possuem usinas de etanol de milho no país. As taxas usadas foram referentes à categoria "indústria" e já incluem a taxa de esgoto.

Tabela 13. Valores unitários das matérias-primas, insumos químicos e produtos usados na usina simulada.

Componente	Unidade	Custo unitário ^a (R\$·unidade ⁻¹)	Referência
Milho	kg	1,0642	CEPEA (2024a)
Etanol	L	2,3686	CEPEA (2024b)
Levedura	kg	9,2416	IBGE (2022)
Enzimas	kg	14,4443	Oliveira e Cruz (2023)
Óleo de milho	kg	5,0853	USDA (2024)
DDGS	kg	1,5	MFRural (2024)
Amônia	kg	2,4890	Business Analytiq (2025)
NaOH	kg	0,0046	Gerrior <i>et al.</i> (2022)
CaO	kg	2,7262	FRED (2025)
H ₂ SO ₄	kg	0,3863	Longati <i>et al.</i> (2018)
Água de processo	m ³	29,2222	SaneaGO (2025), Aeagea (2025) e Sanesul (2025)

^a Os valores apresentados (referências de 2018, 2022 e 2023) foram ajustados para setembro de 2024 utilizando informações inflacionárias disponibilizadas pelo Banco Central do Brasil (BCB, 2024).

Fonte: autor (2025)

Os Custos_{UT} foram calculados de forma similar aos Custos_{MP}. As quantidades anuais de utilidades foram estimadas via balanço de massa na simulação e seu custo total foi calculado de posse dos seus valores unitários, presentes na Tabela 14. O custo com eletricidade foi calculado como a média dos valores para o ano de 2024. Para o vapor, o valor unitário foi calculado usando a entalpia específica do vapor a 125 °C e 1 bar retirado de Van Wylen, Sonntag e Borgnakke (1994) e corrigido para real da mesma forma que feito para os valores unitários das MPs, já que a referência informa o valor em U\$\$·kJ⁻¹.

Tabela 14. Valores unitários das utilidades usadas na usina simulada.

Componente	Unidade	Custo unitário (R\$·unidade⁻¹)	Referência
Eletricidade	MWh	128,1650	CCEE (2024)
Vapor	kg	0,0280	AspenTech (2017)
Água de resfriamento	m ³	0,13	Oliveira e Cruz (2023)

Fonte: autor (2025)

Os Custos_{LAB} foram para operadores e supervisão. A metodologia de Peters e Timmerhaus (1991) foi utilizada e o custo com operadores foi calculado em função da quantidade e do tipo de equipamentos em cada cenário. Os equipamentos considerados na simulação do presente trabalho, dos processos gerais e específicos, são apresentados no Apêndice B (seção 9.2). A Tabela 15 exhibe os equipamentos dos processos gerais da usina simulada que, segundo Peters e Timmerhaus (1991), demandam operadores, suas quantidades na usina simulada e as quantidades de operadores/turno conforme o indicador de acordo com a referência. A coluna da quantidade de operadores/turno é resultado do produto entre a quantidade de equipamentos e seu indicador de operadores/unidade/turno (o mesmo entendimento é feito para as linhas de operadores/turno em cada cenário na Tabela 16).

Tabela 15. Número de operadores/turno para os equipamentos dos processos gerais da usina simulada.

Equipamento	Quantidade equipamento	Indicador Op/Unid/Turno^a	Quantidade de operadores/turno
Coluna de destilação	2	0,25	0,5
Flash	1	0,25	0,25
Centrífuga	1	0,167	0,167
Filtro	1	0,25	0,25
Separador	1	0,5	0,5
Secador	1	0,5	0,5
Trocador de calor	10	0,25	2,5
TOTAL			4,6666

^a Indicador informado por Peter e Timmerhaus (1991).

Fonte: autor (2025)

A diferença entre os equipamentos dos processos gerais e específicos de cada cenário se dá nas quantidades de trocadores de calor, de reatores e de bombas. Para o último equipamento, Peters e Timmehaus (1991) atribuem indicador nulo. Assim, focando apenas nos outro dois, a Tabela 16 exibe as quantidades desses equipamentos nesses cenários e as quantidades de operadores por turno em cada cenário para cada equipamento. Com isso, o número de operadores por turno em cada cenário é dado pela soma da coluna "Qtde op/turno" na Tabela 16 e a mesma coluna na Tabela 15

Tabela 16. Número de operadores/turno para os equipamentos dos processos específicos da usina simulada em cada cenário.

		Trocador de calor	Reator
Indicador Op/Unid/Turno ^a		0,25	1
LSF	Qtde unids	3	3
	Qtde op/turno	0,75	3
SLSF	Qtde unids	2	2
	Qtde op/turno	0,5	2
LSSF	Qtde unids	2	2
	Qtde op/turno	0,5	2
SSF	Qtde unids	1	1
	Qtde op/turno	0,25	1

^a Indicador informado por Peter e Timmerhaus (1991).

Fonte: autor (2025)

Visando considerar o fato de que um operador trabalha mais de um turno ao longo do ano, foi utilizada a metodologia de Turton *et al.* (2012). Para o presente trabalho, além de 330 dias com 24h de funcionamento num ano, que já foram mencionados, também foram considerados turnos de 8h e 48 semanas anuais de trabalho, pois 4 semanas de férias anuais foram abatidas do total de 52 semanas por ano, cada semana com 5 dias de trabalho. Com isso, a quantidade de horas anuais de funcionamento é 7920 h/ano (330 dias de funcionamento (dias/ano) x 24 horas de funcionamento (h/dia)). As horas anuais de trabalho de cada operador são de 1920 h/ano/operador (48 semanas de trabalho por ano (semanas/ano) x 5 dias de trabalho por semana (dias/semana) x 8 horas de trabalho por dia para cada operador (h/dias/operador)). Assim, o número de operadores necessários para o funcionamento da usina modelada durante o período de 1 ano, considerando as condições mencionadas, é de 4,125 operadores (7920 horas de trabalho por ano (h/ano) / 1920 horas anuais de trabalho de cada operador (h/ano/operador)). Com isso, o número total de operadores em cada cenário é formado pelo produto entre o fator calculado pela metodologia de Turton *et al.* (2012) e os valores dados pela Tabela 15 e Tabela 16, conforme a Equação (82).

$$N_{op,k} = f_{mult} \cdot (Qtde\ op/turno_{geral} + Qtde\ op/turno_{específicos,k}) \quad (82)$$

sendo $N_{op,k}$ o número de operadores no cenário k , k os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, e f_{mult} o fator multiplicador calculado pela metodologia de Turton *et al.* (2012).

Os salários da operação foram levantados usando a tabela RAIS (Relação Anual de Informações Sociais), dados cedidos pelo Ministério do Trabalho e Emprego, do Governo Brasileiro (RAIS, 2023). A categoria filtrada na tabela RAIS foi: operador, celetista, da categoria "*Fabricação de Etanol*", dentro de "*Indústria Geral*". O valor usado foi a média dos valores encontrados para os estados do MS, MT e GO, visto que são os estados que contêm a maioria das usinas de produção de etanol de milho no Brasil. O valor final foi de R\$ 5131,25 por operador por mês. Com isso, custo com os salários anuais dos operadores é dado pelo produto entre o número de operadores em cada cenário e o salário calculado. Para os custos adicionais referentes aos operadores, foi multiplicado um fator de taxas (f_{taxa}) de 1,6817, conforme Martins (2023). Esse fator leva em consideração férias, 13º salário, seguro-acidente, FGTS e demais custos provenientes da previdência. De posse desse fator, do número de operadores e considerando os 12 meses do ano, o custo com operadores pode ser calculado. Além disso, o custo com supervisão é oriundo do custo com operação, representando 18% deste, de acordo com Turton *et al.* (2012). Portanto, o $Custos_{LAB}$ foi calculado usando a Equação (83). O símbolo "teto" no termo $N_{op,k}$ indica que o valor dele foi arredondado para o inteiro maior mais próximo.

$$Custos_{LAB} = f_{supervisão} \cdot f_{taxa} \cdot [N_{op,k}] \cdot Salário_{operação} \quad (83)$$

sendo $f_{supervisão}$ o acréscimo para consideração dos custos com supervisão, sendo igual a 1,18.

Os $Custos_{EST}$ e $Custos_{TR}$ foram adicionados à simulação diante do fato de que uma das principais vantagens do uso do milho, em substituição à cana-de-açúcar, é sua possibilidade de estocagem, o que permite a disponibilidade desse grão ao longo do ano (Elias, 2018). Além disso, no Brasil, a distância média entre as usinas produtoras de

etanol e os portos é de cerca de 1000 km (Eckert *et al.*, 2018). Portanto, estimativas de custos de estoque do milho e de transporte são interessantes para a simulação.

Essas estimativas foram feitas de acordo com Milanez *et al.* (2014). Esses autores calcularam esses custos em função da quantidade de milho processada. Portanto, os $Custos_{EST}$ e $Custos_{TR}$ foram calculados usando as Equações (84) e (85), respectivamente, usando a quantidade de milho calculada pela Equação (81).

$$Custos_{EST} = f_{EST/milho} \cdot Qtde_{milho} \quad (84)$$

$$Custos_{TR} = f_{TR/milho} \cdot Qtde_{milho} \quad (85)$$

sendo $f_{EST/milho}$ e $f_{TR/milho}$ os custos de estoque e de transporte por unidade de milho, respectivamente, iguais a $0,0787 \text{ R}\$ \cdot \text{kg}_{\text{milho}}^{-1}$ e $0,0262 \text{ R}\$ \cdot \text{kg}_{\text{milho}}^{-1}$ (Milanez *et al.*, 2014).

De posse dos custos e das receitas, o saldo anual da usina foi calculado pela diferença entre os custos e a receita, conforme Equação (86).

$$\text{Saldo} = \sum_i \text{Receita}_i - \sum_n \text{Custos}_n \quad (86)$$

sendo i o etanol, DDGS e o óleo de milho, e nos custos com matéria-prima, utilidades, mão-de-obra, estoque e transporte do milho. O saldo calculado na Equação (86) será utilizado nas rotinas de otimização.

4.3.6. Indicadores técnicos e econômicos estimados

Alguns indicadores técnicos foram calculados, visando avaliar a simulação realizada, comparando as métricas calculadas pela simulação com dados da literatura, além de comparar esses resultados entre os cenários. As equações formuladas para cada indicador encontram-se no Apêndice C (seção 9.3). Essas métricas foram:

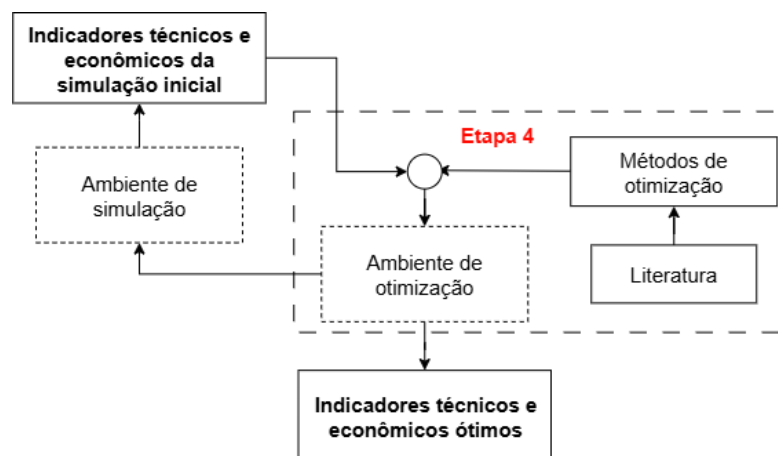
- Indicadores para o milho:
 - Quantidade total de milho no ano ($\text{mil ton} \cdot \text{ano}^{-1}$);
 - Quantidade de milho por dia ($\text{ton} \cdot \text{dia}^{-1}$);
 - Massa de milho por unidade de massa de etanol ($\text{kg}_{\text{milho}} \cdot \text{kg}_{\text{etanol}}^{-1}$).

- Indicadores para o etanol:
 - Quantidade total de etanol no ano ($\text{milhões L} \cdot \text{ano}^{-1}$);
 - Quantidade de etanol por dia ($\text{L} \cdot \text{dia}^{-1}$);
 - Rendimento industrial ($L_{\text{etanol}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$).
- Indicadores para o DDGS e o óleo de milho:
 - Quantidade de DDGS por unidade de milho ($\text{kg}_{\text{DDGS}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);
 - Quantidade de óleo por unidade de milho ($\text{kg}_{\text{óleo}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);
- Indicadores para utilidades:
 - Quantidade de vapor por volume de etanol ($\text{kg}_{\text{vapor}} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Quantidade de água de processo por massa de milho ($\text{m}^3_{\text{água}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);
 - Quantidade de água de processo por volume de etanol ($\text{m}^3_{\text{água}} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Quantidade de eletricidade por massa de milho ($\text{kWh} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);
 - Quantidade de eletricidade por volume de etanol ($\text{kWh} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
- Indicadores para custos;
 - Custo total por unidade de milho ($\text{R\$} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);
 - Custo total por volume de etanol ($\text{R\$} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Custo operacional por unidade de milho ($\text{R\$} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);
 - Custo com eletricidade por unidade de milho ($\text{R\$} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);
 - Custo eletricidade por volume de etanol ($\text{R\$} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Custo com água de resfriamento por volume de etanol ($\text{R\$} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Custo com água de processo por volume de etanol ($\text{R\$} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Custo com MP por unidade de milho ($\text{R\$} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);
 - Custo com milho por volume de etanol ($\text{R\$} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Custo com MP por volume de etanol ($\text{R\$} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Custo com células por volume de etanol ($\text{R\$} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);
 - Custo com enzimas por volume de etanol ($\text{R\$} \cdot L_{\text{etanol}}^{-1}$);

4.4. Otimização dos cenários

Essa etapa da metodologia visou criar um ambiente de otimização que se comunicasse com o ambiente de simulação para otimização da usina simulada. A Figura 21 exibe o fluxograma metodológico dessa etapa.

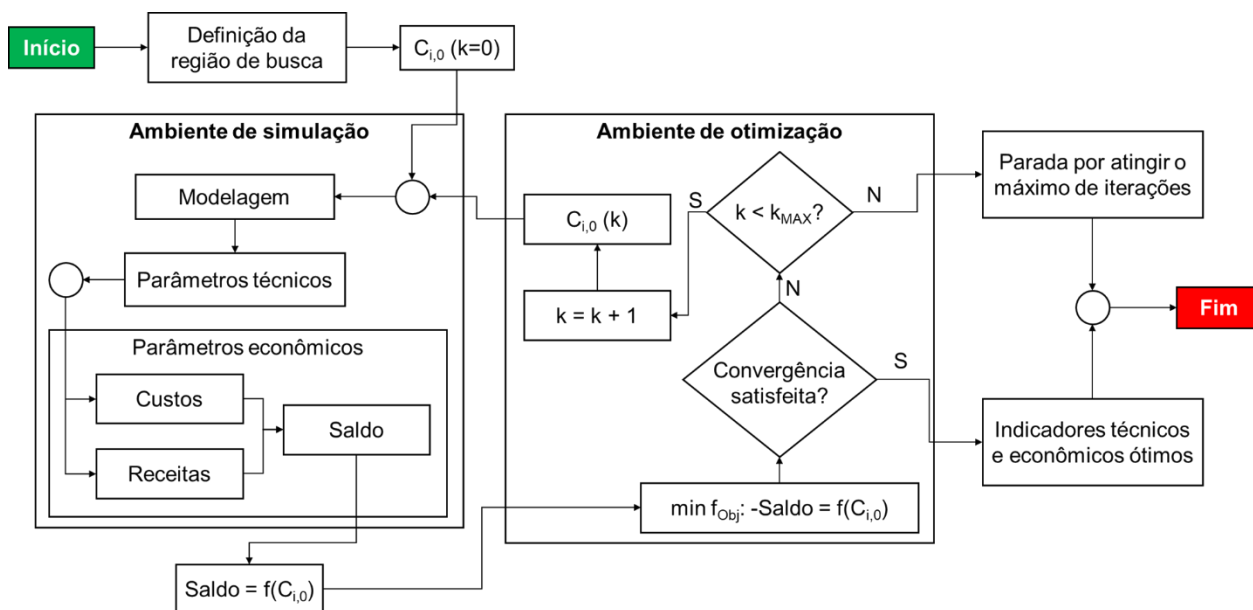
Figura 21. Fluxograma metodológico da Etapa 4 do trabalho.



Fonte: autor (2025)

A estrutura da otimização pode ser vista na Figura 22. O ambiente de simulação tem como entrada, dentre outras, as concentrações iniciais de amido, das enzimas e das células. Desse ambiente, retornam algumas saídas, como a função saldo (Equação (86)). O algoritmo de otimização foi feito para, inicialmente, receber as regiões de busca das variáveis de busca e o algoritmo, através dessas regiões, definir os valores iniciais dessas variáveis ($C_{i,0}$, sendo i = amido, enzimas e células), calcular o saldo no ambiente de simulação e retornar com esse valor para o ambiente de otimização, que, através do método selecionado, avaliará se o ponto encontrado satisfaz os critérios de convergência de acordo com a função objetivo (maximização do saldo, isto é, minimização do negativo do saldo) ou não. Em caso negativo, será calculado outro ponto (com novas $C_{i,0}$) e o processo se repetirá. Em caso afirmativo, os indicadores técnico-econômicos calculados pelo ponto, que resultou o saldo ótimo, serão retornados. O número máximo de iterações definido (k_{MAX}) foi 1000 e a tolerância de convergência foi definida em 10^{-2} .

Figura 22. Fluxograma do algoritmo de otimização implementado.



Fonte: autor (2025)

O método de otimização usado foi o de Diferencial Evolutivo (DE). Esse método foi utilizado diante de otimizações prévias com outros métodos, como o L-BFGS-B (*Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno with Limited-memory*), e diante da sensibilidade da simulação, que não permitia a convergência satisfatória usando métodos de busca local. O método de DE foi proposto por Storn e Price (1997) e é caracterizado por ser um método de otimização global. O método demanda a delimitação de uma região de busca, definição da estratégia de busca, de tamanho da população, fator de mutação e probabilidade de recombinação.

Foram usadas as definições padrões da função “*differential_evolution*” da biblioteca “*scipy*” do Python: a estratégia de busca foi a “best1bin”, o tamanho da população foi 60 (15 vezes o número de variáveis de busca, isto é $15 \cdot 4 = 60$), o fator de mutação foi de 0,5 e o fator de recombinação foi de 0,7 (ou probabilidade de 70%). A estratégia de busca best1bin cria vetores teste, ponderado pelo fator de mutação, causando mutação no melhor ponto usando dois membros da população, aleatoriamente selecionados. Daí, o novo ponto é comparado com o original através de uma distribuição binomial, aprovando o novo ponto ou mantendo o ponto original.

A função objetivo usada no presente trabalho consta na Equação (87). As restrições do problema estão relacionadas com os parâmetros da simulação, tais como os balanços de massa e energia, tempos operacionais, organização das dornas etc. As regiões de busca das variáveis (Tabela 17) basearam-se no reportado por Kwiatkowski *et al.* (2006) e em resultados de simulações anteriores.

$$\text{minimize } f_{\text{obj}}: \text{Saldo}(C_{i,0}) = -[\text{Receitas}(C_{i,0}) - \text{Custos}(C_{i,0})] \quad (87)$$

sendo i = amido, α -amilase, glicoamilase e células.

Tabela 17. Regiões de busca das variáveis no processo de otimização.

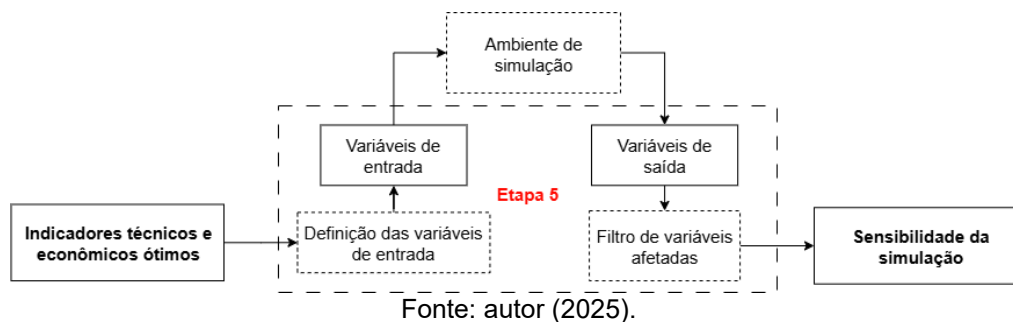
Variável	Limite inferior	Limite superior
$C_{\text{amido},0}$	50	300
$C_{\alpha\text{-amilase},0}$	$0,197 \cdot 10^{-3}$	$1,97 \cdot 10^{-3}$
$C_{\text{glicoamilase},0}$	$0,033 \cdot 10^{-3}$	$0,33 \cdot 10^{-3}$
$C_{\text{células},0}$	0,1	5,0

Fonte: autor (2025)

4.5. Análise de sensibilidade

Após a otimização, foram feitas análises da sensibilidade da simulação, na condição otimizada, frente a perturbações de algumas variáveis de entrada, conforme fluxograma metodológica presente na Figura 23. As variáveis de entrada selecionadas para a análise foram variadas num intervalo entre $\pm 50\%$ do seu valor base, e todas as variáveis de saída foram analisadas, de modo que o algoritmo indicasse quais dessas variáveis sofreram alterações. As perturbações das variáveis de entrada não foram concomitantes, mas cada perturbação foi individual, de modo que as demais variáveis de entrada mantiveram seus valores base.

Figura 23. Fluxograma metodológico da etapa 5 do trabalho.



As variáveis de entrada, que foram perturbadas, foram: $C_{\text{amido},0}$, $C_{\alpha\text{-amilase},0}$, $C_{\text{glicoamilase},0}$, $C_{\text{células},0}$, preços do etanol, do DDGS, do óleo de milho, do milho, das células, das enzimas, da eletricidade, do vapor, da água de processo, da água de resfriamento, além da quantidade de dornas, do volume das dornas e da quantidade diária de milho processado. As variáveis de saída, analisadas em cada perturbação, foram: a concentração final de etanol, a PV, o tempo de ciclo, os tempos das operações, o número de ciclos, o rendimento industrial, a quantidade de etanol por ciclo, as quantidades anuais de etanol, de DDGS e de óleo, os custos anuais de MPs, de insumos químicos, de utilidades e o logístico (estoque+transporte), as receitas de etanol, de DDGS e de óleo, além do saldo e do ROI (*“return on investment”*, ou seja, retorno sobre investimento).

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados são avaliados na seguinte sequência: (i) avaliação do comportamento cinético dos processos em cada cenário, usando os dados da literatura, (ii) avaliação da incerteza do cálculo da concentração final de etanol diante da modelagem realizada, (iii) avaliação dos indicadores técnicos da simulação inicial, com o intuito de avaliar se a simulação oferece resultados viáveis, (iv) otimização dos cenários, (v) comportamento cinético e indicadores técnicos e econômicos da usina otimizada e (vi) resultados das análises de sensibilidade.

5.1. Simulação inicial: comportamento cinético, análise da incerteza dos modelos e indicadores técnicos

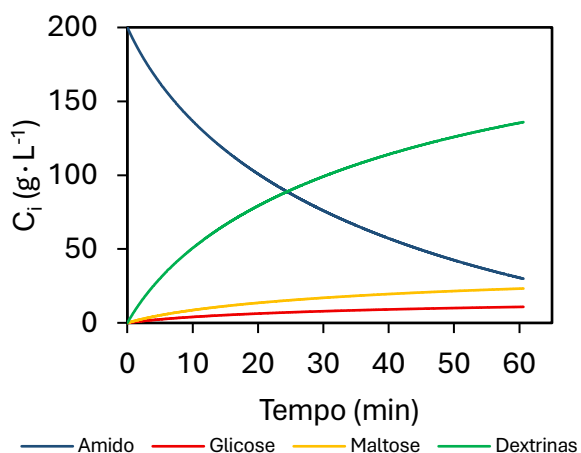
Essa seção se dedica a exibir os resultados da simulação inicial, ou seja, resultados obtidos por meio das concentrações iniciais dos componentes retirados de Kwiatkowski *et al.* (2006) e Oliveira e Cruz (2023).

5.1.1. Comportamento cinético dos processos

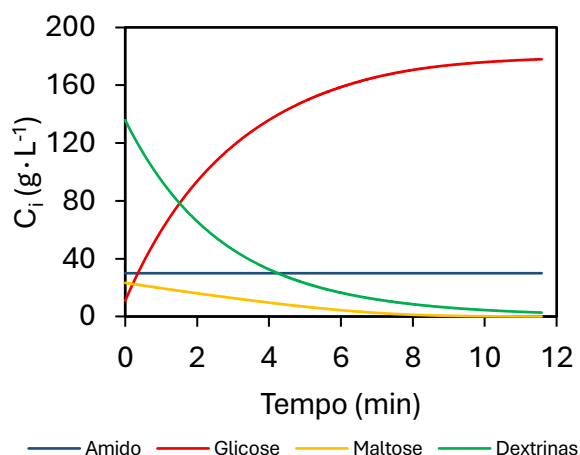
Os perfis de concentração dos componentes dos processos presentes nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF são apresentados na Figura 24, Figura 25, Figura 26 e Figura 27, e na Tabela 18, Tabela 19, Tabela 20 e Tabela 21 constam as concentrações iniciais e finais desses componentes em cada processo, nessa ordem. Os valores das concentrações de α -amilase, glicoamilase e células na coluna "Inicial", dessas tabelas foram calculados pelas Equações (58), (59) e (60), enquanto para o amido foi definido com base na literatura (Oliveira; Cruz, 2023). Assim, as proporções entre o amido e as enzimas e as células nessa etapa dos resultados foram definidas de acordo com a literatura (Kwiatkowski *et al.*, 2006). Os tempos das operações de enchimento, processo, esvaziamento e limpeza das donas, em cada processo e cenários, estão presentes na Tabela 22.

Figura 24. Perfis de concentrações dos processos de liquefação (a), sacarificação (b), enchimento da fermentação (c) e da fermentação (d) no cenário LSF na usina simulada nas condições iniciais.

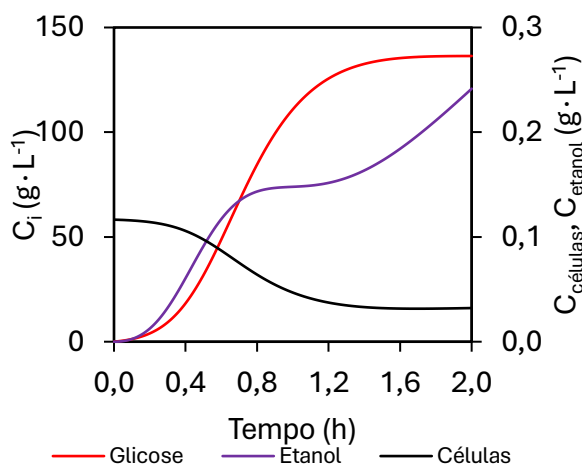
a) liquefação



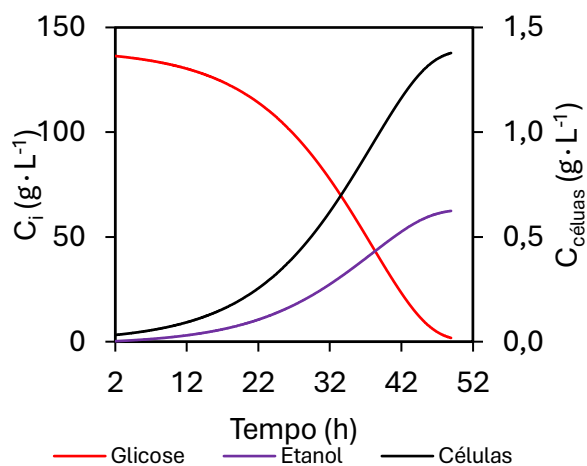
b) sacarificação



c) enchimento fermentação



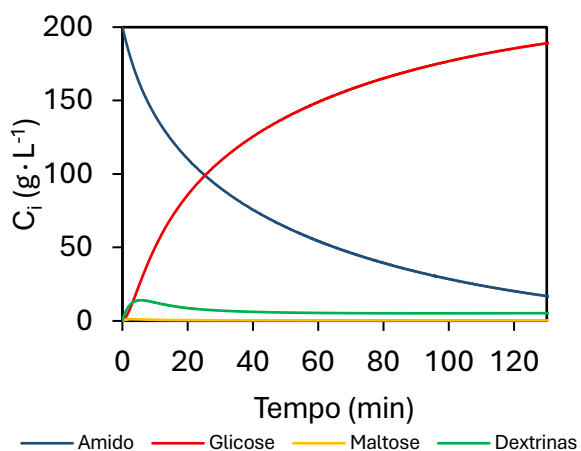
d) fermentação



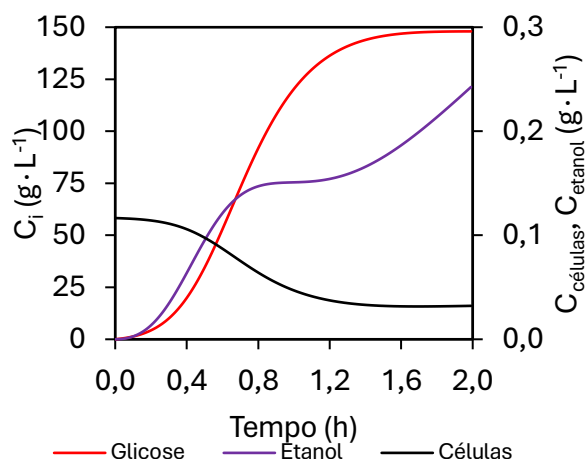
Fonte: autor (2025)

Figura 25. Perfis de concentrações dos processos de liquefação e sacarificação simultâneas (a), enchimento da fermentação (b) e da fermentação (c) no cenário SLSF na usina simulada nas condições iniciais.

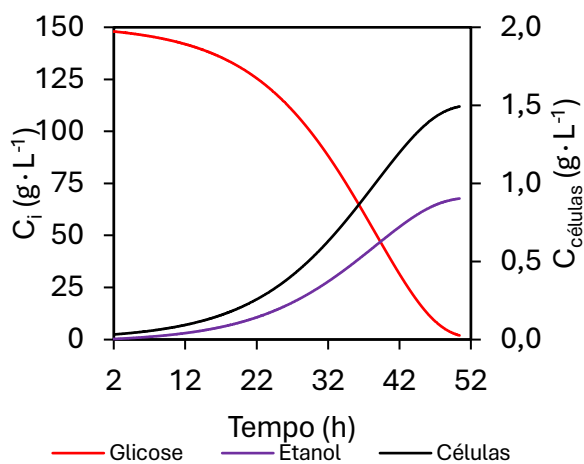
a) liquefação e sacarificação simultâneas



b) enchimento fermentação



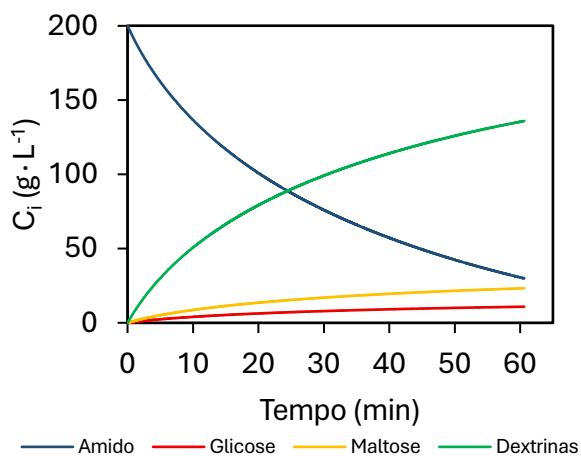
c) fermentação



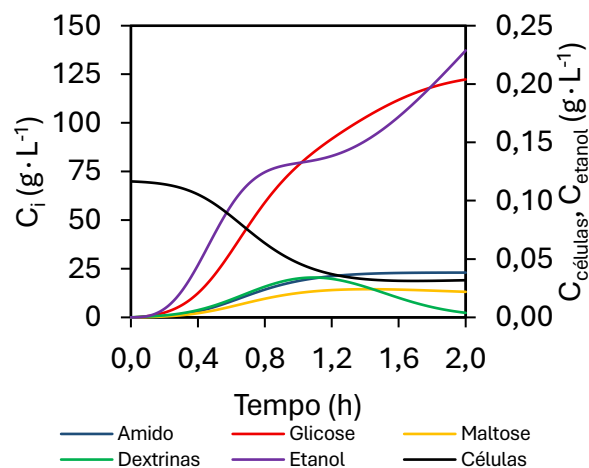
Fonte: autor (2025)

Figura 26. Perfis de concentrações dos processos de liquefação (a), enchimento da sacarificação e fermentação simultâneos (b) e processo de sacarificação e fermentação simultâneos (c) no cenário LSSF na usina simulada nas condições iniciais.

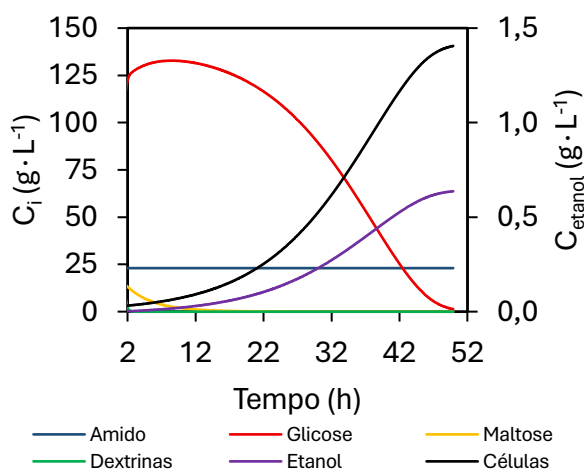
a) liquefação



b) enchimento sacarificação e fermentação simultâneas



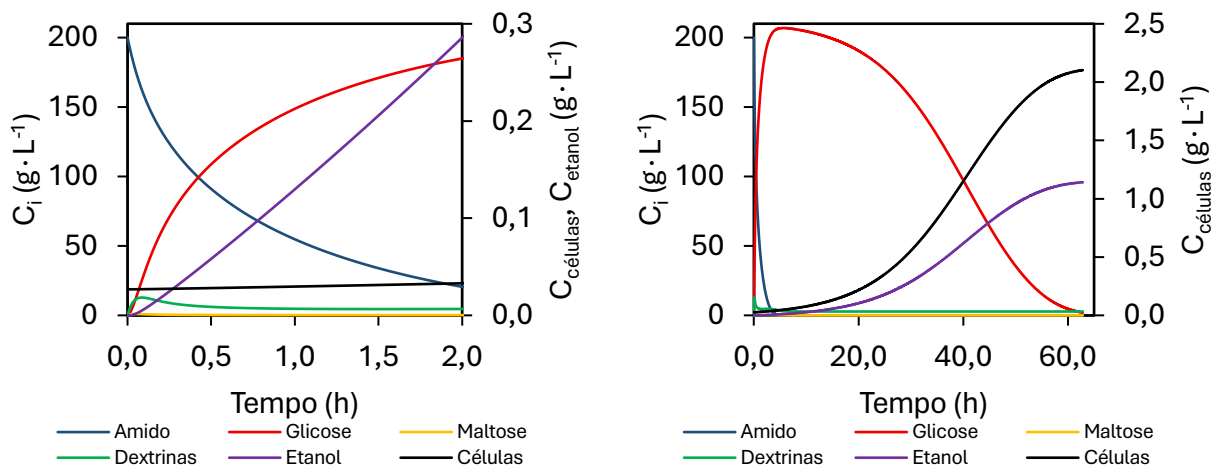
c) sacarificação e fermentação simultâneas



Fonte: autor (2025)

Figura 27. Perfis de concentrações do processo de liquefação, sacarificação e fermentação simultâneos no cenário SSF na usina simulada nas condições iniciais. a) primeiras 2 horas; b) processo completo.

a) primeiras 2h da liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas b) processo completo da liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas



Fonte: autor (2025)

Tabela 18. Concentrações dos componentes nos processos de liquefação (L), sacarificação (S) e fermentação (F) do cenário LSF na simulação inicial, em $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$.

Componente	L		S		F	
	Início	Fim	Início	Fim	Início	Fim
Amido	200	29,93	29,93	29,93	-	-
Glicose	0	10,88	10,88	177,98	136,06	1,79
Maltose	0	23,3	23,3	0,04	-	-
Dextrinas	0	135,88	135,88	2,72	-	-
Etanol	-	-	-	-	0,200	62,43 (7,91 °GL) ^a
α -amilase ($\text{ml} \cdot \text{L}^{-1}$)	1,9688	0,1211	-	-	-	-
Glicoamilase ($\text{ml} \cdot \text{L}^{-1}$)	-	-	0,3287	0,2762	-	-
Células	-	-	-	-	0,0316	1,3781

^a Calculado considerando densidade do etanol de $793 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$.

Fonte: autor (2025)

Tabela 19. Concentrações dos componentes nos processos de liquefação e sacarificação simultâneas (L+S) e fermentação (F) do cenário SLSF na simulação inicial, em g·L⁻¹.

Componente	L+S		F	
	Início	Fim	Início	Fim
Amido	200	12,98	-	-
Glicose	0	193,09	147,64	1,93
Maltose	0	0,27	-	-
Dextrinas	0	5,23	-	-
Etanol	-	-	0,19	67,73 (8,58 °GL) ^a
α-amilase (ml·L ⁻¹)	1,9688	0,0027	-	-
Glicoamilase (ml·L ⁻¹)	0,3287	0,0381	-	-
Células	-	-	0,0316	1,4929

^a Calculado considerando densidade do etanol de 793 g·L⁻¹.

Fonte: autor (2025)

Tabela 20. Concentrações dos componentes nos processos de liquefação (L) e sacarificação e fermentação simultâneas (S+F) do cenário LSSF na simulação inicial, em g·L⁻¹.

Componente	L		S+F	
	Início	Fim	Início	Fim
Amido	200	29,93	23,03	23,03
Glicose	0	10,88	116,14	1,33
Maltose	0	23,3	13,99	0
Dextrinas	0	135,88	6,96	0
Etanol	-	-	0,19	63,69 (8,07 °GL) ^a
α-amilase (ml·L ⁻¹)	1,9688	0,1211	-	-
Glicoamilase (ml·L ⁻¹)	-	-	0,3287	0,0359
Células	-	-	0,0312	1,4054

^a Calculado considerando densidade do etanol de 793 g·L⁻¹.

Fonte: autor (2025)

Tabela 21. Concentrações dos componentes nos processos de liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas (L+S+F) do cenário SSF na simulação inicial, em g·L⁻¹.

Componente	L+S+F	
	Início	Fim
Amido	200	0,04
Glicose ^a	206,88	2,07
Maltose	0	0,08
Dextrinas	0	2,83
Etanol	0	95,89 (12,15 °GL) ^b
α-amilase (ml·L ⁻¹)	1,9688	0
Glicoamilase (ml·L ⁻¹)	0,3287	0
Células	0,0269	2,1024

^a Valor máximo atingido pela glicose

^b Calculado considerando densidade do etanol de 793 g·L⁻¹.

