

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA PRODUÇÃO DE ETANOL VIA FERMENTAÇÃO ALCÓOLICA DA GLICOSE

Michel Brasil Silva¹
Danielle Spohr de Oliveira²

RESUMO

Com a crescente demanda energética e com os problemas ambientais gerados pela utilização de combustíveis de origem fóssil, o estudo de energias renováveis obtidas por meio de biomassa é cada vez mais intenso. Com esse mercado promissor, no presente trabalho visou-se modelar em escala piloto, com o auxílio da ferramenta computacional Scilab, uma fermentação alcoólica de glicose para produção do combustível etanol em um biorreator do tipo batelada alimentada, utilizando como catalisador do processo o microrganismo *Saccharomyces cerevisiae*. Os dados utilizados para desenvolver a base do modelo foram retirados de literatura especializada, e, posteriormente, alguns parâmetros foram modificados a fim de se conseguir otimizar o processo. Gráficos de concentração versus tempo foram plotados tanto para os dados bases quanto para os dados modificados, nos quais estes foram analisados, e determinou-se qual parâmetro conseguiria um ponto de equilíbrio mais rápido da reação obtendo uma maior formação de produto. O resultado foi satisfatório, e conclui-se que, com as variáveis Y_s/c no valor de 17,9 e Y_p/c no valor de 8, alcançou-se a melhor concentração máxima em um menor período de tempo.

Palavras-chave: *Saccharomyces cerevisiae*. Scilab. Energias renováveis. Batelada alimentada.

1 INTRODUÇÃO

Os derivados de petróleo são uma das maiores bases energéticas mundiais, porém são fontes não renováveis, limitadas e que possuem elevada liberação de gases atmosféricos causadores de efeito estufa. Um mercado cada vez mais crescente para substituição desses derivados são os combustíveis oriundos de biomassa, capazes de substituir parcial ou totalmente os combustíveis de origem fóssil (GNANSOUNOU; DAURIAT, 2005; WYMAN, 2007). No Brasil, segundo a Companhia Nacional de Abastecimento (Conab) (2016), o setor sucroalcooleiro deverá atingir na safra 2016/2017 uma área colhida de 8.973,2 mil hectares de cana-de-açúcar dos quais deverão ser produzidos 39,96 milhões de toneladas de açúcar e 27,5 bilhões de litros de etanol, evidenciando, assim, que a cana-de-açúcar é um dos mercados mais promissores para a produção de combustível provindo de fontes renováveis. O etanol é um dos combustíveis renováveis oriundos da cana-de-açúcar e pode ser produzido por meio da fermentação alcoólica, que consiste na transformação de matéria orgânica mediante um processo biológico e anaeróbio; a fermentação compreende um conjunto de reações enzimáticas em que uma molécula orgânica é degradada em compostos mais simples (GNANSOUNOU; DAURIAT, 2005; LOBATO, 2015; LOBATO; SANTOS; MURATA, 2005; LOBATO et al., 2005). As leveduras e algumas bactérias fermentam açúcares produzindo álcool etílico e gás carbônico. Entre os microrganismos, um dos mais utilizados na fermentação é a espécie *Saccharomyces cerevisiae*, que já é utilizada a milênios e atualmente é muito empregada na fermentação de glicose para produção de etanol. Os processos de fermentação podem ser conduzidos em batelada, batelada alimentada ou contínuo; porém grande parte dos processos fermentativos industriais envolvendo *Saccharomyces cerevisiae* é conduzida em batelada alimentada (WYMAN, 2007), já que este se mostra o modo de operação

¹ Mestre em Engenharia Química pela Universidade Federal do Paraná; Especialista em Gestão da Produção pela Universidade do Oeste de Santa Catarina; Docente na Universidade do Oeste de Santa Catarina; micbrava@yahoo.com.br

