



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL DO SEMIÁRIDO
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA DE BIOTECNOLOGIA E BIOPROCESSOS
CURSO DE ENGENHARIA DE BIOTECNOLOGIA E BIOPROCESSOS**

MARIA SUENIA NUNES DE MORAIS

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM PROCESSO FERMENTATIVO
COM SISTEMA DE MONITORAMENTO VIA SUPERVISÓRIO.**

**SUMÉ - PB
2019**

MARIA SUENIA NUNES DE MORAIS

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM PROCESSO FERMENTATIVO
COM SISTEMA DE MONITORAMENTO VIA SUPERVISÓRIO.**

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos do Centro de Desenvolvimento Sustentável do Semiárido da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharela em Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos.

**Orientador: Professor Dr. Bruno Rafael Pereira Nunes.
Co-orientadora: Professora Ma. Arianne de Freitas Barros Soares.**

**SUMÉ - PB
2019**

M827m Morais, Maria Suenia Nunes de.

Modelagem e simulação de um processo fermentativo com sistema de monitoramento via supervisorio. / Maria Suenia Nunes de Morais. - Sumé - PB: [s.n], 2019.

60 f.

Orientador: Prof. Dr. Bruno Rafael Pereira Nunes; Co-Orientadora: Prof^a. Mestra Marina Medeiros de Araújo Silva.

Monografia - Universidade Federal de Campina Grande; Centro de Desenvolvimento Sustentável do Semiárido; Curso de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos.

1. Biotecnologia - fermentação. 2. Modelagem e simulação - fermentação. 3. Processo fermentativo. 4. Sistema de monitoramento supervisorio – fermentação. I. Nunes, Bruno Rafael Pereira. II. Soares, Arianne Freitas Battos. III. Título.

CDU: 663.15 (043.1)

Elaboração da Ficha Catalográfica:

Johnny Rodrigues Barbosa
Bibliotecário-Documentalista
CRB-15/626

MARIA SUENIA NUNES DE MORAIS

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM PROCESSO FERMENTATIVO
COM SISTEMA DE MONITORAMENTO VIA SUPERVISÓRIO.**

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos do Centro de Desenvolvimento Sustentável do Semiárido da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito parcial para obtenção do título de Bacharela em Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos.

BANCA EXAMINADORA:



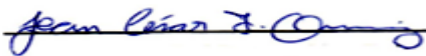
Prof. Dr. Bruno Rafael Pereira Nunes

Orientador – UAEB/CDSA/UFCG



Profª. M^a. Arianne de Freitas Barros Soares

Coorientadora – PPGEQ/UFCG



Prof. Dr. Jean César Farias Queiroz

Examinador I – UAEB/CDSA/UFCG



Prof. Dr. Aldre Jorge Moraes Barros

Examinador II – UAEB/CDSA/UFCG

Trabalho aprovado em: 09 de dezembro de 2019.

SUMÉ - PB

À Deus por estar sempre comigo. À minha família, especialmente a minha mãe Maria Iraneide Nunes de Moraes, razão de minha existência e grande incentivadora dos meus estudos, sempre batalhando para que eu alcance todos os meus objetivos.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus, pois em meio a todas as dificuldades, senti sua presença ao meu lado me levantando e me mostrando que eu posso conseguir alcançar meus objetivos com dedicação e principalmente muita fé.

A meus pais, principalmente a minha mãe Iraneide Nunes a quem não tenho palavras suficientes para agradecer por tudo o que fez e vem fazendo em minha vida, por acreditar no meu potencial, me dando forças nos momentos em que eu mesmo não acreditava em mim, obrigada por todos os esforços e sacrifícios realizados para que eu pudesse alcançar essa vitória. A meu irmão Silmark Nunes e minha cunhada Lindacy Guimarães pelo apoio e pelo o amor incondicional que sentem por mim. Obrigada a toda minha família em geral pelo apoio.

Aos meus amigos, Sabrina Lima por sempre está ao meu lado, me aconselhando e principalmente me ouvindo com paciência eu repetir mais de dez vezes a mesma história, de sempre me falar palavras de incentivo para continuar nessa jornada, de rir e de me fazer rir das minhas próprias desgraças, de ser essa pessoa maravilhosa; a minha amiga Bartira Chaves por ser a pessoa responsável por me colocar nesse curso, por sempre está ao meu lado nos momentos difíceis, sempre me dando conselhos, me orientando e dando seu ombro amigo; ao meu amigo Diego Freire por ser meu psicólogo particular, me aturando nas horas de bebedeiras, nos momentos de muita pressão em minha vida, no qual, sempre estive ali para me ouvir; a minha amiga Rayane Farias por sempre me ouvir e me acalmar nos momentos de ansiedade, sempre sabendo o que me dizer, aturando minhas piadas sem graça, falando mal da minha gata, e que sempre estive ali com seu ombro amigo para me acolher.

As minhas colegas Daiana Oliveira e Ester Sousa, pelos momentos de diversão no início do curso, mesmo vocês desistindo, o companheirismo continuou o mesmo durante os anos. A Larissa Pires, Kátia Barbosa, Luana Queiroz, Isadora Fernandes e Camila Lócio, pelos momentos de descontração e brigas durante os trabalhos em grupo, pois sabemos que a vida acadêmica não é fácil, mas com vocês acabou se tornando um pouco mais leve.

Agradeço aos professores Arianne Barros, Bruno Nunes e Patricio Felix, pelos ensinamentos fundamentais para a minha formação, e em especial aos professores Arianne Barros e Bruno Nunes por serem os professores responsáveis por me fazer gostar do curso, pois conseguiram fazer com que eu tivesse uma visão diferente do curso com a qual eu me identifiquei, agradeço pela valiosa orientação e imensa paciência, além da disponibilidade.

Agradeço a todos que contribuíram de forma direta ou indireta para a minha formação.

Atenta para a obra de Deus: Quem poderá endireitar o que ele fez torto?

Eclesiastes 7: 13.

RESUMO

O presente trabalho utiliza a modelagem e simulação de processos como uma ferramenta que possibilita a previsão de condições ótimas operacionais e a simulação de equipamentos sem afetar a operação do processo, com a finalidade de desenvolver a modelagem matemática de uma reação de fermentação, transformação da glicose a etanol conduzida em um reator batelada e simular seu comportamento em ambiente computacional. Tendo como metodologia aplicada, a utilização de modelos fenomenológicos que descrevam o comportamento de uma reação de fermentação em um reator descontínuo, simulando o modelo desenvolvido em um software de processos químicos e bioquímicos, para se analisar os seus resultados e compará-los com os dispostos na literatura. Os resultados obtidos se mostraram de acordo com os dispostos na literatura, uma vez iniciada a simulação do processo nos softwares utilizados, as variáveis de interesse se comportaram de maneira efetiva, sendo possível visualizar em tempo real seu processo reacional. Embora os resultados obtidos tenham sido eficientes para atingir ao objetivo em estudo e estejam de acordo com a literatura, trata-se de um estudo inicial.