Fonte: autor (2025)

Tabela 22. Tempos das operações de enchimento (I), de processo (II), de esvaziamento (III) e de limpeza (IV) das dornas em cada processo nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF na simulação inicial, em minutos.

	LSF			SLSF		LSSF		SSF
	L	S	F	L+S	F	L	S+F	L+S+F
I	60	60	121	60	121	60	121	60
II	60,63	11,59	2937,29 (48,95 h)	143,67	3024,90 (50,42 h)	60,63	2891,09 (48,18 h)	3771,38 (62,86 h)
III	60	60	60	60	60	60	60	60
IV	60	60	60	60	60	60	60	60
Total	240,63	191,59	3177,29 (52,95 h)	323,67	3264,90 (54,42 h)	240,63	3131,09 (52,18 h)	3951,38 (65,86 h)

Fonte: autor (2025)

Observando os dados da etapa de liquefação no cenário LSF (Figura 24a e Tabela 18), nota-se que a concentração inicial de α-amilase não foi suficiente para hidrolisar

totalmente o amido, restando $29,93 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ no final do processo de liquefação. No entanto, o processo foi parado pelo critério de atingimento da concentração máxima do produto principal desse processo (dextrinas). Da Figura 25a, nota-se que há baixa concentração de maltose ao longo do processo de L+S, enquanto para as dextrinas há um pico de concentração em aproximadamente 10 minutos de processo, mas este também apresenta um perfil parecido com o da maltose, com concentração quase constante durante todo o período do processo. Em contrapartida, o amido é continuamente consumido em todo tempo de processo. Nesse processo, a α -amilase e a glicoamilase são inseridas e atuam paralelamente. Dados os perfis de concentração da Figura 25a, percebe-se que a velocidade de consumo do amido pela α -amilase é inferior à de consumo da maltose e das dextrinas pela glicoamilase, posto que essas últimas são consumidas à medida em que são formadas. Esse resultado está de acordo com o reportado por Wang *et al.* (2024), que estudaram, dentre outras categorias, a atividade enzimática e a constante catalítica (razão entre velocidade máxima da enzima e sua concentração no meio) da α -amilase e da glicoamilase na hidrólise do amido solúvel. Além disso, essa observação é validada quando se nota esses dois processos separados, na Figura 24a e Figura 24b.

A atuação sinérgica das enzimas pode ser evidenciada quando se compara as concentrações residuais do amido nos cenários LSF e SLSF, onde resta o dobro de amido não hidrolisado no primeiro cenário, em comparação com o segundo, o que está de acordo com o relatado por Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013a). Entretanto, é importante ressaltar o tempo dos processos de hidrólises nos dois cenários, sendo que no LSF durou 72,22 minutos (60,63 minutos de liquefação e 11,59 de sacarificação), enquanto no SLSF, 143,67 minutos (Tabela 22). Isto é, apesar da maior hidrólise no cenário SLSF, o tempo gasto nesse processo pode não compensar em indicadores de longo prazo. Ainda no âmbito da quantidade de amido residual, o cenário SSF apresentou melhor resultado, com quase todo amido hidrolisado ao final do processo. Esse resultado pode indicar que, no meio em que a glicose é continuamente consumida enquanto o amido é hidrolisado, há o favorecimento da hidrólise do amido. Essa observação está apoiada na equação da taxa de hidrólise do amido (Equação (16)), que é inversamente dependente da concentração de glicose.

Da Tabela 22, nota-se que o processo de sacarificação no cenário LSF ocorreu em quase metade do tempo máximo (que era de 20 minutos). Além disso, nota-se na Tabela 18 que as concentrações dos oligossacarídeos formados na liquefação ficaram próximos de zero, ao final da sacarificação. Essas observações podem indicar que a concentração inicial de glicoamilase na simulação inicial, definida pela literatura, pode estar acima da ideal, reforçando a necessidade da otimização desses processos. O valor usado na simulação inicial do presente trabalho ($0,3287 \text{ mL}\cdot\text{L}^{-1}$) foi definido com base no reportado por Kwiatkowski *et al.*, 2006. Oliveira e Cruz (2023) utilizaram $0,3 \text{ mL}\cdot\text{L}^{-1}$ enquanto Presecki, Blažević e Vasic-Racki (2013b), $20 \text{ mL}\cdot\text{L}^{-1}$. Isto é, os resultados da simulação inicial, aliados à variabilidade da informação reportada literatura reforça a importância da otimização dessa variável.

A diferença de concentração nas colunas entre o fim dos processos de hidrólise e o início das de fermentação se dão ao processo de enchimento, onde há formação e consumo de componentes, posto que esse processo foi simulado como batelada alimentada. Desse processo, nota-se o expressivo aumento da concentração de glicose no cenário LSSF, apenas com o enchimento da dorna do processo S+F (aumento de $105,25 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$). Isso se dá porque o processo de sacarificação dos oligossacarídeos, para formação da glicose, ocorre quase totalmente nas primeiras duas horas do processo, que compreende o enchimento da dorna. Esse tempo pode ser visualizado na Tabela 22 no cenário LSF, onde a sacarificação é separada.

Pode-se notar, na Tabela 21, que a concentração final de etanol foi maior no cenário SSF, quando comparado com os demais. Esse resultado pode ser atribuído ao fato de que todos os processos ocorreram simultaneamente: a hidrólise ocorreu num meio com baixa inibição pelo produto e a fermentação ocorreu com baixa inibição pelo substrato, ambas inibições causadas pela glicose (Almeida *et al.*, 2021). Assim, apesar de todos os cenários se iniciarem com as mesmas concentrações de amido, enzimas e células, pode-se observar a influência da baixa concentração de glicose no meio para a melhoria da eficiência do processo. Além disso, é nesse cenário que ocorre o maior crescimento celular, o que é esperado posto que o crescimento celular é proporcional à

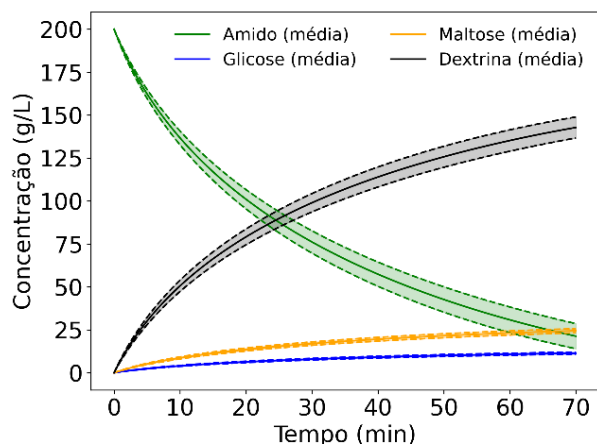
taxa de formação de etanol, conforme os balanços de massa feitos (Mesquita *et al.*, 2021).

5.1.2. Avaliação das incertezas dos modelos

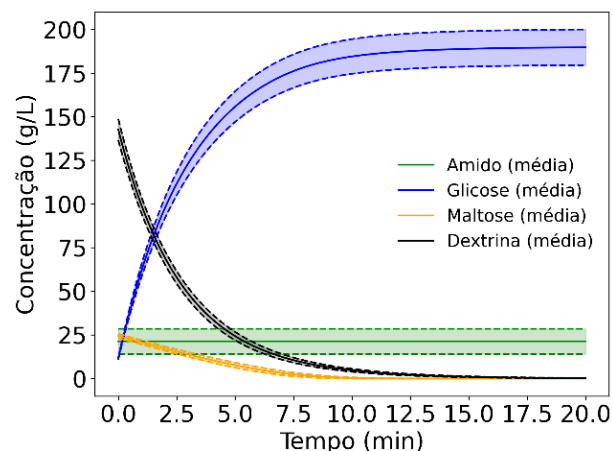
Dada a modelagem proposta e avaliada, avaliações da incerteza no cálculo da concentração final de etanol, para cada cenário, foram feitas usando método de Monte Carlo. A Figura 28 exibe os perfis de concentrações dos componentes nos processos de liquefação, sacarificação e fermentação, no cenário LSF. Nesses gráficos, constam as concentrações médias e o desvio padrão, ambos dinâmicos, isto é, a concentração média e o desvio padrão das concentrações variam com o tempo. Assim, os histogramas presentes na Figura 29 representam a distribuição dos valores das concentrações finais (média e desvio padrão) dos principais componentes do processo de liquefação (glicose, maltose e dextrinas).

Figura 28. Perfis de concentrações (valores médios na linha sólida e desvios padrões na linha pontilhada) dos processos de liquefação (a), sacarificação (b) e fermentação (c) no cenário LSF obtidos via Método de Monte Carlo com 10000 pontos.

a) liquefação



b) sacarificação



c) fermentação

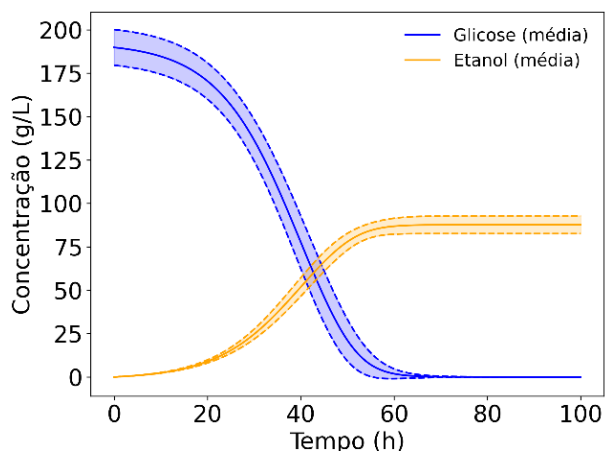
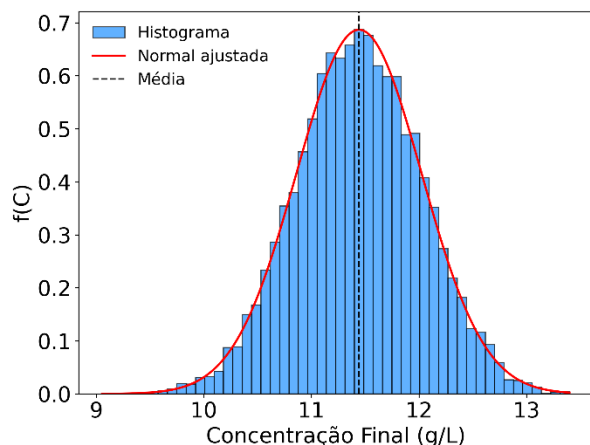
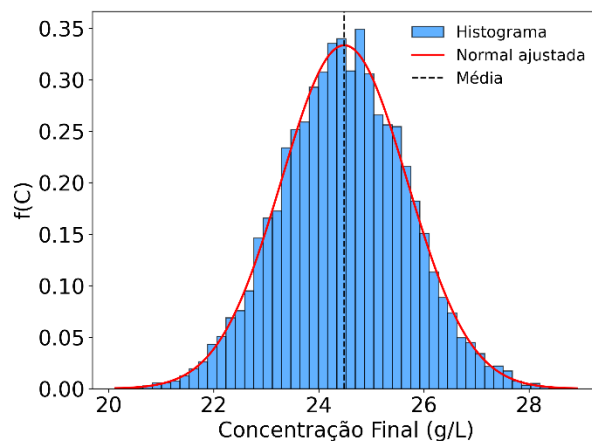


Figura 29. Histogramas, valores médios e curva normal ajustada da distribuição dos valores das concentrações finais dos principais componentes de saída do processo de liquefação (a - glicose, b - maltose e c - dextrinas), sacarificação (d - glicose) e fermentação (e - etanol) do cenário LSF. A distribuição foi dada em função da densidade de probabilidade da frequência dos eventos.

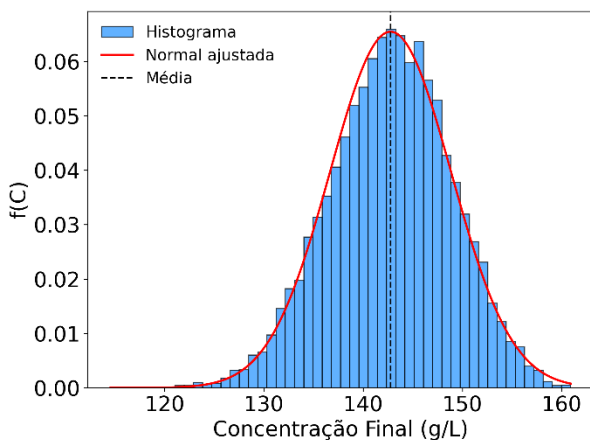
a) C_{glicose} na liquefação



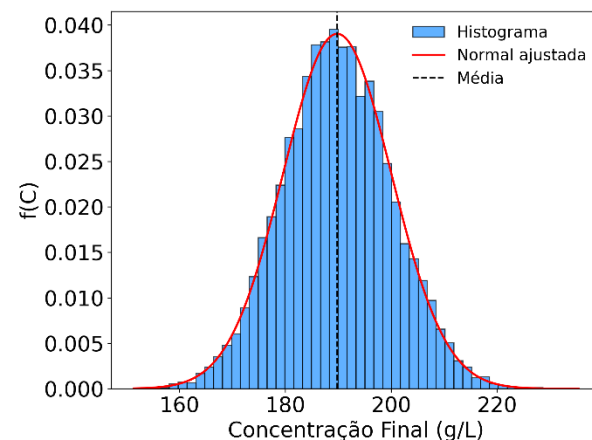
b) C_{maltose} na liquefação



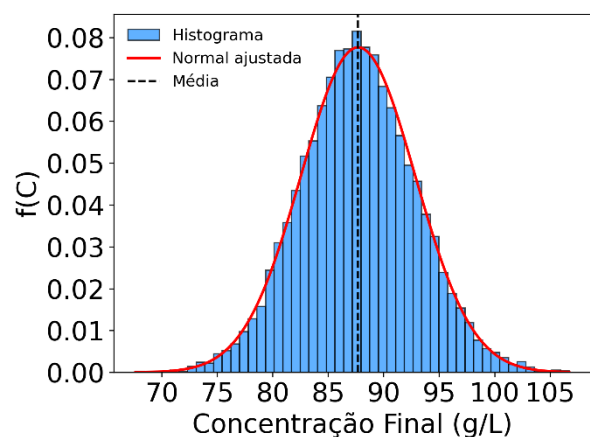
c) $C_{\text{dextrinas}}$ na liquefação



d) C_{glicose} na sacarificação



e) C_{etanol} na fermentação



Fonte: autor (2025)

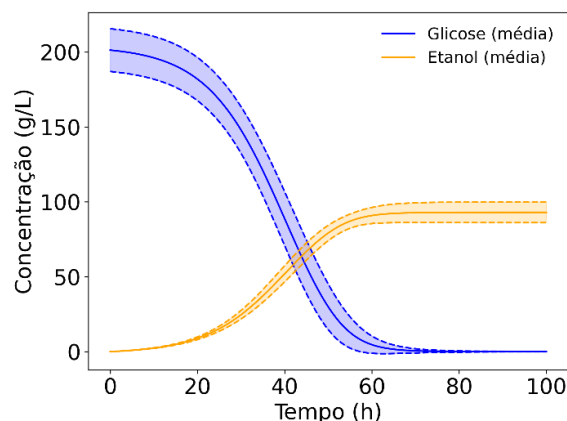
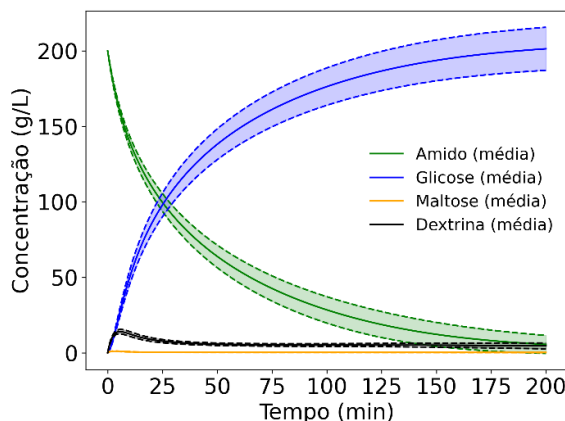
Com base na Figura 28, pode-se notar que os desvios padrões das concentrações aumentam com a variável independente (tempo), o que está de acordo com os resultados de Rodman e Gerogiorgis (2020). Ademais, os autores também tiveram resultados similares quando as curvas se aproximam do eixo das ordenadas, com redução do desvio padrão dinâmico. Além disso, é possível observar na Figura 28b, no caso do amido, que o valor médio e seu desvio padrão é quase constante ao longo do tempo de sacarificação, o que pode ser explicado diante do consumo baixo desse componente pela glicoamilase. Observa-se na Figura 29 que a distribuição dos valores das concentrações finais de glicose, maltose e dextrinas, no processo de liquefação do cenário LSF, obedeceram a uma curva normal, posto que o histograma está conformado na curva normal ajustada para os dados (valor médio e desvio padrão).

Tal como observado para o cenário LSF, os resultados para os demais cenários constam nas próximas figuras. A Figura 30, Figura 32 e Figura 34 (a e b) exibem os perfis de concentrações dos componentes nesses processos (valores de médias e desvios padrões dinâmicos). Além disso, os histogramas dos valores das concentrações finais dos principais componentes da saída desses processos constam na Figura 31, Figura 33 e Figura 34 (c).

Figura 30. Perfis de concentrações (valores médios na linha sólida e desvios padrões na linha pontilhada) dos componentes nos processos de L+S (a) e F (b) no cenário SLSF.

a) liquefação e sacarificação simultâneas

b) fermentação



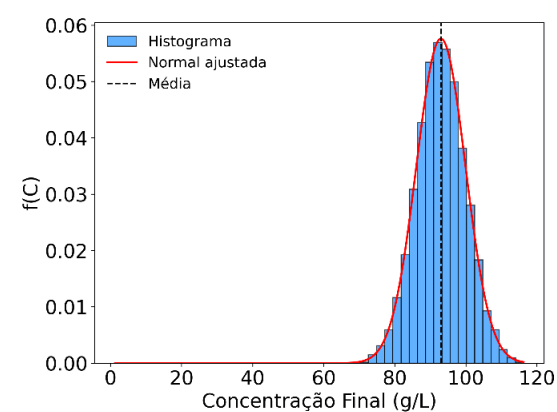
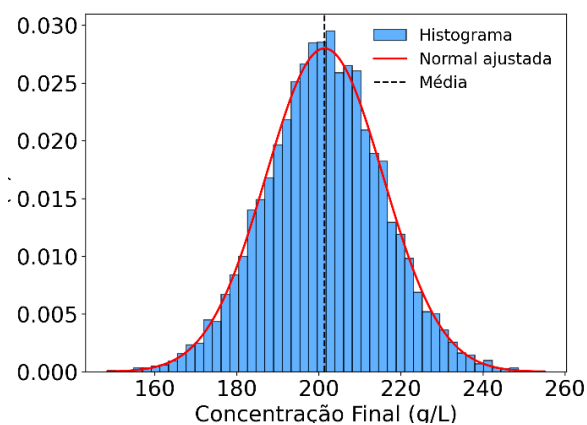
Fonte: autor (2025)

Figura 31. Histogramas, valores médios e curva normal ajustada da distribuição dos valores das concentrações finais dos principais componentes de saída do processo de L+S (a - glicose) e F (b - etanol) do cenário SLSF.

a) C_{glicose} na liquefação e sacarificação simultâneas

b) C_{etanol} na fermentação

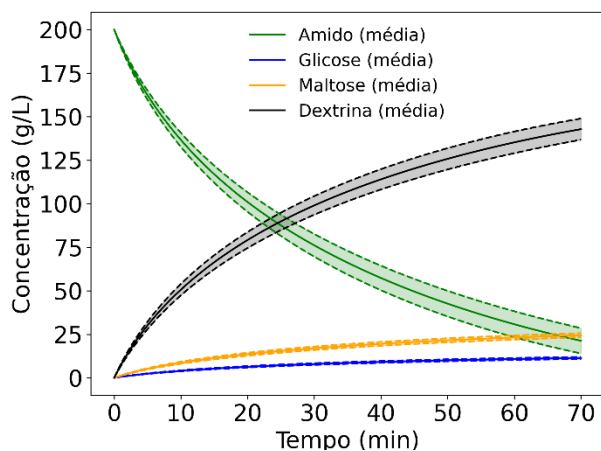
simultâneas



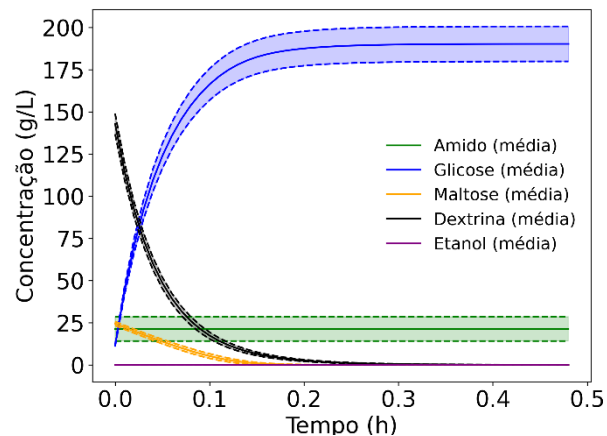
Fonte: autor (2025)

Figura 32. Perfis de concentrações (valores médios na linha sólida e desvios padrões na linha pontilhada) dos componentes nos processos de L (a) e S+F (b – primeiros 30 minutos, c – processo completo) no cenário LSSF.

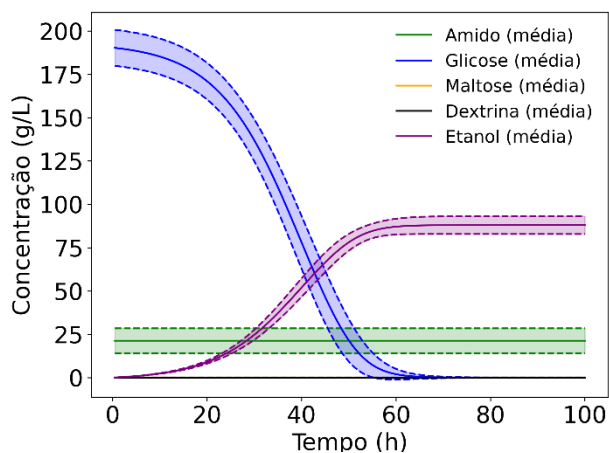
a) liquefação



b) primeiros 30 min da sacarificação e fermentação simultâneas



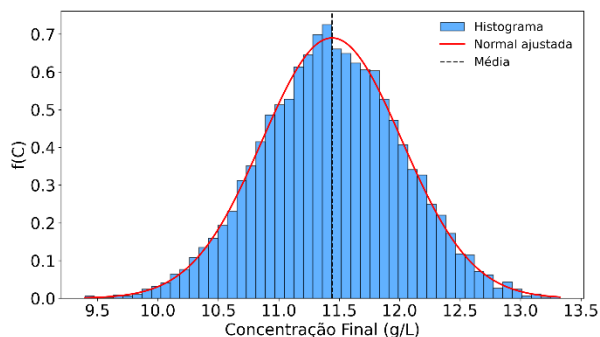
c) processo completo da sacarificação e fermentação simultâneas



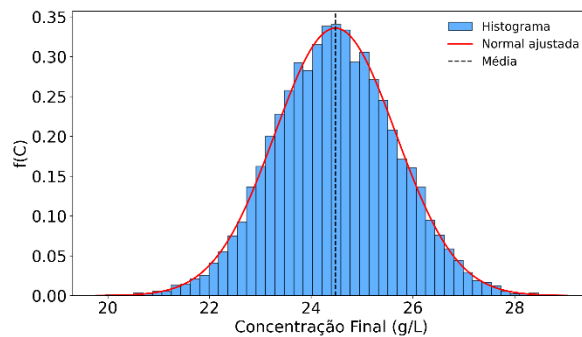
Fonte: autor (2025)

Figura 33. Histogramas, valores médios e curva normal ajustada da distribuição dos valores das concentrações finais dos principais componentes de saída dos processos de L (a – glicose, b – maltose, c - dextrinas) e S+F (d - etanol) do cenário LSSF.

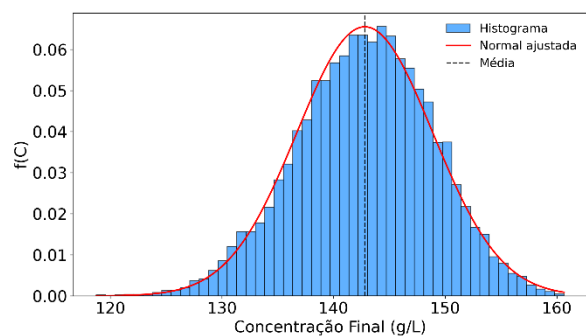
a) C_{glicose} na liquefação



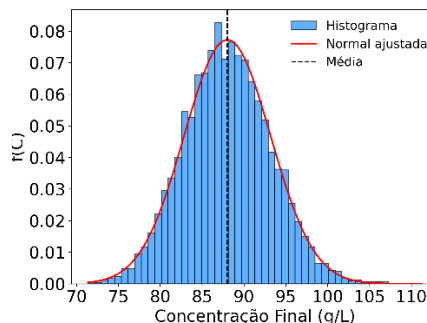
b) C_{maltose} na liquefação



c) $C_{\text{dextrinas}}$ na liquefação



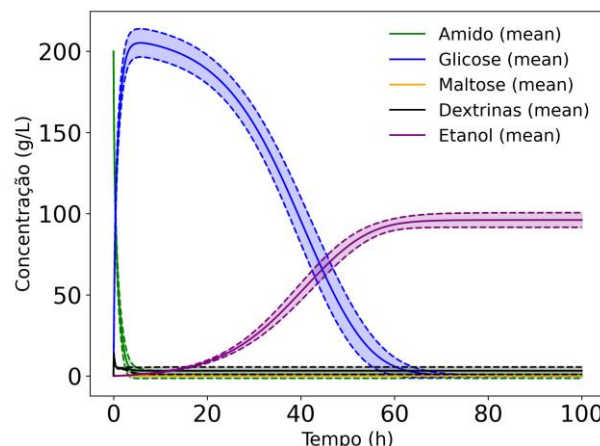
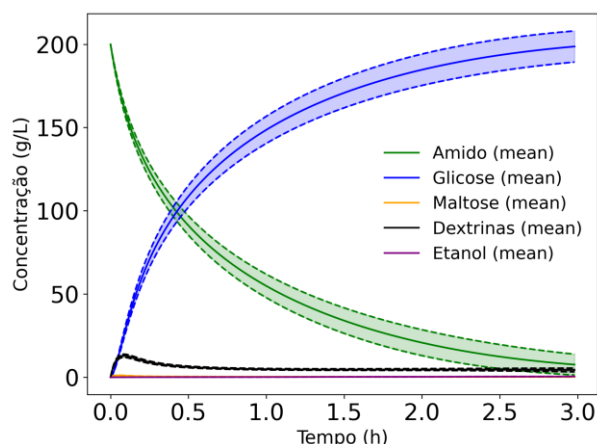
d) C_{etanol} na sacarificação e fermentação simultâneas



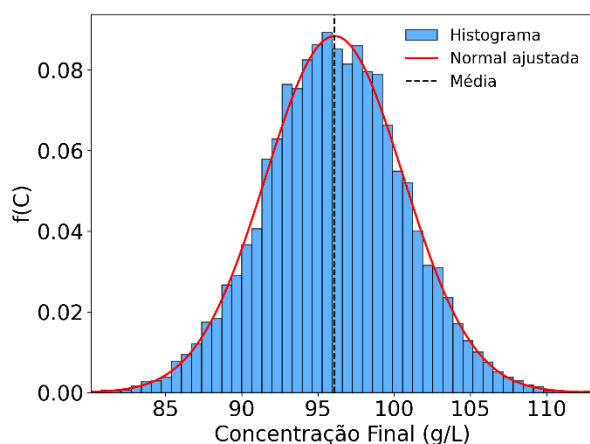
Fonte: autor (2025)

Figura 34. Perfis de concentrações (valores médios na linha sólida e desvios padrões na linha pontilhada) dos componentes nos processos de L+S+F (a – primeiras 3h, b – processo completo) e o histograma, valor médio e curva normal ajustada da distribuição do valor da concentração final do principal componente de saída dos processos (c – etanol) do cenário SSF.

a) primeiras 3h da liquefação, b) processo completo da liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas



c) C_{etanol} na liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas



Fonte: autor (2025)

As curvas de concentrações no tempo, em todos os processos, estão seguindo o mesmo comportamento que foi observado no cenário LSF: o aumento do desvio padrão da concentração se dá com o tempo. Os histogramas, em todos os casos, obedeceram a uma distribuição normal. No caso da distribuição dos valores de concentração final de etanol no cenário SLSF (Figura 31b), é possível observar que a curva normal se estende

até próximo do valor 0. Isso ocorre porque, dentre as 10 mil simulações feitas, houve um arranjo de parâmetros que geraram um valor de concentração de etanol próximo de zero, mas é possível notar que esse resultado tem probabilidade quase nula frente aos demais.

Os valores de média e desvio padrão dos componentes principais de cada processo constam na Tabela 23. Pode-se observar que o maior valor de desvio padrão para a concentração final de etanol foi de 6,93 g·L⁻¹, para o cenário SLSF, correspondendo a 7,45% da média. Diante disso, pode-se concluir que a metodologia de arranjo dos modelos pode gerar resultados com desvios menores que 10% do valor estimado, o que foi considerado aceitável.

Tabela 23. Média e desvio padrão (Std) das concentrações finais dos componentes de saída nos processos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF gerados na análise de Monte Carlo.

Cenário	Processo	Componente	Média (g·L ⁻¹)	Std (g·L ⁻¹ , % ^a)
LSF	L	Glicose	11,44	0,58 (5,08)
		Maltose	24,48	1,20 (4,89)
		Dextrinas	142,77	6,10 (4,27)
	S	Glicose	189,79	10,22 (5,38)
	F	Etanol	89,70	5,14 (5,86)
SLSF	L+S	Glicose	201,37	14,25 (7,08)
	F	Etanol	92,99	6,93 (7,45)
LSSF	L	Glicose	11,44	0,58 (5,05)
		Maltose	24,48	1,19 (4,85)
		Dextrinas	142,80	6,09 (4,26)
	S+F	Etanol	88,02	5,16 (5,87)
SSF	L+S+F	Etanol	96,09	4,51 (4,70)

^a Percentual do desvio padrão em relação à média.

Fonte: autor (2025)

5.1.3. Indicadores técnicos na simulação inicial

De posse dos resultados do modelo e validada a incerteza da modelagem (com base nos erros dos parâmetros), foi possível a realização da simulação da usina no

Google Colab. A simulação foi feita usando os resultados da modelagem, sobretudo a concentração final de etanol, e os parâmetros técnicos informados pela literatura. Essa simulação foi feita para fins de otimização econômica; entretanto, a avaliação dos resultados dessa simulação foi feita, para validar as estimativas feitas nela. A Tabela 24 reúne alguns indicadores técnicos e econômicos para cada cenário na simulação inicial e esses indicadores reportados pela literatura. Vale ressaltar que o objetivo dessa seção não é a comparação entre os cenários (que é um dos objetivos do trabalho), mas sim com a literatura.

Avaliando a Tabela 24, nota-se que as simulações demandaram mais milho processado para produção de uma unidade de etanol. Isso pode ser observado pelo indicador “Massa de milho por massa de etanol” simulado está acima do valor da literatura, enquanto o indicador “Rendimento industrial” está abaixo. Esses indicadores foram avaliados porque o milho é a principal matéria-prima do processo, logo o seu consumo, em função da quantidade de etanol produzido, precisa estar conforme ao informado pela literatura.

Em relação aos subprodutos do processo, DDGS e óleo de milho, nota-se que os indicadores ficaram próximos ao reportado pela literatura. As informações da literatura quanto ao indicador de produção desses subprodutos por unidade de milho variam consideravelmente, como pode ser visto na Tabela 24. O indicador para o óleo ficou um pouco acima, enquanto para o DDGS ficou dentro do intervalo reportado.

Tabela 24. Indicadores técnicos e econômicos estimados na simulação inicial para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF e os valores da literatura.

Indicador	Unidade	LSF	SLSF	LSSF	SSF	Referência
Massa de milho por massa de etanol	$\text{kg}_{\text{milho}} \cdot \text{kg}_{\text{etanol}}^{-1}$	4,06	3,74	3,98	3,71	3,08 (Franceschin, 2008)
Rendimento industrial	$\text{L}_{\text{etanol}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$	310,40	336,89	316,82	340,15	345-395 (Eckert <i>et al.</i> , 2018) 440 (Zieiro <i>et al.</i> , 2021)
Quantidade de DDGS por unidade de milho	$\text{kg}_{\text{DDGS}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$	324,76	325,94	325,05	332,20	344-348 (Olivera e Cruz, 2023) 300-320 (Zieiro <i>et al.</i> , 2021)
Quantidade de óleo por unidade de milho	$\text{kg}_{\text{óleo}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$	34	34	34	34	27,5-30,6 (Eckert <i>et al.</i> , 2018) 8,40 (Oliveira e Cruz, 2023)
Quantidade de vapor por volume de etanol	$\text{kg}_{\text{vapor}} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$	7,63	7,14	7,52	6,34	5,75 (Oliveira e Cruz, 2023)
Quantidade de água por unidade de milho	$\text{m}^3_{\text{água}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$	2,41	2,43	2,41	2,43	5,21 (Donke <i>et al.</i> , 2017) 7,63 (Oliveira e Cruz, 2023)
Quantidade de eletricidade por unidade de milho	$\text{kWh} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$	104,18	113,06	106,48	153,29	104,46 (Oliveira e Cruz, 2023) 130,6 (Marques, 2019)
Quantidade de eletricidade por volume de etanol	$\text{kWh} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$	0,3356	0,3356	0,3361	0,4506	0,3171 (Marques, 2019)
Custo total por volume de etanol	$\text{R\$} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$	4,55	4,27	4,55	4,23	3,38 (Basso <i>et al.</i> , 2021) 4,93 (Kwiatkowski <i>et al.</i> , 2006)
Custos _{MP} por volume de etanol	$\text{R\$} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$	3,81	3,58	3,82	3,55	5,34 (Kwiatkowski <i>et al.</i> , 2006)

Fonte: autor (2025)

Em relação às utilidades, os resultados obtidos na simulação dos cenários ficaram próximos em alguns casos. Quanto a quantidade de eletricidade por unidade de milho processado e a quantidade de vapor por volume de etanol produzido, os indicadores ficaram acima, mas ainda próximos dos respectivos valores da literatura. No caso da quantidade de eletricidade por unidade de milho, os valores simulados ficaram dentro do intervalo da literatura. Por outro lado, a quantidade de água por unidade de milho processado ficou abaixo do reportado pela literatura. Esse resultado pode ser explicado devido a metodologia adotada no presente trabalho, baseada nos cálculos presentes em Turton (2012), que utiliza o fator de perda de água de resfriamento por evaporação de 2,56%, enquanto alguns trabalhos reportam valores de 13 e 11,3% de perda (Shublaq e Sleiti, 2020). Ou seja, o valor usado para a fração de água perdida na torre de resfriamento, no presente trabalho, calculado com base nos dados de Turton *et al.* (2012), é conservador, o que gerou o menor consumo dessa utilidade.

Quanto aos indicadores de custos, notou-se que o custo total por volume de etanol produzido ficou dentro do intervalo informado pela literatura; entretanto, esse indicador para os custos com matéria-prima ficou abaixo. Isso mostra que, na simulação inicial, o custo com matéria-prima foi maior que o esperado, mas os custos com os demais fatores foram menores, gerando o custo total dentro do intervalo esperado. O que pode explicar a diferença do indicador de custosMP por volume de etanol do presente trabalho com o reportado pela literatura é a estimativa feita para esse indicador, uma vez que o trabalho citado apenas informa o valor total dos custos com MP e o indicador exibido na Tabela 24 foi estimado.

Diante do exposto, pode-se notar que a simulação da usina, realizada no presente trabalho, ofereceu resultados adequados em todos os cenários, o que permitiu seu uso no ambiente de otimização, visando maximizar o saldo anual da planta.

5.2. Otimização dos cenários

Feitas as simulações iniciais, com variáveis de entrada (concentrações iniciais) baseadas na literatura, esta seção apresenta os resultados otimizados. O ambiente de simulação se comunicou com o de otimização através do retorno do valor da variável "saldo" em cada iteração k , conforme fluxograma apresentado na Figura 22. As

concentrações iniciais de cada componentes foi a variável de busca e a função objetivo foi o negativo do saldo, isto é, $f_{\text{Obj}} = -\text{saldo}(C_{\text{inicial}})$.

Os resultados das variáveis de busca, antes e depois da otimização, constam na Tabela 25. Além disso, os valores da função objetivo (saldo), antes e depois da otimização, estão presentes na Tabela 26. Pode-se observar que apenas a concentração inicial de glicoamilase, nos cenários LSF, LSSF e SSF, reduziu após a otimização, enquanto todos os outros componentes aumentaram. Esse comportamento da glicoamilase pode ser entendido quando se avalia o tempo de sacarificação do cenário LSF na simulação inicial, presente na Tabela 22, onde esse processo ocorreu na metade do tempo máximo estipulado, quando a concentração inicial de glicoamilase foi de 1,9688 $\text{mL}\cdot\text{L}^{-1}$. Assim, a otimização direcionou a diminuição dessa enzima, de modo a reduzir os custos com ela.

Tabela 25. Valores das concentrações iniciais dos componentes na simulação inicial (C_{inicial}), na simulação otimizada (C_{inicial}^*) e suas variações percentuais para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF.

Componente	C_{inicial} ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	C_{inicial}^* ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)			
		LSF	SLSF	LSSF	SSF
Amido	200,00	299,94 (+50%)	299,99 (+50%)	299,44 (+50%)	239,26 (+20%)
α -amilase ($\text{mL}\cdot\text{L}^{-1}$)	1,9688	4,248 (+116%)	4,157 (+111%)	4,237 (+115%)	2,665 (+35%)
Glicoamilase ($\text{mL}\cdot\text{L}^{-1}$)	0,3287	0,212 (-36%)	0,343 (+4%)	0,047 (-86%)	0,310 (-6%)
Células	0,0316	0,1004 (+218%)	0,1001 (+217%)	0,1002 (+217%)	0,1000 (+216%)

Fonte: autor (2025)

Tabela 26. Valores da função objetivo (saldo) na simulação inicial, nos cenários otimizados e suas variações percentuais para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF

Saldo	LSF	SLSF	LSSF	SSF
Inicial	-6,54	7,48	-11,50	13,63
Otimizado	57,11 (+973%)	32,90 (+340%)	44,42 (+486%)	26,90 (+97%)

Fonte: autor (2025)

As concentrações iniciais de amido e de células, na otimização, tenderam a se aproximar do limite da região de busca determinado, exceto no caso do amido no cenário SSF. Investigações da simulação mostraram que a tendência da otimização em aumentar a concentração do amido pode estar atrelado à quantidade de água de diluição para formação da pasta de milho: quanto menor a concentração de amido, maior o volume de água necessária para formação dessa pasta. Assim, a otimização seguiu para a redução desse consumo. No caso da concentração inicial de células, o resultado esperado era o aumento, visando a redução do tempo de fermentação. Entretanto, esse aumento também iria gerar o aumento do custo com essa matéria-prima. Logo, a otimização seguiu na redução dessa variável de busca.