² Graduanda em Engenharia Química na Universidade do Oeste de Santa Catarina; dani.spohr@hotmail.com

mais efetivo para amenizar os efeitos da inibição causados pelo produto e pelo substrato no processo de fermentação. Esse processo é definido como uma técnica em processos microbianos, nos quais um ou mais nutrientes são adicionados no fermentador durante o cultivo, e os produtos aí permanecem até o final da fermentação (SUHAIMI et al., 2012; YOSHIDA et al., 1999). Nesse contexto, a modelagem matemática do processo de fermentação alcoólica via batelada alimentada para a produção de etanol a partir de *Saccharomyces cerevisiae* é um problema de grande interesse da engenharia (LOBATO, 2015). Para realizar a modelagem de um problema, existem muitos softwares de apoio, e um que vem se tornando extremamente viável é o Scilab, um programa de computação gratuito capaz de solucionar algoritmos complexos e de fácil manuseio. O Scilab inclui grande número de bibliotecas que englobam funções gráficas, integração numérica, álgebra linear, otimização e outras, além de bibliotecas específicas para engenharia e ser de fácil manuseio (SCILAB, 2015). Com o desenvolvimento deste estudo, objetivou-se o desenvolvimento de um modelo matemático para produção de etanol por meio da fermentação da glicose, utilizando o microrganismo *Saccharomyces cerevisiae* como catalisador. O modelo foi desenvolvido baseando-se na literatura e aperfeiçoando algumas de suas variáveis, visando melhorar a produtividade e diminuir o tempo de equilíbrio da reação.

2 METODOLOGIA

Para o desenvolvimento do estudo foram utilizadas equações baseadas em Fogler (2009). As equações foram adaptadas para o uso de glicose na produção de etanol com auxílio do microrganismo *Saccharomyces cerevisiae*.

2.1 BALANÇOS DE MASSA

As equações 1, 2 e 3 representam o balanço de massa para as concentrações de células, substrato e produto, respectivamente, ao longo do tempo. A concentração de células indicada pela equação 1 depende apenas da velocidade de crescimento das células e da velocidade de morte celular (FOGLER, 2009).

$$\frac{dC_c}{dt} = (rg - rd) \quad (1)$$

Em que:

rg = velocidade de crescimento celular;

rd = velocidade de morte celular.

Já a equação 2 mostra que a concentração do substrato ao longo do tempo se baseia na velocidade de crescimento celular, na massa de substrato consumido por massa de células formadas e na velocidade de consumo do substrato (FOGLER, 2009).

$$\frac{dC_s}{dt} = Y_{s/c} * (-rg) - rsm \quad (2)$$

Em que:

$Y_{s/c}$ = relação de massa de substrato consumido/massa células novas formadas;

rsm = velocidade de consumo do substrato.

E a equação 3 mostra que a concentração de produto formado ao longo do tempo é igual à velocidade celular multiplicada pela relação entre a massa de produto formado por massa de células novas formadas (FOGLER, 2009).

$$\frac{dC_p}{dt} = Y_{p/c} * (rg) \quad (3)$$

Em que:

$Y_{p/c}$ = relação massa produto formado/massa de células novas formadas.

2.2 LEIS DE VELOCIDADE

Muitas são as leis de velocidade para crescimento de novas células; a lei utilizada neste trabalho é uma adaptação de uma das mais comumente utilizadas, a equação de Monod. A equação 4 é uma forma empírica fundamentada na equação de Monod para processos nos quais o produto inibe a velocidade de crescimento celular, que é o caso do etanol (FOGLER, 2009).

$$r_g = \mu_{\text{máx}} * \left(1 - \frac{C_p}{C_{p^*}}\right)^n * \frac{C_c + C_s}{K_s + C_s} \quad (4)$$

Em que:

$\mu_{\text{máx}}$ = velocidade específica de crescimento máxima (s^{-1});

C_p = concentração de produto (g/dm^3);

C_{p^*} = concentração do produto no qual todo metabolismo cessa (g/dm^3);

n = constante empírica;

C_c = concentração de células (g/dm^3);

C_s = concentração de substrato (g/dm^3);

K_s = constante de Monod (g/dm^3).

A velocidade de morte celular é resultado do esgotamento de nutrientes no meio e pode ser calculada por meio da equação 5 (FOGLER, 2009):

$$r_d = k_d * C_c \quad (5)$$

Em que:

k_d = velocidade específica de morte natural.