Palavras-Chave: Modelagem. Simulação. Software. Biotecnologia. Bioprocessos.

ABSTRACT

The present work uses the modeling and simulation of processes as a tool that allows the prediction of optimal operational conditions and the simulation of equipment without affecting the operation of the process, in order to develop the mathematical modeling of a fermentation reaction, transformation of glucose to ethanol conducted in to a batch reactor and simulate its behavior in a computational environment. Having as applied methodology, the use of phenomenological models that describe the behavior of a fermentation reaction in a discontinuous reactor, simulating the model developed in a chemical and biochemical process software, to analyze the their results and compare them with those arranged in the literature. The results obtained were in accordance with those arranged in the literature, once the simulation of the process began in the software used, the variables of interest behaved in an effective way, being possible to visualize in real time its reactional process. Although the results obtained were efficient to achieve the objective under study and are in accordance with the literature, it is an initial study.

Keywords: Modeling. Simulation. Software. Biotechnology. Bioprocesses.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Proposta de classificação dos modelos em grupos distintos conforme os conjuntos de ferramentas e técnicas matemáticas disponíveis na literatura.	22
Figura 2 - Tanque de Armazenamento.....	35
Figura 3 - Reator CSTR.	37
Figura 4 - Diagrama do sistema conduzido em um reator batelada.	38
Figura 5 - Criação das tags para as variáveis e parâmetros do processo reacional analisado.	54
Figura 6 - Criação dos displays para apresentação das informações das variáveis e parâmetros do processo analisado.....	55
Figura 7 - Criação dos elementos gráficos para o acompanhamento do comportamento do processo analisado.	56
Figura 8 - Tela de supervisão criada para o processo analisado.	56
Gráfico 1 - Concentração de substrato e etanol na saída da cascata de reatores no regime transiente.	28
Gráfico 2 - Comportamento do processo.	30
Gráfico 3 - Simulação dos resultados.....	31
Gráfico 4 - Comportamento das concentrações.....	38
Gráfico 5 - Comportamento do Nível em um Tanque.	49
Gráfico 6 - Comportamento das concentrações.....	50
Gráfico 7 - Comportamento das concentrações C_c (linha azul), C_s (linha vermelha) e C_p (linha laranja).....	51
Gráfico 8 - Velocidades específicas de r_d (linha azul), r_g (curva vermelha) e r_{sm} (linha laranja).....	52
Gráfico 9 - Forma empírica da equação de Monod para a inibição por produto.....	53

LISTA DE EQUAÇÕES

Equação 1	27
Equação2	27
Equação3	27
Equação 4	27
Equação 5	27
Equação 6	29
Equação 7	29
Equação 8	29
Equação 9	29
Equação 10	29
Equação 11	29
Equação 12	29
Equação 13	30
Equação 14	30
Equação 15	30
Equação 16	30
Equação 17	30
Equação 18	30
Equação 19	39
Equação 20	40
Equação 21	40
Equação 22	40
Equação 23	40
Equação 24	41
Equação 25	41
Equação 26	41
Equação 27	41
Equação 28	42
Equação 29	42
Equação30	42
Equação 31	42
Equação 32	42
Equação 33	43
Equação 34	43
Equação 35	43
Equação36	43
Equação 37	44
Equação 38	44
Equação 39	44
Equação 40	44
Equação 41	44
Equação42	45
Equação43	45
Equação 44	45
Equação 45	45
Equação 46	45
Equação 47	46
Equação 48	46
Equação 49	46

LISTA DE SÍMBOLOS

C_C	Concentração celular (g/dm^3)
C_p^*	Concentração do produto na qual todo metabolismo cessa (g/dm^3)
C_p	Concentração do produto (g/dm^3)
C_{p_x}	Concentração do produto na qual todo o metabolismo cessa (g/dm^3)
C_S	Concentração de substrato <i>Monod</i> (g/dm^3)
C_t	Concentração de uma substância tóxica (g/dm^3)
K_d	Velocidades específicas de morte natural (h^{-1})
k_{obs}	Forma empírica da equação de Monod para a inibição por produto
K_S	Constante de <i>Monod</i> (g/dm^3)
K_t	Velocidades específicas de morte causada pela substância tóxica
M	Manutenção da célula ($\text{g}/\text{g}\cdot\text{h}$)
n	Constante empírica
r_d	Velocidade de morte celular
r_g	Velocidade de crescimento celular ($\text{g}/\text{dm}^3\cdot\text{s}$)
r_p	Velocidade de formação do produto
r_s	Velocidade de consumo do substrato
r_{sm}	Velocidade de consumo do substrato quanto para manutenção celular
$\mu_{máx}$	Velocidade específica de crescimento máximo (s^{-1})
μ	Velocidade específica de crescimento (s^{-1})
V	Volume
$Y_{C/S}$	Coefficiente de rendimento de células em relação ao substrato
$Y_{P/S}$	Coefficiente de rendimento do produto em relação ao substrato
$Y_{S/C}$	Coefficiente de rendimento de substrato em relação às células
$Y_{P/C}$	Coefficiente de rendimento do produto em relação às células

Subscritos

A	Reagente
B	Produto

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	15
2 OBJETIVOS	18
2.1 OBJETIVO GERAL	18
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	18
3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	19
3.1 CLASSIFICAÇÃO DE MODELOS.....	21
3.2 FORMULAÇÕES DOS MODELOS MATEMÁTICOS E CINÉTICOS DE PROCESSOS FERMENTATIVOS	23
3.3 ESTADO DA ARTE.....	25
3.4 MODELAGEM DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS	26
3.5 SIMULAÇÃO DE PROCESSOS	31
3.6 PROTOCOLO DE COMUNICAÇÃO ENTRE OS SOFTWARES	32
4 METODOLOGIA	35
4.1 ESTUDOS DE CASO: TANQUE DE ARMAZENAMENTO.....	35
4.2 ESTUDOS DE CASO: PROCESSO REACIONAL EM REATOR CSTR.....	36
4.3 DESCRIÇÃO DO PROCESSO REACIONAL: FERMENTAÇÃO DA GLICOSE À ETANOL.....	38
4.3.1 Balanço de massa	43
4.4 CONSTRUÇÃO DA TELA DE SUPERVISÃO	47
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	49
5.1 ESTUDOS DE CASO	49
5.2 UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE PARA ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DO PROCESSO.....	50
5.3 UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE PARA A CONSTRUÇÃO DE TELAS DE SUPERVISÃO	53
6 CONCLUSÃO	58
REFERÊNCIAS	59

1 INTRODUÇÃO

A fermentação alcoólica é conhecida desde a antiguidade e era empregada pelos povos primitivos para a produção de bebidas a partir de caldos açucarados obtidos por esmagamentos de frutas. Produtos adquiridos a partir deste processo são utilizados desde então, existindo registro que confirmam o uso de alimentos fermentados pelos povos assírios, sumérios, babilônios e egípcios antigos (PACHECO, 2010).