Vale ressaltar que o valor na simulação inicial da concentração inicial de células está fora do limite de busca dessa variável na otimização. Isso ocorreu porque os limites de busca dessa variável foram baseados em informações da concentração inicial de células em processos de fermentação voltados para o milho ou em mostos de glicose, onde a literatura informa valores de $0,5 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Bialas *et al.*, 2014), $10 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Birol *et al.*, 1998), $0,4$ e $0,8 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Oliveira e Cruz, 2023), $3 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Krishnan *et al.*, 1995). Com isso, o intervalo inferior de $0,1 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ foi definido.

A concentração inicial ótima da glicoamilase no cenário LSSF foi menor que nos demais, com redução acima de 80% do valor da simulação inicial. Esse resultado indica a possibilidade de o processo atuar em baixas concentrações dessa enzima quando há fermentação paralela, dada a redução continuamente da concentração de glicose no meio, que reduz seu efeito inibitivo.

O cenário SSF obteve a menor concentração inicial de amido dentre os cenários estudados. Esse resultado faz sentido quando se observa que, na simulação inicial, esse cenário obteve a menor concentração residual de amido, hidrolisando quase 100% do amido inicial (Tabela 21), mas foi o que demandou maior tempo total de operações (Tabela 22), com mais de 10h de diferença dos demais cenários. Assim, a otimização se guiou em aumentar a quantidade desse componente, mas ainda manter abaixo dos demais cenários, visando tornar o processo mais rápido. Vale reforçar que a menor concentração inicial de amido gera menores concentrações de etanol, logo menor volume de etanol, o que leva a uma receita menor. No entanto, dada a estratégia de simulação adotada no presente trabalho, o algoritmo de otimização avaliou esses pontos e determinou que, apesar das considerações, a concentração menor de amido retorna maior valores de saldo.

Quanto ao saldo dos cenários antes e depois da otimização, nota-se que, em todos os casos, houve o aumento após a otimização, com destaque para o cenário LSF com o maior aumento percentual e maior saldo após a otimização. O cenário SSF se mostrava o economicamente mais viável na simulação inicial e o saldo deste foi o que menos variou após a otimização, o que já era esperado posto que suas variáveis de busca foi a que menos variaram.

Otimizados os cenários, foram avaliados a cinética dos processos, os indicadores técnicos e econômicos, e o OPEX dos cenários otimizados na seção seguinte. Com isso, é possível comparar os resultados de cada cenário otimizado, cumprindo o objetivo do presente trabalho. Nas próximas seções, o sobrescrito “SI” na variável refere-se àquela variável nas condições da simulação inicial, enquanto o asterisco sobrescrito refere-se àquela variável calculada na condição otimizada.

5.3. Simulação otimizada: comportamento cinético, diagramas de ocupação de dornas, estimativas econômicas e indicadores

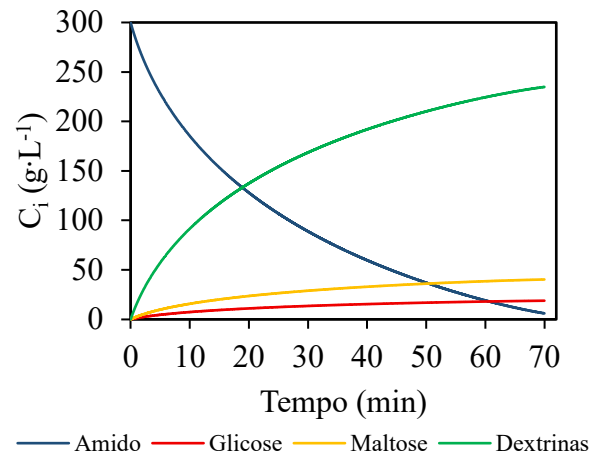
Após o processo de otimização, cada cenário possui seu conjunto de concentrações iniciais, de modo a obter o saldo máximo. Assim, essa seção visa avaliar os resultados da modelagem cinética e dos indicadores técnicos e econômicos dos cenários otimizados.

5.3.1. Comportamento cinético dos processos

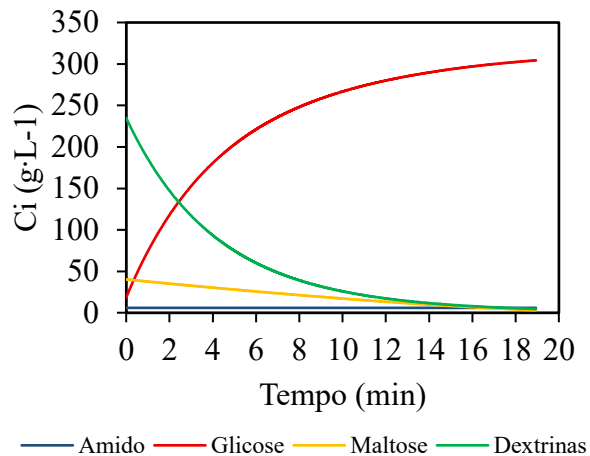
Os perfis de concentração dos componentes nos processos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados são apresentados na Figura 35, Figura 36, Figura 37 e Figura 38, nessa ordem. Além disso, a Tabela 27 exibe os tempos desses processos para esses cenários. Os demais tempos operacionais (limpeza, enchimento e esvaziamento) não são funções das concentrações iniciais dos componentes, logo não se alteraram após a otimização.

Figura 35. Perfis de concentrações dos processos de liquefação (a), sacarificação (b), enchimento da fermentação (c) e da fermentação (d) no cenário LSF na usina simulada nas condições otimizadas.

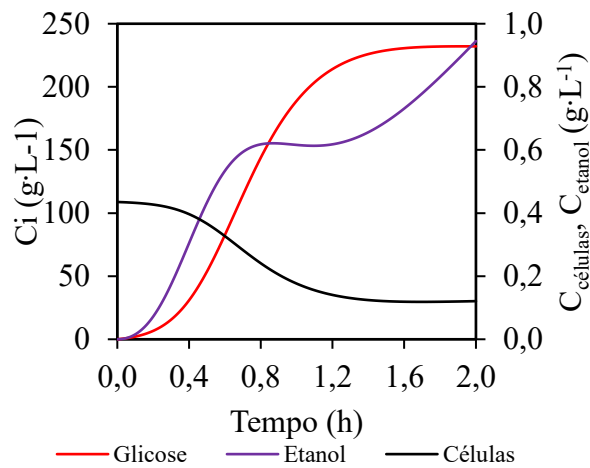
a) liquefação



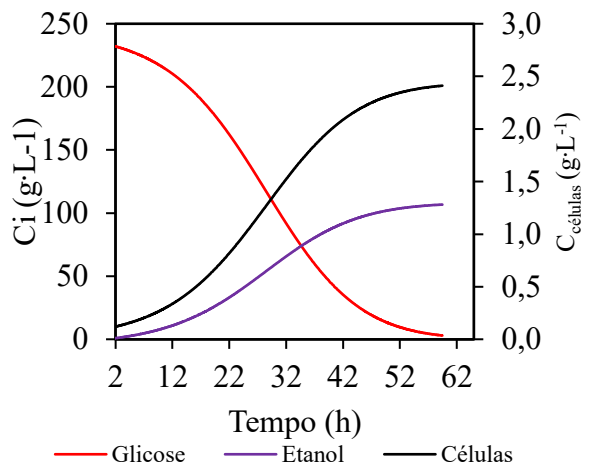
b) sacarificação



c) enchimento da fermentação



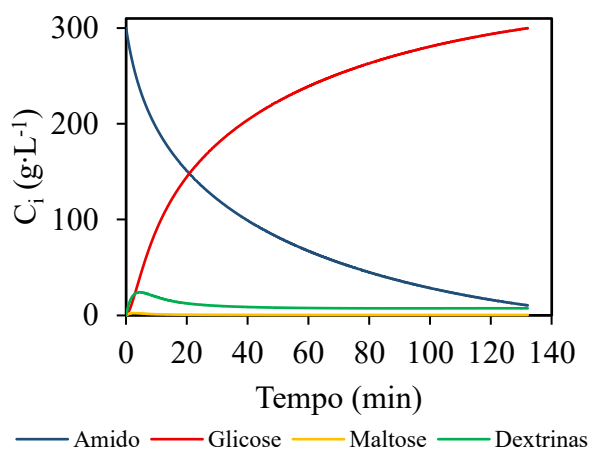
d) fermentação



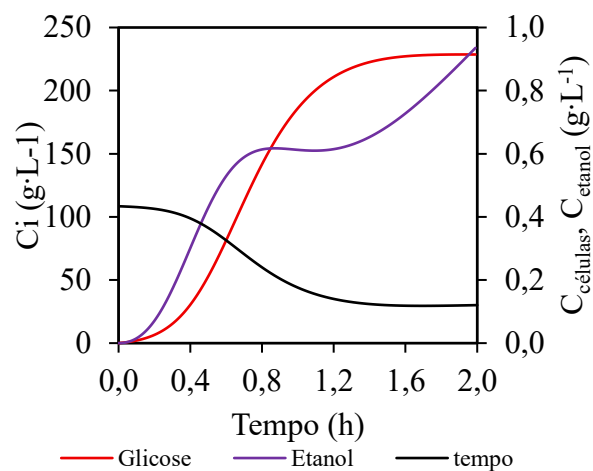
Fonte: autor (2025)

Figura 36. Perfis de concentrações dos processos de liquefação e sacarificação simultâneas (a), enchimento da fermentação (b) e da fermentação (c) no cenário SLSF na usina simulada nas condições otimizadas.

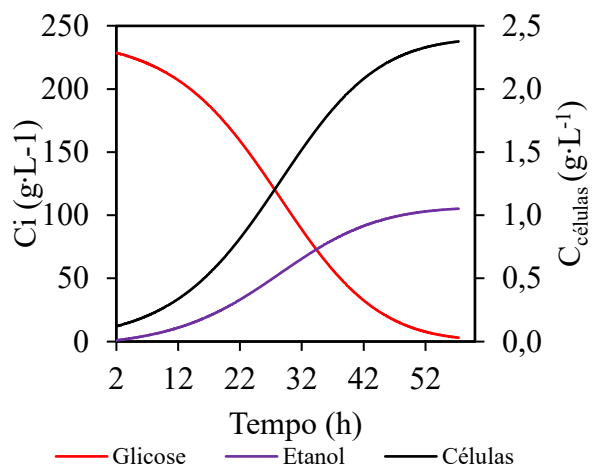
a) liquefação e sacarificação simultâneas



b) enchimento da fermentação



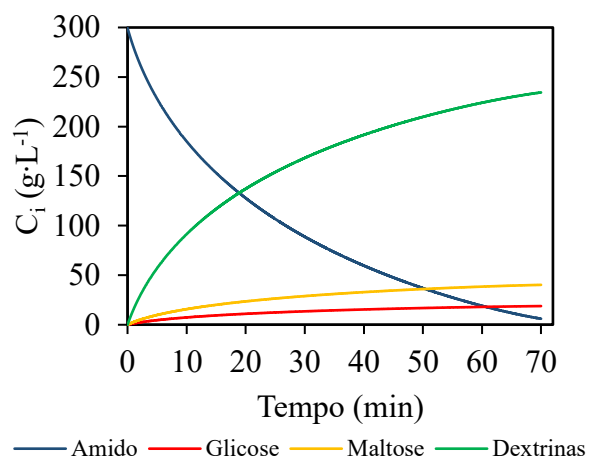
c) fermentação



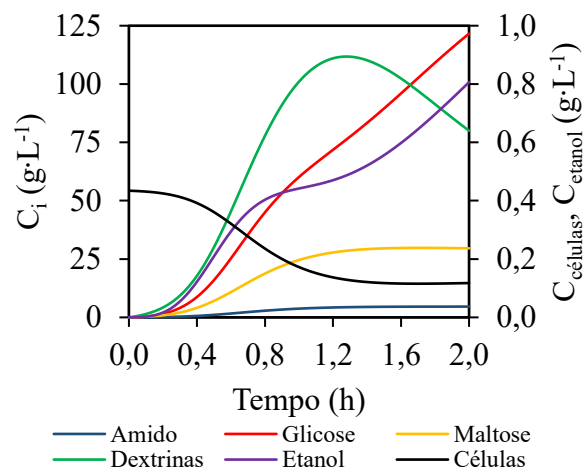
Fonte: autor (2025)

Figura 37. Perfis de concentrações dos processos de liquefação (a), enchimento da sacarificação e fermentação simultâneos (b) e processo de sacarificação e fermentação simultâneos (c) no cenário LSSF na usina simulada nas condições otimizadas.

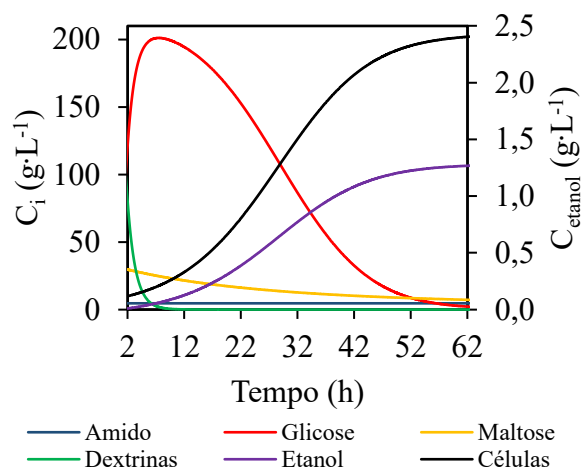
a) liquefação



b) enchimento da sacarificação e fermentação simultâneas



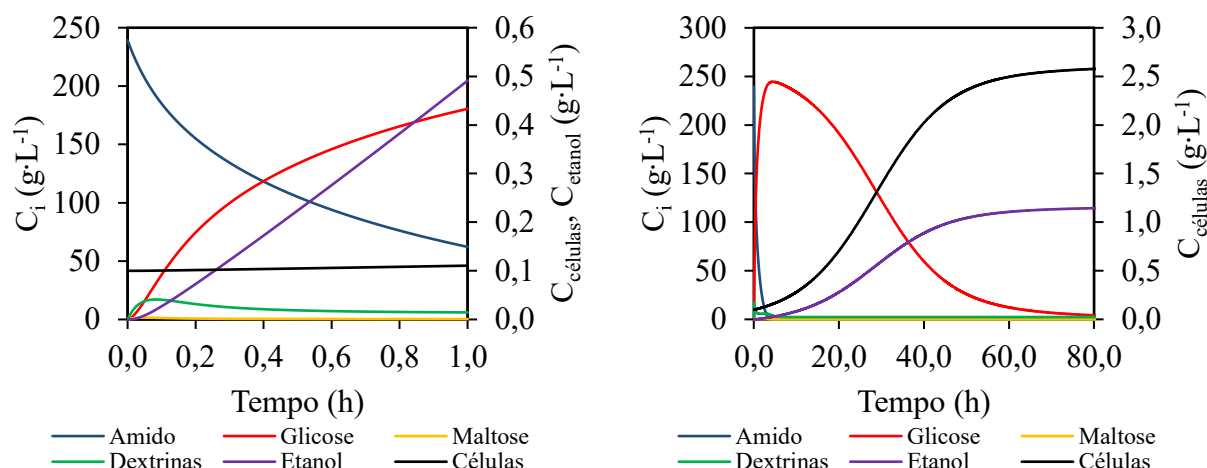
c) sacarificação e fermentação simultâneas



Fonte: autor (2025)

Figura 38. Perfis de concentrações do processo de liquefação, sacarificação e fermentação simultâneos no cenário SSF na usina simulada nas condições iniciais. a) primeira hora; b) processo completo.

a) primeira 1h da liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas b) liquefação, sacarificação e fermentação simultâneas



Fonte: autor (2025)

Tabela 27. Tempo dos processos presentes nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF na simulação inicial ($t_{processo}^{SI}$) e na condição otimizada ($t_{processo}^*$), e sua variação percentual antes e após a otimização.

Cenário	Processo	$t_{processo}^{SI}$ (min)	$t_{processo}^*$ (min)	Variação (%)
LSF	L	60,63	69,99	+15%
	S	11,59	18,94	+63%
	F	2937,29 (48,95 h)	3567,96 (59,47 h)	+21%
SLSF	L+S	143,67	132,13	-8%
	F	3024,90 (50,42 h)	3441,94 (57,37 h)	+14%
LSSF	L	60,63	70,00	+15%
	S+F	2891,90 (48,18 h)	3657,37 (60,96 h)	+26%
SSF	L+S+F	3771,38 (62,86 h)	5678,37 (94,64 h)	+51%

Fonte: autor (2025)

Comparando os perfis de concentrações dos componentes, antes e depois da otimização, observa-se que os comportamentos dessas curvas são parecidos. Nos casos dos processos de unicamente de hidrólise (L e S do cenário LSF, L+S do cenário SLSF e L do cenário LSSF) na simulação inicial resta amido não hidrolisado, enquanto nesses processos, quando otimizados, o amido é quase completamente hidrolisado (indicador presente na Tabela 28). Outra observação é quanto aos tempos desses processos. Apenas o processo de L+S, do cenário SLSF, reduziu o tempo de processo, em 8% comparando com o tempo na simulação inicial. Esse resultado de aumento dos tempos segue no sentido oposto ao esperado para a otimização, pois se esperava obter processos mais rápidos. No entanto, a função objetivo da otimização do presente trabalho foi uma variável econômica; ou seja, apesar dessa variável ter influência dos resultados da cinética do processo, outros parâmetros econômicos se mostram mais relevantes frente à função objetivo. Para avaliar a estratégia da otimização, a análise de indicadores econômicos e anuais será feita em tópicos posteriores.

Outro destaque é quanto ao aumento do tempo do processo de fermentação em todos os cenários após a otimização. Dado que o tempo de processo da fermentação representa a maior parte do tempo total de operação dos cenários (81% no cenário LSF, 84% no SLSF e 93% no LSSF, para a simulação inicial; não há processo de fermentação separado no cenário SSF), esperava-se que a redução do tempo desse processo fosse priorizada, visando aumentar o saldo da usina simulada. Entretanto, essa estratégia não foi observada com a otimização. As representações percentuais do tempo de processo de fermentação, frente ao tempo total de todas as operações, após a otimização foram de 84%, 86% e 94% para os cenários LSF, SLSF e SSF, nessa ordem; ou seja, não tiveram muita variação.

A Tabela 28 exibe alguns indicadores técnicos estimados através da modelagem cinética dos processos em cada cenário, e a comparação desses indicadores otimizados com os obtidos na simulação inicial.

Tabela 28. Alguns indicadores técnicos relacionados à modelagem cinética dos processos presentes nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados e suas variações com os cenários da simulação inicial.

Indicador	Unidade	LSF	SLSF	LSSF	SSF
Percentual de amido hidrolisado	%	98,00 (+15%)	96,53 (+3%)	98,46 (+11%)	99,99 (0%)
Percentual de glicose fermentada	%	99,00 (0%)	99,00 (0%)	98,07 ^a (-1%)	99,00 ^b (0%)
PV da fermentação em etanol	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$	1,7953 (+41%)	1,8335 (+36%)	1,7482 (+32%)	1,2176 (-20%)
Concentração final de etanol	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	106,76 (13,53 °GL) ^c (+71%)	105,18 (13,33 °GL) ^c (+55%)	106,56 (13,50 °GL) ^c (+67%)	115,23 (14,61 °GL) ^c (+20%)
Percentual residual da α -amilase ativa	%	4,00 (-35%)	0,02 (-85%)	4,00 (-35%)	0,00 (0%)
Percentual residual da glicoamilase ativa	%	75,27 (-10%)	13,78 (+19%)	9,01 (-17%)	0,00 (0%)
Massa de α -amliase por unidade de milho	$\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$	11,798 (+44%)	11,543 (+41%)	11,787 (+44%)	9,278 (+13%)
Massa de glicoamliase por unidade de milho	$\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$	0,473 (-57%)	0,765 (-30%)	0,105 (-90%)	0,867 (-21%)

^a Calculado considerando a concentração final de glicose ao final do enchimento da dorna de fermentação.

^b Calculado considerando a concentração máxima de glicose atingida no processo.

^c Calculado considerando densidade do etanol de $793 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$.

Fonte: autor (2025)

O percentual de amido hidrolisado aumentou em todos os cenários, exceto para o SSF, pois na simulação inicial o amido foi quase completamente consumido. A estratégia da otimização em aumentar a concentração inicial de α -amilase (acima de 100% nos 3 dos 4 cenários) contribuiu para esse resultado. Quanto ao percentual de glicose fermentada, não foi observada grande variação após a otimização, uma vez que o processo de fermentação, na simulação inicial, já oferecia resultados de consumo quase completo da glicose.

O aumento da PV em etanol se deu pelo aumento da concentração final de etanol na fermentação, posto que o tempo desse processo aumentou após a otimização. A literatura informa valores de PV em etanol, para fermentação de etanol de milho, por volta de $1,7 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ (Xu; Wang, 2017), $1,40 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ (Gronchi *et al.*, 2019) e $1,97 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ (calculado via dados de Kumar *et al.*, 2018). Diante disso, os valores de PV dos cenários otimizados ficaram próximos ao esperado, exceto para o cenário SSF, resultado causado pelo elevado tempo do processo.

A redução dos percentuais residuais da α -amilase e da glicoamilase indicou que, após a otimização, uma fração menor de enzima ativa restou ao final dos processos de hidrólises, exceto para a glicoamilase no cenário SLSF. No caso na α -amilase, esse resultado está de acordo com a taxa de desativação desse componente (Equações (19) e (20)): quanto maior a concentração de α -amilase, maior a sua taxa de desativação, o que está de acordo com Presecki, Blažević e VasicRacki (2013b). No entanto, os dados presentes na Tabela 28 indicaram o contrário para a glicoamilase, pois mesmo com a redução da concentração inicial dessa enzima, após a otimização, foi observada a redução da sua quantidade residual ao final do processo. Esse fenômeno pode ser explicado diante do aumento do tempo do processo de sacarificação após a otimização, contribuindo com o aumento da quantidade de glicoamilase desativada.

Com a otimização, o indicador de massa de α -amilase por unidade de milho aumentou, enquanto esse indicador, para a glicoamilase, reduziu, seguindo a tendência dos resultados das variáveis de busca (as concentrações iniciais dessas enzimas, na Tabela 25). Usando a literatura empregada na simulação inicial, a quantidade dessas enzimas, por quilograma de milho, é de 8,2 g de α -amilase e 1,1 g de glicoamilase, para os processos de liquefação e sacarificação, respectivamente (Kwiatkowski *et al.*, 2006). Portanto, os valores obtidos no presente trabalho, após a otimização, se distanciaram da literatura usada na simulação inicial. Em contrapartida, com base nos dados de Oliveira e Cruz (2023), foram calculadas¹ as quantidades de 13,966 g e 0,842 g de α -amilase e

¹ Foi considerado as densidades da α -amilase de $1400 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (ChemSrc, 2024) e de glicoamilase de $1125 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Sunson Enzymes, 1999), e a fração de 0,595 gramas de amido por grama de milho.

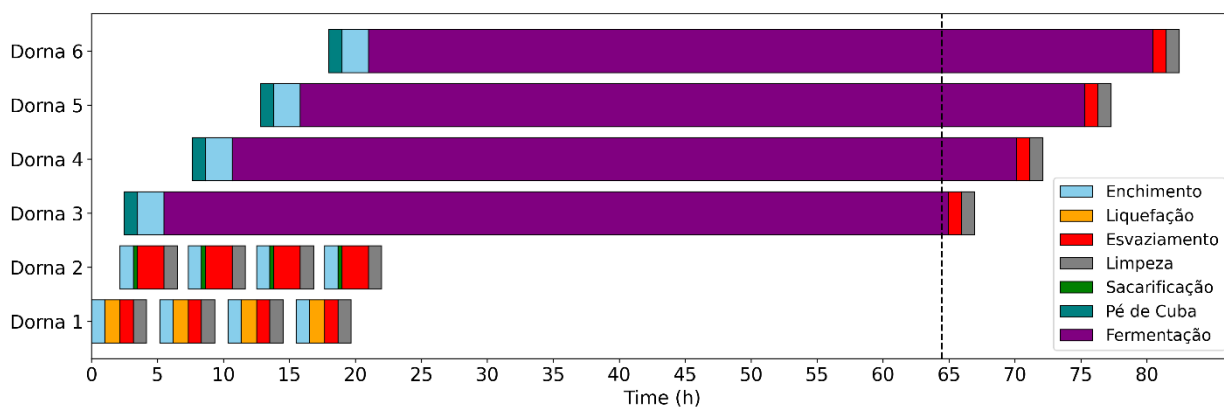
de glicoamilase, respectivamente, por quilograma de milho; ou seja, após a otimização esse indicador ainda está próximo do reportado pela literatura.

Diante dos resultados exibidos nessa seção, observa-se que o cenário SSF se destaca em termos de eficiência da hidrólise do amido e na necessidade de menos α -amilase em seu processo. O cenário SLSF apresentou melhor resultado em termos de produtividade volumétrica em etanol na fermentação, produzindo vinhos mais concentrados em menos tempo, e o cenário LSSF se destacou quando se avalia a quantidade de glicoamilase necessária no processo, apresentando a menor demanda.

5.3.2. Diagrama de ocupação de dornas

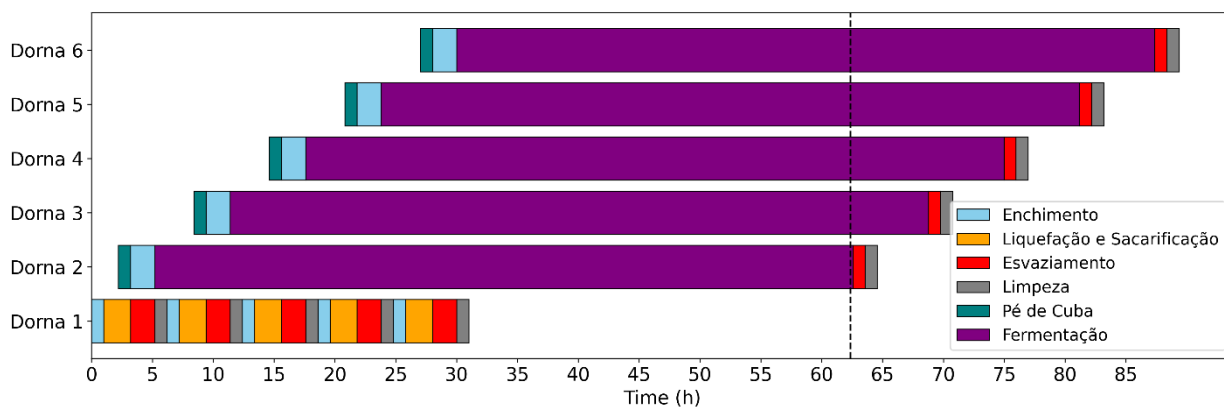
De posse dos resultados otimizados da modelagem cinética dos processos, os diagramas de ocupação de dornas para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados são exibidos na Figura 39, Figura 40, Figura 41 e Figura 42, nessa ordem. Através desses diagramas, pode-se visualizar o fluxo das operações entre as dornas, além do tempo de ciclo de cada cenário, marcado pela linha vertical pontilhada. Como previamente discutido, essa linha marca o reinício do processo, isto é, a partir dela o processo de enchimento pode ser reiniciado na dorna 1, assegurado o funcionamento das demais dornas. A Figura 42 indica que o tempo de ciclo do cenário SSF é exatamente igual ao término do processo de limpeza dorna 1, sendo que isso é possível porque, nesse cenário, as dornas funcionam de maneira independente, diferente do que ocorre nos demais cenários.

Figura 39. Diagrama de ocupação de dornas do cenário LSF simulado nas condições ótimas.



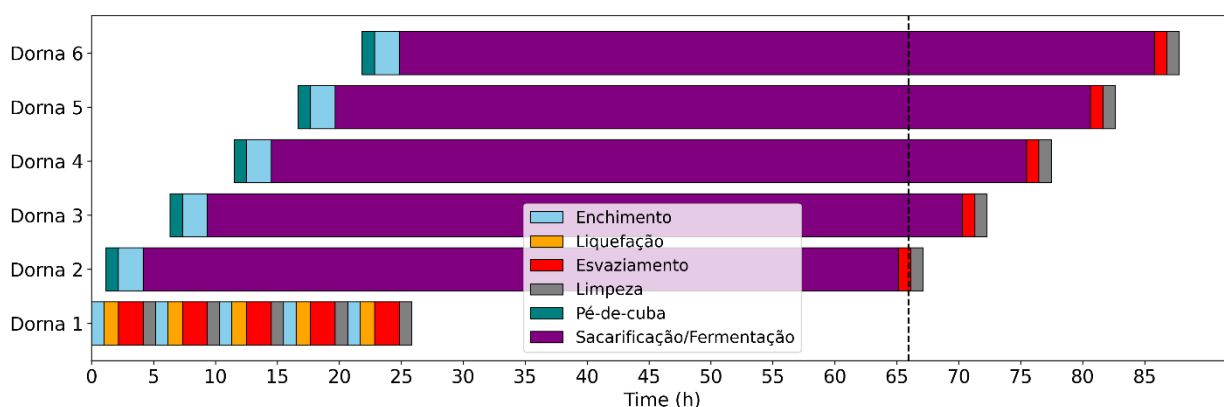
Fonte: autor (2025)

Figura 40. Diagrama de ocupação de dornas do cenário SLSF simulado nas condições ótimas.



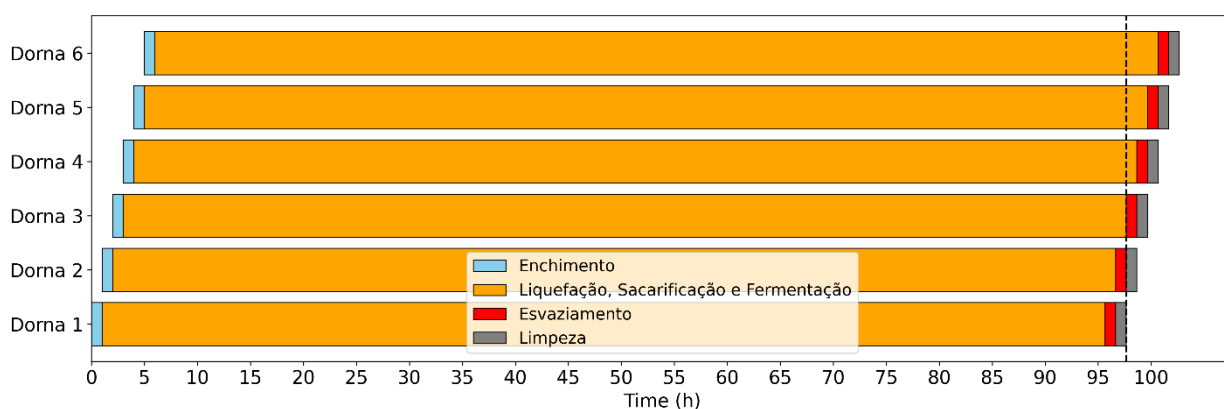
Fonte: autor (2025)

Figura 41. Diagrama de ocupação de dornas do cenário LSSF simulado nas condições ótimas.



Fonte: autor (2025)

Figura 42. Diagrama de ocupação de dornas do cenário SSF simulado nas condições ótimas.



Fonte: autor (2025)

Observando os diagramas de ocupação de dornas dos cenários LSF (Figura 39), SLSF (Figura 40) e LSSF (Figura 41), nota-se o período de ociosidade das dornas destinadas às hidrólises (dornas 1 e 2 no cenário LSF e dorna 1 nos cenários SLSF e LSSF) no período de fermentação. Essa observação sugere que a estratégia de organização das dornas aplicada no presente trabalho, baseado no relatado por Oliveira e Cruz (2023), pode apresentar problemas de eficiência; necessitando, portanto, de investigações visando a redução desse tempo ocioso, mas essa análise não é objetivo do presente trabalho.

Baseado nos diagramas de ocupação das dornas, os tempos e os números de ciclos, após a otimização, nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF estão presentes na Tabela 29. Dessa tabela, nota-se que a otimização guiou em aumentar o tempo de ciclo e reduzir o número de ciclos, em todos os cenários. Esse resultado é consequência do aumento dos tempos dos processos de L, S, F, S+F e L+S+F, como apresentado na Tabela 27, que, por conseguinte, foi gerado pelo aumento da concentração inicial de amido, como apresentado na Tabela 25.

Tabela 29. Tempo de ciclo e número de ciclos estimados para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados e suas respectivas variações com os resultados da simulação inicial.

	LSF	SLSF	LSSF	SSF
t_{ciclo} (h)	64,47 (+19%)	62,37 (+13%)	65,96 (+24%)	97,64 (+48%)
n_{ciclos}	122 (-16%)	126 (-11%)	120 (-19%)	81 (-33%)

Fonte: autor (2025)

Dada a simulação realizada no presente trabalho, as variações do tempo de ciclo e do número de ciclos, apresentadas na Tabela 29, contribuem para redução da quantidade de etanol produzido pela usina, o que provoca a redução da receita da planta; em contrapartida, também colabora com a redução dos custos, o que coopera no aumento do saldo anual. Assim, ainda se torna necessário relacionar os resultados dos diagramas de ocupação de dornas com os resultados econômicos da usina na condição otimizadas, em todos os cenários.

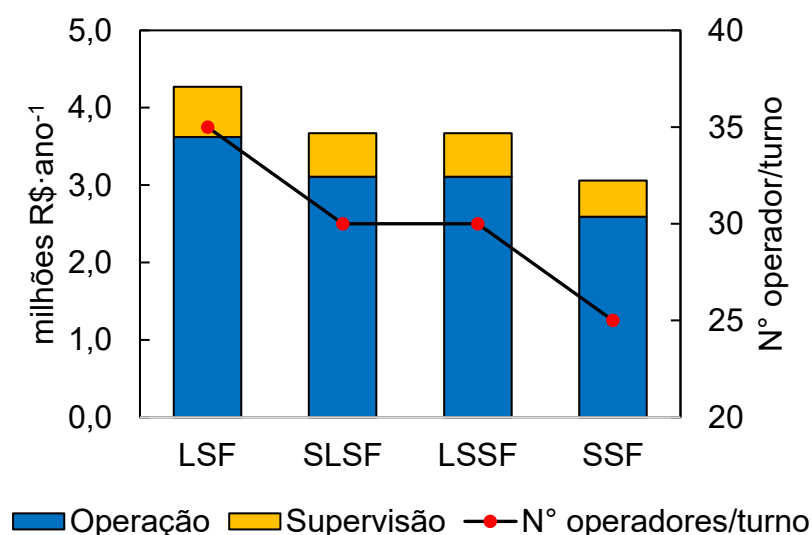
Os resultados dessa seção mostraram que o cenário SLSF obteve menor tempo de ciclo, logo maior número de ciclos, o que contribui para o aumento da sua receita, e também dos seus custos.

5.3.3. Estimativas de custos, receitas e saldos

Calculados a quantidade de ciclos anuais e o tempo de cada um, pode-se, utilizando o balanço de massa realizado, estimar os custos e as receitas da usina simulada para cada cenário. A Figura 43 exhibe os custos laborais (operação e supervisão)

os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF. A metodologia de estimativa dos Custos_{LAB} utilizada no presente trabalho define que esse custo é função da quantidade e do tipo de equipamento; portanto, a otimização não afetou esse custo. Ou seja, os Custos_{LAB} são os mesmos antes e depois da otimização, para cada cenário. É possível observar que o cenário LSF possui o maior número de operadores por turno e, conseqüentemente, maior Custo_{LAB}, enquanto SSF tem os menores valores nessas categorias. Isso decorre porque a diferença entre esses cenários é presente nos equipamentos específicos, que estão em maior quantidade no cenário LSF do que nos demais, gerando a tendência observada na Figura 43.

Figura 43. Custos_{LAB} dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF considerando operação e supervisão.

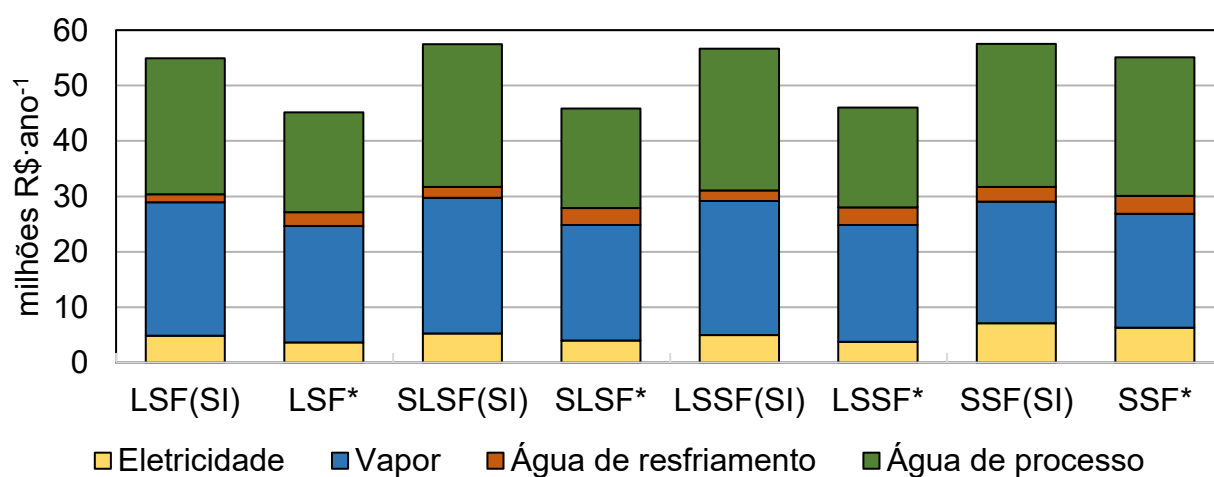


Fonte: autor (2025).

A literatura aponta valores de custo operacional por unidade de volume de etanol variando entre 0,0781 R\$.L⁻¹ (Kwiatkowski *et al.*, 2006) e 0,1699 R\$.L⁻¹ (Oliveira; Cruz, 2023). Os cenários apresentaram valores de 0,0295, 0,0256, 0,0253 e 0,0246 R\$.L⁻¹ para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, nessa ordem; ou seja, ficaram abaixo do reportado pela literatura. Essa diferença pode ser explicada porque o presente trabalho apenas considerou custos com operações e supervisão, de modo que outras categorias também poderiam ser contempladas, como administrativo.

Os custos com utilidades de cada cenário, antes e depois da otimização, estão apresentados na Figura 44. Nota-se a redução de cerca de 20% desse custo em todos os cenários, após a otimização, exceto para o cenário SSF, que apresentou redução de apenas 4%. Essa baixa variação, apresentada pelo cenário SSF, pode ser entendida diante da baixa variação dos resultados das variáveis de busca após a otimização, como apresentado na Tabela 25, onde esse cenário apresentou as menores variações entre os valores da simulação inicial e os otimizados, quando se compara com os demais cenários.