Além de ser consumido para produção de novas células, uma parte do substrato deve ser usada para manutenção das células já existentes; a velocidade com que o substrato é consumido para manutenção celular está indicada na equação 6 (FOGLER, 2009):

$$r_{sm} = m * C_c \quad (6)$$

Em que:

m = massa substrato consumido para manutenção/massa de células * tempo.

2.3 ESTEQUIOMETRIA

A estequiometria de crescimento celular é complexa e varia conforme o microrganismo e as condições do ambiente. No caso da formação de etanol por intermédio da fermentação da glicose a formação do produto somente ocorre durante a fase de crescimento exponencial, e a equação 7 traz o cálculo da velocidade de formação do produto (FOGLER, 2009).

$$rp = Yp/c * rg \quad (7)$$

2.4 EQUAÇÕES DIFERENCIAIS

Combinando as equações anteriormente apresentadas, obtêm-se as equações 8, 9 e 10, que são equações diferenciais ordinárias e representam a concentração de células, substrato e produto, respectivamente, ao longo do tempo; estas foram as equações trabalhadas no software Scilab para plotagem dos gráficos (FOGLER, 2009).

$$\frac{dCc}{dt} = \mu_{\text{máx}} * \left(1 - \frac{Cp}{Cp^*}\right)^n * \frac{Cc + Cs}{Ks + Cs} - (kd * Cc) \quad (8)$$

$$\frac{dCs}{dt} = -Ys/c * \mu_{\text{máx}} * \left(1 - \frac{Cp}{Cp^*}\right)^n * \frac{Cc + Cs}{Ks + Cs} - mCc \quad (9)$$

$$\frac{dCp}{dt} = Yp/c * rg \quad (10)$$

2.5 DADOS INICIAIS

Os dados inseridos inicialmente no modelo para plotagem do primeiro gráfico são de base literária, retirados de Fogler (2009) e seguem listados a seguir na Tabela 1. Os demais dados, que foram modificados, foram retirados de algumas pesquisas e literatura especializada em reações de fermentação de glicose.

Tabela 1 – Dados iniciais do modelo

Variável	Valor
Cp*	93 (g/dm ³)
n	0,52
μ _{máx}	0,33 (h ⁻¹)
Ks	1,7 (g/dm ³)
m	0,03 (g substrato/g células*h)
Ys/c	12,5 (g/g)
Yp/s	0,45 (g/g)
Y/c	5,6 (g/g)
kd	0,01 (h ⁻¹)

Fonte: Fogler (2009, p. 345).

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com os dados da Tabela 1, foi plotado o Gráfico 1, que é o gráfico de referência. A Tabela 2 a seguir apresenta os dados utilizados para tentar otimizar o processo. Os dados que foram modificados são a relação de produto formado/célula nova formada (Y_p/c) e a relação substrato consumido/célula nova formada (Y_s/c). As duas variáveis foram modificadas ao mesmo tempo, pois são dependentes em relação às células novas formadas.

Tabela 2 – Testes com diferentes variáveis

Testes	Y _{p/c}	Y _{s/c}
Teste 1	5,6	12,5
Teste 2	3,5	7,8
Teste 3	7,0	15,6
Teste 4	4,8	10,7
Teste 5	6,3	14,1
Teste 6	7,5	16,7
Teste 7	8,0	17,9

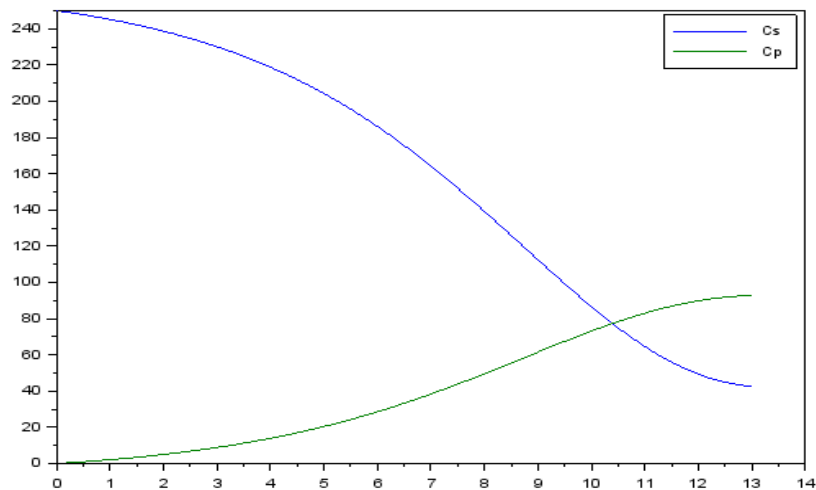
Fonte: os autores.