A fermentação alcoólica é um processo anaeróbico, no qual ocorre a transformação bioquímica de açúcares em álcool etílico (etanol) e gás carbônico (CO₂) pela ação de um determinado grupo de organismos unicelulares denominados leveduras. De acordo com Corazza (2001), o processo fermentativo pode ser dividido em três etapas: a primeira representa a fase de adaptação da cultura ao meio, em seguida a tumultuosa e a última a complementar, que consiste no término da fermentação. A fermentação alcoólica envolve um conjunto de estágios em que as reações são controladas, e uma molécula orgânica é degradada em compostos mais simples realizando a liberação de energia.

As leveduras do gênero *Saccharomyces* são as mais usadas na produção do etanol. No processo de produção da cerveja, por exemplo, geralmente são empregadas duas espécies desse gênero: *Saccharomyces cerevisiae* (alta fermentação) e *Saccharomyces uvarum* (baixa fermentação). Tais organismos são desenvolvidos para propiciar fermentação uniforme, rápida e com alto rendimento em etanol (SILVA, 2007).

Os equipamentos nos quais são conduzidas reações químicas catalisadas por enzimas ou células vivas são designados de biorreatores (PORTO, 2005). Os reatores convencionais podem ser classificados de acordo com seu modo de operação de quatro maneiras: reatores descontínuos (batelada), descontínuo alimentado, reatores de escoamento contínuo (tubular ou tanque) e reatores com processo em semi-batelada (semicontínuo).

O reator batelada, operando em pequena escala e de forma descontínua é utilizado para testar processos que não tenham sido desenvolvidos completamente para fabricação de produtos caros e para aqueles em que são de difíceis conversões em operações contínuas. Uma das principais características positivas desse tipo de reator é o alcance de altas conversões obtidas pela permanência do reagente durante um longo período, obtendo assim menores riscos de contaminação e boa flexibilidade de operação. Todavia, esse equipamento possui altos custos de operação, devido à presença de tempos mortos além da dificuldade de produção em larga escala (FOGLER, 2009).

O modo de operação realizado em descontínuo alimentado é caracterizado pela alimentação do mosto ao fermentador, onde é dividido em dois grupos (intermitente ou contínua), baseados no fato da adição de substrato ser ou não controlada por um mecanismo de retroalimentação, no qual esse processo visa o fornecimento de substrato dentro do processo podendo ser controlado em função da concentração (controle direto) ou em função de outros parâmetros (controle indireto), tendo como parâmetros: densidade óptica, pH, entre outros.

Os reatores com escoamento contínuo são quase sempre operados em regime estacionário, podendo ser classificados em três tipos, sendo todos aplicados em processos de grande escala de produção: o reator contínuo de tanque agitado (CSTR), o reator com escoamento empistonado-tubular (PFR) e o reator de leito de recheio (PBR). O primeiro é frequentemente empregado no processamento industrial (reações de fase líquida) e assume que em seu interior, durante a operação, a mistura seja perfeita, ou seja, a concentração na saída é idêntica àquela dentro do reator. O segundo consiste em um tubo cilíndrico utilizado frequentemente em reações em fase gasosa, onde os reagentes entram, seguem em escoamento e são consumidos ao longo do equipamento. A conversão nesse tipo de equipamento vai aumentando à medida que a reação percorre o trajeto axial do reator. Já o PBR também é tubular, porém é recheado com partículas de catalisador sólido, sendo utilizado especialmente para catalisar reações gasosas. Segundo Fogler (2009), dentre os reatores catalíticos, o PBR se destaca por ser o reator que promove a mais alta conversão por massa de catalisador.

Segundo Silva (2017), os processos de fermentação podem ser administrados aplicando as quatro formas citadas anteriormente. Entretanto, uma ampla parte dos processos fermentativos industriais envolvendo a levedura *Saccharomyces cerevisiae* é conduzida em batelada alimentada, pois este se mostra o modo de operação mais eficaz para suavizar os efeitos da inibição ocasionados pelo produto e pelo substrato no processo de fermentação.

A aplicação industrial de processos como este é amplamente conhecida e consolidada do ponto de vista técnico e reacional. Porém, a busca por melhorias na qualidade do produto ou na possível redução de custos operacionais impulsiona o setor industrial a descobrir alternativas que auxiliem a conquistar esses objetivos da maneira menos onerosa possível. A modelagem e simulação de processos é uma ferramenta poderosa e pode ser definida como uma dessas alternativas na Engenharia de Bioprocessos pelo fato de possibilitar a previsão de condições ótimas operacionais e a simulação de equipamentos sem afetar a operação do processo (SILVA, 2012).

Nesse contexto, o presente trabalho tem como finalidade desenvolver a modelagem matemática de um processo fermentativo alcoólico genérico da glicose para a produção de etanol conduzida em um reator em batelada.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

O presente trabalho tem como objetivo desenvolver a modelagem matemática de uma reação de fermentação conduzida em um reator batelada e simular seu comportamento, em ambiente computacional.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Formular um modelo fenomenológico que descreva o comportamento de uma reação de fermentação de forma descontínua;
- Adequar o modelo desenvolvido em um software de processos químicos e bioquímicos;
- Otimizar os resultados e compará-los com os apresentados na literatura.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O termo *modelo*, na engenharia, pode ser entendido como a réplica - física ou matemática - de um sistema, possuindo todas as propriedades e funções deste (SINGH, 2009). Os modelos matemáticos, desenvolvidos de maneira adequada, são capazes de prever os efeitos (alterações) possíveis ao decorrer do processo e carregam a função de explicar qualquer fenômeno físico na engenharia. A modelagem matemática, por sua vez, pode ser definida como a representação física do problema através de um conjunto de equações consistentes.

A modelagem matemática mencionada na literatura técnica especializada refere-se às reações químico-bioquímicas que acontecem no interior da célula. Com isso, a modelagem de processos fermentativos, consiste nas equações matemáticas que representam os balanços de massa para cada componente do biorreator, associados às complexas transformações bioquímicas que ocorrem nos processos, e às velocidades que se processam as reações (BUENO, 2006). Em seus estudos, Schwaab (2007) propõe que o modelo seja uma estrutura que tenta descrever a realidade através das equações.

De acordo com Bueno (2006), um dos objetivos da modelagem matemática e simulação para o desenvolvimento tecnológico de processos fermentativos é antecipar o comportamento dinâmico e estacionário de tais processos. Incluindo suas condições não testadas empiricamente, na qual será possível determinar as condições operacionais economicamente viáveis do sistema. Além disso, auxiliar no projeto e no ajuste de algoritmos de controle, na qual o modelo matemático formulado passa a ser parte integrante do mesmo.

