



Simulação de um Biorreator para a Produção de Etanol

**Letícia F. Azarias, Ana L. Leonardo, Fernanda A. dos Santos, Isis D. F. dos Santos,
Rosa M. P. Trentin, Paulo R. A. Pereira**

UNIFAE – Centro Universitário das Faculdades Associadas de Ensino FAE
Departamento de Engenharia Química
Largo Engenheiro Paulo de Almeida Sandeville, 15
CEP: 13.870-377, São João da Boa Vista – SP
Fone/Fax: (19) 3638-0240

E-mail: leticia.azarias@hotmail.com, analu.leo@hotmail.com, fernandaalb13@hotmail.com,
isisfelizardo@hotmail.com, rosa.trentin@hotmail.com, prapereira@hotmail.com

Resumo

A indústria sucroalcooleira está entre as mais tradicionais e antigas no Brasil, representando uma ampla cultura que vem se desenvolvendo desde o período colonial, em que o açúcar foi, durante alguns séculos (XVI ao XVIII), produto de exportação básico para a economia brasileira. Foi em 1975 que a indústria ganhou relevância e um novo impulso no Brasil, após a primeira crise do petróleo, quando foi instituído o Proálcool [1]. Em menos de cinco anos a produção de pouco mais de 300 milhões de litros ultrapassou a cifra de 11 bilhões de litros, caracterizando o PROÁLCOOL como o maior programa de energia renovável já estabelecido em termos mundiais, economizando mais de US\$ 30 bilhões em divisas.

Para cumprir as expectativas do novo mercado, a indústria sucroalcooleira brasileira se desenvolveu de tal forma que se tornou referência internacional na produção de etanol, no entanto, o Brasil perdeu a liderança em 2007 para os Estados Unidos, que utilizam o milho como matéria-prima na maior parte do seu território.

Comparando-se o balanço energético obtido mediante os dois produtos, tem-se para cada unidade de energia utilizada para a fabricação do etanol de cana quase sete vezes mais energia que a produzida pelo milho. “Ambientalmente falando, a vantagem também é significativa: o etanol de cana reduz em 44% a emissão de poluentes contra apenas 16% do etanol de milho” [2].

No processo de fabricação de etanol também é possível aproveitar seus subprodutos de forma rentável. Depois de moída a cana é possível obter energia elétrica queimando seu bagaço. Isto só propicia às usinas uma autossuficiência energética e também permite fornecer os excedentes de eletricidade para as redes nacionais de distribuição. O bagaço obtido na extração é enviado para as caldeiras, onde se produz vapor. Este é utilizado diretamente nas próprias unidades da usina ou então para a geração de energia elétrica por meio de turbinas e geradores. Na fabricação de açúcar, há os processos de evaporação e cozimento, enquanto as unidades da fermentação e destilação constituem as etapas finais da produção de etanol. [2]

Portanto, torna-se cada vez mais importante conhecer os processos de fermentação alcoólica e os diferentes tipos de organismos desenvolvidos para proporcionar fermentação uniforme, rápida, alta tolerância ao etanol e outros inibidores, com alto rendimento, capacidade de crescer rapidamente sob as condições anaeróbicas que são caracteristicamente estabelecidas durante a fermentação em larga-escala (KNAUF e KRAUS, 2006).

O organismo mais utilizado na produção de etanol e sem dúvidas o mais importante microrganismo já explorado pela humanidade é o *Saccharomyces*, no entanto, outros organismos como a bactéria *Zymomonas Mobilis* e *Escherichia Coli*, têm sido utilizados em programas de engenharia genética com objetivo de melhorar seu desempenho em termos de fermentação alcoólica. [5].

A principal rota metabólica envolvida na fermentação alcoólica em leveduras é a glicólise (rota *Embden-Meyerhof-Parnas* ou EMP), através da qual uma molécula de glicose é oxidada e duas

moléculas de piruvato são produzidas [6]. Diversos estudos acerca do mecanismo de formação de etanol a partir de glicose em leveduras, seu respectivo modelo fenomenológico e estratégias de simulação e otimização têm sido estudados por diferentes autores.

Através do gás natural de síntese (metanol) é possível desenvolver um modelo fenomenológico para representar a produção de metanol, com foco para a modelagem em reator do tipo Lurgi [3]. Foi utilizado um método de simulação baseado na arquitetura orientada a cálculos equacionais, através da aplicação do método Newton-Raphson. O algoritmo desenvolvido foi empregado para avaliar o aumento da produção de metanol através do aproveitamento de dióxido de carbono (CO₂). A metodologia de simulação desenvolvida foi aplicada na investigação da injeção de uma carga de CO₂ para ocasionar o aumento de produção de metanol sem alteração das condições operacionais, aproveitando o excesso de hidrogênio originalmente existente. Os resultados obtidos permitiram avaliar um aumento na produção de metanol, devido à introdução de CO₂, aproveitando o excesso de hidrogênio presente na corrente de gás de síntese original para reagir.

Outro estudo [4] avaliou os diversos fatores de influência da reação do metanol, como a temperatura de operação, as razões molares álcool/óleo, catalisador/óleo e constantes de equilíbrio. Sabendo da importância desses fatores, os autores realizaram uma simulação da reação de produção do biodiesel, através do software Matlab. Os autores utilizaram equações diferenciais descrevendo o comportamento dos oito componentes envolvidos na reação: triglicerídeos, diglicerídeos, monoglicerídeos, glicerol, A (correspondente ao ácido graxo em questão), hidroxila, acidez de álcoois e éster. Os resultados obtidos permitiram avaliar a influência de alguns dos fatores mencionados anteriormente na extensão das concentrações finais dos ésteres (biodiesel) e de alguns produtos indesejáveis formados ao longo da reação, e como citação de caso análogo, o sabão.