Nos Gráficos a seguir, foram plotadas as curvas de comportamento da concentração de substrato e concentração de produto (eixo Y) ao longo tempo (eixo X), analisando qual dos testes obteve um ponto de equilíbrio em menor tempo e com uma boa concentração final.

O Gráfico 1, obtido com os dados retirados da literatura, apresenta um tempo de 10,4 horas para chegar ao ponto de equilíbrio da reação e alcançou uma concentração máxima de 92,8 g/dm³.

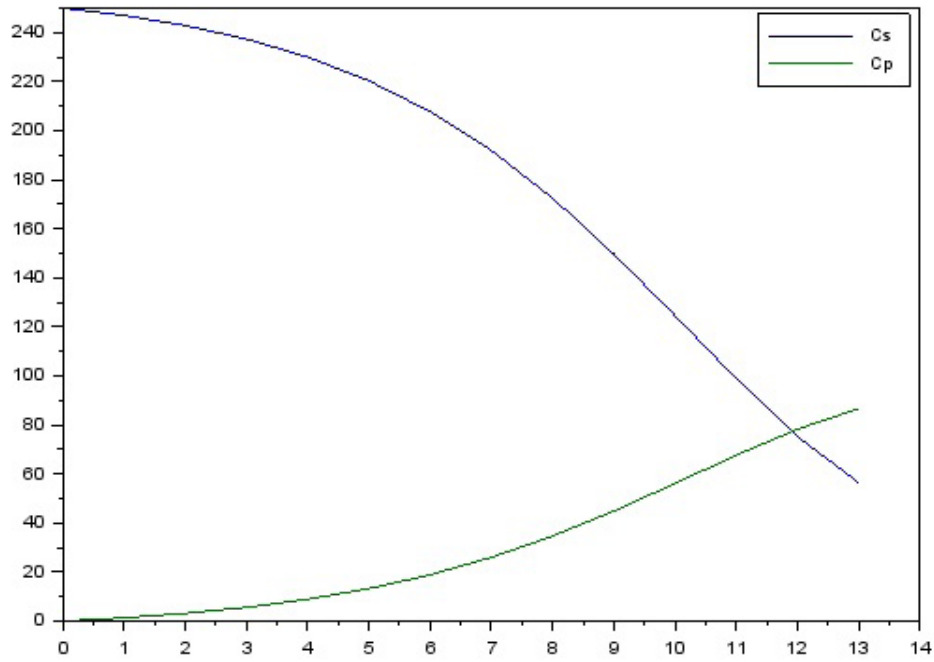
O Gráfico 2 mostra um considerável aumento no tempo para alcançar o equilíbrio; este foi de 12 horas e somente alcançou uma concentração de 86,35 g/dm³, bem inferior à do Gráfico 1.

Gráfico 1 – Concentração versus tempo (Teste 1)



Fonte: os autores.

Gráfico 2 – Concentração versus tempo (Teste 2)