De acordo com Mendesa (2011), a modelagem matemática de processos busca um conjunto de relações entre as variáveis em um sistema podendo prever as variáveis de saída (*outputs*) e o estado do sistema a partir das variáveis de entrada (*inputs*). Este conjunto de relações é denominado de modelo e, no caso específico da modelagem matemática, é constituído por equações algébrico-diferenciais. Sendo assim, as equações de balanço mostram como os materiais se comportam dentro e fora do volume de controle e como são convertidos no interior deste volume. Em processos reativos a conversão interna no volume de controle é denominada de taxa de reação (também chamada de cinética reacional) e, juntamente com o balanço de massa, especificam o modelo completo (NIELSEN, *et al.*, 2003).

A elaboração do modelo matemático junto com sua aplicação na simulação acumula uma série de vantagens na hora de conhecer e melhorar o processo, tais como: compreender o comportamento do sistema, de maneira a formular um modelo; explorar o modelo mediante

simulação ajuda a planejar o experimento, de forma a ter uma visão das variáveis que afetam o processo, podendo estabelecer o tempo de duração para alcançar os objetivos propostos; o modelo permite projetar estratégias de operação e controle; e por último a sua utilização didática, permitindo traçar estratégias e facilitar sua compreensão (MENDESA, 2011).

Para Bueno (2006), os modelos matemáticos representam adequadamente os processos fermentativos, contudo alguns problemas podem ser encontrados durante esses processos, devido à necessidade de incorporar uma série de características que os diferenciam dos processos químicos convencionais. Podem-se listar tais problemas como sendo: baixas concentrações e baixas velocidades de reações; complexidade da mistura reagente e dificuldade das enzimas conseguirem sintetizar seu próprio catalisador; falta de conhecimento sobre os fenômenos limitantes da velocidade de produção, além da falta de sensores para automação online; problemas de esterilização, segurança e da toxicidade dos processos fermentativos.

Os modelos cinéticos são bastante utilizados para examinar o crescimento microbiano da fermentação alcoólica, na aplicação industrial, analisando a formação de produto e consumo de substrato. No estudo teórico experimental de um processo fermentativo a determinação de um modelo cinético é considerada a etapa mais importante, pois tal modelo definirá a taxa de produção e consumo dos principais constituintes, além de auxiliar no controle dos processos, como na redução dos custos e no aumento da qualidade do produto (DODIÉ, 2012; *apud* SILVA, 2016;).

De acordo com Souza (2013) e Viegas (2003), o estudo da cinética de processos microbianos tem por objetivo básico conseguir quantificar a taxa de crescimento celular, tanto do consumo de substrato como a de formação de produtos, e dos demais parâmetros relacionados, esse estudo ainda permite analisar a influência de fatores externos como: temperatura, pH, inibidores, tempo, concentração, entre outros. Para a fermentação alcoólica, todos esses parâmetros são fundamentais para conseguir uma produção de etanol adequada em uma unidade industrial.

Segundo Birol (1998, p.15); *apud* Silva, (2016, p.2):

Modelos cinéticos para fermentações industriais são normalmente baseados em modelos simples e não estruturados. Além disso, nem todo modelo cinético pode ser diretamente aplicável a uma situação real do processo, portanto o modelo matemático deve partir de um modelo simples que deve ser modificado e adaptado até eventualmente conduzir a um modelo cinético adequado.

A combinação do balanço de massa, com as equações cinéticas da taxa de reação e o modelo do reator constitui uma descrição matemática completa do processo fermentativo, no qual esse modelo pode ser utilizado para simular como as variáveis de saída podem ser influenciadas pelo o conjunto de variáveis de entrada (MENDESA, 2011).

3.1 CLASSIFICAÇÃO DE MODELOS

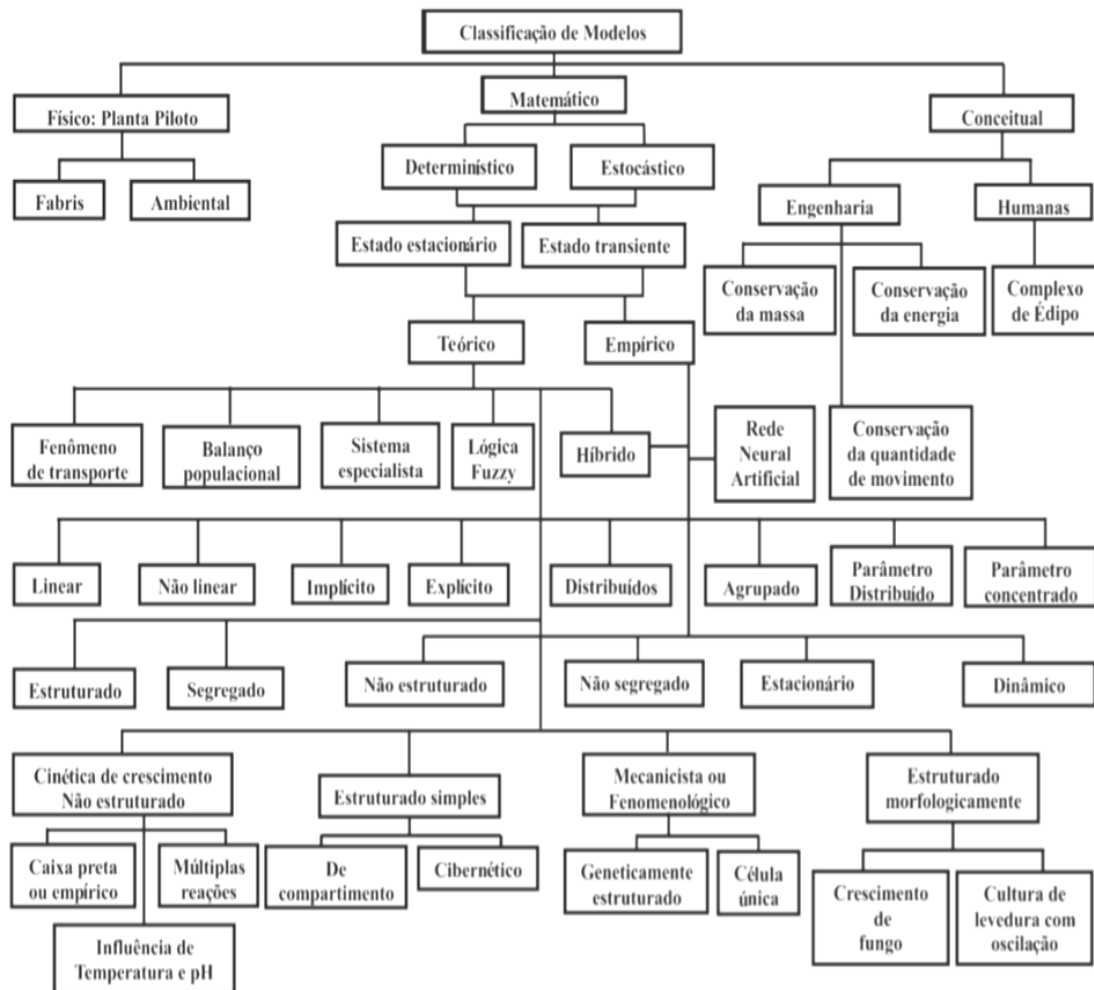
Segundo Alves (2010), os modelos são ferramentas utilizadas para conseguir condições mais favoráveis no desenvolvimento da produção e aumento de escala de equipamentos, incluído os biorreatores, além de exercer um importante papel na síntese e projeto de sistemas de controle, podendo ser utilizados em simulações de processos.