Figura 44. Custos com utilidades em milhões de R\$ por ano para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, antes (SI) e depois da otimização (*).



Fonte: autor (2025).

Dentre as categorias de utilidades analisadas, apenas o custo com água de resfriamento aumentou após a otimização, com maior aumento de 74% para o cenário LSF e menor de 22% para o SSF. O principal consumo de água de resfriamento, na simulação realizada no presente trabalho, é no processo de resfriamento da dorna de fermentação, cujo trocador de calor responsável por essa função irá variar com o cenário analisado. A Tabela 30 exhibe o equipamento responsável pelo resfriamento do caldo fermentativo em cada cenário, bem como a vazão de água de resfriamento necessária, o tempo de operação desse equipamento (que é função do tempo de fermentação e do número de vezes que a fermentação ocorre em cada cenário) e o consumo total anual de água de resfriamento, antes (sobrescrito SI) e depois (*) da otimização. Nota-se,

observando essa tabela, que o aumento do consumo de água de resfriamento por essa unidade, ocorrido após a otimização, é igual ao aumento do custo total dessa utilidade. Como detalhado no Apêndice B (seção 9.2), o cálculo da quantidade de água de resfriamento necessária para manter a temperatura da dorna é função da quantidade de glicose consumida no processo de fermentação, segundo Kwiatkowski *et al.* (2006). Assim, como a otimização direcionou o aumento da concentração inicial de amido e de seu percentual hidrolisado, a modelagem cinética gerou maiores concentrações de glicose no meio, logo foi liberado mais calor durante a fermentação, o que demandou o maior volume de água de resfriamento.

Tabela 30. Tags dos trocadores de calor responsáveis pelo resfriamento da dorna de fermentação, a vazão da água de resfriamento, os tempos do processo de fermentação no ano, em horas, e o consumo total de água de resfriamento por cada trocador, em cada cenário, antes e depois da otimização.

Cenário	Equipamento	Vazão·10 ⁻⁷ (kg·h ⁻¹)	Tempo (h·ano ⁻¹)	Consumo·10 ⁻⁸ (ton·ano ⁻¹) ^a
LSF ^{SI}	C1-TC03	1,49	7147,41	4,26
LSF*	C1-TC03	2,56	7254,85	7,43
SLSF ^{SI}	C2-TC02	1,62	7158,94	5,79
SLSF*	C2-TC02	2,52	7228,08	9,12
LSSF ^{SI}	C3-TC02	1,52	7131,35	5,42
LSSF*	C3-TC02	2,55	7314,73	9,33
SSF ^{SI}	C4-TC01	1,76	7542,75	7,95
SSF*	C4-TC01	2,11	7665,80	9,71

^a Calculado levando em consideração o número de dornas disponíveis para fermentação em cada cenário.
Fonte: autor (2025).

De acordo com Kwiatkowski *et al.* (2006), o custo com água por volume de etanol é de 0,1405 R\$·L⁻¹. No presente trabalho, foram encontrados valores de 0,1242, 0,1255, 0,1244 e 0,1752 R\$·L⁻¹ para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados, nessa ordem. Ou seja, os valores otimizados estão de acordo com a literatura.

A redução da quantidade de vapor pode ser atribuída à diminuição da concentração de etanol após a otimização, para todos os cenários. No presente trabalho,

o maior consumo de vapor ocorre no processo de destilação, para formar o etanol hidratado. Esse consumo foi calculado utilizando dados de Zarpelon (2012), onde foi estabelecida uma função que relaciona a quantidade de vapor gasto nessa unidade com a concentração de etanol no vinho fermentativo. Após a otimização, a concentração de etanol aumenta em todos os cenários, como visto na Tabela 28, o que proporciona a diminuição da quantidade de vapor necessária para destilar o vinho para formar o etanol hidratado, coincidindo a redução do custo dessa utilidade, após a otimização. Em seu trabalho, Oliveira e Cruz (2023) encontraram o consumo de vapor por volume de etanol de $5,75 \text{ kg}\cdot\text{L}^{-1}$. No presente trabalho esses valores foram 5,17, 5,21, 5,18 e 5,92 para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados, respectivamente. Ou seja, os valores otimizados satisfazem os dados da literatura.

Quanto ao custo com eletricidade, sua redução, após a otimização, tem relação com a redução das vazões do processo, que foram reduzidas diante do aumento das concentrações dos componentes após a otimização: o amido mais concentrado na corrente C11 demanda uma menor quantidade de água de processo da corrente C06, por exemplo. Essa observação também justifica a redução do custo com água de processo, que foi cerca de 30% para os cenários LSF, SLSF e LSSF e 3% para o SSF. Por fim, observando a Figura 44, nota-se que as contribuições do custo de cada utilidade no valor total do $\text{Custos}_{\text{UT}}$ permanecem quase inalterado após a otimização, com o custo com vapor e água de processo representando uma média de 86% custo total com utilidades. Os valores de consumo de eletricidade por volume de etanol produzido nos cenários otimizados foram de $0,1967 \text{ kWh}\cdot\text{L}^{-1}$ para o cenário LSF, $0,2166 \text{ kWh}\cdot\text{L}^{-1}$ para o SLSF, $0,2024 \text{ kWh}\cdot\text{L}^{-1}$ para o LSSF e $0,3948 \text{ kWh}\cdot\text{L}^{-1}$ para o SSF, enquanto Eckert *et al.* (2018) reporta $0,288 \text{ kWh}\cdot\text{L}^{-1}$. Diante disso, nota-se que os valores encontrados no presente trabalho estão próximos ao reportado pela literatura, mas o indicador do cenário SSF está acima.

Para estimativa dos custos com matérias-primas e insumos químicos é necessário avaliar as quantidades desses produtos que foram processados em cada cenário, que estão apresentadas na Tabela 31. Pode-se observar que a quantidade de milho processado no ano foi a mesma em todos os cenários, antes e depois da otimização. Isso

ocorreu porque, na simulação, a quantidade diária de milho processado foi definida em 1100 toneladas·dia⁻¹, conforme explicado na seção 4.3.2. Diante disso, as quantidades de insumos químicos também não variavam porque estes foram calculados em função da quantidade de milho.

Tabela 31. Quantidades das matérias-primas e insumos demandadas nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF após a otimização e suas variações em relação à simulação inicial.

Componente	Unidade	LSF	SLSF	LSSF	SSF
Milho	mil ton	363 (0%)	363 (0%)	363 (0%)	363 (0%)
α -amilase	ton	4298,21 (+80%)	5430,05 (+87%)	5271 (+74%)	2685,45 (-9%)
Glicoamilase	ton	172,37 (-46%)	360,03 (-7%)	46,98 (-88%)	251,02 (-36%)
Células	ton	94,33 (+212%)	121,39 (+230%)	115,76 (+202%)	71,98 (+151%)
Insumos ^a	mil ton	20,1102 (0%)	20,1102 (0%)	20,1102 (0%)	20,1102 (0%)

^a Considerando amônia, NaOH, CaO e ácido sulfúrico.

Fonte: autor (2025).

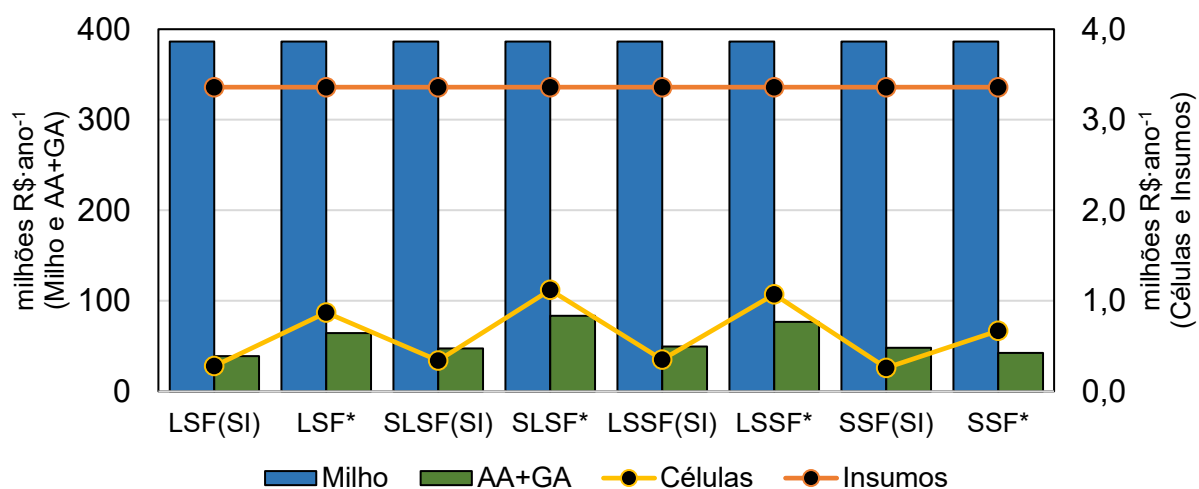
Quanto às quantidades dos demais componentes, percebe-se que suas variações, após a otimização, foram influenciadas pelas variações das suas concentrações iniciais, do tempo de ciclo e do número de ciclos. No caso da α -amilase, sua concentração inicial aumentou após a otimização em todos os cenários, mas sua quantidade anual reduziu no cenário SSF. Esse comportamento pode ser entendido diante do baixo aumento da concentração inicial desse componente no cenário SSF (35% de aumento, o menor entre os cenários, como visto na Tabela 25) e pelas altas variações do tempo de ciclo e do número de ciclos que esse cenário apresentou após a otimização (maiores que para os demais cenários, como visto na Tabela 29). Portanto, esses fatores explicam o resultado exibido na Tabela 31. Já para a glicoamilase, sua concentração inicial somente aumentou no cenário SLSF e reduziu nos demais, mas, como pode ser visto na Tabela 31, em todos

os cenários houve a redução da sua quantidade anual processada, resultado explicado pelas variações do tempo de ciclo e do número de ciclo.

A baixa variação da quantidade de glicoamilase no cenário SLSF se deu porque este foi o único cenário em que a concentração inicial dessa enzima aumentou, indo no sentido contrário das variações do tempo e do número de ciclos. As variações da quantidade de células seguiram a tendência da variação da sua concentração inicial.

Os custos com matéria-prima e insumos estão apresentados na Figura 45. Nota-se o destaque o custo do milho frente aos custos dos demais componentes, representando, em média 87% e 84% dos Custos_{MP} antes e depois da otimização, respectivamente. Conforme discutido com os resultados da Tabela 31, é possível observar que os custos com o milho e os insumos não variaram com a otimização, pelos motivos previamente mencionados.

Figura 45. Custos com matérias-primas e insumos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF na simulação inicial e após a otimização. AA+GA é a soma dos custos com α -amilase e glicoamilase e insumos é a soma dos custos com amônia, NaOH, CaO e ácido sulfúrico.



SI – simulação inicial; * simulação otimizada

Fonte: autor (2025).

Nos casos dos custos com α -amilase e glicoamilase (AA+GA) e os custos com células, suas variações após a otimização seguiram a tendência apresentada na Tabela

31: o aumento da quantidade gerou o aumento do custo e vice-versa. O custo da enzima (AA+GA) por volume de etanol foi de 0,45, 0,58, 0,53 e 0,34 R\$.L⁻¹ para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados, enquanto a literatura reporta um valor de 0,31 R\$.L⁻¹ (Kwiatkowski *et al.*, 2006). Portanto, os valores encontrados no cenário SSF estão mais próximos da literatura, enquanto dos demais cenários estão acima.

O $\text{custos}_{\text{MP}}$ por volume de etanol encontrado nos cenários otimizados foram 3,14 R\$.L⁻¹ para o cenário LSF, 2,70 R\$.L⁻¹ para o SLSF, 3,22 R\$.L⁻¹ para o LSSF e 3,49 R\$.L⁻¹ para o SSF. A literatura reporta valores de 3,56 R\$.L⁻¹ (Marques, 2019) a 5,34 R\$.L⁻¹ (Kwiatkowski *et al.*, 2006). Ou seja, os valores encontrados estão próximos do reportado pela literatura, exceto para o cenário SLSF, que ficou abaixo. Quanto ao milho, a literatura aponta que seu custo por volume de etanol é de 2,23 R\$.L⁻¹ (Marques, 2019). Após a otimização, os cenários retornaram valores de 2,66, 2,70, 2,66 e 3,12 R\$.L⁻¹ para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, respectivamente. Isto é, os valores encontrados no presente trabalho estão acima do reportado pela literatura, sobretudo para o cenário SSF após a otimização. O cenário SSF é o que produziu a menor quantidade de etanol no ano (124 milhões de litros), o que pode explicar seus indicadores mais distantes dos indicadores dos demais cenários.

Os custos com o estoque ($\text{Custos}_{\text{EST}}$) e o transporte ($\text{Custos}_{\text{TR}}$) do milho foram R\$14,28 milhões e R\$9,52 milhões, em todos os cenários, antes e depois da otimização. Como esses custos foram calculados em função da quantidade de milho e este se manteve constante em todas essas condições, esses custos também de mantiveram inalterados.

As quantidades de etanol, DDGS e óleo de milho produzidos nos cenários otimizados e suas variações com os resultados da simulação inicial estão presentes na Tabela 32, e as receitas anuais, geradas por esses produtos, estão apresentadas na Figura 46. Nota-se que a otimização direcionou o aumento do volume de etanol produzido em todos os cenários, exceto no SSF, cenário este em que o aumento do saldo foi atingido por outra estratégia, discutida a frente. Quanto aos demais cenários, o aumento do volume de etanol pode ser atribuído ao aumento da concentração de desse componente ao final do processo de fermentação, conforme apresentado na Tabela 28 e

dada a metodologia de cálculo de etanol produzido, conforme Equação (70). Os aumentos da receita com etanol, após a otimização, são iguais aos aumentos da sua produção.

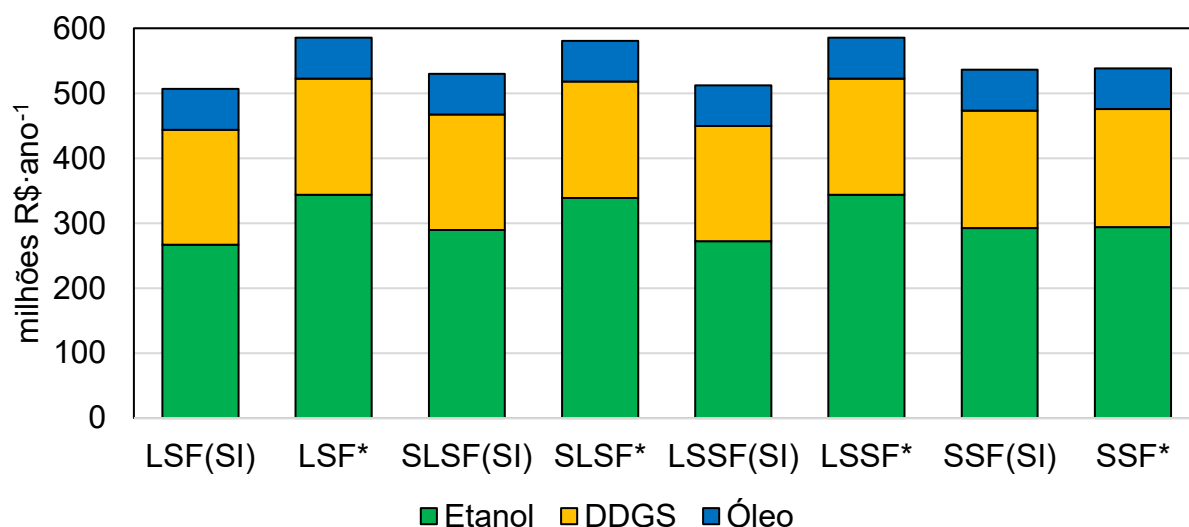
Com os volumes de etanol obtidos nos cenários otimizados, os rendimentos industriais (volume de etanol produzido por unidade de milho processado) obtidos foram 399,44, 393,97, 399,46 e 341,62 L·ton⁻¹ para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, respectivamente. A literatura reporta valores de 362 L·ton⁻¹ (Donke *et al.*, 2017), 345-395 L·ton⁻¹ (Eckert *et al.*, 2018) e 422,1 L·ton⁻¹ (Kwiatkowski *et al.*, 2006). Portanto, os valores encontrados estão dentro do intervalo esperado.

Tabela 32. Quantidades dos produtos nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF após a otimização e suas variações em relação à simulação inicial.

Componente	Unidade	LSF	SLSF	LSSF	SSF
Etanol	mi L	145	143,01	145	124,01
		(+29%)	(+17%)	(+26%)	(0%)
DDGS	mil ton	119,51	119,42	119,51	121,23
		(+1%)	(+1%)	(+1%)	(+1%)
Óleo	mil ton	12,34	12,34	12,34	12,34
		(0%)	(0%)	(0%)	(0%)

Fonte: autor (2025).

Figura 46. Receitas com etanol, DDGS e óleo de milho geradas nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados e na simulação inicial.



Fonte: autor (2025).

As quantidades anuais de DDGS mostraram baixas variações, próximas de 1% em todos os cenários, de acordo com os resultados da Tabela 32. De acordo com a Equação (68), a quantidade de DDGS é calculada em função da concentração de células ao final da fermentação e da vazão da corrente de vinho (C12). O primeiro fator aumentou em todos os casos, após a otimização, aumentou em mais de 200% em todos os cenários, como visto na Tabela 25. Entretanto, a vazão da corrente de vinho reduziu em todos os cenários (uma média de -25% nos cenários LSF, SLSF e LSSF e cerca de -12% no cenário SSF). Por isso, a resultante foi a manutenção da vazão da corrente de DDGS, mantendo sua variação quase nula, após a otimização. Esse comportamento impactou a receita desse coproduto, que também não variou após a otimização. Apesar disso, vale ressaltar a relevante contribuição do DDGS na receita total da usina de etanol de milho, representando entre 30 e 35% do total da receita, em todos os cenários, antes e depois da otimização, resultados de acordo com o reportado por Oliveira e Cruz (2023).

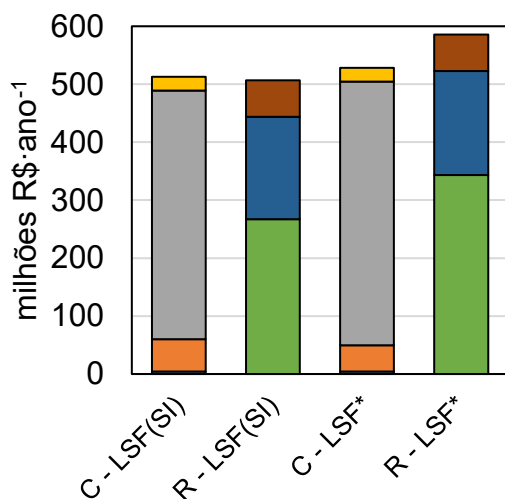
De acordo com a literatura, a quantidade de DDGS produzida por tonelada de milho varia entre 220-240 kg·ton⁻¹ (Eckert *et al.*, 2018) e 344-348 kg·ton⁻¹ (Oliveira; Cruz, 2023). Os valores obtidos no presente trabalho foram de 329,23, 328,99, 329,26 e 333,98 kg·ton⁻¹ para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, respectivamente. Com isso, os valores

obtidos nesses cenários, após a otimização, estão no intervalo reportado pela literatura. Além disso, a literatura informa que a quantidade de óleo de milho por tonelada de milho varia entre 27-31 kg·ton⁻¹ (Eckert *et al.*, 2018). O presente trabalho encontrou 34 kg·ton⁻¹ para todos os cenários, valor próximo da literatura.

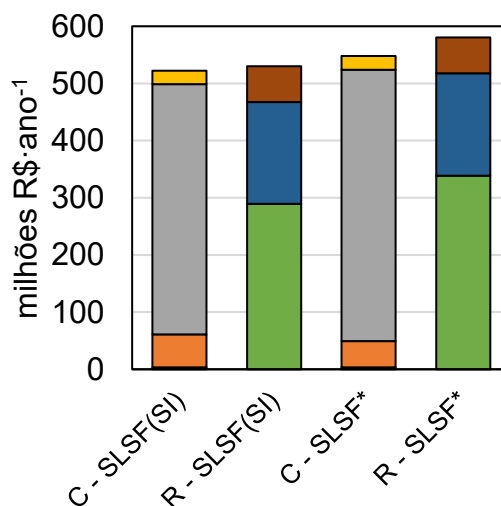
Analisando a Figura 47, pode-se avaliar a estratégia de otimização para os cenários, visando o aumento dos seus respectivos saldos, além de verificar quais principais categorias que compõem o custo e a receita totais em cada cenário, antes e depois da otimização. Os custos com matéria-prima são majoritários em todos os cenários, média 84% antes da otimização e 86% após, com aumento entre 6 e 8% para os cenários LSF, SLSF e LSSF e redução de 1% para o cenário SSF. Os custos com utilidades são os mais reduziram após a otimização, com redução média de 20%, exceto para o cenário SSF, que reduziu apenas em 10%.

Figura 47. Custos de operação, utilidades, matéria-prima e logísticos (transporte e estoque do milho) e as receitas com etanol, DDGS e óleo de milho, para os cenários LSF (a), SLSF (b), LSSF (c) e SSF (d) na simulação inicial (SI) e otimizados (*).

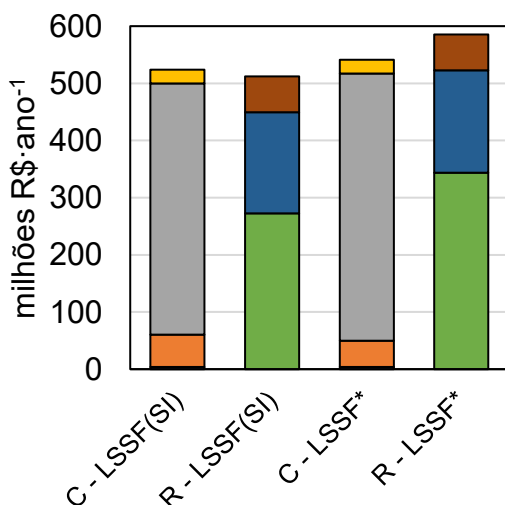
a) cenário LSF



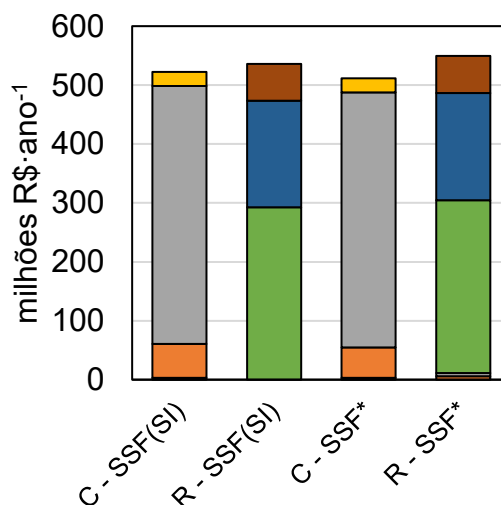
b) cenário SLSF



c) cenário LSSF



d) cenário SSF



■ Custos LAB
 ■ Custos UT
 ■ Custos MP
 ■ Custos LOG
■ Receita Etanol
 ■ Receita DDGS
 ■ Receita Óleo

Fonte: autor (2025)

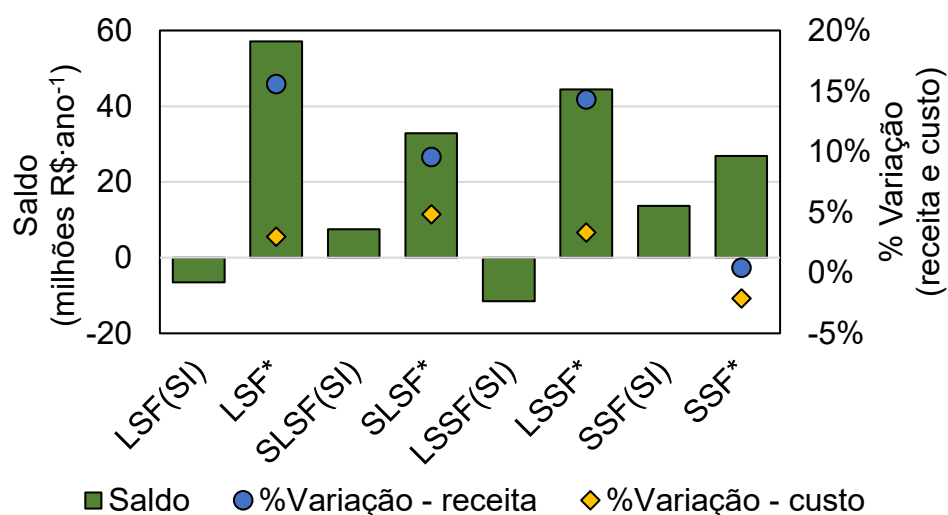
Os custos totais por volume de etanol para cada cenário, após a otimização, foram de 3,64, 3,83, 3,73 e 4,12 R\$.L⁻¹ para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, nessa ordem, enquanto a literatura reporta valores de 3,38 R\$.L⁻¹ (Basso *et al.*, 2011) e 4,93 R\$.L⁻¹

(Kwiatkowski *et al.*, 2006). Portanto, os valores encontrados no presente trabalho estão próximos àqueles reportados na literatura.

Quanto às receitas, a otimização não gerou mudanças significativas nas distribuições percentuais de cada componente. A Figura 47 permite observar o aumento da contribuição do etanol na receita total, após a otimização, em todos os cenários, exceto para o SSF; mas sua contribuição passou de 54% da receita total para 58%, em média, gerando a redução da contribuição dos coprodutos.

Além disso, analisando a Figura 47, nota-se que os dados do cenário SSF(SI) e SSF(*) são muito similares. As variações das receitas para esse cenário, após a otimização foi de 0,3% em média, indicando que a otimização do cenário não seguiu na direção da produção de mais produto. A variação dos custos, após a otimização, foi de reduções de 1% para as matérias primas e 10% para as utilidades (representando um montante total de R\$ 11,05 milhões), representando 83% da variação do saldo após a otimização, como pode ser visto na Figura 48, que apresenta os saldos dos cenários, antes e depois da otimização, bem como as variações do custo e da receita após a otimização, em percentuais. Isso indica a estratégia de otimização do cenário SSF se baseou na redução dos custos, sobretudo de utilidades, para aumento do saldo.

Figura 48. Saldos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF na simulação inicial (SI) e otimizados (*), e as variações do custo (♦) e da receita (●) totais antes e depois da otimização para cada cenário.



Fonte: autor (2025).

Avaliando a Figura 48, nota-se que as estratégias de otimização dos cenários LSF, SLSF e LSSF foi o aumento da receita, com variações de 16, 10 e 14% para esses cenários, respectivamente, mantendo baixas variações do custo. No entanto, o cenário SSF apresentou variação negativa da receita, mas reduziu o custo, permitindo o aumento do saldo em 98%. Os demais cenários tiveram aumentos de 773% para o LSF, 340% para o SLSF e 286% para o LSSF.

Os resultados dessa seção mostraram que, uma vez otimizados, os cenários LSF e LSSF apresentam as maiores receitas de etanol, enquanto o cenário SSF, de coprodutos. Esse cenário ainda se destaca quando aos custos, apresentando o menor valor. O cenário LSF apresentou maior saldo.

Por fim, os principais resultados, antes e depois da otimização, estão reunidos na Tabela 33, Tabela 34 e Tabela 35, que reúnem resultados da cinética, dos montantes de consumo de MP e produção de produtos, e os resultados financeiros, nessa ordem.

Tabela 33. Principais resultados relacionados à cinética dos processos e dos diagramas de ocupação de dornas dos cenários antes (SI) e depois (*) da otimização.

	Unidade	LSF (SI)	LSF*	SLSF (SI)	SLSF*	LSSF (SI)	LSSF*	SSF (SI)	SSF*
Modelagem e cinética									
% amido hidrolisado	%	85,03	98,00	93,51	96,53	88,49	98,46	99,98	100,00
PV	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$	1,2752	1,7953	1,3434	1,8335	1,3217	1,7482	1,5255	1,2176
Y_{ps} fermentação	$\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$	0,4649	0,4669	0,4648	0,4669	0,4846	0,5352	0,4682	0,4762
Y_{xs} fermentação	$\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$	0,0094	0,0086	0,0094	0,0086	0,0098	0,0099	0,0101	0,0103
C_{etanol}	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	62,43	106,76	67,73	105,18	63,69	106,56	95,89	115,23
t_{processo}^a	h	50,16	60,95	52,81	59,57	49,2	62,12	62,86	94,64
DesvPad C_{etanol}^b	$\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, %	5,86	-	7,45	-	5,87	-	4,70	-
Diagrama de dornas									
t_{ciclo}	h	53,95	64,47	55,42	62,37	53,18	65,96	65,86	97,64
n_{ciclos}	-	146	122	142	126	148	120	120	81
Qtde etanol por ciclo	$\text{mil L}\cdot\text{ciclo}^{-1}$	771,74	1188,49	861,22	1135,01	777,06	1208,37	1028,96	1530,98

^a Calculado como a soma dos processos de liquefação, sacarificação e fermentação, sejam eles simultâneos ou separados.

^b DesvPad = desvio padrão amostral

Fonte: autor (2025).

Tabela 34. Principais resultados relacionados aos consumos de utilidades, de MPs e produção de produtos dos cenários antes (SI) e depois (*) da otimização, em base anual.

	Unidade	LSF (SI)	LSF*	SLSF (SI)	SLSF*	LSSF (SI)	LSSF*	SSF (SI)	SSF*
Utilidades									
Eletricidade	GWh	37,82	28,51	41,04	30,98	38,65	29,35	55,64	48,95
Vapor	ton	860256	749694	873724	744580	864921	750935	782912	734547
Água de processo	mil m ³	874,16	616,31	882,15	614,26	875,97	617,1	883,14	743,44
Água de resfriamento	mi m ³	10,99	19,15	14,92	23,49	14,47	24,69	20,44	24,97
MPs									
Milho	mil ton	363	363	363	363	363	363	363	363
AA+GA ^a	ton	2703,73	4470,58	3287,07	5790,08	3425,96	5317,98	3333,37	2936,47
Células	ton	30,24	94,33	36,76	121,39	38,31	115,76	28,67	71,98
Insumos ^b	ton	20110,2	20110,2	20110,2	20110,2	20110,2	20110,2	20110,2	20110,2
Produtos									
Etanol	mi L	112,67	145	122,29	143,01	115,01	145	123,48	124,01
DDGS	mil ton	117,89	119,51	118,32	119,42	117,99	119,51	120,59	121,23
Óleo	mil ton	12,34	12,34	12,34	12,34	12,34	12,34	12,34	12,34

^a AA+GA é a soma das quantidades de α -amilase e de glicoamilase.

^b “Insumos” são a somas das quantidades de amônia, hidróxido de sódio, óxido de cálcio e ácido sulfúrico.

Fonte: autor (2025).

Tabela 35. Principais resultados financeiros dos cenários antes (SI) e depois (*) da otimização, em base anual.

	Unidade	LSF (SI)	LSF*	SLSF (SI)	SLSF*	LSSF (SI)	LSSF*	SSF (SI)	SSF*
Utilidades	mi R\$	55,93	45,17	57,47	45,84	56,68	46,05	57,54	51,83
Eletricidade		8,67 %	8,09 %	9,15 %	8,66 %	8,74 %	8,17 %	12,39 %	12,1 %
Vapor		43,11 %	46,52 %	42,61 %	45,52 %	42,77 %	45,7 %	38,14 %	39,72 %
Água		48,23 %	45,39 %	48,23 %	45,82 %	48,49 %	46,13 %	49,47 %	48,18 %
MPs	mi R\$	428,99	455,11	437,48	474,41	439,5	467,54	438,07	432,74
Milho		90,05 %	84,88 %	88,3 %	81,43 %	87,9 %	82,62 %	88,18 %	89,27 %
AA+GA ^a		9,1 %	14,19 %	10,85 %	17,63 %	11,26 %	16,43 %	10,99 %	9,8 %
Células		0,07 %	0,19 %	0,08 %	0,24 %	0,08 %	0,23 %	0,06 %	0,15 %
Insumos ^b		0,78 %	0,74 %	0,77 %	0,71 %	0,76 %	0,72 %	0,77 %	0,78 %
Logísticos	mi R\$	23,81	23,81	23,81	23,81	23,81	23,81	23,81	23,81
Transporte		60 %	60 %	60 %	60 %	60 %	60 %	60 %	60 %
Estoque		40 %	40 %	40 %	40 %	40 %	40 %	40 %	40 %
Operacional	mi R\$	4,28	4,28	3,67	3,67	3,67	3,67	3,05	3,05
Operação		84,75 %	84,75 %	84,75 %	84,75 %	84,75 %	84,75 %	84,75 %	84,75 %
Supervisão		15,25 %	15,25 %	15,25 %	15,25 %	15,25 %	15,25 %	15,25 %	15,25 %
Receitas	mi R\$	506,47	585,47	529,90	580,63	512,15	585,49	536,11	538,34
Etanol		52,69 %	58,66 %	54,66 %	58,34 %	53,19 %	58,66 %	54,55 %	54,56 %
DDGS		34,91 %	30,62 %	33,49 %	30,85 %	34,56 %	30,62 %	33,74 %	33,78 %
Óleo		12,39 %	10,72 %	11,84 %	10,81 %	12,25 %	10,72 %	11,71 %	11,66 %

^a AA+GA é a soma das quantidades de α -amilase e de glicoamilase.

^b “Insumos” são a somas das quantidades de amônia, hidróxido de sódio, óxido de cálcio e ácido sulfúrico.

Fonte: autor (2025).

5.4. Análise de sensibilidade

De posse das condições otimizadas dos cenários, foi possível avaliar o impacto na simulação causado por algumas variáveis chave definidas. Para isso, foram analisadas variáveis relacionadas à cinética (concentração final de etanol, PV, tempo de ciclo, tempo das operações, número de ciclos), aos indicadores técnicos (rendimento, quantidade de etanol por ciclo, quantidade de etanol total, quantidades de DDGS e de óleo de milho) e aos indicadores econômicos (custos, receitas e saldo). As Figura 49, Figura 50, Figura 51 e Figura 52 exibem os resultados da análise de sensibilidade para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, nessa ordem, na condição otimizada. Vale ressaltar que, conforme definido na seção da metodologia (seção 4.5), as variáveis de saída que não fossem impactadas pela variação da variável de entrada, não foram plotadas. Ou seja, todas as variáveis de saída listadas foram analisadas a cada perturbação da variável de entrada, mas somente aquelas variáveis de saída que variaram foram plotadas. Isso indicou que, se a variável de saída não foi plotada, então ela não foi afetada pela perturbação daquela variável de entrada.

Inicialmente, nota-se que as variações das concentrações iniciais de amido, das enzimas e das células, que foram usadas como variáveis de busca na otimização, impactam a maioria das variáveis do processo, conforme Figura 49 (a-d), Figura 50 (a-d), Figura 51 (a-d) e Figura 52 (a-d), excetuando a quantidade de milho processado (que foi fixada na otimização), e a quantidade de óleo, o custo com insumos e os custos logísticos (estoque e transporte do milho), que são calculados em função da quantidade de milho, o que justifica o fato da sua não variação. Isso indica que a simulação se mostra muito sensível às variáveis de busca, o que indica que a escolha dessas variáveis, na otimização, foi propícia. Em todos os cenários, a simulação se mostra mais sensível à variação da concentração inicial de amido do que dos demais componentes. Esse resultado já era esperado, posto que a concentração de amido está relacionada a mais variáveis de processo do que a concentração inicial dos demais componentes, e está de acordo com o reportado por Kwiatkowski *et al.* (2006).

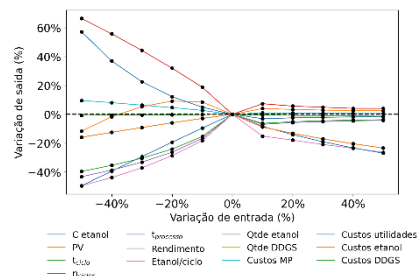
Ademais, vale ressaltar que o n_{ciclos} e a quantidade de etanol por ciclo se mostram como as variáveis de saída mais impactadas pela variação das concentrações iniciais

dos componentes, e o t_{ciclo} também é impactado, mas em menor proporção. Isso ocorre porque, quando se diminui as concentrações iniciais de amido, das enzimas e das células, há uma menor produção de etanol por ciclo, o t_{ciclo} reduz em proporção menor que o n_{ciclo} , mas suficientemente para aumentar essa variável. Essa estratégia permite avaliar se é mais rentável produzir etanol por mais vezes e numa quantidade menor, com menores concentrações desses componentes. No entanto, os resultados da simulação realizada no presente trabalho permitem concluir que variações dessas variáveis de busca, nas redondezas do ponto ótimo, geram resultados de saldo abaixo do ótimo encontrado, como visto na Figura 53. Mas há algumas exceções encontradas no cenário SSF e na variação da concentração de células.

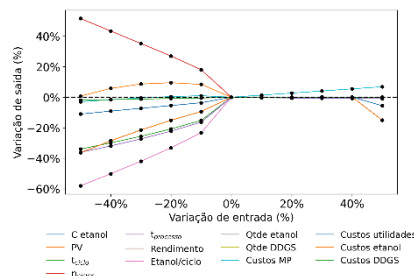
Como visto nas Figura 53 a e b, o aumento da concentração inicial de amido e a diminuição da concentração inicial de α -amilase gera o aumento do saldo no cenário SSF. Entretanto, essa configuração está fora da região de busca definida no problema de otimização do presente trabalho, como exibido na Tabela 17. Essas regiões foram definidas para manter a simulação dentro da região tecnicamente viável; isto é, operar a usina em condições muito altas de concentração inicial de amido ou muito baixas de α -amilase não se mostraram viáveis, por isso essa possibilidade não foi considerada. Além disso, a Figura 53 d mostra que a diminuição da concentração inicial de células, nos cenários LSF, SLSF e LSSF também geraria o aumento do saldo, mas esses resultados vão ao encontro do explicado anteriormente.

Figura 49. Relação da variação da variável de saída em função da variável de entrada, para o cenário LSF otimizado. As variáveis de entrada foram: a) $C_{amido,0}$, b) $C_{amilase,0}$, c) $C_{glicoamilase,0}$, d) $C_{células,0}$, e) preço do etanol, f) preço do DDGS, g) preço do óleo, h) preço do milho, i) preço das células, j) preço da α -amilase, k) preço da glicoamilase, l) preço da eletricidade, m) preço do vapor, n) preço da água de resfriamento, o) preço da água de processo, p) n° de dornas, q) volume das dornas e r) quantidade de milho processado por dia.