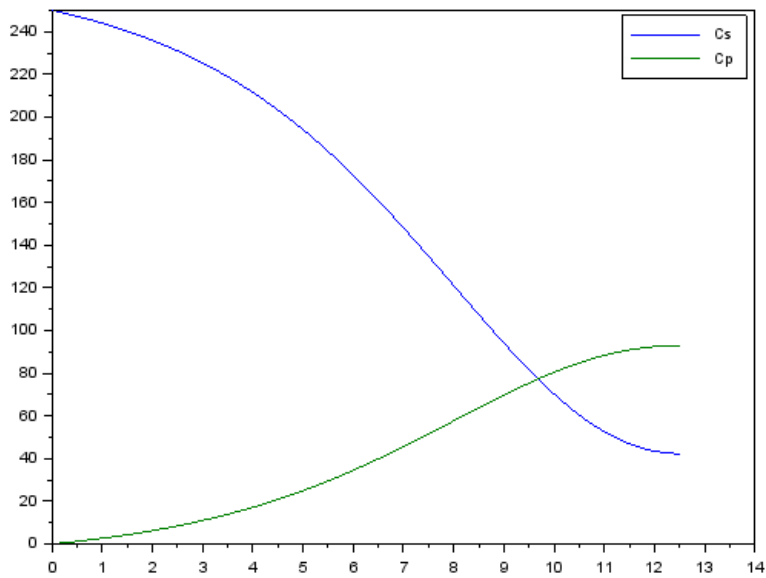


Fonte: os autores.

O Gráfico 3 obteve um tempo de 9,7 h e uma concentração de 93 g/dm³.

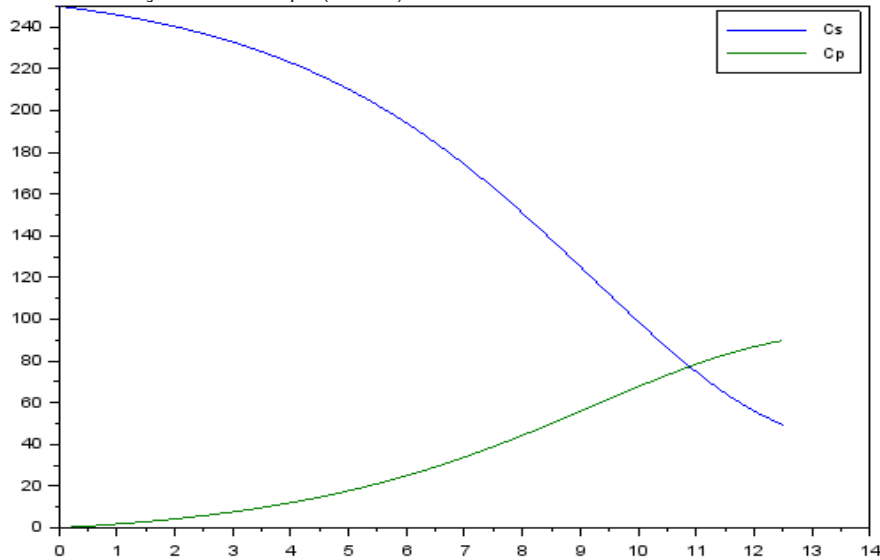
Já no Gráfico 4 foi obtido um tempo relativamente alto de 10,9 horas e concentração de 89,5 g/dm³.

Gráfico 3 – Concentração versus tempo (Teste 3)



Fonte: os autores.

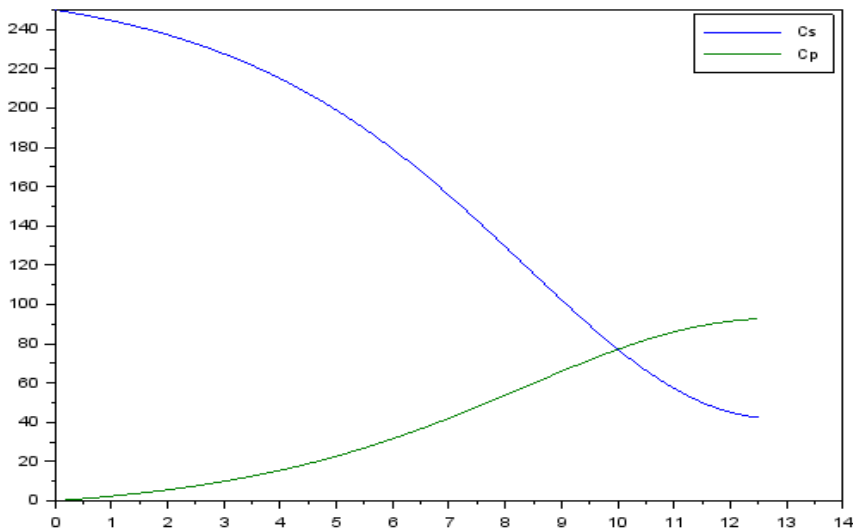
Gráfico 4 – Concentração versus tempo (Teste 4).