Diante da importância do cenário apresentado sobre os aspectos que envolvem a produção de etanol, com foco para o modelo fenomenológico que descreve as etapas envolvidas na reação de fermentação desse composto, esse trabalho teve como propósito, escolher um modelo existente na literatura e proceder com a simulação deste modelo. Assim, optou-se pelo modelo composto por Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) [7], o qual considera as seguintes condições de aplicação: mistura ideal; ausência de arraste de etanol na saída de CO₂; vazões volumétricas iguais nas entradas e saídas e; volume constante. A equação da velocidade específica do crescimento célula (μ) neste modelo, leva em consideração o substrato limitante, a inibição pelo substrato e a inibição de potência pelo substrato.

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \left(\frac{C_s}{C_s + K_s + \frac{C_s^2}{K_i}} \right) \cdot \left(1 - \frac{C_p}{P_{\max}} \right)^{Y_n} \quad (1.1)$$

Cujas variáveis e seus valores iniciais são definidos como:

μ_{\max} = velocidade específica de reação (0,0001388 s⁻¹);

C_s = concentração de saída do substrato (kg/m³);

K_s = constante de saturação do substrato (3 kg/m³);

K_i = constante de inibição pelo substrato (27 kg/m³);

P_{\max} = concentração máxima de produto (92 kg/m³);

C_p = concentração final de produto (kg/m³);

Y_n = fator potência de inibição do produto (5,3 adimensional).

As equações de taxa para cada componente se relacionam pela equação (1.1).

$$r_x = C_x \cdot \mu = r_s \cdot \frac{Y_x}{S} = r_p \cdot \left(\frac{Y_x / S}{Y_p / S} \right) \quad (1.2)$$

Cujas variáveis e seus valores iniciais são definidos como:

C_x = concentração de células (kg/m³);

Y_x/s = rendimento em células (0,026 adimensional);
 Y_p/s = rendimento em etanol (0,426 adimensional).

O modelo matemático para cada componente que compõe a reação é dado pelas EDOs (1.3) para o substrato, (1.4) para o etanol (1.5) para as células.

$$\frac{dC_s}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (C_{so} - C_s) - C_x \cdot \mu_{\max} \cdot \left(\frac{C_s}{C_s + K_s + C_s^2/K_i} \right) \cdot \left(1 - \frac{C_p}{P_{\max}} \right)^{Y_n} \cdot \left(\frac{1}{Y_x/s} \right) \quad (1.3)$$

$$\frac{dC_p}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (C_{po} - C_p) - C_x \cdot \mu_{\max} \cdot \left(\frac{C_s}{C_s + K_s + C_s^2/K_i} \right) \cdot \left(1 - \frac{C_p}{P_{\max}} \right)^{Y_n} \cdot \left(\frac{Y_p/s}{Y_x/s} \right) \quad (1.4)$$

$$\frac{dC_x}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (C_{xo} - C_x) - C_x \cdot \mu_{\max} \cdot \left(\frac{C_s}{C_s + K_s + C_s^2/K_i} \right) \cdot \left(1 - \frac{C_p}{P_{\max}} \right)^{Y_n} \quad (1.5)$$

Cujas variáveis e seus valores iniciais são definidos como:

- V = o volume do reator (800 m³),
- F = vazão dos componentes (0,0444 m³/s),
- C_{so} = concentração de entrada do substrato (115 kg/m³),
- C_{xo} = concentração de células na entrada (13 kg/m³),
- C_{po} = concentração inicial de produto (10 kg/m³),

Para a resolução das EDOs 1.2 a 1.5 que representam o consumo de reagentes e a produção de etanol, além da equação 1.1 definida para a velocidade específica da reação, serão desenvolvidos algoritmos e programas computacionais, com o auxílio do software livre Scilab. Além disso, as equações citadas também serão resolvidas por meio do simulador livre XCOS.

- [1] G. Z. Filho, J. P. Piccirilli. O processo de fabricação do açúcar e álcool: desde a lavoura da cana até o produto acabado. Santa Cruz do Rio Pardo, 2012.
- [2] M. V. A. da C. Filho. Modelagem, controle e otimização de processos da indústria do etanol: uma aplicação em energia solar. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Engenharia de Automação e Sistemas, 179 f. Florianópolis, 2013.
- [3] R. G. D. França, R. S. Mello, E. R. A. Lima e A. L. H. Costa. Modelagem e Simulação do Loop de Síntese de Metanol Através de uma Abordagem Orientada a Equações em COBEQ, 2016.
- [4] M. Ivancic, B. Santek, S. Novak, P. Horvat, V. Maric. Bioprocess kinetics in a horizontal rotating tubular bioreactor. Bioprocess Biosyst, Eng (2004).
- [5] M. Knauf; K. Kraus. Specific yeasts developed for modern ethanol production. Sugar Industry, v. 131, p. 753-758, Germany, 2006.
- [6] M. T. Madigan, J. M. Martinko, J. Parker. Brock's Biology of Microorganisms. Prentice Hall College Div; 8th Packag edition, 1996.
- [7] G. M. Tosetto, Influência da Matéria-Prima no Comportamento Cinético de Levedura na Produção de Etanol. 95 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade estadual de Campinas, São Paulo, 2002.

Palavras-chave: Equações Diferenciais Ordinárias, Fermentação Alcoólica, Produção de Etanol, Scilab, Xcos.