Os modelos podem ser classificados de acordo com o intuito da pesquisa a ser utilizada, podendo ser apresentados de várias formas (SCHWAAB, 2007 *apud* MENDESA, 2011), dentre as quais, temos:

- a) Modelo Matemático - indica que as interações entre diversas variáveis, relacionadas a um determinado problema, possam ser descritas de forma matemática precisa, na qual se é possível fazer previsões quantitativas do comportamento futuro do sistema em estudo;
- b) Modelo Conceitual – não precisa obrigatoriamente constituir um vínculo matemático quantitativo preciso, devido à complexidade das variáveis envolvidas no processo, mas sim estabelecer vínculos qualitativos entre as diversas variáveis do problema.
- c) Modelo Físico: A Planta Piloto – é composta por modelos físicos reais, que possui uma escala bastante inferior à escala dos sistemas propostos. É sempre empregada quando é impossível realizar experimentos diretamente no sistema estudado, mesmo tendo em mente a probabilidade de que esses testes experimentais mal sucedidos resultem em acidentes ou em desvios de metas de produção.

Para um melhor entendimento Mendesa (2011), apresenta uma proposta da classificação de modelos (Figura 1), através do fluxograma esquematizado com dados recorrentes na literatura.

Figura 1 - Proposta de classificação dos modelos em grupos distintos conforme os conjuntos de ferramentas e técnicas matemáticas disponíveis na literatura.



Fonte: (MENDESA, 2011, p. 16).

De acordo com Schwaab (2007), os modelos podem ainda ser classificados como:

- a) Modelos teóricos e empíricos – nos modelos teóricos, as interações das equações das diversas variáveis do problema, provêm de hipóteses teóricas, tais como: lei de energia, movimento e conservação de massa. Já nos modelos empíricos, as interações das equações das diversas variáveis são postuladas, ou seja, não se tem qualquer hipótese teórica que justifique a relação concebida;
- b) Modelos lineares e não lineares - os modelos são considerados lineares quando conseguem satisfazer as propriedades de linearidade e quando proporcionam interações lineares entre as variáveis do problema proposto, caso contrário, são considerados não lineares;

- c) Modelos determinísticos e estocásticos - Nos modelos determinísticos leva-se em consideração que todo acontecimento dentro de um experimento é explicado por um resultado bem definido, enquanto para os modelos estocásticos, que para todo acontecimento dentro de um experimento, exista um possível conjunto de resultados, cada qual com certa probabilidade;
- d) Modelos a parâmetros concentrados e a parâmetros distribuídos – são denominados como sendo modelos a parâmetros concentrados, aqueles em que as variações espaciais das variáveis são desprezíveis e as propriedades não mudam com a posição; já para os modelos a parâmetros distribuídos as variáveis espaciais são importantes e não podem ser desprezadas;
- e) Modelos estacionários e dinâmicos - os modelos são considerados dinâmicos quando uma ou mais variáveis, variam ao decorrer do tempo (em função do tempo), enquanto nos modelos estacionários, as variáveis não mudam em função do tempo, ou seja, não variam.

Já para Valdman (2008) os modelos matemáticos simulam o comportamento dinâmico dos processos segundo as peculiaridades das equações diferenciais e algébricas que o compõem, fazendo com que se consiga definir os métodos e técnicas usadas para determinar a solução. Baseado nisso, ele propôs os seguintes modelos:

- a) Modelos agrupados – são formados por equações diferenciais totais, tendo o tempo como a variável independente;
- b) Modelos distribuídos – são consideradas parciais as equações diferenciais componentes e, na maioria das vezes, são consideradas variáveis independentes as variáveis tempo e outra variável dimensional (comprimento);
- c) Modelos lineares – quando não possui qualquer termo não linear nas equações diferenciais e algébricas;
- d) Modelos não lineares – quando possui pelo menos um termo não linear dentro das equações diferenciais e algébricas.

3.2 FORMULAÇÕES DOS MODELOS MATEMÁTICOS E CINÉTICOS DE PROCESSOS FERMENTATIVOS

Por meio da aplicação dos modelos matemáticos, obtém-se uma relação entre as variáveis de um sistema em estudo (variáveis de entrada e variáveis de saída), o que torna possível prever quais serão as variáveis de saída de um sistema, além do seu estado, através

dos valores das variáveis de entrada. As relações que ocorrem entre as variáveis são normalmente expressas na forma de equações matemáticas (especificadas também como expressões lógicas), as quais são usadas nas operações de processos fermentativos. Dessa forma, segundo Nielsen e seus colaboradores (2003), “as equações de balanço especificam como os materiais fluem dentro e fora do volume de controle e como são convertidos no interior deste volume”. Essa conversão que acontece no volume de controle é representada pela equação da cinética e, junto com o balanço de massa, expressam o modelo completo (SOUZA, 2013).

Nos processos fermentativos acontece a interação de dois sistemas: sistema com a fase biológica composta por cultura de células animais (ou vegetais ou pela população microbiana), e sistema com a fase ambiental (ou meio de cultura), a qual é usualmente conhecida por conter substratos e produtos no processo (BORZANI *et al.*, 2001 apud BUENO, 2006). O correto na modelagem de uma fermentação é mostrar o resultado de várias transformações químicas que acontecem pela ação de uma cultura de células animais (ou vegetais ou por uma população microbiana). No entanto, seria extremamente complexo, ou impossível, obter uma descrição detalhada de todas as vias e interações metabólicas pertinentes ao desenvolvimento microbiano (BUENO, 2006). Deste modo, para elaboração da modelagem de processos fermentativos, na maioria das vezes são utilizadas simplificações para se obter modelos possíveis de serem manipulados e generalizados (BORZANI *et al.*, 2001).

Para a engenharia bioquímica, o desenvolvimento da modelagem matemática dos processos fermentativos busca atingir cinco objetivos básicos: organizar informações dos fenômenos biológicos, deixando-as coerentes; saber quais componentes e interações são importantes num sistema complexo; conseguir explicar o comportamento das células; corrigir as falhas existentes e, por fim, entender as características qualitativamente essenciais de determinados processos (SOUZA, 2013). Segundo Alves (2010), o principal objetivo da modelagem matemática e simulação como ferramenta para o desenvolvimento de processos fermentativos é conseguir prever o comportamento estacionário e dinâmico de processos, mesmo em condições não testadas empiricamente. Ainda de acordo com este autor, vários autores apresentaram diversas classificações para os diversos modelos utilizados na engenharia bioquímica, começando a definição por dois grandes grupos de modelos matemáticos de processos fermentativos: modelos fenomenológicos e modelos entrada-saída (SINCLAIR *et al.*, 1987; VOLESKY *et al.*, 1992; BONOMI *et al.*, 2001;).