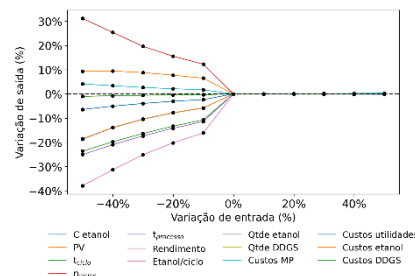
a) $C_{amido,0}$



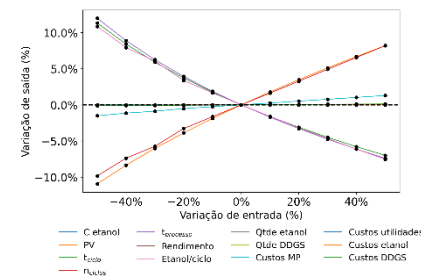
b) $C_{amilase,0}$



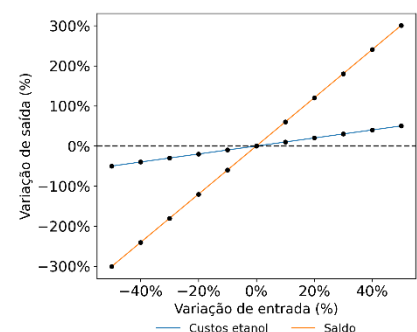
c) $C_{glicoamilase,0}$



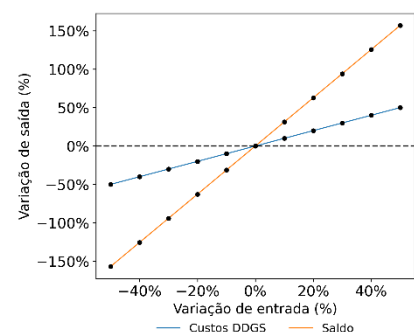
d) $C_{células,0}$



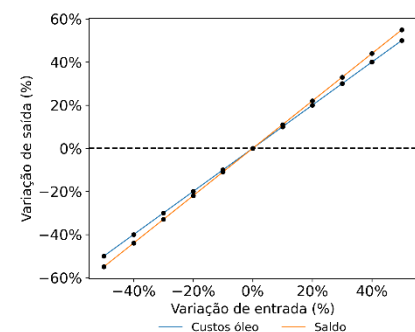
e) preço do etanol



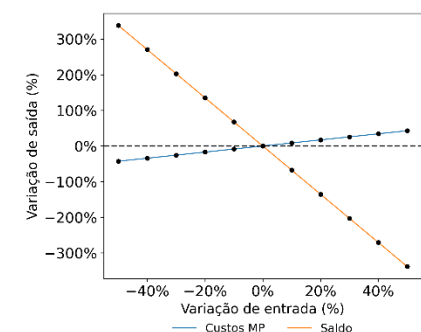
f) preço do DDGS



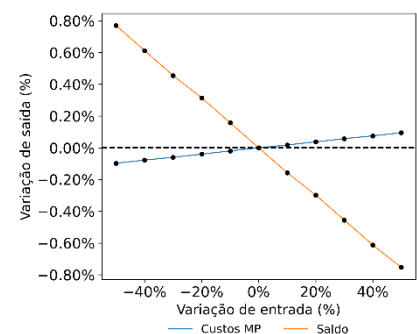
g) preço do óleo



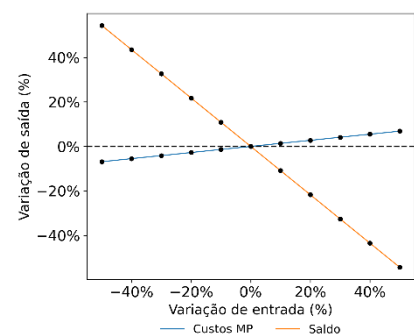
h) preço do milho



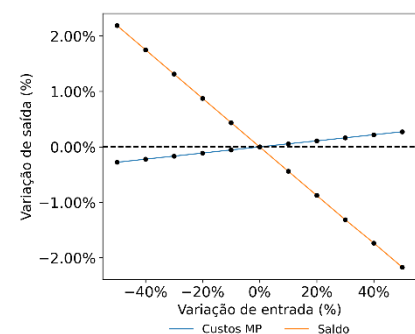
i) preço das células



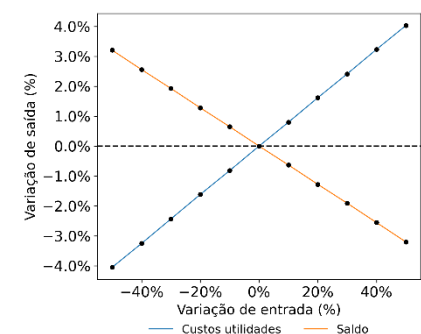
j) preço da α -amilase



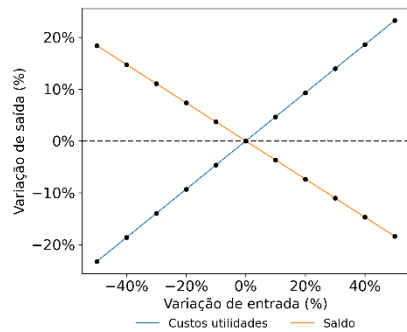
k) preço da glicoamilase



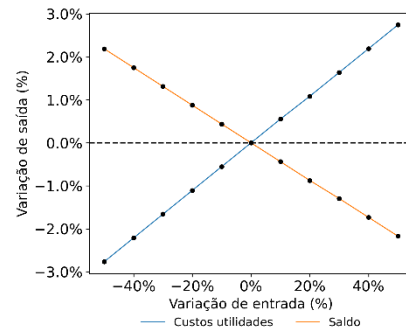
l) preço da eletricidade



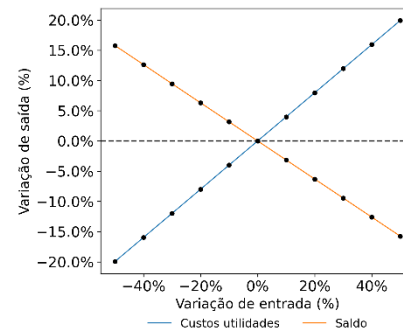
m) preço do vapor



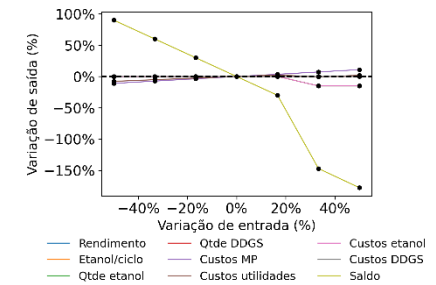
n) preço da água de resfriamento



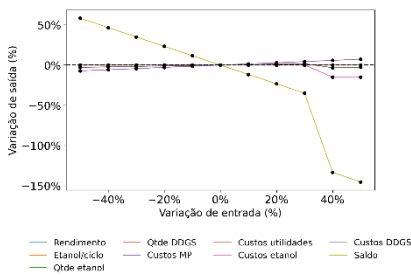
o) preço da água de processo



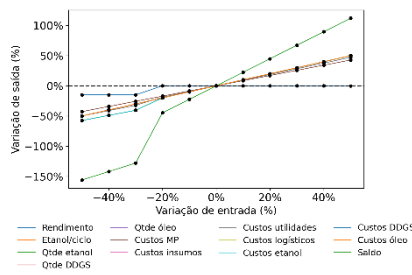
p) número de dornas



q) volume de dornas



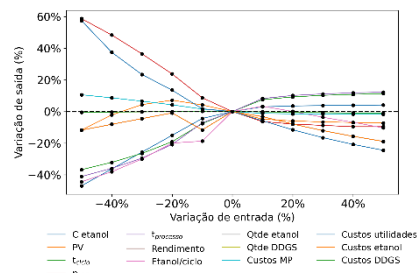
r) quantidade de milho processado por dia



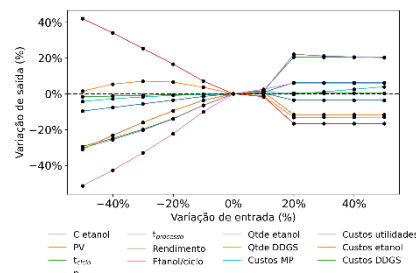
Fonte: autor (2025).

Figura 50. Relação da variação da variável de saída em função da variável de entrada, para o cenário SLSF otimizado. As variáveis de entrada foram: a) $C_{amido,0}$, b) $C_{amilase,0}$, c) $C_{glicoamilase,0}$, d) $C_{células,0}$, e) preço do etanol, f) preço do DDGS, g) preço do óleo, h) preço do milho, i) preço das células, j) preço da α -amilase, k) preço da glicoamilase, l) preço da eletricidade, m) preço do vapor, n) preço da água de resfriamento, o) preço da água de processo, p) n° de dornas, q) volume das dornas e r) quantidade de milho processado por dia.

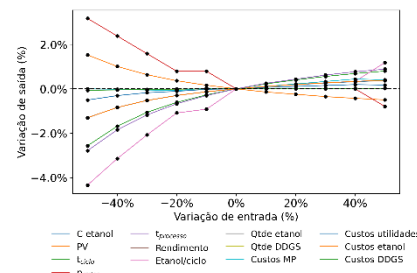
a) $C_{amido,0}$



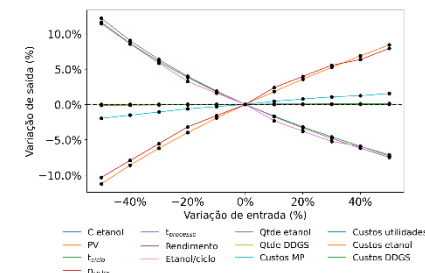
b) $C_{amilase,0}$



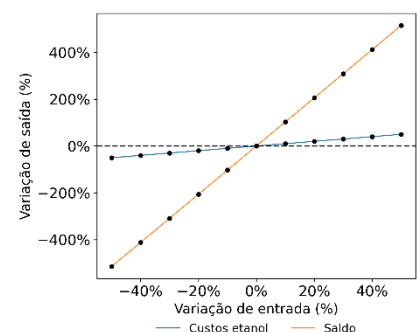
c) $C_{glicoamilase,0}$



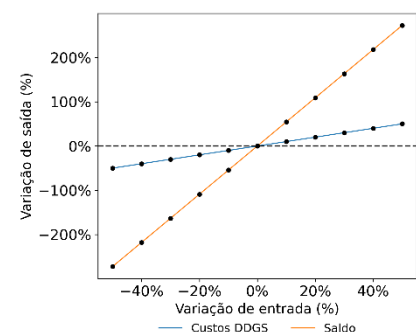
d) $C_{células,0}$



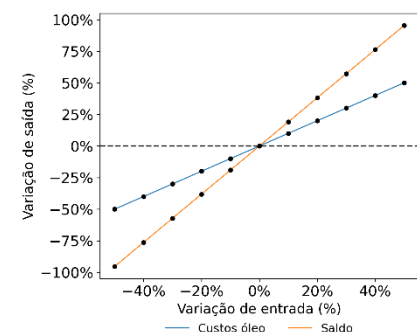
e) preço do etanol



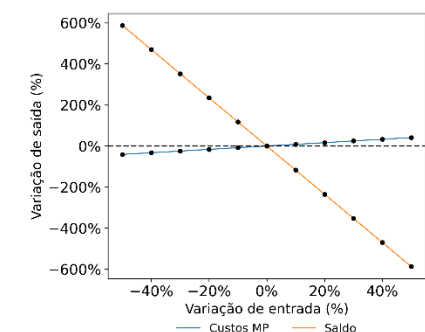
f) preço do DDGS



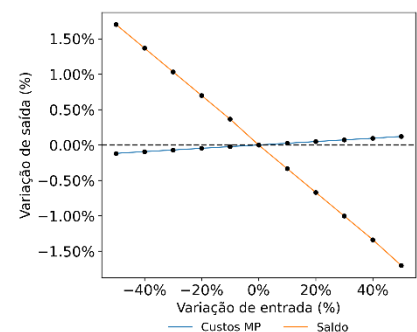
g) preço do óleo



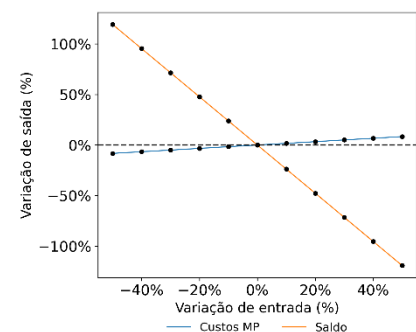
h) preço do milho



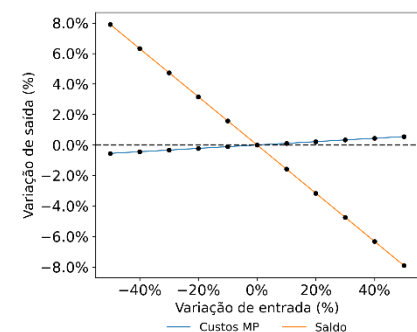
i) preço das células



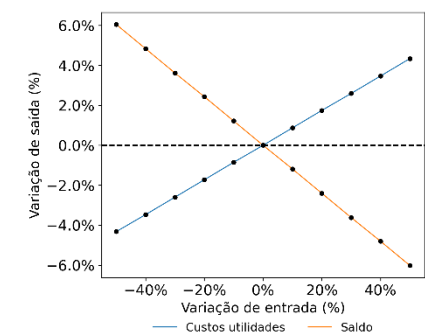
j) preço da α -amilase



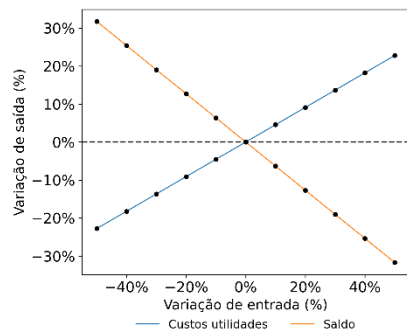
k) preço da glicoamilase



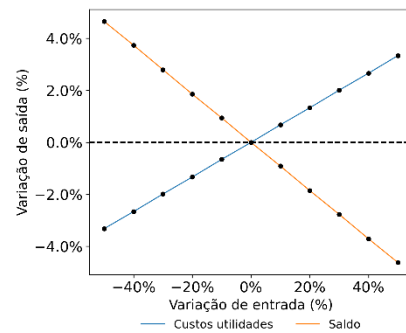
l) preço da eletricidade



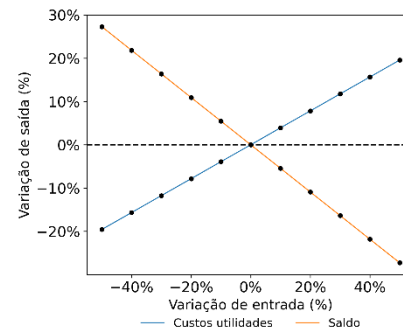
m) preço do vapor



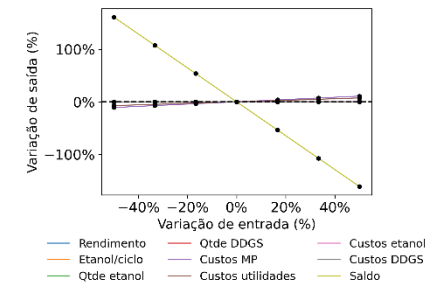
n) preço da água de resfriamento



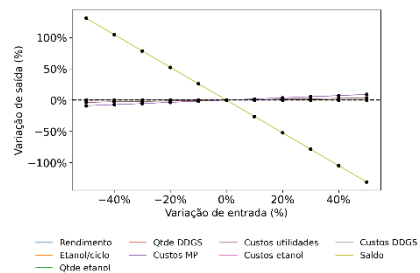
o) preço da água de processo



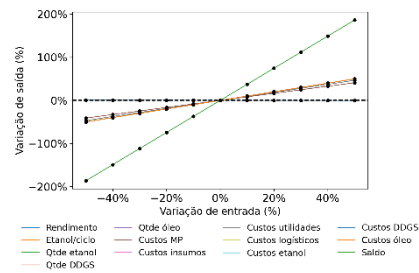
p) número de dornas



q) volume das dornas



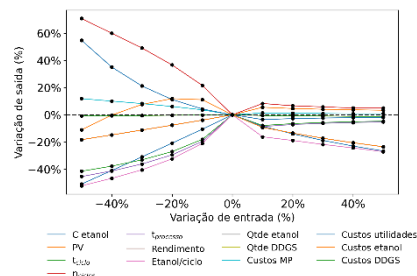
r) quantidade de milho processado por dia



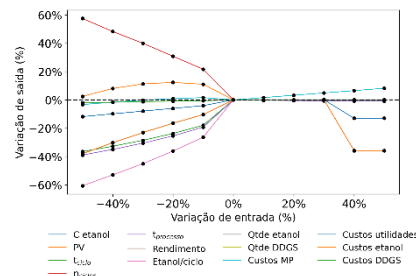
Fonte: autor (2025).

Figura 51. Relação da variação da variável de saída em função da variável de entrada, para o cenário LSSF otimizado. As variáveis de entrada foram: a) $C_{amido,0}$, b) $C_{amilase,0}$, c) $C_{glicoamilase,0}$, d) $C_{células,0}$, e) preço do etanol, f) preço do DDGS, g) preço do óleo, h) preço do milho, i) preço das células, j) preço da α -amilase, k) preço da glicoamilase, l) preço da eletricidade, m) preço do vapor, n) preço da água de resfriamento, o) preço da água de processo, p) n° de dornas, q) volume das dornas e r) quantidade de milho processado por dia.

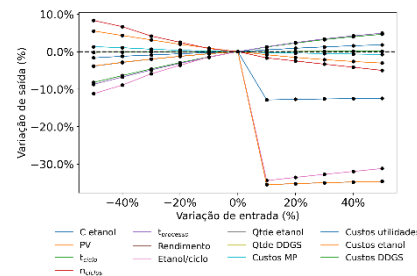
a) $C_{amido,0}$



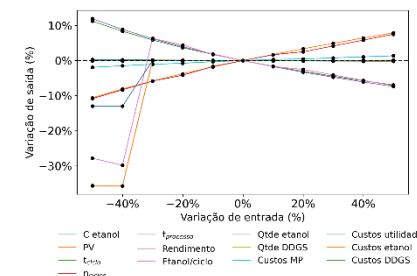
b) $C_{amilase,0}$



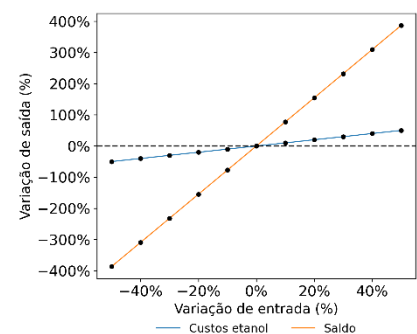
c) $C_{glicoamilase,0}$



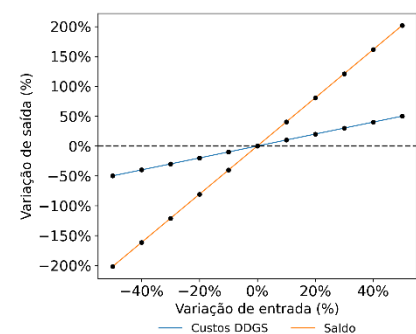
d) $C_{células,0}$



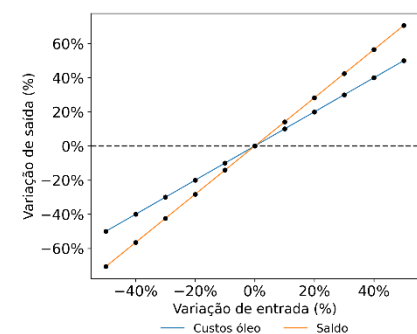
e) preço do etanol



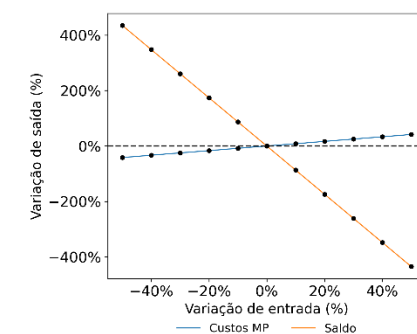
f) preço do DDGS



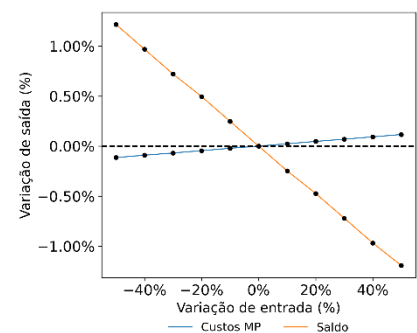
g) preço do óleo



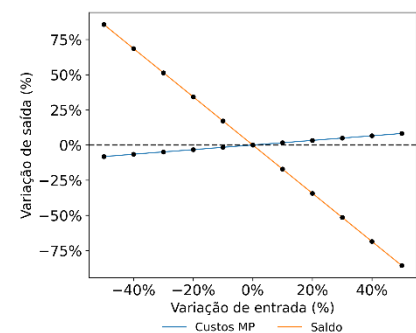
h) preço do milho



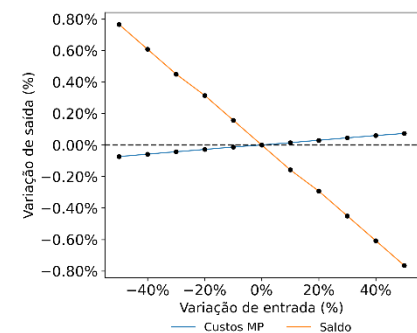
i) preço das células



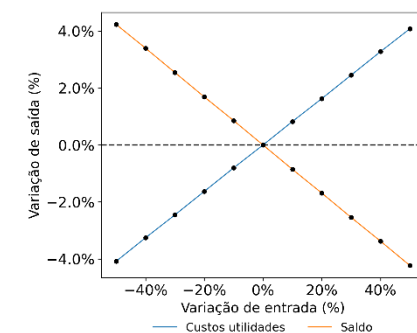
j) preço da α -amilase



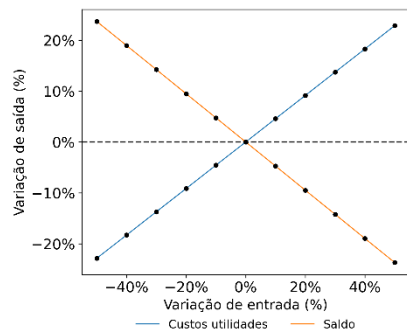
k) preço da glicoamilase



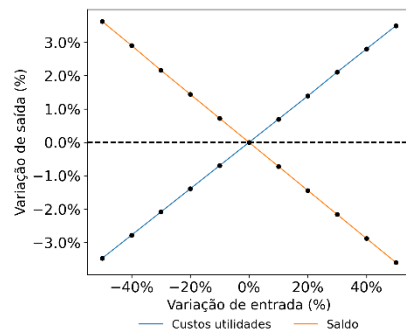
l) preço da eletricidade



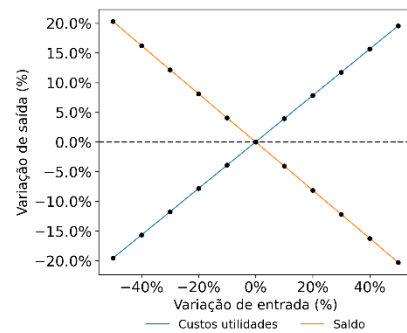
m) preço do vapor



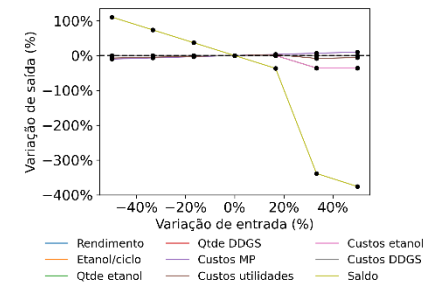
n) preço da água de resfriamento



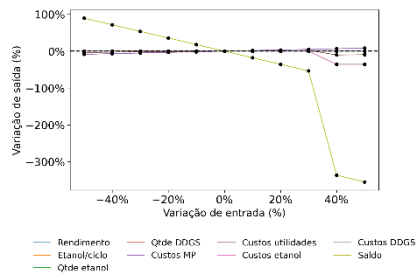
o) preço da água de processo



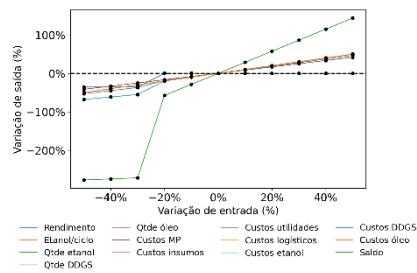
p) número de dornas



q) volume das dornas



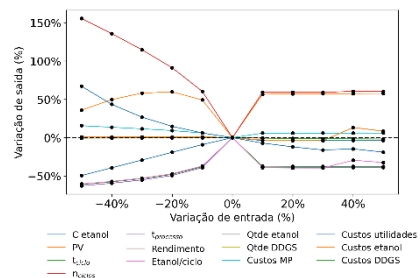
r) quantidade de milho processado por dia



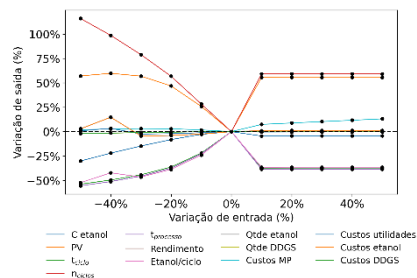
Fonte: autor (2025).

Figura 52. Relação da variação da variável de saída em função da variável de entrada, para o cenário SSF otimizado. As variáveis de entrada foram: a) $C_{amido,0}$, b) $C_{amilase,0}$, c) $C_{glicoamilase,0}$, d) $C_{células,0}$, e) preço do etanol, f) preço do DDGS, g) preço do óleo, h) preço do milho, i) preço das células, j) preço da α -amilase, k) preço da glicoamilase, l) preço da eletricidade, m) preço do vapor, n) preço da água de resfriamento, o) preço da água de processo, p) n° de dornas, q) volume das dornas e r) quantidade de milho processado por dia.

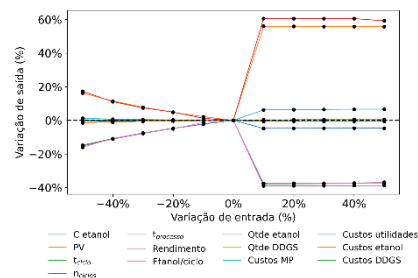
a) $C_{amido,0}$



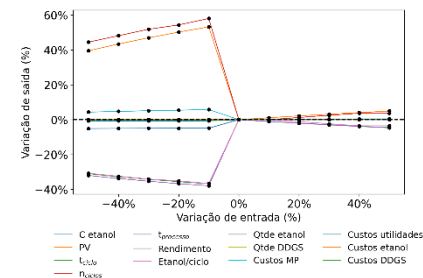
b) $C_{amilase,0}$



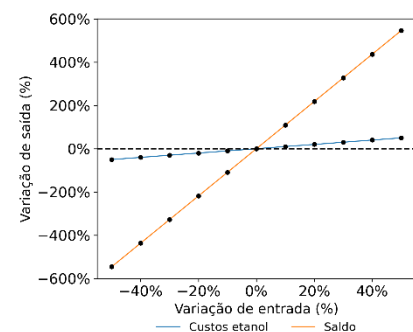
c) $C_{glicoamilase,0}$



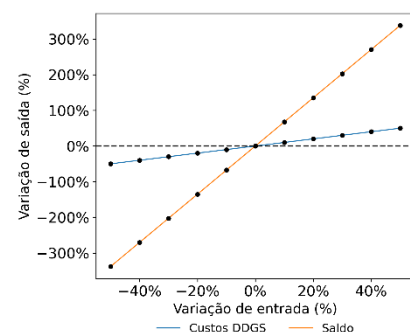
d) $C_{células,0}$



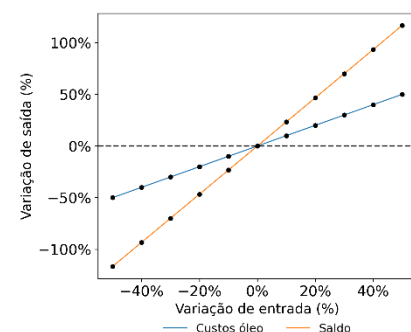
e) preço do etanol



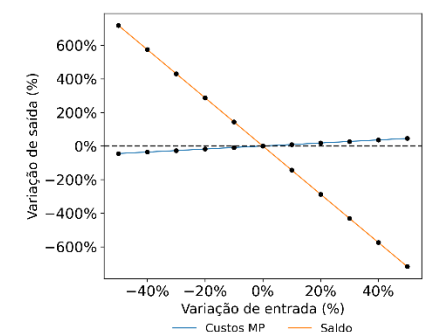
f) preço do DDGS



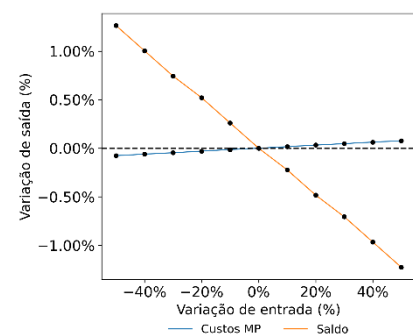
g) preço do óleo



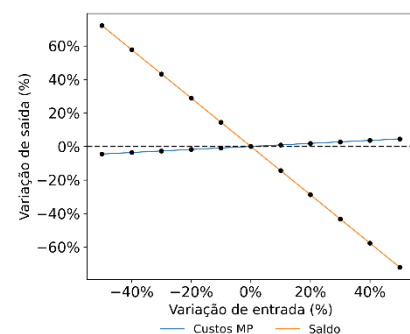
h) preço do milho



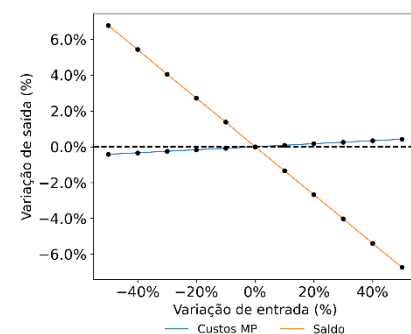
i) preço das células



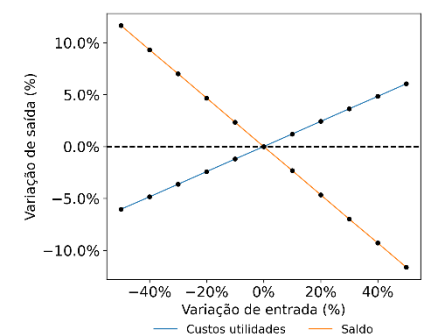
j) preço da α -amilase



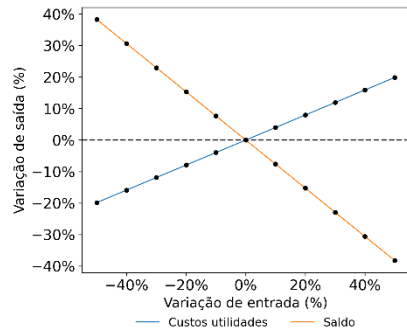
k) preço da glicoamilase



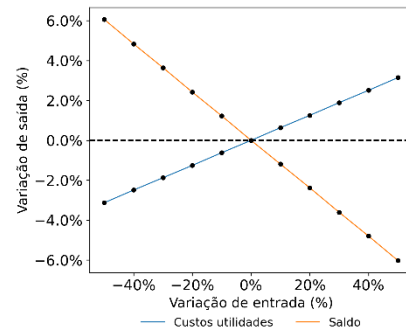
l) preço da eletricidade



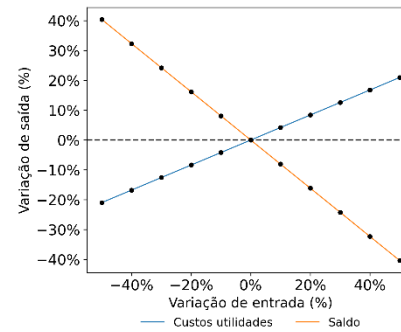
m) preço do vapor



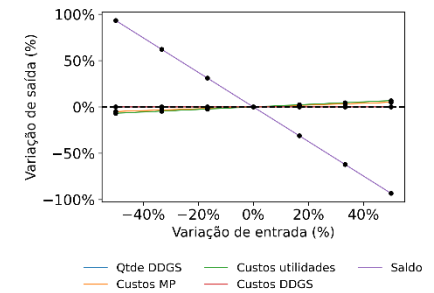
n) preço da água de resfriamento



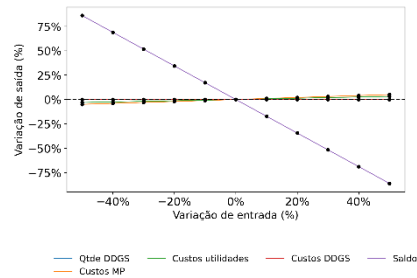
o) preço da água de processo



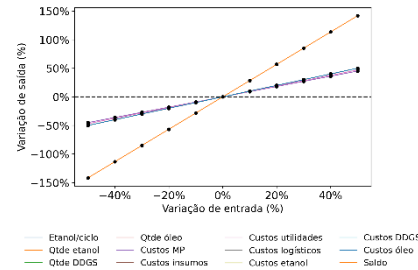
p) número de dornas



q) volume das dornas



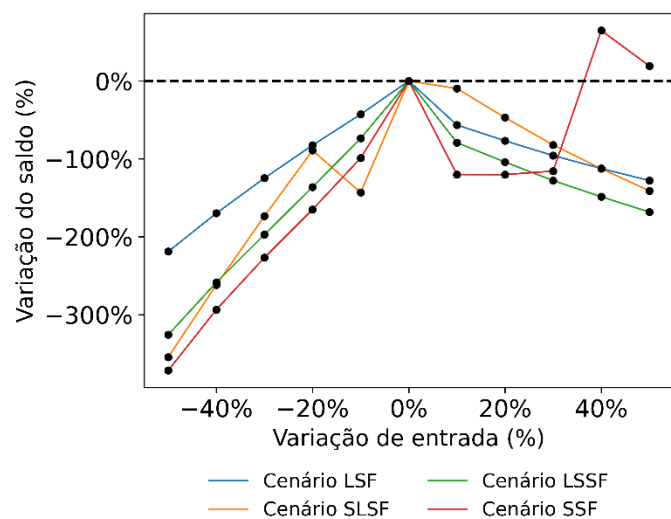
r) quantidade de milho processado por dia



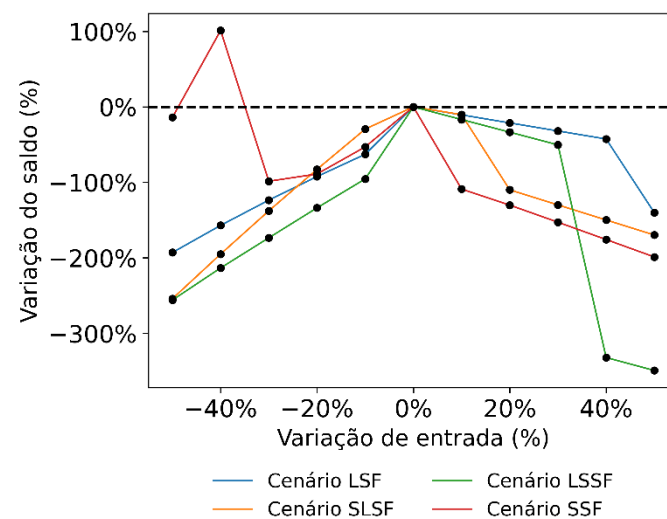
Fonte: autor (2025)

Figura 53. Relação da variação do saldo em função da variação da $C_{amido,0}$ (a), da $C_{amilase,0}$ (b), da $C_{glicoamilase,0}$ (c) e da $C_{células,0}$ (d) nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados.

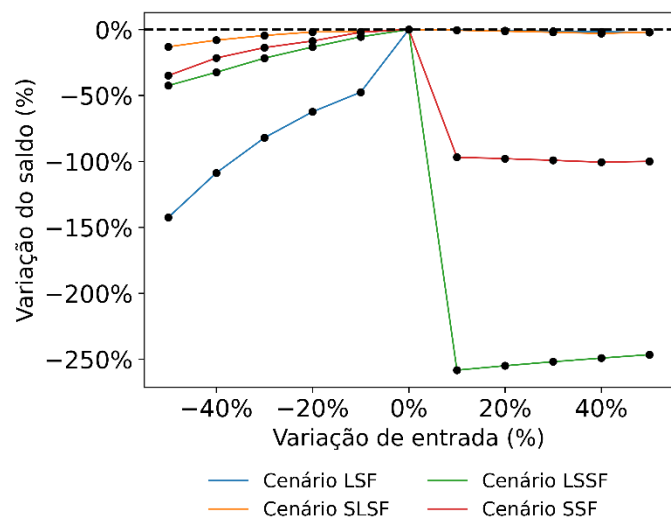
a) $C_{amido,0}$



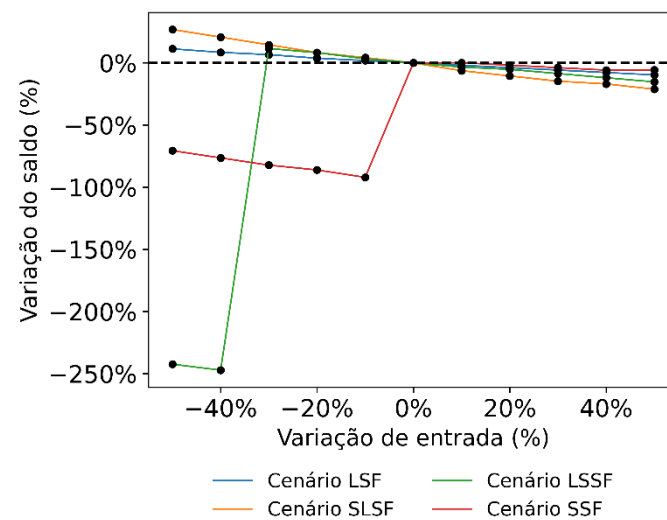
b) $C_{amilase,0}$



c) $C_{glicoamilase,0}$



d) $C_{células,0}$



Fonte: autor (2025).

Quanto às variações dos preços dos produtos (etanol, DDGS e óleo de milho), notou-se que as simulações foram mais sensíveis no caso do etanol, como já esperado, posto que esse produto é responsável por aproximadamente 60% da receita total. O cenário SSF se mostrou o mais sensível frente à essas variações. Isso ocorre porque esse cenário possui o menor saldo, dentre os demais; portanto, uma pequena variação na sua receita, seja com etanol, DDGS ou óleo, gera maior aumento do saldo.

As variações dos preços das matérias-primas são apresentadas nas Figura 49, Figura 50, Figura 51 e Figura 52 (h – milho, i – células, j – α -amilase e k - glicoamilase). Como já esperado, os resultados da simulação se mostram mais sensíveis frente ao preço do milho do que aos preços das demais MPs. O cenário SSF foi o mais afetado pela variação do preço dessa MP, que é entendido pelo fato desse cenário possuir o maior percentual do custo do milho em relação ao $\text{Custos}_{\text{MP}}$ (89%). Dentre as enzimas, o preço da α -amilase se mostra mais relevante na variação do saldo dos cenários simulados, o que é justificado diante da sua quantidade em comparação com a de glicoamilase.