Fonte: os autores.

Para o Gráfico 5, em 10 horas chegou-se ao ponto de equilíbrio com uma concentração de 92,6 g/dm³.

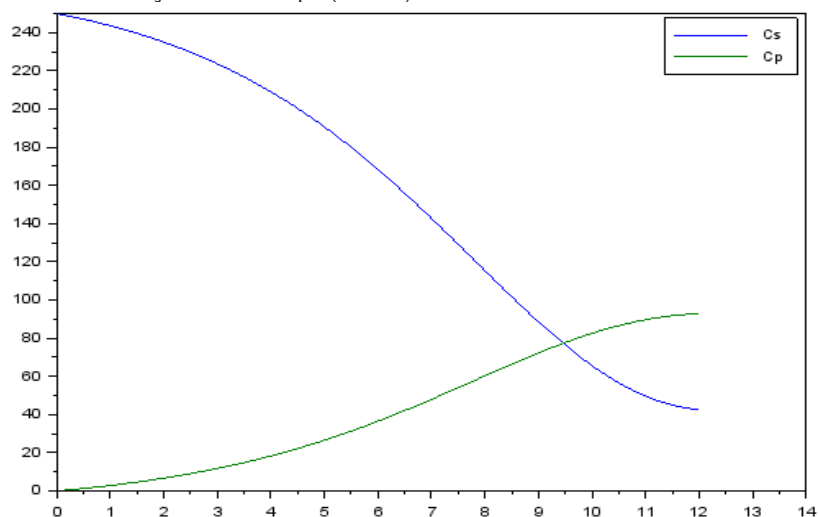
Gráfico 5 – Concentração versus tempo (Teste 5)



Fonte: os autores.

O Gráfico 6 apresentou um tempo de equilíbrio de 9,43 horas e uma concentração máxima elevada de 92,8 g/dm³.

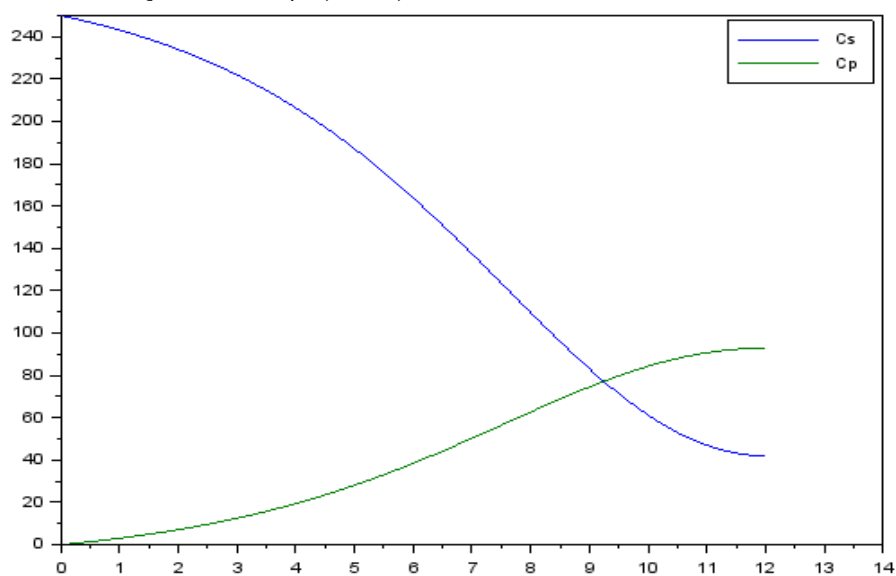
Gráfico 6 – Concentração versus tempo (Teste 6)



Fonte: os autores.

Diversas foram as tentativas de se otimizar o processo, porém as variáveis possuem limites para serem alteradas e o Gráfico 7 foi o limite máximo encontrado em literatura especializada que essas variáveis podem chegar utilizando *Saccharomyces cerevisiae* como catalisador; o Gráfico 7 mostra um equilíbrio em 9,3 h com uma concentração de 92,96 g/dm³.