Os modelos fenomenológicos são fundamentados nas relações teóricas (ou empíricas) e na formulação de hipóteses, para tentar esclarecer no processo os procedimentos das variáveis e os seus fenômenos (SOUZA, 2013). Para Borzani (*et al.*, 2001, apud BUENO, 2006), os modelos fenomenológicos são embasados em hipóteses e correlações teóricas (ou empíricas) para esclarecer o comportamento das variáveis dos processos, sendo equações baseadas na lei de conservação de massa e energia, nos fenômenos de transporte e em princípios físico-químicos, termodinâmicos e cinéticos.

A cinética em um processo fermentativo consiste na avaliação dos valores da concentração de um ou mais componentes do sistema de cultivo, em função do tempo de fermentação (ALVES, 2010) e possui modelos que podem ser classificados quanto ao número de componentes usados na representação celular e quanto à sua heterogeneidade da população microbiana. Por exemplo, nos modelos estruturados as células são descritas com maiores detalhes, enquanto que nos modelos não estruturados as células (microrganismos) são vistas como simples reagentes; nos modelos segregados, as células são consideradas heterogêneas e nos modelos não segregados, as células são consideradas homogêneas, ou seja, todas apresentam o mesmo comportamento (ALVES, 2010; SOUZA, 2013).

Os modelos “entrada e saída” (ou empíricos) são aqueles que conseguem estabelecer uma relação empírica no sistema, capazes de descrever as relações entre o efeito da variação nas variáveis de entrada (ou variáveis possíveis de serem manipuladas), e o comportamento das variáveis de saída (BORZANI *et al.*, 2001 apud BUENO, 2006).

3.3 ESTADO DA ARTE

A partir da década de 1980, coincidindo com a evolução dos microcomputadores e a disponibilização de softwares, diversos trabalhos científicos foram desenvolvidos com o objetivo de simular computacionalmente o comportamento de diversos processos (SILVA, 2012 apud SCHULTZ, 2014).

Por volta de 1984, o cientista Lozano *et al.* (1984), apresentou em seu trabalho uma forma adequada para se prever a elevação do ponto de ebulição de soluções em um processo reacional. A modelagem consistiu na proposta de funções de transferência para cada efeito, onde os parâmetros foram determinados a partir de ensaios experimentais em equipamentos reais. O modelo em si é válido apenas para um equipamento específico, mas foi trabalhado para que pudesse ser utilizado em diferentes estratégias de controle do equipamento (WESTPHALEN, 1999).

A utilização do computador para simulação de processos químicos cresceu de uma forma vertiginosa nas últimas décadas. No mercado podem ser encontrados vários pacotes comerciais, nos quais esses programas se destacam por possuírem uma flexibilidade em relação aos processos químicos, tal como, sua abundância de correlações e métodos termodinâmicos para predição de propriedades (WESTPHALEN, 1999).

Evans (1990) explica que a aplicação da simulação de processos pode ser utilizada em outras áreas, além das indústrias de refino de petróleo e petroquímicas (onde o processo de destilação é considerado um dos mais importantes), podendo ser aproveitada como ferramenta na biotecnologia e na produção de polímeros.

3.4 MODELAGEM DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS

Fantozzi (*et al.*, 2015), utilizaram o reator batelada para averiguar a viabilidade econômica do processo de conversão de energia por digestão anaeróbica do leite estragado para a produção de biogás e metano em micro escala, que mostrou ser uma alternativa eficiente, por apresentar uma geração de energia elétrica, que permitiu atender a quatro empresas de laticínios de pequeno porte, mostrando indicadores financeiros interessantes para investimento. Carlini (*et al.*, 2015) utilizaram dejetos de aves e de soro de queijo em um reator em batelada para a produção de biogás. Os resultados obtidos a partir da modelagem permitiram mostrar uma quantidade elevada de metano, e ao mesmo tempo, uma redução da acidez do soro de queijo, melhorando a proporção do carbono, do nitrogênio e redução dos sólidos totais, tornando-se uma alternativa eficiente de produção de eletricidade.

Qazizada (2016) abordou em seu trabalho a produção do etanol realizada em um biorreator batelada a partir da levedura *Saccharomyces cerevisiae*. O resultado alcançado no biorreator utilizando altas concentrações de substrato se mostrou promissor, por conta da levedura e das ótimas condições iniciais dentro do reator. Através da utilização dos balanços de massa, foi possível prever as conversões de substrato a produto, além do rendimento de produtos individuais.

Oliveira (2015) utilizou em seu trabalho duas estratégias para reduzir a complexidade de um modelo matemático de um processo contínuo de fermentação alcoólica em biorreator tubular de leito fixo. Uma das estratégias foi desenvolver um modelo alternativo muito menos complexo, mas conservativo, o qual possibilitou a simulação (estimação de parâmetros,

controle e otimização) do bioprocesso com um menor esforço computacional. As equações utilizadas para esse processo podem ser vistas a seguir.

$$\frac{dc_x}{dt} = \mu_x c_x - r_x; \mu_x = \left(\frac{\mu_{m\acute{a}x} c_s}{K_M c_x + c_s + \frac{c_s^2}{K_I}} \right) \left(1 - \frac{c_x}{c_x^*} \right) e^{-k_P c_P}; r_d = k_d c_x \quad (1)$$

$$\frac{dc_s}{dt} = k_{mS} a(C_s - c_s) - \mu_s c_x; \mu_s = \frac{\mu_x}{Y_{x/S}} + m \quad (2)$$

$$\frac{dc_P}{dt} = \mu_P c_x - k_{mP} a(c_P - C_P); \mu_P = Y_{P/S} \mu_s \quad (3)$$

Em que k_{mS} e k_{mP} são os coeficientes de transferência de massa para o substrato e para o etanol, K_M é a constante de saturação do modelo de Monod e k_d a velocidade específica de morte celular; μ_x , μ_s , μ_P , $\mu_{m\acute{a}x}$ são as velocidades específicas de crescimento, consumo de substrato, formação de produto, e a velocidade específica máxima de crescimento, respectivamente; c_x , c_s , C_s , c_P , e C_P são respectivamente, a concentração de microrganismos no interior da partícula, a concentração de substrato no interior da partícula, concentração de substrato na fase fluida, a concentração de produto no interior da partícula, concentração de produto (etanol) na fase fluida; r_d é a taxa de morte celular; m é a velocidade específica de consumo de substrato para manutenção celular; $Y_{x/S}$ e $Y_{P/S}$ são os coeficientes aparentes de conversão de substrato em células e produto, respectivamente.

A outra estratégia utilizada foi desprezar os gradientes de concentração no interior da partícula e aproximar o biorreator tubular de leito fixo por uma cascata de n-CSTRs em série de volume equivalente, para conseguir reduzir a complexidade de um modelo matemático, através da utilização das seguintes equações.