A simulação apresentou baixa sensibilidade frente ao preço das células, com variação máxima de $\pm 1,5\%$ do saldo para o cenário SLSF (Figura 50 i). Esse resultado decorreu da baixa contribuição do custo dessa matéria-prima frente ao custo total dos cenários otimizados e, por conseguinte, do saldo total. No presente trabalho, o custo com células representou, no máximo, 0,24% do $\text{Custos}_{\text{MP}}$, resultado do cenário SLSF, enquanto Oliveira e Cruz (2023) obtiveram resultados nos quais o custo com células representou entre 1 e 4% dos $\text{Custos}_{\text{MP}}$. Os resultados de Kwiatkowski *et al.* (2006) informaram que o custo com células por volume de etanol foi de $0,0727 \text{ R}\$\cdot\text{L}^{-1}$, enquanto no presente trabalho esse valor foi, em média, de $0,01 \text{ R}\$\cdot\text{L}^{-1}$. Essas comparações indicam que o custo de células, obtido no presente trabalho, está abaixo do reportado pela literatura. Por outro lado, de acordo com Kwiatkowski *et al.* (2006), a quantidade de células por unidade de mosto é de $0,008\% \text{ g}\cdot\text{g}^{-1}$. No presente trabalho, os cenários otimizados apresentaram, para o mesmo indicador, os valores de 0,0087, 0,0112, 0,0107 e $0,0057 \text{ g}\cdot\text{g}^{-1}$, para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, nessa ordem. Ou seja, as quantidades de células usadas nos cenários estão próximas (em alguns casos acima) do

valor da literatura. Essa observação indica, portanto, que a baixa sensibilidade da simulação frente ao preço das células decorre de outros fatores, que não são as quantidades dessa matéria-prima, definidas pelas concentrações iniciais de células, obtidas da otimização.

Quanto à sensibilidade dos modelos variando os custos das utilidades, os resultados entre os cenários foram próximos, conforme pode ser visto na Figura 49, Figura 50, Figura 51 e Figura 52 (l – eletricidade, m – vapor, n – água de resfriamento e o – água de processo). As variações dos preços de vapor e de água de processo causaram maiores sensibilidades nas simulações: maiores aumento do $Custos_{UT}$ e redução do saldo. Nota-se, ainda, que o cenário SSF se mostrou o mais sensível, o que se entende diante do fato desse cenário apresentar maior percentual do $Custos_{UT}$ frente ao custo total (10%), mas vale ressaltar que esse percentual ficou próximo para todos os cenários (9% para o LSF e o LSSF, e 8% para o SLSF).

As análises presentes na Figura 49, Figura 50, Figura 51 e Figura 52 (p – n_{dornas} , q – volume das dornas e r – quantidade de milho processado por dia) foram feitas para avaliar o comportamento da simulação com a variação de parâmetros técnicos. Inicialmente, nota-se que, na análise dessas três variáveis de entrada, diversas variáveis de saída são perturbadas, indicando que a alteração da quantidade de dornas, do volume de cada uma e da quantidade de milho processado afeta diretamente nos resultados apresentados nessa seção. A escolha de avaliar a sensibilidade da simulação frente à essas três variáveis se deram pela análise de simulações prévias.

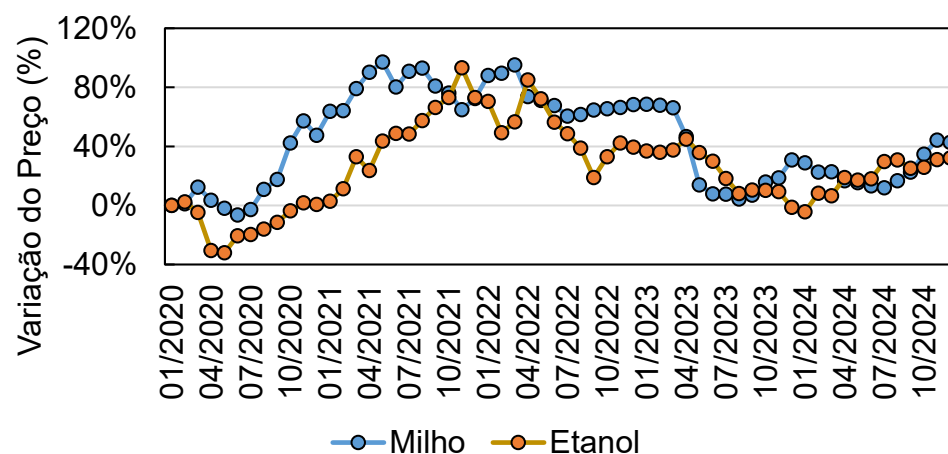
A variação do n_{dornas} afeta o diagrama de ocupação de dornas de cada cenário, mas não afeta variáveis como t_{ciclo} e n_{ciclos} , isso pode ser observado pela ausência dessas variáveis na Figura 49 p, Figura 50 p, Figura 51 p e Figura 52 p. De acordo com a simulação realizada no presente trabalho, o aumento ou a diminuição da quantidade de dornas irá afetar apenas as dornas destinadas para a fermentação. Assim, o acréscimo de uma dorna não resultará no aumento da produção de etanol, pois essa variável está limitada pela quantidade de milho processada (fixada em $1100 \text{ ton} \cdot \text{dia}^{-1}$) e por fatores cinéticos. No entanto, as quantidades de MPs são calculadas em função de suas concentrações, logo se relacionado com a quantidade das dornas e o volume de cada

uma, afetando o saldo da maneira como exibida as figuras mencionadas. Quanto à quantidade de milho processada, seu aumento provoca o crescimento do valor de todas as variáveis de saída que não se relacionam com a cinética dos processos, como concentração de etanol e produtividade volumétrica. Ou seja, o aumento da quantidade de milho processado gera o aumento dos indicadores econômicos e do saldo, em todos os casos, permitindo concluir que o aumento das receitas supera o aumento dos custos.

A análise de sensibilidade permitiu verificar que as variáveis externas que mais impactam os indicadores econômicos da simulação são o preço do etanol (destaque para o cenário SSF com variação de $\pm 600\%$ do saldo), o preço do DDGS (destaque para o cenário SSF com variação de $\pm 300\%$ do saldo) e o preço do milho (destaque para os cenários SLSF e SSF com variações de $\pm 600\%$ do saldo). Essa alta sensibilidade da simulação à fatores externos pode se mostrar uma ameaça a essa indústria.

A Figura 54 exibe o histórico da variação dos preços de etanol e de milho no Brasil entre o período de janeiro de 2020 a dezembro de 2024, tendo como referência o preço desses produtos em janeiro de 2020 (para o milho, foi considerado o preço da saca de 60kg e o uso do indicador do *Milho ESALQ/BM&FBovespa*; para o etanol foi considerado o preço por litro do etanol anidro no estado de São Paulo, e o indicador *CEPEA/ESALQ – São Paulo*). Com base nessa figura, nota-se que os preços do milho e do etanol variam consideravelmente ao longo do tempo, com variações máximas de 97 e 93% para o milho e o etanol, respectivamente. Não foi encontrado histórico de preços de DDGS no Brasil, mas os dados de Langemeier (2022) permitiram concluir que a variação do preço desse produto nos Estados Unidos, no período entre 2007 e 2021, teve variação máxima de 114% em relação ao preço reportado em 2007.

Figura 54. Variação dos preços de etanol e de milho no Brasil em relação ao preço de janeiro de 2020 até dezembro de 2024.



Fonte: adaptado de CEPEA (2025).

Vale ressaltar que a análise de sensibilidade feita no presente trabalho variou esses parâmetros em $\pm 50\%$ do seu preço base, enquanto os dados do mercado mostram variações próximas de 100% em 4 anos para o milho e o etanol, e 14 anos para o DDGS. Diante disso, pode-se concluir que os resultados da análise de sensibilidade obtidos mostram uma “ameaça” econômica ao mercado da produção de etanol de milho.

6. CONCLUSÕES

O presente trabalho visou modelar as etapas de liquefação, sacarificação e fermentação presentes no processo de etanol de milho com o intuito de simular o funcionamento de uma usina *full* nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF. Após isso, a usina foi otimizada variando as concentrações de amido, das enzimas e das células visando maximizar o saldo da planta, em cada cenário. Por fim, a sensibilidade da simulação frente à variáveis-chave foi analisada. Para isso, foram implementados algoritmos em *Python* e dados da literatura.

A modelagem cinética dos processos permitiu a estimativa da concentração dos componentes ao longo do tempo, bem como definir os tempos desses processos. O cenário SSF obteve a maior concentração de etanol ($\sim 96 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$), mas demandou maior tempo total de operação ($\sim 66 \text{ h}$). Quanto à incerteza do valor da concentração final de etanol, o Método de Monte Carlo foi usado e o cenário SLSF apresentou maior valor de desvio padrão ($\sim 7,5\%$ do valor médio). Os indicadores da simulação inicial ficaram próximos aos da literatura, permitindo validar a simulação usada na otimização (desvios de 2-5% na quantidade de DDGS, 5% no rendimento industrial, 9% no consumo da eletricidade etc.), com desvio maior para a quantidade de água simulada (desvio de 50%).

Na otimização, as concentrações iniciais do amido, da α -amilase e das células aumentaram, com destaque para a última, com aumento de aproximadamente 217%. No caso da glicoamilase, só houve aumento no cenário SLSF. O saldo aumentou em todos os cenários, com destaque para o cenário LSF, que saiu de -R\$ 6,54 milhões para R\$ 57,11 milhões no ano.

As condições otimizadas resultaram no aumento dos tempos dos processos de liquefação (L), sacarificação (S) e fermentação (F), com destaque para o processo S do cenário LSF com aumento de 63%. A exceção foi para o processo L+S do cenário SLSF, que teve redução de 8%. As concentrações finais de etanol aumentaram em todos os cenários, com destaque para o cenário LSF, com o aumento de 71%. A PV diminuiu no cenário SSF (redução de 20%), mas aumentou nos demais cenários, destaque para o cenário LSF, com aumento de 41%. Com a otimização, houve o aumento do tempo de

ciclo (maior aumento no cenário SSF de 48%) e a redução do número de ciclos (menor diminuição no cenário SSF de 33%).

Os custos laborais foram maiores para o cenário LSF. Quanto às utilidades, os custos com vapor e água de processo foram os destaques, correspondendo a 44 e 41% do custo total com utilidades, respectivamente. Os custos com matérias-primas foi o mais representativo, correspondendo a 86% do custo total, enquanto o milho correspondeu a 85% dos custos com matérias-primas, em média. Quanto às receitas, a quantidade de etanol produzido aumentou em todos os cenários, com destaque para o cenário LSF (aumento de 29%). O rendimento de produção de etanol ficou próximo ao encontrado na literatura e sua receita correspondeu a 58% da receita total, em média. A receita de DDGS foi altamente representativa, apesar de ele ser um coproduto (média 31%). A receita total aumentou em todos os cenários. Assim, o saldo aumentou em todos os casos, após a otimização. No cenário SSF, a estratégia da otimização foi a redução dos custos.

A análise de sensibilidade indicou que as variáveis usadas como variáveis de busca na otimização impactam a maioria dos indicadores do processo simulado, apontando que a escolha dessas variáveis na otimização foi propícia. Dentre os resultados obtidos, pôde-se observar que a simulação se mostrou mais sensível frente às variações do preço do etanol, do preço do DDGS, do preço do milho, do número de dornas disponíveis para a fermentação e da quantidade de milho processada por dia. Vale ressaltar que as três primeiras variáveis não podem ser controladas pois são elementos externos.

Com esses resultados, o presente trabalho simulou e otimizou os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF do processo de etanol de milho, utilizando equações cinéticas dos processos de liquefação, sacarificação e fermentação. Foi possível estudar as condições ótimas de uma usina simulada em distintas configurações, através da linguagem Python. Por fim, foi visto que, após a otimização, o cenário SSF apresentou melhores resultados relacionados à cinética de hidrólise (99,99% de amido hidrolisado) e SLSF quanto à cinética de fermentação (PV de $1,83 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$). Os cenários LSF e LSSF apresentaram maiores receitas de etanol (R\$ 343,4 milhões por ano), e o SSF menor custo total (R\$ 511,4 milhões no ano).

7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para trabalhos futuros, sugere-se o incremento de mais detalhes à simulação, realize a estimativa de custos de capitais na análise econômica e melhore a simulação numérica considerando:

- A utilização de parâmetros cinéticos das hidrólises estimados nas temperaturas dos processos simultâneos;
- A variação da capacidade calorífica das correntes nos cálculos de troca térmica dos trocadores de calor;
- A estimativa do CAPEX (*Capital Expenditure* ou Despesas de Capital) para a simulação inicial e como esse fator é impactado após a otimização;
- A avaliação do impacto da otimização no VPL (valor presente líquido) e no tempo de *payback* da usina simulada;
- A otimização da estratégia de ocupação de dornas para minimizar o tempo de ociosidade entre as operações;
- O estudo e a implementação de uma estratégia de cogeração e reaproveitamento energético na simulação;
- A utilização de meta-modelos para tornar o processamento da simulação mais rápido;
- A implementação da Análise de Sensibilidade Global na simulação realizada; e
- A implementação da Avaliação do Ciclo de Vida na simulação inicial e otimizada, visando avaliar a diferença dos impactos ambientais.

8. REFERÊNCIAS

- ABEDI, Daryoush *et al.* 1.03-Enzyme Biocatalysis. **Comprehensive biotechnology (second edition)**, p. 15-24, 2011. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-088504-9.00111-2>.
- ABEDI, Elehe *et al.* Which one is important to achieve maximum degree of hydrolysis, starch pre-treatment or activated α -amylase: kinetics and mathematical modeling for liquefaction. **Journal of Food Measurement and Characterization**, v. 17, n. 5, p. 4938–4953, 2023. <https://doi.org/10.1007/s11694-023-01995-5>.
- ALCANTARA, Giovanni *et al.* Brazilian “flex mills”: ethanol from sugarcane molasses and corn mash. **BioEnergy research**, v. 13, p. 229–236, 2020. <https://doi.org/10.1007/s12155-019-10052-3>.
- ALMEIDA, Leticia P. *et al.* Heat transfer evaluation for conventional and extractive ethanol fermentations: Saving cooling water. **Journal of Cleaner Production**, v. 304, p. 127063, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.127063>.
- ANDRIETTA, Silvio. **Optimal Industrial Fermentation**. 2009. Disponível em: https://fapesp.br/eventos/2009/09/10_bioen/Silvio_Roberto.pdf. Acessado em janeiro de 2025.
- ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Painéis dinâmicos: produtores de etanol**. 2024. Disponível em: <https://app.powerbi.com/view?r=eyJrljoiMmRhZWU2NDUtZWE2Yi00NzI5LWJjMGQtNjIwNjE0MjM0MjEzIiwidCI6IjQ0OTImNGZmLTl0YTYtNGI0Mi1iN2VmLTExNGFmY2FkYzIxMyJ9>. Acessado em janeiro de 2025.
- ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Resolução ANP nº 907, de 18 de novembro de 2022**. Dispõe sobre as especificações do etanol combustível e suas regras de comercialização em todo o território nacional. Atos Oficiais, 2022. Disponível em: <https://atosoficiais.com.br/anp/resolucao-n-907-2022-dispoe-sobre-as-especificacoes-do-etanol-combustivel-e-suas-regras-de-comercializacao-em-todo-o-territorio-nacional?origin=instituicao>. Acesso em janeiro de 2025.
- ASPENTECH. Aspen Plus – Aspen Plus Bioethanol from Corn Model. 2017.

AZEVEDO, Rafaella Eloisa Candido *et al.* Deterioração de variedades de cana-de-açúcar e influência na produção de bioetanol. **Revista Ibero-Americana de Ciências Ambientais**, 2018. <https://doi.org/10.6008/CBPC2179-6858.2018.007.0022>.

BASSO, Luiz Carlos *et al.* Ethanol production in Brazil: the industrial process and its impact on yeast fermentation. **Biofuel production-recent developments and prospects**, v. 1530, n. 3, p. 85-100, 2011. <https://doi.org/10.5772/17047>.

BCB – Banco Central do Brasil. **Inflação**. 2024. Disponível em: <https://www.ibge.gov.br/explica/inflacao.php>. Acessado em setembro de 2024.

BHAGAVAN, Nadhipuram. V. Chapter 6 - enzymes i: General properties, kinetics, and inhibition. In: **Medical Biochemistry (Fourth Edition)**. San Diego: Academic Press, 2002. p. 85–108. <https://doi.org/10.1016/B978-012095440-7/50008-1>.

BIAŁAS, Wojciech; CZERNIAK, Adrian; SZYMANOWSKA-POWAŁOWSKA, Daria. Kinetic modeling of simultaneous saccharification and fermentation of corn starch for ethanol production. **Acta Biochimica Polonica**, v. 61, n. 1, 2014. https://doi.org/10.18388/abp.2014_1938.

BIROL, Gülnur *et al.* Mathematical description of ethanol fermentation by immobilised *Saccharomyces cerevisiae*. **Process Biochemistry**, v. 33, n. 7, p. 763-771, 1998. [https://doi.org/10.1016/S0032-9592\(98\)00047-8](https://doi.org/10.1016/S0032-9592(98)00047-8).

BOTHAST, R. J.; SCHLICHER, M. A. Biotechnological processes for conversion of corn into ethanol. **Applied microbiology and biotechnology**, v. 67, n. 1, p. 19-25, 2005. <https://doi.org/10.1007/s00253-004-1819-8>.

CEPEA - Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada. **CONSULTAS AO BANCO DE DADOS DO SITE**. 2025. Disponível em: <https://www.cepea.org.br/br/consultas-ao-banco-de-dados-do-site.aspx>. Acessado em julho de 2025.

CEPEA - Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada. **ETANOL**. 2024b. Disponível em: <https://www.cepea.esalq.usp.br/br/indicador/etanol.aspx>. Acessado em setembro de 2024.

CEPEA - Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada. **MILHO**. 2024a. Disponível em: <https://www.cepea.esalq.usp.br/br/indicador/milho.aspx>. Acessado em setembro de 2024.

CFS – Committee on World Food Security. Policy recommendations: Biofuels And Food Security. Disponível em: <https://openknowledge.fao.org/server/api/core/bitstreams/6c7d8831-50a7-411d-91c9-a4cbf3949b1b/content>. Acessando em junho de 2025.

ChemSrc. **α -Amylase**. 2024. Disponível em: https://www.chemsrc.com/en/cas/9001-19-8_1197503.html. Acessado em janeiro de 2025.

CHEN, Guo; ZHANG, Bin. Hydrolysis of granular corn starch with controlled pore size. **Journal of cereal science**, v. 56, n. 2, p. 316-320, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.jcs.2012.01.011>.

CONAB - Companhia Nacional de Abastecimento. **Séries históricas: milho**. 2025. Disponível em: <https://www.gov.br/conab/pt-br/atuacao/informacoes-agropecuarias/safras/series-historicas/graos/milho>. Acessado em janeiro de 2025.

CRIPWELL, Rosemary A. *et al.* Consolidated bioprocessing of raw starch to ethanol by *Saccharomyces cerevisiae*: Achievements and challenges. **Biotechnology Advances**, v. 42, p. 107579, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2020.107579>.

CRUZ, José Carlos *et al.* **Cultivo do Milho**. 2010. Disponível em: <https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/27037/1/Plantio.pdf>. Acessado em janeiro de 2025

CZECH BREWERY SYSTEM. **CCT-1000C: Cyindroconical fermentation tank CLASSIC, 0.5-3.0 bar, insulated, 1000/1200L**. 2025. Disponível em: <https://eshop.czechminibreweries.com/product/cct-1000c/>. Acessado em junho de 2025.

DEVOS, Rafaela Julyana Barboza; COLLA, Luciane Maria. Simultaneous saccharification and fermentation to obtain bioethanol: a bibliometric and systematic study. **Bioresource Technology Reports**, v. 17, p. 100924, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.biteb.2021.100924>.

DONKE, Ana *et al.* Environmental and energy performance of ethanol production from the integration of sugarcane, corn, and grain sorghum in a multipurpose plant. **Resources**, v. 6, n. 1, p. 1, 2016. <https://doi.org/10.3390/resources6010001>.

ECKERT, C. T. *et al.* Maize ethanol production in Brazil: Characteristics and perspectives. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 82, p. 3907-3912, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.10.082>.

ELIAS, M. C. Secagem e armazenamento de grãos de milho e de sorgo na propriedade rural. 2018. Disponível em: <https://www.agricultura.rs.gov.br/upload/arquivos/201811/23093823-armazenamento-em-prop-milho-e-sorgo.pdf>. Acessado em janeiro de 2025.

ENDURAMAX. **250 Litre Fermentation Tank**. 2025. Disponível em: <https://enduramaxx.co.uk/enduramaxx/250-litre-plastic-fermentation-tank/>. Acessado em junho de 2025.

EUN, H.-M. 1 - Enzymes and nucleic acids: General principles. In: **Enzymology Primer for Recombinant DNA Technology**. San Diego: Academic Press, 1996. p. 1–108. <https://doi.org/10.1016/B978-012243740-3/50004-1>.

FOGLER, H. Scott. Elementos de engenharia das reações químicas. LTC, 2009.

GALINHA, C. F.; SANCHES, S.; CRESPO, J. G. Chapter 6 – membrane bioreactors. In: **Fundamental Modelling of Membrane Systems**. 2018. p. 209–249. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813483-2.00006-X>.

GIL, I. D.; GARCÍA, L. C.; RODRÍGUEZ, G. J. B. J. Simulation of ethanol extractive distillation with mixed glycols as separating agent. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 31, p. 259-270, 2014. <https://doi.org/10.1590/S0104-66322014000100024>.

GRONCHI, Nicoletta *et al.* Novel yeast strains for the efficient saccharification and fermentation of starchy by-products to bioethanol. **Energies**, v. 12, n. 4, p. 714, 2019. <https://doi.org/10.3390/en12040714>.

GUPTA, Rishi *et al.* Kinetic study of batch and fed-batch enzymatic saccharification of pretreated substrate and subsequent fermentation to ethanol. **Biotechnology for Biofuels**, v. 5, n. 1, p. 16, 2012. <https://doi.org/10.1186/1754-6834-5-16>.

HJERSTED, Jared L.; HENSON, Michael A. Optimization of fed-batch *Saccharomyces cerevisiae* fermentation using dynamic flux balance models. **Biotechnology progress**, v. 22, n. 5, p. 1239-1248, 2006. <https://doi.org/10.1021/bp060059v>.

IBGE - Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. **PIA-Produto - Pesquisa Industrial Anual - Produto**. 2022. Disponível em: <https://ibge.gov.br/estatisticas/todos-os-produtos-estatisticas/9044-pesquisa-industrial-anual-produto?=&t=downloads>. Acessado em setembro de 2024.

IGLESIAS, Carlos; SESMERO, Juan P. Economic analysis of supplementing sugarcane with corn for ethanol production in Brazil: a case study in Uberaba. **BioEnergy Research**, v. 8, n. 2, p. 627-643, 2015. <https://doi.org/10.1007/s12155-014-9551-4>.

JANG, Ming-Feng; CHOU, Yi-Shyong. Modeling and optimization of bioethanol production via a simultaneous saccharification and fermentation process using starch. **Journal of Chemical Technology & Biotechnology**, v. 88, n. 6, p. 1164-1174, 2013. <https://doi.org/10.1002/jctb.3961>.

KARUPPIAH, Ramkumar *et al.* Energy optimization for the design of corn-based ethanol plants. **AIChE Journal**, v. 54, n. 6, p. 1499-1525, 2008. <https://doi.org/10.1002/aic.11480>.

KOÇAK, Emrah *et al.* Is ethanol production responsible for the increase in corn prices?. **Renewable energy**, v. 199, p. 689-696, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2022.08.146>.

KOREN, D. W.; DUVNJAK, Z. Kinetics of the selective fermentation of glucose from glucose/fructose mixtures using *Saccharomyces cerevisiae* ATCC 36859. **Acta biotechnologica**, v. 13, n. 4, p. 311-322, 1993. <https://doi.org/10.1002/abio.370130402>.

KRISHNAN, M. S. *et al.* Process engineering of high-ethanol-tolerance yeast for the manufacture of ethanol. **Applied Biochemistry and Biotechnology**, v. 51, n. 1, p. 479-493, 1995. <https://doi.org/10.1007/BF02933449>.

KROUMOV, Alexander Dimitrov; MÓDENES, Aparecido Nivaldo; DE ARAUJO TAIT, Maicon C. Development of new unstructured model for simultaneous saccharification and fermentation of starch to ethanol by recombinant strain. **Biochemical engineering journal**, v. 28, n. 3, p. 243-255, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2005.11.008>.

KUJAWSKA, Anna *et al.* ABE fermentation products recovery methods—a review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 48, p. 648-661, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.04.028>.

KUMAR, Deepak; SINGH, Vijay. Bioethanol production from corn. In: **Corn. AACC International Press**, 2019. p. 615-631. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-811971-6.00022-X>.

KWIATKOWSKI, Jason R. *et al.* Modeling the process and costs of fuel ethanol production by the corn dry-grind process. **Industrial crops and products**, v. 23, n. 3, p. 288-296, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2005.08.004>.

LANGEMEIER, Michael. Explaining Fluctuations in DDG Prices. **Center for Commercial Agriculture**: Purdue University. 2022. Disponível em: <https://farmdocdaily.illinois.edu/2022/06/explaining-fluctuations-in-ddg-prices-2.html>. Acesso em julho de 2025.

LIU, S. Chapter 11 - how cells grow. In: **Bioprocess Engineering. Second edition**, 2017. p. 629–697. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63783-3.00011-3>.

LOPES, Mario Lucio *et al.* Ethanol production in Brazil: a bridge between science and industry. **Brazilian journal of microbiology**, v. 47, p. 64-76, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.bjm.2016.10.003>.

LUZ, Rinaldo Farias *et al.* Process Simulation Applied to the Prediction of the Impact of Corn Incorporation as Raw Material on the Brazilian Ethanol Market. **ACS Sustainable Chemistry & Engineering**, v. 11, n. 28, p. 10352-10363, 2023. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c01339>.

MARTINS, C. O. **Valorizando subprodutos das produções de óleo de soja e etanol: síntese e análise técnico-econômica da produção de biolubrificantes em**

biorrefinarias. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) — Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), São Carlos, SP, 2023.

MCALOON, Andrew *et al.* Determining the cost of producing ethanol from corn starch and lignocellulosic feedstocks. **National Renewable Energy Lab. (NREL)**, Golden, CO (United States), 2000. <https://doi.org/10.2172/766198>.

MESQUITA, Thiago José Barbosa *et al.* A high-throughput approach for modeling and simulation of homofermentative microorganisms applied to ethanol fermentation by *S. cerevisiae*. **Industrial Biotechnology**, v. 17, n. 1, p. 13-26, 2021. <https://doi.org/10.1089/ind.2020.0034>.

MESTRES, Christian *et al.* Modeling cereal starch hydrolysis during simultaneous saccharification and lactic acid fermentation; case of a sorghum-based fermented beverage, gowé. **Food Research International**, v. 100, p. 102-111, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2017.06.059>.

MFRURAL - Mercado Físico Rural. **Busca: "DDG Milho"**. 2024. Disponível em: <https://www.mfrural.com.br/busca/ddg-milho>. Acessado em setembro de 2024.

MILANEZ, A. Y.; NYKO, D.; VALENTE, M. S.; XAVIER, C. E. O.; KULAY, L. A.; DONKE, A. C. G.; MATSUURA, M. I. d. S. F.; RAMOS, N. P.; MORANDI, M. A. B.; BONOMI, A. M. F. L. J. *et al.* A produção de etanol pela integração do milho-safrinha às usinas de cana-de-açúcar: avaliação ambiental, econômica e sugestões de política. **Banco Nacional de Desenvolvimento Econômico e Social**, 2014. https://web.bndes.gov.br/bib/jspui/handle/1408/1921?&locale=pt_BR.

MISRA, Varucha *et al.* Effect of water logging on post-harvest sugarcane deterioration. **Agrica**, v. 5, n. 2, p. 119-132, 2016. <http://dx.doi.org/10.5958/2394-448X.2016.00020.1>.

MOHANTY, Sujit K.; SWAIN, Manas R. Bioethanol production from corn and wheat: food, fuel, and future. In: **Bioethanol production from food crops**. Academic Press, 2019. p. 45-59. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813766-6.00003-5>.

NEVES, M. F. **Etanol de Milho: Cenário Atual e Perspectivas para a Cadeira no Brasil**. 2021. Disponível em: https://www.sna.agr.br/wp-content/uploads/2021/05/Etanol-de-Milho-no-Brasil-Fava-Neves-et-al-2021_compressed.pdf. Acessado em janeiro de 2025

OLIVEIRA, Luiza Stolte Bezerra Lisboa; CRUZ, Antonio José Gonçalves. Techno-economic analysis and carbon intensity of sugarcane-corn flex plants in Brazil. **Bioresource Technology Reports**, v. 24, p. 101694, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.biteb.2023.101694>.

ONU Brasil – Organização das Nações Unidas no Brasil. **O que são as mudanças climáticas?** 2022. Disponível em: <https://brasil.un.org/pt-br/175180-o-que-s%C3%A3o-mudan%C3%A7as-clim%C3%A1ticas>. Acessado em janeiro de 2025.

PARMENTIER, Y.; BOSSANT, M.-J.; BERTRAND, M.; WALTHER, B. 5.10 - In vitro studies of drug metabolism. In: **Comprehensive Medicinal Chemistry II**. Oxford: Elsevier, 2007. p. 231–257. <https://doi.org/10.1016/B0-08-045044-X/00125-5>.

PELLEY, J. W. 4 - enzymes and energetics. In: **Elsevier's Integrated Review Biochemistry (Second Edition)**. Second edition. Philadelphia: W.B. Saunders, 2012. p. 29–37. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-07446-9.00004-0>.

PENG, Xiaowei *et al.* Investigation on solvolysis liquefaction mechanism of *Chlorella pyrenoidosa* in ethanol–water solvent based on major model compounds: protein and starch. **Journal of Analytical and Applied Pyrolysis**, v. 141, p. 104621, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2019.05.010>.

PERRY, Chem Engr et al. Handbook. **Chemical Engineers" Handbook," third edition, 1950**, pages 39I and IO9-IIO, 1963.

PETERS, M. S.; TIMMERHAUS, K. D. Plant Design and Economics for Chemical Engineers. 4ª edição. ed. [S.l.]: **McGraw-Hill Book Company**, 1991.

PHISALAPHONG, Muenduen; SRIRATTANA, Nuttapan; TANTHAPANICHAKOON, Wiwut. Mathematical modeling to investigate temperature effect on kinetic parameters of ethanol fermentation. **Biochemical engineering journal**, v. 28, n. 1, p. 36-43, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2005.08.039>.

PRESEČKI, Ana Vrsalović; BLAŽEVIĆ, Zvezdana Findrik; VASIĆ-RAČKI, Đurđa. Complete starch hydrolysis by the synergistic action of amylase and glucoamylase: impact of calcium ions. **Bioprocess and biosystems engineering**, v. 36, n. 11, p. 1555-1562, 2013b. <https://doi.org/10.1007/s00449-013-0926-2>.

PRESEČKI, Ana Vrsalović; BLAŽEVIĆ, Zvezdana Findrik; VASIĆ-RAČKI, Đurđa. Mathematical modeling of maize starch liquefaction catalyzed by α -amylases from *Bacillus licheniformis*: effect of calcium, pH and temperature. **Bioprocess and biosystems engineering**, v. 36, n. 1, p. 117-126, 2013a. <https://doi.org/10.1007/s00449-012-0767-4>.

PubChem. **Ethanol**. 2004. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/702>. Acessado em janeiro de 2025

QUINTERO, J. A. *et al.* Fuel ethanol production from sugarcane and corn: comparative analysis for a Colombian case. **Energy**, v. 33, n. 3, p. 385-399, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2007.10.001>.

RAIS - Relação Anual de Informações Sociais. **Painel de Informações da RAIS**. 2023. Disponível em <https://app.powerbi.com/view?r=eyJrljoiZmJmMDVhODctMTEwOS00YTZhLWJhNzltOWE3NmVIMWEwMTUxliwidCI6IjNIYzkyOTY5LTVhNTEtNGYxOC04YWM5LWVmOThmYmFmYTtk3OCJ9>. Acessado em junho de 2025.

RAMÍREZ, Edna C. *et al.* Enzymatic corn wet milling: engineering process and cost model. **Biotechnology for Biofuels**, v. 2, n. 1, p. 2, 2009. <https://doi.org/10.1186/1754-6834-2-2>.

REIS, Cristiano E. Rodrigues; RAJENDRAN, Aravindan; HU, Bo. New technologies in value addition to the thin stillage from corn-to-ethanol process. **Reviews in Environmental Science and Bio/Technology**, v. 16, n. 1, p. 175-206, 2017. <https://doi.org/10.1007/s11157-017-9421-6>.

RODMAN, Alistair D.; GEROGIORGIS, Dimitrios I. Parameter estimation and sensitivity analysis for dynamic modelling and simulation of beer fermentation. **Computers &**

Chemical Engineering, v. 136, p. 106665, 2020.
<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.106665>.

SATYANARAYANA, T. *et al.* Development of an ideal starch saccharification process using amylolytic enzymes from thermophiles. [S.l.]: **Portland Press Ltd.**, 2004.
<https://doi.org/10.1042/bst0320276>.

SD INOX. **1000L Stainless steel wine fermentation tank**. 2025. Disponível em:
<https://tank-inox.bg/en/produkt/1000l-stainless-steel-wine-fermentation-tank/>. Acessado em junho de 2025.

SECCHES, Thaís O. *et al.* Brazilian industrial yeasts show high fermentative performance in high solids content for corn ethanol process. **Bioresources and bioprocessing**, v. 9, n. 1, p. 97, 2022. <https://doi.org/10.1186/s40643-022-00580-w>.

SHUBLAQ, Mohammed; SLEITI, Ahmad K. Experimental analysis of water evaporation losses in cooling towers using filters. **Applied Thermal Engineering**, v. 175, p. 115418, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.115418>.

SINGH, Sukhendra *et al.* Development of a process model for simultaneous saccharification and fermentation (SSF) of algal starch to third-generation bioethanol. **Biofuels**, 2020. <https://doi.org/10.1080/17597269.2018.1426162>.

SINGH, V. **Corn Grading, Cleaning, Milling and Cooking**. 2009. Disponível em:
<http://www.iea.usp.br/midiateca/apresentacao/singhbiofuels5.pdf>. Acessado em janeiro de 2025.

SLAVIĆ, Marinela Šokarda *et al.* Modified simultaneous saccharification and fermentation for the production of bioethanol from highly concentrated raw corn starch. **Fuel**, v. 338, p. 127363, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.127363>.

SOBRINHO, P. Processo (simplificado) de produção de etanol de milho—Destilaria/Usina Flex—Abordagem descritiva de um novo potencial. **CONAB-Companhia Nacional de Abastecimento/Superintendência regional de Mato Grosso**, Cuiabá/MT, 2012.

SUBRAMANIAM, Yogeeswari; MASRON, Tajul Ariffin; AZMAN, Nik Hadiyan Nik. The impact of biofuels on food security. *International Economics*, v. 160, p. 72-83, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.inteco.2019.10.003>.

SUMIKAWA, Victor Iwao Oliveira; MEDEIROS DE LIMA, Alice. Technoeconomic evaluation of a flex ethanol Plant of Sugarcane and Corn in Brazil. **Chemical Engineering & Technology**, v. 44, n. 11, p. 2147-2158, 2021. <https://doi.org/10.1002/ceat.202100177>.

Sunson Enzymes. **Glucoamylase enzyme Sunson GA150L for saccharification in alcohol fermentation**. 1999. Disponível em: <http://www.sunsonenzyme.com/Products/Ethanol%20&%20Alcohol/2017/0518/180.html>. Acessado em janeiro de 2025

TURTON, R.; BAILIE, R. C.; WHITING, W. B.; SHAEIWITZ, J. A.; BHATTACHARYYA, D. Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes. 4ª edição. ed. [S.I.]: **Pearson Education**, 2012.

UNICADATA – Observatório da Cana e da Bioenergia. **Painel histórico da área de cultivo, moagem e produção de açúcar e etanol**. 2024. Disponível em: <https://unicadata.com.br/listagem.php?idMn=4>. Acessado em janeiro de 2025

USDA - United States Department of Agriculture. **Grain Grading Primer: corn**. 2016. Disponível em: <https://www.ams.usda.gov/sites/default/files/media/GrainGradingPrimer11272017.pdf>. Acessado em janeiro de 2025.

USDA - United States Department of Agriculture. **National Weekly Grain Co-Products Report**. 2024. Disponível em: https://www.ams.usda.gov/mnreports/ams_3618.pdf. Acessado em setembro de 2024.

UTHUMPORN, U.; ZAIDUL, I. SmM; KARIM, A. A. Hydrolysis of granular starch at sub-gelatinization temperature using a mixture of amylolytic enzymes. **Food and bioproducts processing**, v. 88, n. 1, p. 47-54, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.fbp.2009.10.001>.

VAN WYLEN, Gordon; SONNTAG, Richard E.; BORGNAKKE, Claus. Fundamentos da termodinâmica clássica. **Editora Blucher**, 1994.

WANG, Yanan et al. Investigation of the potential mechanisms of α -amylase and glucoamylase through ultrasound intensification. **LWT**, v. 198, p. 115979, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2024.115979>.

XU, Youjie; WANG, Donghai. Integrating starchy substrate into cellulosic ethanol production to boost ethanol titers and yields. **Applied Energy**, v. 195, p. 196-203, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.03.035>.

YUAN, Gonglin; LU, Xiwen. An active set limited memory BFGS algorithm for bound constrained optimization. **Applied Mathematical Modelling**, v. 35, n. 7, p. 3561-3573, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.apm.2011.01.036>.

ZENTOU, Hamid *et al.* Modelling of molasses fermentation for bioethanol production: a comparative investigation of Monod and Andrews models accuracy assessment. **Biomolecules**, v. 9, n. 8, p. 308, 2019. <https://doi.org/10.3390/biom9080308>.

ZHANG, Runyang *et al.* Comprehensive utilization of corn starch processing by-products: A review. **Grain & Oil Science and Technology**, v. 4, n. 3, p. 89-107, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.gaost.2021.08.003>.

ZHU, Ciyu *et al.* Algorithm 778: L-BFGS-B: Fortran subroutines for large-scale bound-constrained optimization. **ACM Transactions on mathematical software (TOMS)**, v. 23, n. 4, p. 550-560, 1997. <https://doi.org/10.1145/279232.279236>.