Gráfico 7 – Concentração versus tempo (Teste 7)



Fonte: os autores.

4 CONCLUSÃO

Ao término de todas as tentativas e plotagens dos gráficos, foi possível observar que os valores de Y_s/c e Y_p/c verificados nos testes 2 e 4 foram inferiores ao padrão e tiveram um tempo elevado para obter equilíbrio químico, além de que suas concentrações máximas foram baixas. Nos demais testes, conforme as variáveis aumentaram, os resultados ficaram melhores, como esperado; o teste 8 foi o que obteve o melhor resultado, conseguindo o equilíbrio da reação em 9,3 horas e com uma concentração de 92,96 g/dm³, ou seja, comparando-o com o teste 1, que era modelo, ele obteve um pouco mais de produto em 1,1 horas a menos, conseguindo, assim, otimizar muito o processo, pois se tratando de microrganismos sempre são processos demorados.

Modeling and simulation of ethanol production through alcoholic fermentation of glucose

Abstract

*With the increasing energy demand and the environmental problems generated by the use of fossil fuels the study of renewable energies obtained through biomass is increasingly intense. With this promising market the present work aimed to model in a pilot scale with the aid of the computational tool Scilab an alcoholic fermentation of glucose to produce the ethanol fuel in a bioreactor in the batch type fed using as a catalyst of the process the microorganism *Saccharomyces cerevisiae*. The data used to develop the model base were taken from specialized literature and later some parameters were modified in order to optimize the process. Concentration versus time graphs were plotted for both the base data and the modified data, where they were analyzed and the parameter was determined which would achieve a faster equilibrium point of the reaction, obtaining a higher formation of product. The result was satisfactory and it was concluded that with the variables Y_s/c in the value of 17.9 and Y_p/c in the value of 8, the best maximum concentration was reached in a shorter period of time.*

*Keywords: *Saccharomyces cerevisiae*. Scilab. Renewable energy. Batch fed.*

REFERÊNCIAS

- COMPANHIA NACIONAL DE ABASTECIMENTO. **Segundo levantamento cana-de açúcar** – Agosto/2016. Disponível em: <http://www.conab.gov.br/OlalaCMS/uploads/arquivos/16_08_18_12_03_30_boletim_cana_portugues_-_2o_lev_-_16-17.pdf>. Acesso em: 15 nov. 2016.
- FOGLER, H. S. **Elementos de engenharia das reações químicas**. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.
- GNANSOUNOU, E.; DAURIAT, A. Ethanol fuel from biomass: A review. **Journal Scientific Industrial Research**, v. 64, p. 809-822, 2005.
- LOBATO, F. S. Controle ótimo da fermentação alcoólica em reator batelada alimentada usando computação bio-inspirada. **Tendências em Matemática Básica e Computacional**, v. 1, p. 3-15, 2015.
- LOBATO, F. S. et al. Controle ótimo da fermentação alcoólica com altas concentrações iniciais de substrato em reator batelada alimentada. In: SIMPÓSIO NACIONAL DE BIOPROCESSOS – SINAFERM, 15., 2005, Recife. **Anais...** Recife, 2005.
- LOBATO, F. S.; SANTOS, K. G.; MURATA, V. V. Controle on-off de um fermentador batelada alimentada para altas concentrações de substrato. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA EM INICIAÇÃO CIENTÍFICA (COBEQ-IC), 6., 2005, Campinas. **Anais...** Campinas 2005.
- SCILAB. **About Scilab. What is Scilab?** 2015. Disponível em: <<http://www.scilab.org/scilab/about>>. Acesso em: 24 nov. 2016.
- SUHAIMI, S. N. et al. Bioconversion of glycerol for bioethanol production using isolated *Escherichia coli* SS1. **Brazilian Journal of Microbiology**, v. 43, i. 2, p. 506-516, 2012.
- YOSHIDA, N. et al. Effect of hypergravitational stress on microbial cell viability. **Journal of Bioscience and Bio-engineering**, v. 88, p. 342-344, 1999.
- WYMAN, C. E. What is (and is not) vital to advancing cellulosic ethanol. **Trends Biotechnology**, v. 25, p. 153-157, 2007.