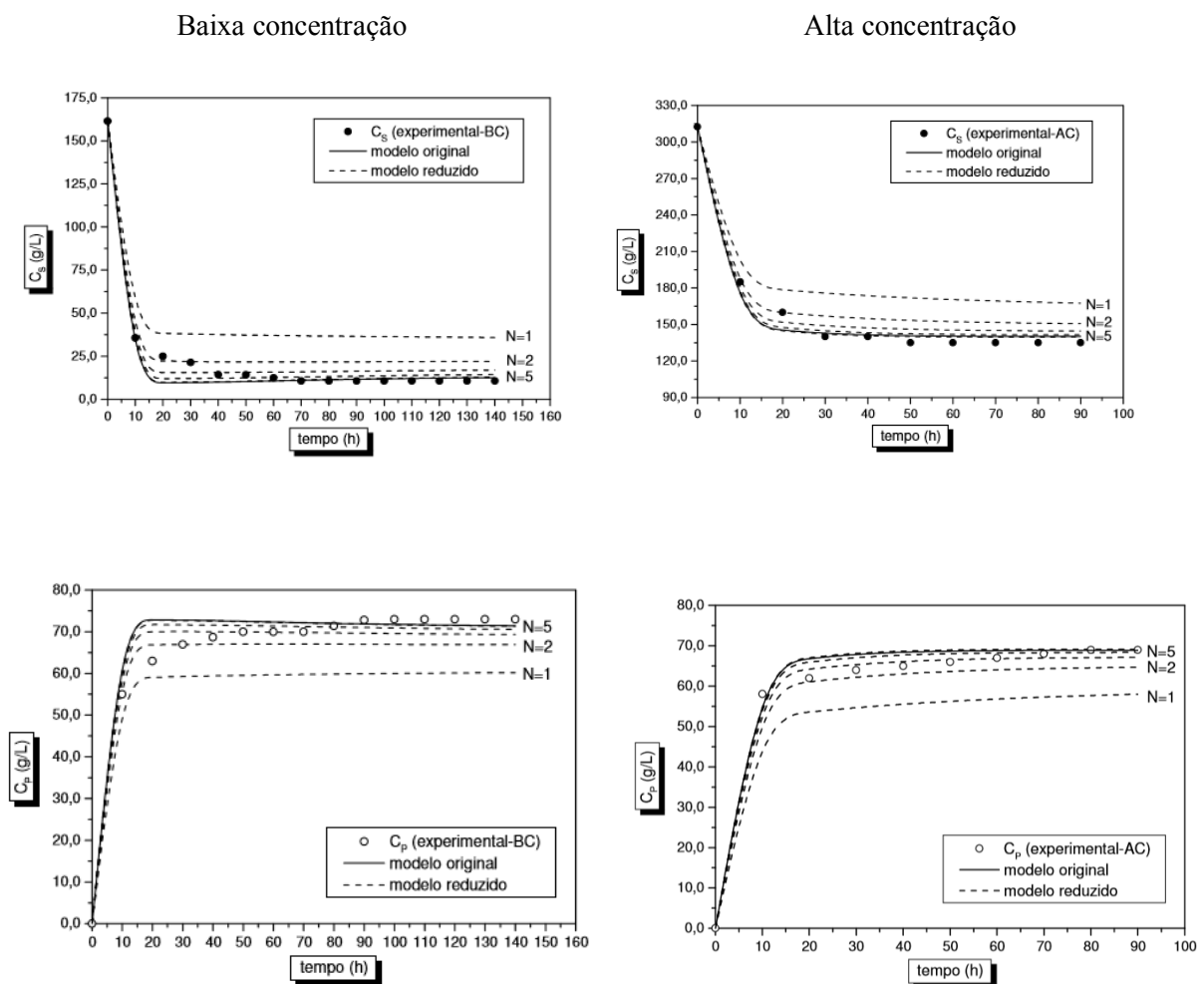
$$\frac{dc_{si}}{dt} = \frac{Q}{\varepsilon V_i} (C_{S_{i-1}} - C_{Si}) - \eta (\dot{r}_S)_{\text{sup}} \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right); i=1, \dots, N \quad (4)$$

$$\frac{dc_{Pi}}{dt} = \frac{Q}{\varepsilon V_i} (C_{P_{i-1}} - C_{Pi}) + Y_{P/S} \eta (\dot{r}_S)_{\text{sup}} \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \quad (5)$$

Em que Q representa a vazão volumétrica de alimentação; N é o número de reatores a ser estimado; V_i é igual ao volume do reator tubular dividido por N ; ε é a porosidade; η é o fator de efetividade; $(r'_s)_{sup}$ é a velocidade de consumo de substrato na superfície da partícula.

A partir da combinação das estratégias de redução do modelo da partícula e do modelo hidrodinâmico do biorreator, foi desenvolvido um modelo muito menos complexo. É possível observar no Gráfico 1, os resultados simulados da concentração de substrato e etanol na saída da cascata de reatores no regime transiente para baixa e alta concentração de substrato na alimentação (OLIVEIRA, 2015).

Gráfico 1 - Concentração de substrato e etanol na saída da cascata de reatores no regime transiente.



Fonte: OLIVEIRA, 2015, p. 6.

Nascimento (2018) aplicou na sua metodologia o modelo cinético de Monod na modelagem do processo de fermentação em caldo residual da casca de jabuticaba. O modelo proposto é descrito pelo conjunto de equações (balanços de massa) descrito a seguir.

$$\frac{dx}{dt} = \mu_x X - k_d X \quad (6)$$

$$\frac{dP}{dt} = qX \quad (7)$$

$$\frac{dS}{dt} - \frac{1}{Y_{x/s}} \left(\frac{dX}{dt} \right) + \frac{1}{Y_{P/s}} \left(\frac{dP}{dt} \right) + mX \quad (8)$$

$$Y_{P/s} = \frac{P_f - P_0}{S_0 - S_f} \quad (9)$$

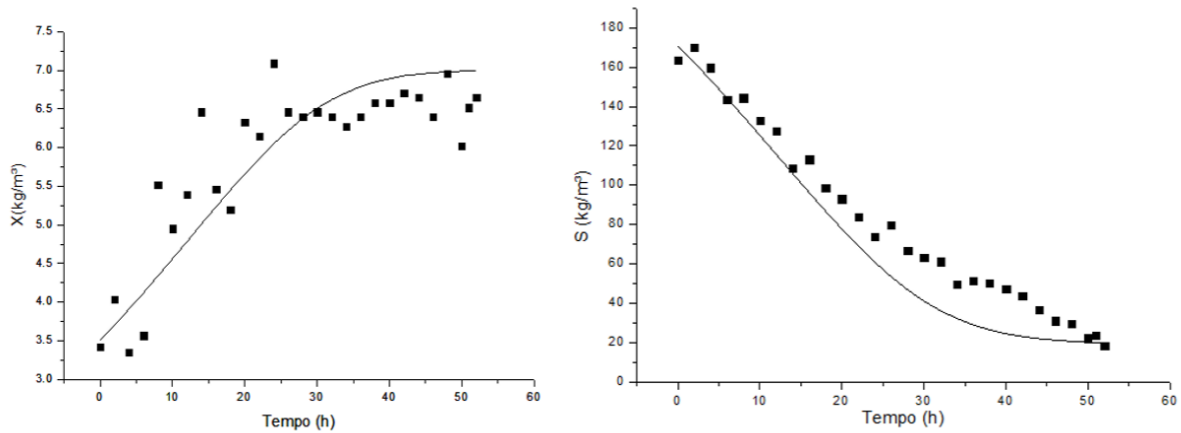
$$Y_{X/s} = \frac{X_f - X_0}{S_0 - S_f} \quad (10)$$