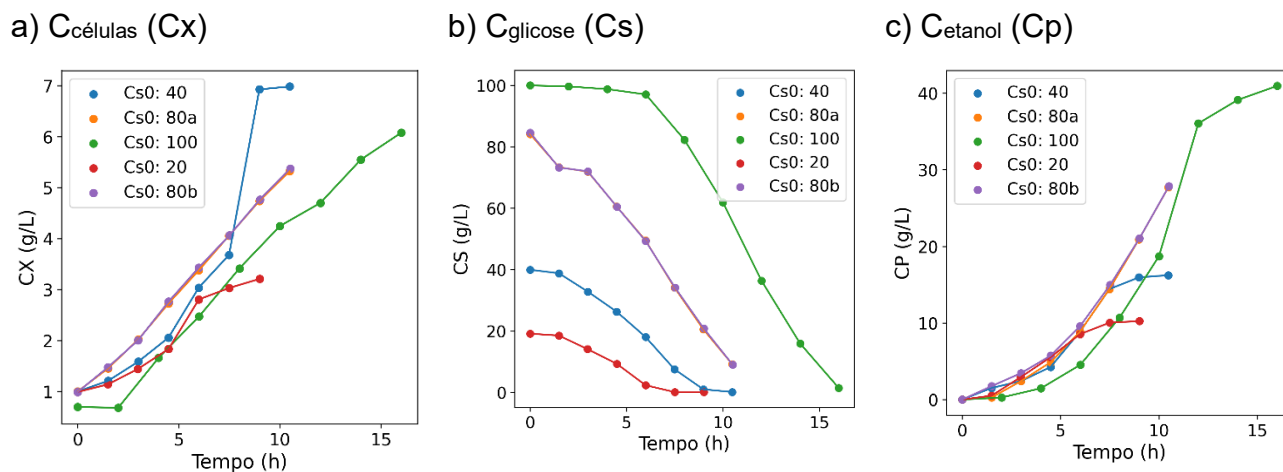
ZIERO, Henrique D. *et al.* Foresight for corn-to-ethanol mills in the Southern Brazilian Amazon: Energy, economic and environmental analysis. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 9, n. 6, p. 106740, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.106740>.

9. APÊNDICES

9.1. Apêndice A – Ajuste dos parâmetros do modelo do processo de fermentação

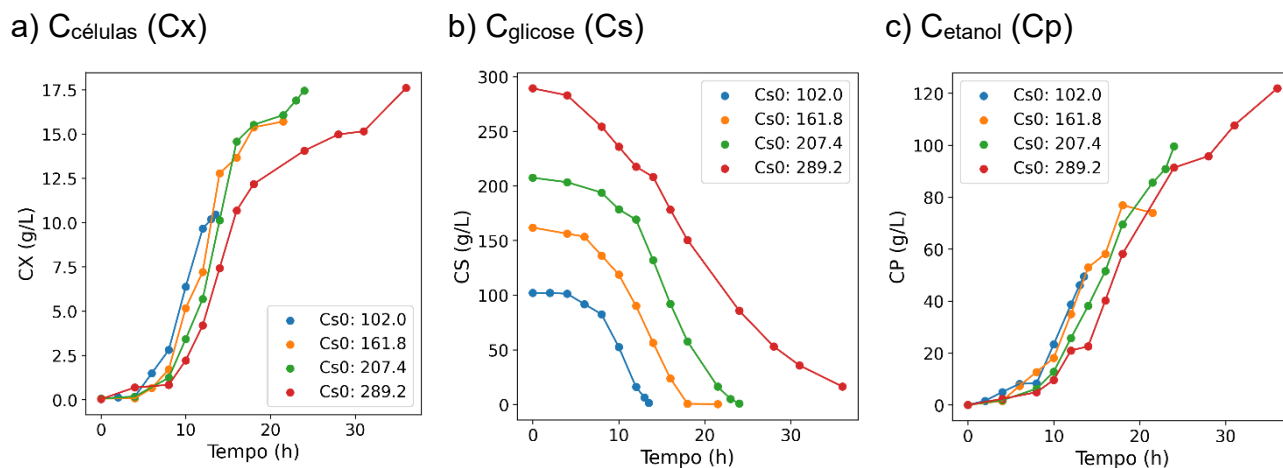
Para os ajustes dos parâmetros do modelo de fermentação foram usados os dados de Birol *et al.* (1998) e Krishnan *et al.* (1995). Esses trabalhos foram usados porque ambos levantaram dados das concentrações de glicose, de células e de etanol num processo de fermentação em batelada usando a levedura *Saccharomyces cerevisiae*, para fins de ajuste de parâmetros de modelos cinéticos. Krishnan *et al.* (1995) propuseram um modelo cinético considerando inibições de produto e de substrato, enquanto Birol *et al.* (1998) ajustaram os dados levantados em 11 modelos distintos e avaliaram como esses modelos se adequaram aos dados experimentais. Ambos os trabalhos estudaram a fermentação na mesma temperatura, a 30°C, o que permite o uso dos dois conjuntos de dados para fins de ajuste dos parâmetros (o que não seria possível se os dados fossem coletados em temperaturas distintas, posto que os valores dos parâmetros cinéticos são funções da temperatura). Os dados experimentais apresentados nesses trabalhos constam na Figura 55 e na Figura 56.

Figura 55. Dados das concentrações de células (a), de glicose (b) e de etanol (c) no processo de fermentação reportados por Birol *et al.* (1998).



Fonte: adaptado de Birol *et al.* (1998).

Figura 56. Dados das concentrações de células (a), de glicose (b) e de etanol (c) no processo de fermentação reportados por Krishnan *et al.* (1998).



Fonte: adaptado de Krishnan *et al.* (1998).

Os dados foram apresentados em forma de gráfico pelos respectivos trabalhos, então o software GetData Graph Digitizer foi utilizado. Foram retirados dados em duplicata e foi feita a média simples para o uso no algoritmo de estimação dos parâmetros. A estimação foi feita usando linguagem Python, na plataforma Google Colab. O modelo cinético ajustado e a metodologia de ajuste foram o propostos por Mesquita *et al.* (2021), sendo o modelo apresentado na Equação (26). A metodologia usada pelos autores baseou-se na partição do modelo em três etapas, conforme Figura 57.

Figura 57. Partição do modelo de fermentação para ajuste dos parâmetros, conforme Mesquita *et al.* (2021).

$$\mu_F = \underbrace{\mu_{MAX} \cdot \frac{C_S}{K_S + C_S}}_{2^a \text{ etapa}} \cdot \underbrace{\exp\left(-\frac{C_S}{S_m}\right)}_{1^a \text{ etapa}} \cdot \underbrace{\left(1 - \frac{C_P}{C_{P_{MAX}}}\right)}_{3^a \text{ etapa}}$$

Fonte: adaptado de Mesquita *et al.* (2021).

As etapas foram:

1. Os parâmetros μ_{MAX} e K_S foram ajustados selecionando dados nos quais a concentração inicial de glicose fosse menor que $50 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$. Esse critério foi definido para diminuir o impacto do substrato no crescimento celular;
2. Mantidos os valores ajustados dos parâmetros μ_{MAX} e K_S , o parâmetro S_m foi ajustado usando dados nos quais a concentração final de etanol fosse abaixo de $50 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$. Esse critério foi estabelecido visando diminuir a inibição pelo produto, garantindo que a inibição do processo fosse apenas do substrato, posto que o parâmetro estimado é a constante de inibição pela glicose;
3. Por fim, com os valores estimados desses três parâmetros, a constante de saturação pelo produto ($C_{P_{MAX}}$) foi estimado filtrando dados nos quais a concentração final de etanol fosse acima de $50 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$, com o intuito de ajustar esse parâmetro em processo em que esse fenômeno de saturação fosse o máximo.

Além dessas etapas, a estimação dos rendimentos $Y_{X/S}$ e $Y_{P/S}$ foi feita selecionando os dados nos quais a razão entre a concentração final de etanol e a concentração inicial de substrato fosse acima de 0,45. Essa estratégia foi definida de modo a maximizar o valor de $Y_{P/S}$, mantendo a restrição do seu valor máximo teórico de 0,511.

O método de estimação usado foi o de mínimos quadrados, que se baseia na minimização do erro quadrado entre o valor modelado e o experimental. Dada diferença

entre a ordem de grandeza do erro das concentrações de células e dos demais componentes, uma ponderação foi feita usando o máximo do valor experimental. A Equação (88) apresenta a o método aplicado no presente trabalho.

$$\text{minimize } E(\theta_j) = \sum_{i=1}^n \left[\frac{y_{i,\text{mod}}(\theta_j) - y_{i,\text{exp}}}{\text{MAX}(y_{i,\text{exp}})} \right]^2 \quad (88)$$

Sendo $E(\theta_j)$ o erro do parâmetro θ_j , n o número de dados experimentais, $y_{i,\text{mod}}$ e $y_{i,\text{exp}}$ o valor de y modelado e experimental, respectivamente. Essa minimização é feita usando os parâmetros como variáveis de busca. Os valores de $y_{i,\text{mod}}$ são calculados de acordo com os valores dos parâmetros θ_j , por isso $y_{i,\text{mod}} = y_{i,\text{mod}}(\theta_j)$, como apresentado na Equação (88). Assim, a minimização de E , definidos os parâmetros θ_j , aproxima os valores modelados por esses parâmetros aos dados experimentais, ao mesmo tempo que o termo $\text{MAX}(y_{i,\text{exp}})$ gera erros na mesma grandeza entre os dados usados no ajuste. A minimização foi feita usando o método L-BFGS-B, com a função *minimize* da biblioteca *scipy.optimize*, do Python.

O intervalo de confiança dos parâmetros estimados foi calculado através da matriz de covariância dos parâmetros (Equação (89)), que é calculada pela matriz jacobiana dos parâmetros e a variância dos resíduos do modelo.

$$\text{Cov}(\theta_j) = \sigma^2 \cdot (J^T \cdot J)^{-1} \quad (89)$$

sendo J a matriz Jacobiana dos parâmetros, definida pela Equação (90), e σ^2 a variância dos resíduos.

$$J(\theta_j) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial \theta_j} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_i}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j} \end{bmatrix} \quad (90)$$

sendo i os conjuntos de dados (conjunto para cada componentes, C_x , C_s e C_p) e j o número de parâmetros estimados. Cada elemento da matriz Jacobiana foi calculado pelo método das Diferenças Finitas, conforme Equação (91), sendo $\varepsilon = 10^{-5}$ (perturbação arbitrariamente definida).

$$\frac{\partial f_i}{\partial \theta_j} \approx \frac{r_i(\theta_j + \epsilon) - r_i(\theta_j - \epsilon)}{2 \cdot \epsilon} \quad (91)$$

sendo r_i o resíduo, isto é, a diferença entre o valor modelado e o experimental. Isto posto, a Equação (91) calcula a variação da função i (C_x , C_s e C_p) dada uma variação do resíduo gerado quando o parâmetro estimado sofre uma perturbação de $\pm \epsilon$. As variâncias dos resíduos são dadas pela Equação (92). A diferença $n-p$ é feita para contemplar a perda dos graus de liberdade do problema ao estimar os parâmetros, bem como calcular a variância amostral.

$$\sigma^2 = \frac{1}{n - p} \cdot \sum_{i=1}^n (r_i - \bar{r})^2 \quad (92)$$

sendo n o número de dados experimentais, r_i o resíduo gerado pelo dado i , $\bar{r}$ a média dos resíduos e p o número de parâmetros estimados.

De posse da matriz J e da variância σ^2 , a matriz Cov foi calculada usando a Equação (89). Assim, o erro padrão foi calculado de acordo com a Equação (93).

$$EP = \sqrt{DP(J)} \quad (93)$$

Sendo EP o erro padrão e $DP(J)$ a diagonal principal da matriz Jacobiana. Com isso, o intervalo de confiança (IC) dos parâmetros θ_j é dado pela Equação (94), onde foi assumido a distribuição t de Student, com nível de confiança (NC) de 95% e graus de liberdade (GL) igual a $p-n$.

$$IC = \theta_j \pm t(NC = 95\%, GL = n - p) \cdot EP \quad (94)$$

Com isso, os valores médios, de desvio padrão e de intervalo de confiança dos parâmetros estimados constam na Tabela 13. Dessa tabela, nota-se que o maior valor de %IC foi para o parâmetro K_s , a constante de Monod, próximo de 50%. Koren e Duvnjak (1993) estudaram a cofermentação da glicose e da frutose usando *Saccharomyces cerevisiae* e, em seus ajustes de parâmetros, a constante de Monod apresentou o %IC de aproximadamente 63%, o que indica que o valor encontrado no presente trabalho para esse parâmetro está próximo do reportado pela literatura.

Tabela 36. Valores médios, de desvio padrão e intervalos de confiança dos parâmetros estimados para o processo de fermentação a 30 °C.

Parâmetro	Unidade	Valor médio	Desvio padrão	IC	%IC ^a
μ_{MAX}	h^{-1}	0,2480	0,0097	0,2288 – 0,2673	$\pm 7,80$
K_S	$g \cdot L^{-1}$	13,220	3,146	1,3929 – 3,8947	$\pm 47,21$
S_m	$g \cdot L^{-1}$	2626,198	0,9670	2624,826 – 2627,511	$\pm 0,05$
P_m	$g \cdot L^{-1}$	117,147	0,1313	116,8879 – 117,4059	$\pm 0,22$
$Y_{X/S}$	$g \cdot L^{-1}$	0,010	0,002	0,00098 – 0,0109	$\pm 4,76$
$Y_{P/S}$	$g \cdot L^{-1}$	0,462	0,0098	0,4431 – 0,4816	$\pm 4,16$

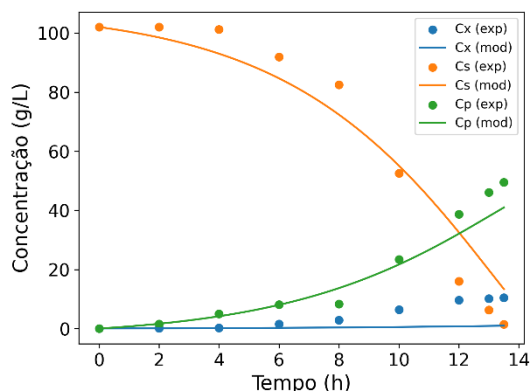
^a Percentual do valor do IC em relação ao valor médio.

Fonte: autor (2025).

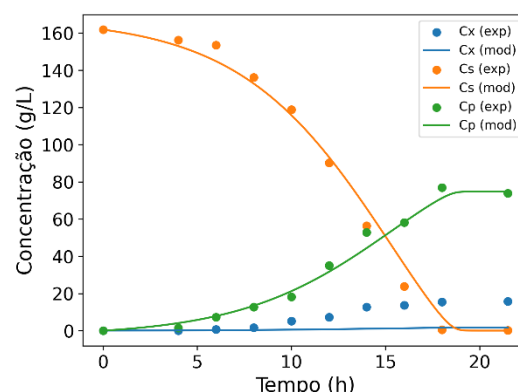
Com os valores dos parâmetros ajustados, foi possível obter as curvas das concentrações modeladas com base no modelo proposto. A Figura 58 exhibe os gráficos das curvas modeladas e os pontos experimentais. Pode-se notar que as curvas que descrevem as concentrações de substrato e de produto estão próximas dos pontos experimentais. No entanto, a observação contrária é vista para as curvas das concentrações de células. De todo modo, como o presente trabalho visa simular uma usina cujos cálculos técnicos e econômicos centram-se, majoritariamente, na concentração final de etanol e nas concentrações iniciais dos componentes (determinados pela literatura, ou em função da concentração inicial de amido, ou pela otimização), os desvios observados nas concentrações de células foram considerados aceitáveis para a finalidade do presente trabalho.

Figura 58. Curvas modeladas com os parâmetros ajustados e os dados experimentais de Krishnan *et al.* (1995) para $C_{\text{substrato},0}$ de $102,0 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (a), $161,8 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (b), $207,4 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (c) e $289,2 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ (d).

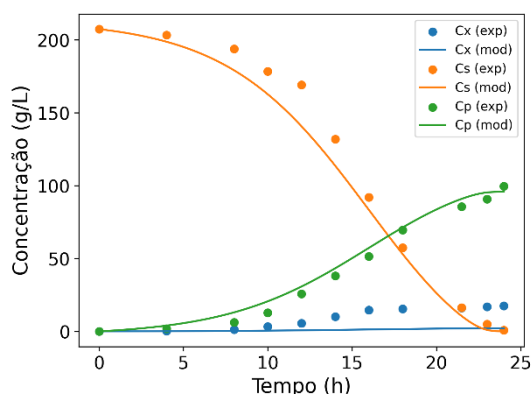
a) $C_{\text{substrato},0} = 102,0 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$



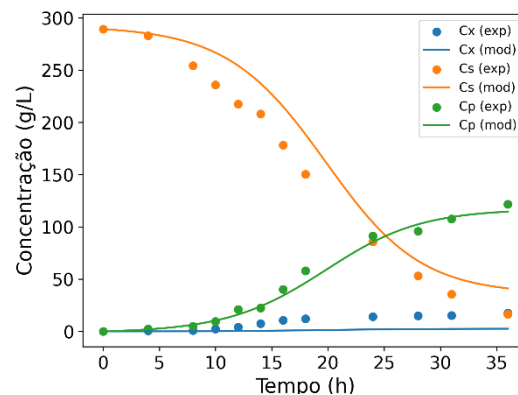
b) $C_{\text{substrato},0} = 161,8 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$



c) $C_{\text{substrato},0} = 207,4 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$



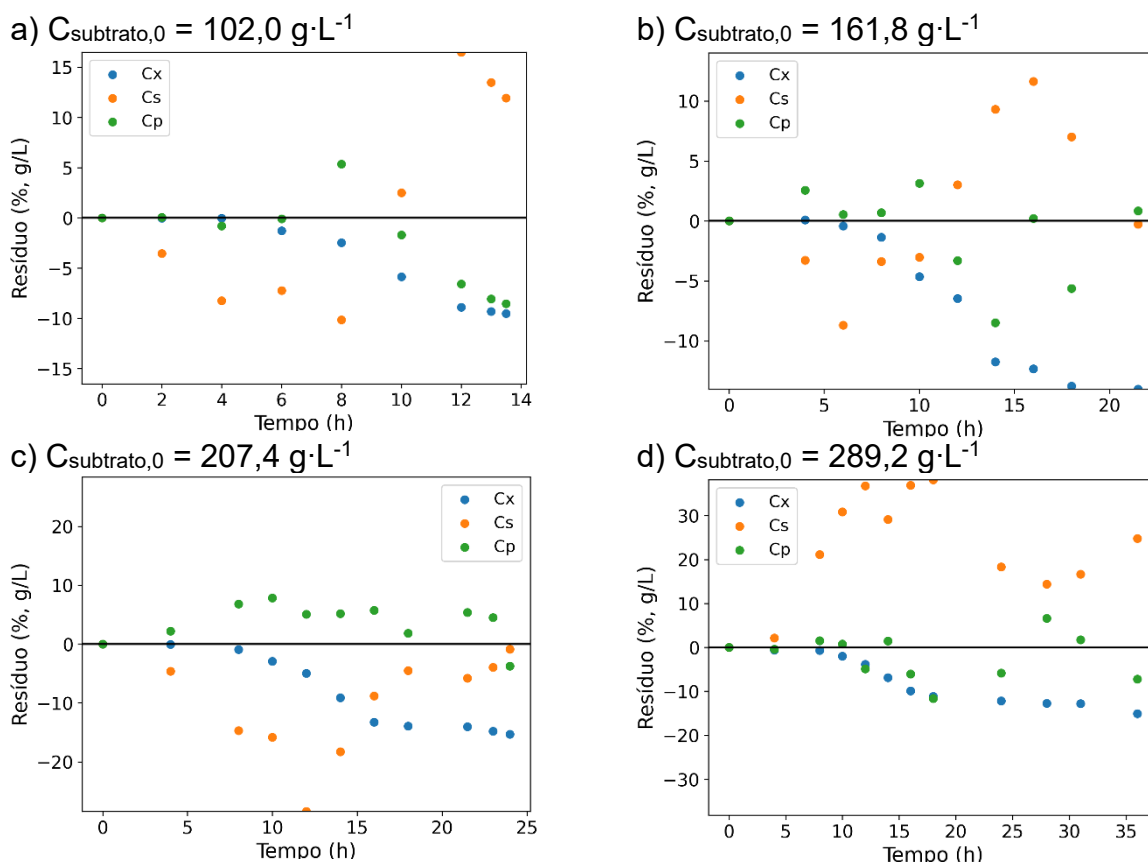
d) $C_{\text{substrato},0} = 289,2 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$



Fonte: autor (2025).

Com o objetivo de avaliar os desvios entre o modelado e o experimental, a Figura 59 exibe os resíduos das curvas exibidas na Figura 58. Além disso, a Tabela 37 exibe a média dos resíduos, bem como o desvio padrão destes, ambos percentuais. Pode-se observar que, conforme avaliado na Figura 58, o erro para a concentração celular é próximo de 50%; mas, diante do discutido, foi considerado aceitável frente aos objetivos do presente trabalho.

Figura 59. Resíduos, em percentual, entre as curvas modeladas com os parâmetros ajustados e os dados experimentais de Krishnan *et al.* (1995) para $C_{\text{glicose},0}$ de 102,0 $\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (a), 161,8 $\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (b), 207,4 $\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (c) e 289,2 $\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (d).



Fonte: autor (2025).

Tabela 37. Média e desvio padrão percentuais dos resíduos entre a curva modelada com os parâmetros ajustados e os dados experimentais de Krishnan *et al.* (1995).

Componente	Média ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, %)	Desvio padrão ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, %)
Cx	42,39	34,91
Cs	5,88	4,51
Cp	4,38	4,31

Fonte: autor (2025).

9.2. Apêndice B – Balanços de massa e energia do processo para os diferentes cenários

Essa seção visa detalhar os balanços de massa e energia feitos para o processo utilizado no presente trabalho. Como descrito na seção 4.3, o processo do presente

trabalho foi dividido em 5 unidades, dos quais 4 pertencem aos *processos gerais* e uma unidade é voltada para os *processos específicos*, relacionados entre si conforme exibido na Figura 19. No processo, os cada equipamento possui sua respectiva tag. As tags dos equipamentos presentes nos processos gerais e específicos, bem como a função de cada um, são apresentadas nas Tabela 38 e Tabela 39. Os processos específicos foram detalhados na seção 4.3.1, conforme Figura 20; portanto, a presente seção focará nos processos gerais. Os balanços de massa foram feitos para o estado permanente.

Tabela 38. Equipamentos dos processos gerais, TAGs e suas respectivas funções.

Equipamento	TAG	Função
Limpador	LI01	Limpeza do milho
Moenda	MO01	Moe o milho limpo para produção do farelo de milho
Degaseificador	DS01	Separa a fase vapor da fase líquida advinda da fermentação
Coluna de absorção	AB01	Lava a corrente gasosa vinda do degaseificador DS01 para recuperação do etanol
Misturador	MI01	Mistura o farelo de milho com os reciclos da destilação e centrifugação do DDGS e com água de processo formando o amido gelatinizado
	MI02	Mistura a fase líquida do degaseificador DS01 e a fase líquida da coluna de absorção AB01
Coluna de destilação	CD01	Alimentada no topo pelo vinho aquecido pelos trocadores de calor TC-FP01. O produto de topo segue para a coluna CD02, e o fundo forma a vinhaça bruta que segue para a produção de DDGS
	CD02	Alimentada pelo produto de topo da CD01. No topo, gera o etanol hidratado (99,3% m/m) e seu produto de fundo é reciclado no misturador MI01 ou purgado.
Flash	FL01	Recebe corrente aquecida da fase líquida com sólidos da centrífuga CE01 para geração de corrente para o separador SP01 extrair o óleo de milho
Centrífuga	CE01	Centrifuga a fase líquida com sólidos oriunda do filtro FI01 e separa as fases sólida e líquida
Filtro	FI01	Filtra a corrente resfriada do produto de fundo da coluna CD01, gerando uma corrente líquida com presença de sólidos e uma fase de sólidos com umidade (WDGS)
Separador	SP01	Separa a corrente de fundo do flash FL01 para extração do óleo de milho destilado
Secador	SE01	Seca o WDGS (70% de umidade) utilizando ar quente e produzindo o DDGS (10% de umidade)
Trocador de calor	TC01	Aquece a corrente para o reator adequado ao cenário definido. C1-RE01 a 80 °C no LSF, C2-RE01 a 65 °C no SLSF, C3-RE01 a 35°C no LSSF ou C4-RE01 a 35°C no SSF.
	TC02	Refervedor de fundo da coluna CD01
	TC03	Refervedor de fundo da coluna CD02
	TC04	Condensador do topo da coluna CD02
	TC05	Aquece a fase líquida da centrífuga CE01 para alimentação do flash FL02
	TC06	Aquece o ar para operação no secador SE01 até 270°C
	TC07	Resfria (no estado estacionário) a corrente de MEG e de reciclo do produto de fundo da coluna CD06 para 80°C
	TC08	Refervedor de fundo da coluna CD03
	TC09	Condensador do topo da coluna CD03
Bomba	TC-FP01	Resfria a corrente de topo da coluna CD03 para 45°C e aquece o vinho que sai do misturador MI02.
	BB01	Bombeia água de processo para o misturador MI01 para gelatinização do amido
	BB02	Bombeia pasta de amido para aquecimento no trocador de calor TC01
	BB03	Bombeia água de processo para coluna de absorção AB01 para remoção de CO2
	BB04	Bombeia fase líquida do degaseificador DS01 para misturador MI02
	BB05	Bombeia corrente que sai do misturador MI02
	BB06	Bombeia corrente de vinhaça bruta para processo de produção de DDGS e óleo de milho destilado
	BB07	Bombeia a fase líquida da centrífuga CE01 para o trocador TC06
	BB08	Bombeia a corrente de fundo da coluna CD06 para reciclo do MEG e de etanol

Fonte: autor (2025).

Tabela 39. Equipamentos dos processos específicos dos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF, TAGs e suas respectivas funções.

Cenário	Equipamento	TAG	Função
LSF	Reator	C1-RE01	Reator onde ocorre a liquefação do amido presente no farelo de milho gelatinizado
		C1-RE02	Reator onde ocorre a sacarificação da mistura de açúcares gerados na liquefação
		C1-RE03	Reator onde ocorre a fermentação da glicose produzida na sacarificação
	Bomba	C1-BB01	Bombeia o mosto com a mistura de açúcares advinda do reator de liquefação para o processo de sacarificação
		C1-BB02	Bombeia o mosto (rico em glicose) para resfriamento e o processo de fermentação
		C1-BB03	Bomba de recirculação de vinho
	Trocador de calor	C1-TC01	Resfria a corrente para reação de sacarificação (65°C)
		C1-TC02	Resfria a corrente para reação de fermentação (35°C)
		C1-TC03	Controle de temperatura em 35°C durante o período de fermentação
SLSF	Reator	C2-RE01	Reator onde ocorre a liquefação do amido e a sacarificação dos oligossacarídeos simultaneamente
		C2-RE02	Reator onde ocorre a fermentação da glicose produzida na liquefação e sacarificação simultâneas
	Bomba	C2-BB01	Bombeia o mosto (rico em glicose) para resfriamento e o processo de fermentação
		C2-BB02	Bomba de recirculação de vinho
	Trocador de calor	C2-TC01	Resfria a corrente para reação de fermentação (35°C)
		C2-TC02	Controle de temperatura em 35°C durante o período de fermentação
LSSF	Reator	C3-RE01	Reator onde ocorre a liquefação do amido presente no farelo de milho gelatinizado
		C3-RE02	Reator onde ocorre a sacarificação e a fermentação simultaneamente
	Bomba	C3-BB01	Bombeia o mosto para o resfriamento e para a dorna de fermentação
		C3-BB02	Bomba de recirculação de vinho
	Trocador de calor	C3-TC01	Resfria a corrente para reação de sacarificação e fermentação simultâneas (35°C)
		C3-TC02	Controle de temperatura em 35°C durante o período de fermentação
SSF	Reator	C4-RE01	Reator onde ocorre a liquefação do amido, a sacarificação dos oligossacarídeos e a fermentação da glicose simultaneamente
	Bomba	C4-BB01	Bomba de recirculação de vinho
	Trocador de calor	C4-TC02	Controle de temperatura em 35°C durante o período de fermentação

Fonte: autor (2025).

simulação), considerando a quantidade de farelo de milho que entra no misturador (C05) e a quantidade de amido em cada unidade de milho ($r_{\text{amido/milho}}$).

$$C08 = \frac{C05 \cdot \rho_{\text{água}} \cdot r_{\text{amido/milho}}}{C_{\text{amido},0}} \quad (95)$$

Dáí, a quantidade de água de processo na C06 foi definida de modo a suprir a necessidade de solvente no misturador MI01, caso a quantidade vinda na C75 não fosse suficiente para atingir a concentração $C_{\text{amido},0}$. Portanto, a C06 foi calculada conforme Equação (96). Por se relacionarem com os reciclos do processo, as vazões das correntes C36, C71, C74 e C75 foram definidas como $1000 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ na primeira iteração.

$$C06 = \begin{cases} C08 - C71, & \text{se } C08 > C75 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (96)$$

A vazão C71 foi definida para passar toda quantidade vinda da C75 (caso a quantidade de solvente fique acima da quantidade vinda da C75) ou que passe apenas a quantidade necessária no misturador MI01 (caso a quantidade de solvente demandada nesse equipamento ficasse abaixo da quantidade vinda da C75). Assim, caso a vazão da C75 ficasse acima da necessária no MI01, a C71 apenas passaria a quantidade certa e a corrente C72 seria acionada, para descarte do excesso. Caso contrário, a corrente C71 passaria toda a vazão da C75 e não haveria purga. Portanto, as correntes C71 e C72 foram calculadas de acordo com as Equações (97) e (98).

$$C71 = \min(C75, C08) \quad (97)$$

$$C72 = \begin{cases} C75 - C71, & \text{se } C75 > C08 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (98)$$

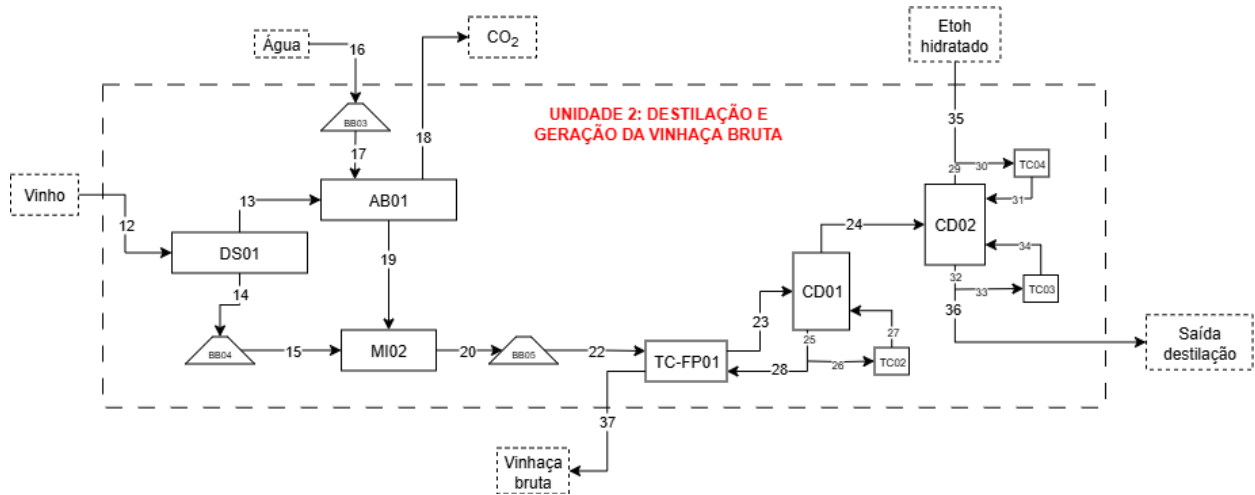
A água de processo entra no processo pela corrente C06, através do bombeamento da bomba BB01. Os cálculos das potências das bombas em cada caso serão detalhados na seção 9.2.1.

Calculadas a C08 e C05, há a mistura dessas duas correntes no misturador MI01, gerando o amido solubilizado na corrente C09. Essa corrente é bombeada pela bomba BB01 e segue para o trocador de calor TC01. A potência requerida por essa bomba foi calculada estimando a necessidade desse fluido passar pelo trocador de calor TC01 e,

depois, seguir para a dorna do processo específico. O trocador TC01 irá aquecer quando nos cenários LSF, SLSF e LSSF e resfriar quando no cenário SSF. Isso ocorre porque a solubilização que ocorre no misturador MI01 ocorre a 57 °C, que é a temperatura da corrente C10, e a temperatura do processo específico que recebe a corrente C11 varia a depender do cenário, podendo ser 80°C para os cenários LSF e LSSF, 65 °C para o cenário SLSF e 30 °C para o SSF. Os cálculos de balanço de energia para cada trocador serão detalhados na seção 9.2.1. Por fim, a corrente C11 tem vazão igual à da corrente C10, que segue para a unidade dos processos específicos, que foi detalhada na seção da metodologia do presente trabalho.

A unidade 2 recebe o vinho vindo da dorna de fermentação, que é a corrente C12. A Figura 61 exibe o processo e os equipamentos da unidade 2. A corrente C12 entra na unidade 2 a 30 °C, temperatura da fermentação. Essa corrente segue para o degaseificador DS01 para remoção do CO₂ ainda dissolvido no vinho. Nesse processo, Oliveira e Cruz (2023) encontraram um resultado no qual 89,57% da corrente C12 segue para a fase líquida e o restante para o processo de recuperação de etanol na coluna de absorção AB01. Portanto, no presente trabalho, C12 foi definida como 89,57% de C12 e C13 foi a diferença entre C12 e C14. Oliveira e Cruz (2023) reportam que a fração mássica de CO₂ na corrente C13 é de 96,05%. Portanto, o balanço de massa foi feito de modo que todo CO₂ que entra na corrente C13 sai na corrente C18. Logo, C18 foi calculado como sendo 96,05% da corrente C13. A quantidade de água necessária na coluna de absorção AB01 foi calculada em função das frações de etanol nas correntes C13 e C19, antes e depois do processo de absorção. Oliveira e Cruz (2023) reportam que as frações de etanol nas correntes C13 ($f_{\text{EtOH},C13}$) e C19 ($f_{\text{EtOH},C19}$) são 0,0228 e 0,0300, respectivamente. Portanto, a vazão da corrente C16 foi calculada em função da quantidade de CO₂ na corrente C18 (que é puramente CO₂), a vazão C13 e as frações de etanol mencionadas (Equação (99)).

Figura 61. Detalhamento do processo da unidade 2: destilação e geração da vinhaça bruta.



Fonte: Adaptado de Oliveira e Cruz (2023), Kwiatkowski *et al.* (2006), McAloon *et al.* (2000) e Quintero *et al.* (2008).

$$C16 = C18 + \left(\frac{f_{\text{EtOH},C13}}{f_{\text{EtOH},C19}} - 1 \right) \cdot C13 \quad (99)$$

A vazão da corrente C17 é igual da C16 e a C19 é dada pelo balanço das vazões das correntes C13, C17 e C18 ($C19 = C13 + C17 - C18$). Assim, o misturador MI02, como apresentado na Tabela 38, recebe as correntes C15 e C19 para mistura, posto que essas correntes possuem teores de etanol diferentes e seguirão para os processos de destilação, após o aquecimento. A vazão da corrente C20 é dada pela soma das vazões das correntes C15 e C19, e segue para a bomba BB05. A corrente C22, pressurizada a 2,5 bar, segue para o trocador de calor TC-FP01, que usa o calor da vinhaça bruta (corrente 28) para seu aquecimento, gerando a corrente C23, que segue para a coluna de destilação CD01.

No processo de destilação da CD01, há a geração da vinhaça bruta no fundo (corrente C28) e do produto de topo (C24), que segue para a segunda coluna de destilação dessa unidade (CD02). Dados relatados pela Aspen Tech (2017) informaram que 20,65% da corrente que entra na coluna CD01 segue como produto de topo e o restante vai para o fundo. Portanto, C24 foi calculada como 20,65% da C23, sendo C28

a diferença entre C23 e C24. No fundo na CD01, a corrente C26 (reciclo que vai para o refeedor representado pelo trocador de calor TC02) é calculada com base no reportado pela Aspen Tech (2017), que informa que essa corrente representa 21,30% do produto de fundo (corrente C28). Logo, C26 é 21,30% de C28. Com isso, a vazão da C25 é dada pela soma das vazões das correntes C28 e C26, e a vazão da corrente C27 é igual da corrente C26.

A corrente C24 segue para a segunda coluna de destilação dessa unidade, a CD02. Nela, há a produção da corrente de etanol hidratado, a C35. O cálculo da vazão dessa corrente foi feito considerando a concentração de etanol no vinho, fatores regulatórios da ANP e os rendimentos teóricos dos processos de hidrólise e de fermentação, como apresentado na Equação (65). Para o topo dessa coluna, a Aspen Tech (2017) reporta que sua taxa de refluxo ($f_{\text{refluxo},CD02}$) é de 1,66. Assim, a corrente C30 foi calculada conforme a Equação (100). Portanto, a corrente C29 foi dada pela soma das correntes C30 e C35. A vazão da corrente C31 é igual da C30.

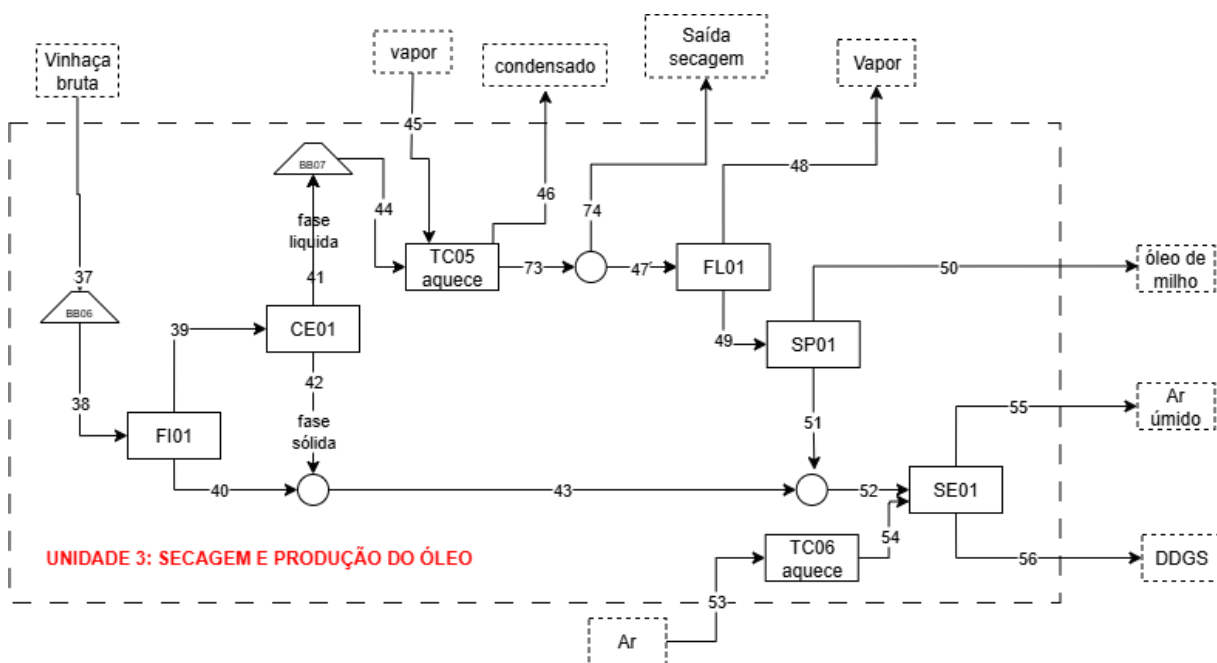
$$C30 = f_{\text{refluxo},CD02} \cdot C35 \quad (100)$$

Na base, a vazão da corrente C36 foi calculada pela diferença entre as vazões das correntes C24 e C35. Vale ressaltar que a vazão da corrente C36 foi estipulada como $1000 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$ como chute inicial e, nesse momento, ela é recalculada com informações de outras correntes. Portanto, essa corrente segue como saída do processo de destilação, se une a corrente C74 para formar a C75, que é alimentada no misturador MI01 para formação da pasta de amido, no processo de solubilização.

A vinhaça bruta também é gerada nessa unidade, sendo a corrente C37. Essa corrente é gerada pela corrente C28, após passar pelo trocador de calor TC-FP01, e segue para a unidade 3. Antes de seguir para os balanços da unidade 3, as vazões das correntes C71 e C72 são novamente calculadas conforme Equações (97) e (98), com as vazões calculadas via balanço até então.

A unidade 3 do presente trabalho visa recepcionar a vinhaça bruta, gerar a vinhaça e os coprodutos da usina, DDGS e óleo de milho. O detalhamento dos processos e dos equipamentos dessa unidade estão presentes na Figura 62.

Figura 62. Detalhamento do processo da unidade 3: secagem do DDGS e produção do óleo de milho.



Fonte: Adaptado de Oliveira e Cruz (2023), Kwiatkowski *et al.* (2006), McAloon *et al.* (2000) e Quintero *et al.* (2008).

A corrente C37, vinhaça bruta, é bombeada pela bomba BB06 até o filtro FI01, gerando a corrente C38, que tem a mesma vazão mássica que a C37. O processo de filtração, nesse momento, visa separar, a fase sólida da líquida, presentes na corrente C37. Segundo Aspen Tech (2017), 96,98% da corrente de vinhaça bruta (C38) segue para a fase líquida nesse processo de filtração. Portanto, a corrente C39 é calculada em função da razão mássica ($f_{líquido,FI01}$) entre o produto líquido e a entrada do filtro FI01 (Equação (101)). Logo, a vazão da corrente C40 é dada pela diferença entre as vazões das correntes C38 e C39.

$$C39 = f_{líquido,FI01} \cdot C38 \quad (101)$$

A corrente C39 segue para o processo de centrifugação na CE01, visando remover os sólidos que restaram do processo de filtração. De acordo com os resultados de Oliveira e Cruz (2023), 2,14% da vazão de entrada da CE01 segue para a fase sólida ($f_{\text{sólido,CE01}}$). Portanto, a corrente C42, fase sólida do processo de centrifugação da corrente C39, tem sua vazão calculada de acordo com a Equação (102). Com isso, a vazão da corrente C41 foi calculada pela diferença entre as vazões das correntes C39 e C42.

$$C42 = f_{\text{sólido,CE01}} \cdot C39 \quad (102)$$

O produto líquido da centrífuga CE01, a corrente C41, é bombeado pela bomba BB07, gerando a corrente C44, que segue para aquecimento no trocador de calor TC05, até a temperatura de 116 °C, conforme Oliveira e Cruz (2023), gerando a corrente C73, que é a vinhaça fina. Esse aquecimento é para o processo de flasheamento no FL01. Nesse momento, a corrente C74 ainda é definida pela condição de chute inicial, de 1000 kg·h⁻¹, mas esta será calculada com maior rigorosidade nos balanços a frente. Essa corrente foi definida de modo a garantir as especificidades das produções de DDGS e de óleo de milho.

De posse das vazões das correntes C73 e C74, a vazão da corrente C47 foi calculada como a diferença entre elas. Essa corrente é alimentada no flash FL01, para remoção de água em forma de vapor, visando a formação do óleo de milho no processo seguinte. Segundo Aspen Tech (2017), o produto de topo desse processo de flasheamento corresponde a 81,75% da quantidade alimentada. Portanto, a vazão da corrente C48 (vapor) foi calculada usando a relação entre a quantidade alimentada e o produto de todo desse processo ($f_{\text{topo,FL01}}$), conforme Equação (103). Com isso, a vazão da corrente de fundo do flash FL01, corrente C49, que segue para o separador SP01, foi calculada pela diferença entre as vazões das correntes C47 e C48.

$$C48 = f_{\text{topo,FL01}} \cdot C47 \quad (103)$$

A operação no separador SP01 visa a formação do óleo de milho. O cálculo da vazão da corrente C50 já foi explicada na seção 4.3.2, conforme Equação (69). Assim, a vazão da corrente C51 foi calculada pela diferença entre as vazões das correntes C49 e C50.

As correntes C42 e C40 se unem para formar a corrente C43, que recebe a corrente C51 para formar a C52. Essa corrente é o WDGS, que segue para o secador SE01 para formação do DDGS. O processo de secagem do WDGS para formar o DDGS é utilizando ar quente. O ar frio, corrente C53, entra inicialmente no trocador de calor TC06 e é aquecido até 270 °C. Os resultados de Oliveira e Cruz (2023) indicaram que é necessário 10,75 kg de ar por kg de WDGS para que a fração mássica de água nessa corrente reduza de 70% para 10%. Portanto, a vazão da corrente C53 foi calculada usando a relação mássica de 0,1075 ($f_{ar/WDGS}$) entre essas correntes, conforme Equação (104). Foi considerado que a vazão de ar úmido que sai do secador SE01, corrente C55, tem a mesma vazão da entrada de ar, corrente C54.

$$C53 = f_{ar/WDGS} \cdot C52 \quad (104)$$

O cálculo da vazão de DDGS, corrente C56, foi feito conforme descrito na seção 4.3.2 (Equação (68)).

Dada essa metodologia, nota-se que não tem um equacionamento que liga as correntes no secador SE01, de modo que seu balanço convirja, uma vez que a corrente C52 é definida pelos processos de flasheamento, de separação (corrente C51) e de centrifugação (corrente C42), e as correntes C54 e C55 são iguais, logo não afeta o balanço nessa operação. Dessa forma, a vazão da corrente C74 foi calculada de modo a garantir que as produções de DDGS e de óleo de milho seguissem as especificações mencionada e ainda o balanço de massa convergisse. A vazão da corrente C74 foi calculada pela Equação (106), usando o balanço de massa global da unidade 2 com a ausência dessa corrente ($BM_{unidade2, sem C74}$, Equação (105)) e considerando que no mínimo 10,37% da vinhaça bruta que entrou na unidade necessariamente teria de ser purgado (fator calculado pelos resultados de Oliveira e Cruz (2023)). Em outras palavras, a corrente C74 ou mandava para o reciclo o excesso que entrou nessa unidade e não se tornou nem óleo, nem DDGS, calculado pela Equação (105), ou mandava a quantidade mínima estabelecida, calculada usando o fator $f_{vinhaça,purga}$ de 0,1036.

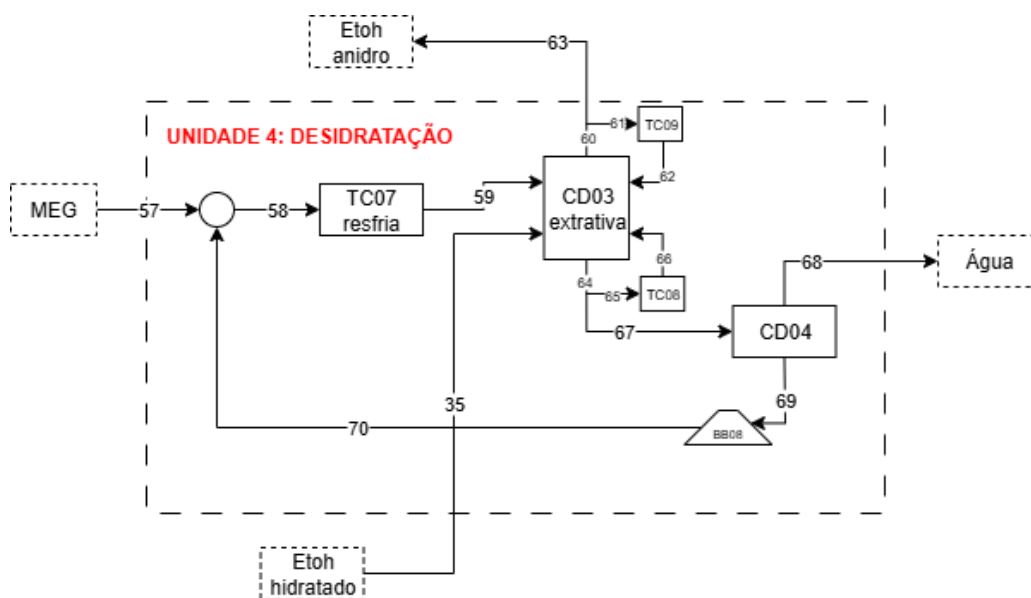
$$BM_{unidade2, sem C74} = C37 - C48 - C50 - C55 - C56 + C53 \quad (105)$$

$$C74 = \max \left(\begin{cases} BM_{unidade2, sem C74}, & \text{se } BM_{unidade2, sem C74} > 0 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}, f_{vinhaça,purga} \cdot C37 \right) \quad (106)$$

Com isso, a vazão da corrente C75 foi recalculada, como sendo a soma das vazões das correntes C74 e C36.

Como visto, a unidade 2 gera a vinhaça bruta, tratada na unidade 3, e o etanol anidro, que segue para a unidade 4, que tem o objetivo de desidratar o etanol hidratado utilizando monoetilenoglicol (MEG), para formar o etanol anidro. O detalhamento dessa unidade está apresentado na Figura 63.

Figura 63. Detalhamento do processo da unidade 4: desidratação.



Fonte: Adaptado de Oliveira e Cruz (2023), Kwiatkowski *et al.* (2006), McAloon *et al.* (2000) e Quintero *et al.* (2008).

Inicialmente, a corrente C58 foi definida, pois essa corrente é a quantidade de MEG necessária para a operação de desidratação. Alves *et al.* (2014) reporta que são necessários 1,18 kg de MEG para cada kg de etanol hidratado. Assim, a vazão da corrente C58 foi calculada em função da vazão da corrente de etanol hidratado (C35) e do fator de 1,18 ($f_{\text{MEG/EtOH-H}}$), conforme Equação (107). Essa corrente é formada pelas correntes de MEG puro (C57) e MEG recuperado da coluna CD04 (C70), e suas misturas geram uma corrente com temperatura acima (148,91 °C) da temperatura de operação da coluna CD03 (80 °C) (Oliveira e Cruz, 2023), portanto a corrente C58 precisa ser resfriada no trocador de calor TC07, gerando a corrente C59.

$$C58 = f_{\text{MEG/EtOH-H}} \cdot C35 \quad (107)$$

No balanço da coluna de destilação CD03, a corrente de etanol anidro (C63) foi definida antes das demais, de acordo com a metodologia descrita na seção 4.3.2, usando a Equação (70). Assim, de posse das vazões das correntes C59, C63 e C35 (calculada na unidade 2), a vazão da corrente C67 foi calculada. A vazão da corrente C61 foi calculada usando informação da taxa de reciclo no topo da CD03 ($f_{\text{reciclo,CD03}} = 0,5$, conforme Oliveira e Cruz, 2023) e a corrente C63, de acordo com a Equação (108). A vazão da corrente C62 é igual da C61 e da corrente C60 é dada pela soma dessas duas.

$$C61 = f_{\text{reciclo,CD03}} \cdot C63 \quad (108)$$

A coluna CD04 tem o objetivo de recuperar o MEG que sai do fundo da CD03. O balanço da coluna CD04 é feito de acordo com a taxa de recuperação do MEG. Com base nos resultados de Oliveira e Cruz (2023), 95,27% da corrente de MEG+água que entra na coluna de recuperação (corrente C67) retorna ao processo como MEG recuperado, gerando a corrente C69. Com isso, a C69 foi calculada de posse desse fator ($f_{\text{MEG,recuperado}}$) e a corrente C67, de acordo com a Equação (109).

$$C69 = f_{\text{MEG,recupado}} \cdot C67 \quad (109)$$

A vazão da corrente C68, portanto, é dada pela diferença entre as vazões das correntes C67 e C69. A corrente C69 passa pela bomba BB09, gerando a corrente C70, que seu use a corrente de MEG puro (C57) e forma a corrente C58. Com isso, a vazão da corrente de MEG puro (C57) é calculada pela diferença entre as vazões das correntes C58 e C70.

9.2.1. Balanço de energia/utilidades – processos gerais e específicos

Os balanços de energia visaram calcular os consumos de eletricidade pelas bombas e demais equipamentos, de vapor e de água de resfriamento. Esse cálculo foi feito individualmente, para cada equipamento do processo, com o intuito de contemplar a particularidade de cada operação.

Quanto a eletricidade, as bombas dos processos gerais foram a BB01, BB02, BB03, BB04, BB05, BB06, BB07 e BB08. As funções e justificativas de uso de cada

bomba estão descritas na Tabela 38. O cálculo das potências das bombas foi feito usando a Equação (78). No presente trabalho, foram considerados casos em que o bombeamento foi feito para alimentar um trocador de calor, ou para alimentar uma unidade com uma altura h , ou ambos em sequência. A definição dessas finalidades é necessária nos cálculos de perda de carga, ΔP . No caso da alimentação num trocador de calor, para cálculos de perda de carga, foram usadas heurísticas reportadas por Turton *et al.* (2012). Foram considerados trocadores do tipo casco-tubo, com 2 passes (NP_{TC}), com tubos de 4,9 metros de comprimento em cada passe (L_{TC}), considerando perda de carga por unidade de comprimento de tubulação ($f_{\Delta P/m}$) de 0,14/30,48 $\text{bar}\cdot\text{m}^{-1}$, conforme Turton *et al.* (2012). Com isso, a perda de carga num trocador (ΔP_{TC} , dado em bar) é dada pela Equação (110).

$$\Delta P_{TC} = f_{\Delta P/m} \cdot NP_{TC} \cdot L_{TC} \quad (110)$$

No caso da alimentação de algum equipamento, o cálculo da perda de carga (ΔP_H , dado em bar) levou em consideração a densidade da corrente bombeada (ρ_{Cn} , dado em $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$) e a altura de alimentação do equipamento (h , dado em m), conforme Equação (111).

$$\Delta P_H = 0,01 \cdot \rho_{Cn} \cdot g \cdot h \quad (111)$$

sendo g a constante gravitacional, dada por $9,80665 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ e 0,01 um conversor de unidade (de Pa para bar). As alturas dos equipamentos foram estimadas com metodologias distintas, a serem detalhadas abaixo.

A BB01 é responsável pelo bombeamento da água de processo para a operação de solubilização no misturador MI01. Nesse caso, foi usada apenas a Equação (111), considerando a altura desse equipamento de 10 m e a densidade do fluido de $0,99802 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, posto que essa corrente é de água pura.

No caso da BB02, ela é usada para bombear a corrente C09 para o trocador de calor TC01 e para a primeira dorna da região dos processos específicos (C1-RE01 no cenário LSF, C2-RE01 no cenário SLSF, C3-RE03 no cenário LSSF e C4-RE01 no cenário SSF). Nesse caso, a perda de carga é calculada pela soma das Equações (110) e (111). A massa específica dessa mistura foi de $1,094 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (Oliveira e Cruz, 2023). A

altura da dorna alimentada variou a depender do cenário: 24,73 m no caso do cenário SSF e 22,47 para os demais cenários.

As perdas de carga da BB03 e da BB04 foram calculadas de maneira similar. A BB03 é responsável por alimentar água de processo na coluna de absorção AB01, logo a perda de carga é calculada apenas pela Equação (111). A massa específica é de $0,99802 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, por ser água pura. A altura da coluna AB01 foi estimada considerando que ela seja comporta por 9 pratos (Oliveira e Cruz, 2023), com espaçamento de 0,55 m entre os pratos e com espaços de 1,2 e 1,8 m no topo e na base da coluna, respectivamente (Turton *et al.*, 2012). Assim, a altura dessa coluna foi de 7,95 m. Com isso, a perda de carga foi calculada, permitindo o cálculo da potência dessa bomba. No caso da BB04, da mesma forma, apenas a Equação (111) foi usada, a mesma altura do AB01 foi usada para o MI02, e a massa específica dessa corrente foi de $1,017 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (Oliveira e Cruz, 2023).

A BB05 alimenta a corrente C22 no trocador de calor TC-FP01 e na coluna de destilação CD01; ou seja, sua perda de carga é calculada pela soma das Equações (110) e (111). A massa específica dessa corrente foi definida como $1,009 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (Oliveira e Cruz, 2023). A altura da CD01 foi definida considerando que as mesmas heurísticas descritas para a coluna de absorção AB01, mas considerando 24 pratos, conforme Oliveira e Cruz (2023), resultado em 16,2 m de altura.

A BB06 é responsável pelo bombeamento da vinhaça bruta para o processo de filtração, no filtro FI01. A massa específica da vinhaça bruta foi de $1,011 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (Oliveira e Cruz, 2023) e a altura do equipamento foi definida como 10 m. Assim, a Equação (111) foi usada. No caso na BB07, que é responsável por bombear a fase líquida da centrífuga CE01 pelo trocador de calor TC05 e, em seguida, para a torre de flash FL01, sua perda de carga será dada pela soma das Equações (110) e (111), considerando a altura do FL01 de 10 m e massa específica da corrente de $1,2785 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (Oliveira e Cruz, 2023).

Por fim, a BB08 bombeia a corrente C70 para o trocador TC07, que segue para a coluna CD03. Logo, a perda de carga para essa bomba foi calculada usando as Equações (110) e (111). A altura da CD03 foi calculada usando as mesmas heurísticas que as

usadas para CD01 e a AB01, mas considerando que essa coluna tem 26 pratos, conforme Oliveira e Cruz (2023). A massa específica adotada foi de $1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

No caso das bombas nos processos específicos, conforme apresentado na Tabela 39, as quantidades se distinguem em cada cenário. Para os casos de bombas que encham as dornas (C1-BB01 e C1-BB02 no cenário LSF, C2-BB01 no cenário SLSF, C3-BB01 no cenário LSSF), sua potência foi calculada considerando a perda de carga nos seus respectivos trocadores e a alimentação na dorna correspondente.

As alturas de cada dorna foram calculadas com base em seu volume total, informação retirada de Oliveira e Cruz (2023), e da média da razão altura/diâmetro (H/D) de dornas voltadas para fermentação, encontradas em SD Inox (2025), EnduraMAX (2025) e Czech Brewery System (2025). Portanto, o H/D definido no presente trabalho foi de 2,1795. Os volumes úteis das dornas dos processos de hidrólises foram de 1875 m^3 e para os processos de fermentação, 2500 m^3 , com 80% de volume útil (parâmetro calculado usando dados de SD Inox (2025), EnduraMAX (2025) e Czech Brewery System (2025)). Com isso, a altura calculada para as dornas dos processos de hidrólises foi de 22,47 m e para as dornas de fermentação, 24,73 m. Portanto, as potências das bombas responsáveis por alimentar essas dornas foram calculadas usando esse valor para a determinação da perda de carga. No caso das bombas de recirculação de vinho, foi considerada a metade da altura total da dorna de fermentação.

Calculadas as perdas de carga de cada bomba, pôde-se calcular a potência de cada uma e, por conseguinte, a energia consumida por elas. Como descrito anteriormente, a energia foi calculada pelo produto entre a potência e h_{totais} , que é o tempo de operação anual dado em horas. Entretanto, no caso da BB02, que alimenta os processos específicos, e das demais bombas dos processos específicos, sua potência foi calculada em função do tempo de enchimento da dorna 1, do número de ciclos e da quantidade de dornas disponíveis para a fermentação. As potências, tempos de uso e energias das bombas presentes nos processos são apresentados na Tabela 40, para os cenários otimizados.

Tabela 40. Potências, tempos de uso e energias consumidas pelas bombas nos processos gerais otimizados para os cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF.

TAG	Cenário LSF			Cenário SLSF		
	Potência (kW)	Tempo de uso (h)	Energia (MWh)	Potência (kW)	Tempo de uso (h)	Energia (MWh)
BB01	5,5505	7864,85	43,6535	5,5369	7858,08	43,5093
BB02	25,6935	610	15,6730	25,7125	756	19,4387
BB03	0,6745	7864,85	5,3050	0,6759	7858,08	5,3112
BB04	8,0374	7864,85	63,2128	8,0536	7858,08	63,2861
BB05	18,0745	7864,85	142,1532	18,1110	7858,08	142,3177
BB06	8,7325	7864,85	68,6794	8,7501	7858,08	68,7589
BB07	8,5807	7864,85	67,4859	8,5980	7858,08	67,5641
BB08	2,6696	7864,85	20,9960	2,6354	7858,08	20,7093
Ci-BB01 ^a	25,8654	610	15,7779	28,4779	1512	43,0586
Ci-BB02 ^a	28,4212	1220	34,6739	14,2390	7228,08	617,5238 ^b
Ci-BB03 ^a	14,2106	7254,85	515,4789 ^b	-	-	-
TAG	Cenário LSSF			Cenário SSF		
	Potência (kW)	Tempo de uso (h)	Energia (MWh)	Potência (kW)	Tempo de uso (h)	Energia (MWh)
BB01	5,52609	7914,73	43,7375	6,69765	7908,80	52,9704
BB02	25,56	720	18,4032	32,8048	567	18,6003
BB03	0,671514	7914,73	5,3149	0,781846	7908,80	6,1835
BB04	8,00156	7914,73	63,3302	9,31624	7908,80	73,6803
BB05	17,9939	7914,73	142,4169	20,9504	7908,80	165,6925
BB06	8,69352	7914,73	68,8069	10,1219	7908,80	80,0521
BB07	8,54245	7914,73	67,6112	9,94601	7908,80	78,6610
BB08	2,6528	7914,73	20,9961	2,26813	7908,80	17,9382
Ci-BB01 ^a	28,2925	1440	40,7412	16,4278	7665,80	881,5256 ^b
Ci-BB02 ^a	14,1463	7314,73	620,8582 ^b	-	-	-

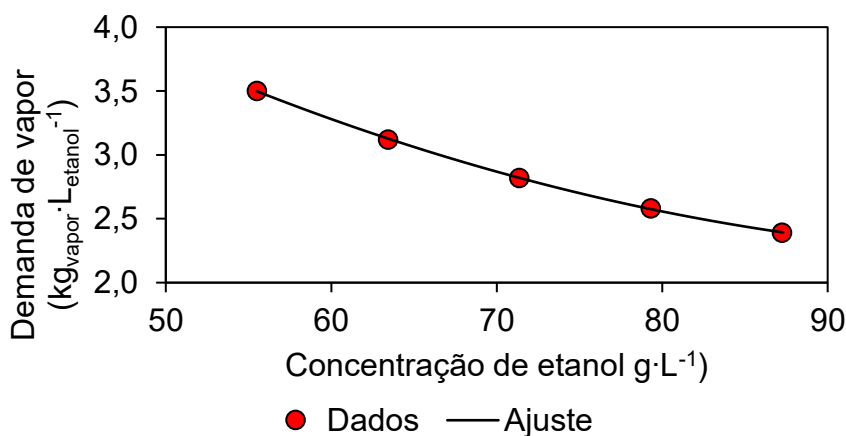
^a Cenário LSF: i = 1; cenário SLSF: i = 2; cenário LSSF: i = 3; cenário SSF: i = 4.

^b Calculado considerando o n° de dornas de fermentação de cada cenário (5 no LSF, 6 no SLSF e no LSSF, e 7 no SSF).

Fonte: autor (2025).

No que se refere aos balanços para os consumos de vapor, a Equação (80) foi utilizada para estimar a vazão de vapor necessária em cada caso. No entanto, essa equação não foi usada no caso dos trocadores de calor TC02, TC03 e TC04, presentes na unidade 2. Para isso, foram usados os dados de Zarpelon (2012), que informou a quantidade de vapor, em kg, necessária para destilar uma unidade de etanol hidratado, em litros, em função da concentração do vinho, em °GL. Com isso, um polinômio de segunda ordem foi ajustado para calcular a quantidade de vapor por unidade de volume de etanol hidratado, considerando a concentração de etanol na corrente C12. Os dados reportados por Zarpelon (2012) e a curva ajustada são apresentados na Figura 64. Os coeficientes ajustados foram $a = 0,0050 \text{ kg}_{\text{vapor}} \cdot \text{L}_{\text{etanol}} \cdot \text{g}_{\text{etanol}}^{-2}$, $b = -0,1061 \text{ kg}_{\text{vapor}} \cdot \text{g}_{\text{etanol}}^{-1}$ e $c = 7,8489 \text{ kg}_{\text{vapor}} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$, na equação $y = a \cdot x^2 + b \cdot x + c$, sendo y a demanda de vapor, em $\text{kg}_{\text{vapor}} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$, e x a concentração de etanol no vinho, em $\text{g}_{\text{etanol}} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$. O ajuste resultou no coeficiente de determinação de 0,9999 e resíduo médio percentual de 0,1331%.

Figura 64. Dados de consumo de vapor na unidade de destilação em função da concentração de etanol no vinho e curva ajustada aos dados.



Fonte: adaptado de Zarpelon (2012)

Não há trocador de calor que aquece nos processos específicos. Os resultados do consumo de vapor, tempo de uso de cada trocador e quantidade total anual de vapor demandada para cada trocador que aquece está presente na Tabela 41. Nota-se que não há dados para a TC01 no cenário SSF, pois nesse cenário esse trocador não usa vapor.

Tabela 41. Resultados de vazão, tempo de uso e consumo total de vapor pelos trocadores nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados.

TAG	Cenário LSF			Cenário SLSF		
	Vazão (kg·h ⁻¹)	Tempo de uso (h)	Consumo total (ton)	Vazão (kg·h ⁻¹)	Tempo de uso (h)	Consumo total (ton)
TC01	6052,43	610	3691,98	6056,90	756	4579,02
TC02	43409,30	7865	341407,63	42858,90	7858,08	336788,66
TC03						
TC04						
TC05	10512,00	7865	82675,30	10533,20	7858,08	82770,73
TC06	25455,40	7865	200202,90	25509,10	7858,08	200452,55
TC08	15672,10	7865	123258,72	15471,50	7858,08	121576,28
TAG	Cenário LSSF			Cenário SSF		
	Vazão (kg·h ⁻¹)	Tempo de uso (h)	Consumo total (ton)	Vazão (kg·h ⁻¹)	Tempo de uso(h)	Consumo total (ton)
TC01	6020,97	720	4335,10	-	-	-
TC02	43134,1	7914,73	341394,76	37565,4	7908,8	297097,24
TC03						
TC04						
TC05	10465,1	7914,73	82828,44	12184,6	7908,8	96365,56
TC06	25345,6	7914,73	200603,58	29829,4	7908,8	235914,76
TC08	15573,5	7914,73	123260,05	13315,2	7908,8	105307,25

Fonte: autor (2025).

Quanto aos balanços de energia para o cálculo de água de resfriamento, a metodologia descrita na seção 4.3.4, conforme Equação (79). Apenas o trocador de calor TC07 resfia e faz parte dos processos gerais. Seu cálculo de demanda de água de resfriamento foi feito usando a Equação (79) e a capacidade calorífica da corrente C58 (mistura de MEG recuperado e puro) foi estimada usando coeficientes reportados por Perry (1963), para a temperatura da corrente (148,91 °C). Para o cenário SSF, o TC01 também entra no grupo de trocadores de calor que resfia e fazem parte dos processos gerais.

Quanto aos processos específicos, todos os trocadores foram calculados de maneira similar, já explicado. No entanto, o consumo de água de resfriamento do trocador de calor responsável pelo resfriamento da dorna de fermentação (C1-TC03, C2-TC02, C3-TC02 e C4-TC01) foi calculado em função da massa de glicose fermentada, que foi

calculada usando a taxa de consumo desse componente (μ_F , Equação (26)), conforme Equação (112).

$$m_{\text{glicose}}^{\text{consumida}} = \frac{V}{100} \cdot \int_0^{t_{\text{processo}}} \frac{C_{\text{células}}}{Y_{\text{xs}}} \cdot \mu_F \cdot dt \quad (112)$$

sendo t_{processo} o tempo do processo em que ocorre a fermentação (podendo ser F, S+F ou L+S+F). De posse da massa de glicose e da taxa de calor liberada por unidade de consumo desse componente, a demanda da água de resfriamento para esse trocador de calor.

Calculada toda água de resfriamento necessária para o processo, a quantidade de perda de água por evaporação, numa unidade de torre de resfriamento, foi estimada, adaptando a metodologia descrita por Turton *et al.* (2012). Inicialmente foi calculada a quantidade de água de resfriamento necessária para remover $1 \text{ GJ} \cdot \text{h}^{-1}$ de energia do processo. Para isso, o C_p foi considerado $4180 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$ e o ΔT de $5 \text{ }^\circ\text{C}$ (entrada a 20 e saída a $25 \text{ }^\circ\text{C}$). Com isso, a quantidade de água de resfriamento necessária foi de $47846,89 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$. Nesse momento, é necessário conhecer a quantidade de energia necessária para evaporar a água na temperatura de trabalho da torre de resfriamento, que é a temperatura de saída da água de resfriamento das operações de troca térmica ($25 \text{ }^\circ\text{C}$). Com base no reportado por Van Wylen *et al.* (1994) a entalpia de vaporização da água à $25 \text{ }^\circ\text{C}$ é de $2442,30 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$. Com isso, o percentual de água perdida na torre (W_{torre}) é calculado em função da quantidade de água necessária a ser evaporada para suprir a base de cálculo da quantidade de energia ($BC_{\text{calor}} = 1 \text{ GJ} \cdot \text{h}^{-1}$) e a quantidade total de água que segue para esse equipamento, conforme Equação (113).

$$W_{\text{torre}} = \frac{\left(\frac{BC_{\text{calor}}}{\Delta H_{\text{água}}^{\text{vap}}} \right)}{\dot{m}_{\text{AR}}^{\text{total}}} = \frac{\left(\frac{1 \cdot 10^9 \text{ J} \cdot \text{h}^{-1}}{2442,30 \cdot 10^3 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}} \right)}{47846,89 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}} = 0,856\% \quad (113)$$

Turton *et al.* (2012) propõem um balanço de sais entre as correntes de água que ficam recirculando na torre de resfriamento e a quantidade de água de make-up da torre. Portanto, com base no reportado pelos autores, no presente trabalho foi estabelecido que

a razão entre a quantidade de sais da água que circula na torre de resfriamento (s_{recirc}) e da água de make-up (s_{mu}) é de 4. Assim, o percentual de água de make-up necessária pode ser calculado com base na Equação (114).

$$f_{\text{perda, torre}} = \frac{s_{\text{in}} \cdot W_{\text{torre}}}{s_{\text{loop}} - s_{\text{in}}} - W_{\text{CN}} = \frac{0,856\%}{3} - 0,03\% \approx 2,565\% \quad (114)$$

sendo W_{CN} a perda de massa de água por convecção natural. Os resultados de consumo de água de resfriamento estão apresentados na Tabela 42.

Tabela 42. Resultados de vazão, tempo de uso e consumo total de vapor pelos trocadores nos cenários LSF, SLSF, LSSF e SSF otimizados.

TAG	Cenário LSF			Cenário SLSF		
	Vazão (kg·h ⁻¹)	Tempo de uso (h)	Consumo total (ton)	Vazão (kg·h ⁻¹)	Tempo de uso (h)	Consumo total (ton)
TC07	181634	7864,85	1,43E+06	179309,00	7858,08	1,41E+06
Ci-TC01	413408	122	50435,78	1,38E+06	252	348024,60
Ci-TC02	964810	244	235413,64	2,52E+07	7228,08	1,09E+09 ^b
Ci-TC03	2,56E+07	7255	9,29E+08 ^b	-	-	-
TAG	Cenário LSSF			Cenário SSF		
	Vazão (kg·h ⁻¹)	Tempo de uso (h)	Consumo total (ton)	Vazão (kg·h ⁻¹)	Tempo de uso (h)	Consumo total (ton)
TC01	-	-	-	732937	1,35	6926,25
TC07	180491	7914,73	1,43E+06	154319	7908,80	1,22E+06
Ci-TC01 ^a	1,37E+06	240	329294,40	2,11E+07	7665,8	1,13E+09 ^b
Ci-TC02 ^a	2,55E+07	7314,73	1,12E+09 ^b	-	-	-

^a Cenário LSF: i = 1; cenário SLSF: i = 2; cenário LSSF: i = 3; cenário SSF: i = 4.

^b Calculado considerando o n° de dornas de fermentação de cada cenário (5 no LSF, 6 no SLSF e no LSSF, e 7 no SSF).

Fonte: autor (2025).

9.3. Apêndice C – Equações dos indicadores calculados na simulação

Conforme visto na metodologia (seção 4.3.6), alguns indicadores da usina simulada foram calculados para fins de comparação com a literatura. As equações que foram utilizadas para o cálculo desses indicadores estão presentes nas Equação de (115) a (139).

- Indicadores para o milho:

Quantidade total de milho no ano (QTMA, mil ton·ano⁻¹):

$$QTMA = Qtde_{\text{milho}} \cdot 10^{-6} \quad (115)$$

Quantidade de milho por dia (QMpD, ton·dia⁻¹);

$$QMpD = \frac{Qtde_{\text{milho}}}{D_{\text{op}} \cdot 1000} \quad (116)$$

Massa de milho por unidade de massa de etanol (MMpME, kg_{milho}·kg_{etanol}⁻¹).

$$MMpME = \frac{Qtde_{\text{milho}} \cdot 1000}{Qtde_{\text{etanol}} \cdot \rho_{\text{etanol}}} \quad (117)$$

- Indicadores para o etanol

Quantidade total de etanol no ano (QTEA, milhões L·ano⁻¹);

$$QTEA = Qtde_{\text{etanol}} \cdot 10^{-6} \quad (118)$$

Quantidade de etanol por dia (QEpD, L·dia⁻¹);

$$QEpD = \frac{Qtde_{\text{etanol}}}{D_{\text{op}}} \quad (119)$$

Rendimento industrial (RInd, L_{etanol}·ton_{milho}⁻¹).

$$RInd = \frac{Qtde_{\text{etanol}}}{Qtde_{\text{milho}} \cdot 10^{-3}} \quad (120)$$

- Indicadores para o DDGS e o óleo de milho:

Quantidade de DDGS por unidade de milho (QDpM, kg_{DDGS}·ton_{milho}⁻¹);

$$QDpM = \frac{Qtde_{\text{DDGS}}}{Qtde_{\text{milho}} \cdot 10^{-3}} \quad (121)$$

Quantidade de óleo por unidade de milho (QOpM, kg_{milho}·ton_{milho}⁻¹);

$$QOpM = \frac{Qtde_{\text{óleo}}}{Qtde_{\text{milho}} \cdot 10^{-3}} \quad (122)$$

- Indicadores para utilidades

Quantidade de vapor por volume de etanol (QVpE, $\text{kg}_{\text{vapor}} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$);

$$QVpE = \frac{\sum_n \dot{m}_{\text{vap},Cn}}{Qtde_{\text{etanol}}} \quad (123)$$

Quantidade de água de processo por massa de milho (QAPpM, $\text{m}^3_{\text{água}} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);

$$QAPpM = \frac{\sum_n \dot{m}_{AP,Cn}}{Qtde_{\text{milho}} \cdot 10^{-3}} \quad (124)$$

Quantidade de água de processo por volume de etanol (QAPpE, $\text{m}^3_{\text{água}} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$);

$$QAPpE = \frac{\sum_n \dot{m}_{AP,Cn}}{Qtde_{\text{etanol}}} \quad (125)$$

Quantidade de eletricidade por massa de milho (QELpM, $\text{kWh} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);

$$QELpM = \frac{\sum_n E_{\text{bombas},Cn} + E_{\text{demais equipamentos}}}{Qtde_{\text{milho}} \cdot 10^{-3}} \quad (126)$$

Quantidade de eletricidade por volume de etanol (QELpE, $\text{kWh} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$);

$$QELpE = \frac{\sum_n E_{\text{bombas},Cn} + E_{\text{demais equipamentos}}}{Qtde_{\text{etanol}}} \quad (127)$$

- Indicadores para os custos:

Custo total por unidade de milho (CTpM, $\text{R\$} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);

$$CTpM = \frac{\text{Custo}_{\text{total}}}{Qtde_{\text{milho}} \cdot 10^{-3}} \quad (128)$$

Custo total por volume de etanol (CTpE, $\text{R\$} \cdot \text{L}_{\text{etanol}}^{-1}$);

$$CTpE = \frac{\text{Custo}_{\text{total}}}{Qtde_{\text{etanol}}} \quad (129)$$

Custo operacional por unidade de milho (COPpM, $\text{R\$} \cdot \text{ton}_{\text{milho}}^{-1}$);

$$COPpM = \frac{Custos_{LAB}}{Qtde_{milho} \cdot 10^{-3}} \quad (130)$$

Custo com eletricidade por unidade de milho (CELpM, R\$·ton_{milho}⁻¹);

$$CELpM = \frac{Custos_{eletricidade}}{Qtde_{milho} \cdot 10^{-3}} \quad (131)$$

Custo eletricidade por volume de etanol (CELpE, R\$·L_{etanol}⁻¹);

$$CELpE = \frac{Custos_{eletricidade}}{Qtde_{etanol}} \quad (132)$$

Custo com água de resfriamento por volume de etanol (CARpE, R\$·L_{etanol}⁻¹);

$$CARpE = \frac{Custos_{AR}}{Qtde_{etanol}} \quad (133)$$

Custo com água de processo por volume de etanol (CAPpE, R\$·L_{etanol}⁻¹);

$$CAPpE = \frac{Custos_{AP}}{Qtde_{etanol}} \quad (134)$$

Custo com MP por unidade de milho (CMPpM, R\$·ton_{milho}⁻¹);

$$CMPpM = \frac{Custos_{milho}}{Qtde_{milho} \cdot 10^{-3}} \quad (135)$$

Custo com milho por volume de etanol (CMpE, R\$·L_{etanol}⁻¹);

$$CMpE = \frac{Custos_{milho}}{Qtde_{etanol}} \quad (136)$$

Custo com MP por volume de etanol (CMPpE, R\$·L_{etanol}⁻¹);

$$CMPpE = \frac{Custos_{MP}}{Qtde_{etanol}} \quad (137)$$

Custo com células por volume de etanol (CCELpE, R\$·L_{etanol}⁻¹);

$$CCELpE = \frac{Custos_{células}}{Qtde_{etanol}} \quad (138)$$

Custo com enzimas por volume de etanol (CENZpE, R\$·L_{etanol}⁻¹);

$$CCELpE = \frac{Custos_{\alpha\text{-amilase}} + Custos_{glicoamilase}}{Qtde_{etanol}} \quad (139)$$