$$P_E = \frac{P_f - P_0}{t_f} \quad (11)$$

$$\mu_x = \frac{\ln X - \ln X_0}{t} \quad (12)$$

Sendo $Y_{X/s}$ o fator de conversão substrato em células (kg de células/kg de substrato); $Y_{P/s}$ o fator de conversão substrato em etanol (kg de etanol/kg de substrato); μ_x a velocidade específica máxima de crescimento celular (s⁻¹); P é a produtividade em etanol (kg de etanol/m³.s); X é a concentração de células no tempo t (kg/m³); S a concentração de substrato no tempo t (kg/m³); t o tempo de fermentação (s); P_E é a produtividade em etanol (kg de etanol/m³.s); X_f a concentração final de células (kg/m³); X_0 é a concentração inicial de células (kg/m³); S_f a concentração final de substrato (kg/m³); S_0 a concentração inicial de substrato (kg/m³); P_f é a concentração final de etanol (kg/m³); P_0 a concentração inicial de etanol (kg/m³); t_f o tempo total da fermentação (s).

O comportamento obtido é apresentado no (Gráfico 2), “com os pontos discretos representando os dados experimentais e a linha contínua a predição do modelo” (NASCIMENTO, 2018). Nos dados experimentais, observou-se a presença de muitos desvios, com isso, para melhor descrição do processo é necessário fazer um intervalo menor de tempo entre as coletas de amostras, ou seja, “o comportamento do sistema é descrito de maneira satisfatória pelo modelo cinético de Monod utilizando os parâmetros listados anteriormente” (NASCIMENTO, 2018).

Gráfico 2 - Comportamento do processo.

Fonte: (NASCIMENTO, 2018, p. 5).

Os pontos representam os dados obtidos experimentalmente e a linha contínua a predição do modelo.

Júnior (2015) aplicou a modelagem matemática em um processo químico, em que é abordado um problema na verificação do comportamento dinâmico da biomassa, substrato e produto ao longo do ciclo de fermentação. Para a realização dos cálculos, a taxa de crescimento específica (μ) foi baseada na equação de Monod e as taxas de crescimento da biomassa (r_g) e a de formação de produto (r_p), foram consideradas por unidade de volume. No modelo, as células de biomassa foram representadas pela letra X e o substrato pela letra S. As equações que descrevem seus comportamentos encontram-se expressas abaixo.

$$\mu = \mu_{\text{máx}} \frac{S}{K_S + S} \quad (13)$$

$$r_g = \mu X \quad (14)$$

$$r_p = Y_{p/X} r_g \quad (15)$$

$$\frac{dX}{dt} = r_g \quad (16)$$

$$\frac{dP}{dt} = r_p \quad (17)$$

$$\frac{dS}{dt} = \left(-\frac{r_g}{Y_{X/S}} \right) + \left(-\frac{r_p}{Y_{p/S}} \right) \quad (18)$$

No Gráfico 3, pode-se observar a simulação das equações do modelo descrito anteriormente. Verifica-se que ocorreu uma redução da quantidade do substrato desde o início da reação até aproximadamente 25 minutos do processo, atingindo seu valor mínimo após

esse período. Simultaneamente, observa-se que houve uma produção de biomassa em relação ao valor inicial na qual pode ser obtida uma pequena quantidade de produto, e os componentes atingiram um valor constante permanecendo assim durante o restante do tempo (JÚNIOR, 2015).

Gráfico 3 - Simulação dos resultados.



Fonte: JÚNIOR, 2015, p. 6.

Onde a linha azul no gráfico representa o substrato (S), a linha da curva verde significa o produto (P) e a linha vermelha representa a biomassa (X).

3.5 SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

A simulação de processos é capaz de explicar por meio da modelagem matemática o comportamento dos processos, gerando vários cenários experimentais, além de analisar estratégias para sua operação (SAWAKI, 2015). Para averiguar o desempenho de um processo químico, podem-se utilizar diversos softwares voltados para essa área, uma delas é a ferramenta computacional *software MATLAB®* (vastamente empregado no meio acadêmico nos setores de pesquisa), para avaliar um processo fermentativo conduzido em um biorreator, analisando o comportamento dinâmico das variáveis de concentração de produto, biomassa e substrato (JÚNIOR, 2015).

Por meio da ferramenta computacional aplicada aos processos fermentativos é possível avaliar todas as variáveis contidas dentro do processo, ou seja, valores finais de concentração a ser alcançados no equilíbrio para produto, substrato e biomassa, além da rapidez com que o equilíbrio pode ser alcançado em cada um dos casos adotados. Segundo Sawaki (2015), atualmente para a construção e operação de plantas industriais, são utilizados modelos matemáticos e software computacional para se ter uma visão do processo, ou seja, simulação de vários cenários de comportamento dentro dos sistemas.

De acordo com Leandro (2018), linguagens modernas que facilitam a estrutura de programação, vêm ganhando espaço entre os usuários e programadores, por conta da facilidade e integração entre ambos. Um exemplo, seria a linguagem *Python*, bastante empregada no meio computacional.

3.6 PROTOCOLO DE COMUNICAÇÃO ENTRE OS SOFTWARES

Com o intuito de garantir a competitividade em um mercado cada vez mais agressivo, a indústria tem investido pesado na automação de seus processos nos últimos anos. Plantas e processos industriais automatizados se tornaram imprescindíveis em praticamente todos os setores produtivos, desde o setor agrícola, químico, petroquímico, biotecnológico até o setor manufatureiro. A consequência da inserção da automação em um processo produtivo é a facilitação do monitoramento e controle destes, uma vez que permite a otimização de seus sistemas no que diz respeito à produção de bens de maior qualidade em um menor tempo de produção, além da redução dos custos e o aumento da capacidade produtiva (ROSÁRIO, 2009; OLIVEIRA, 2015).

Para a indústria, a simulação de processos deve estar sempre relacionada à facilitação da automação e controle de seus processos. O desenvolvimento de sistemas de supervisão e controle de processos inteligentes é uma das áreas mais promissoras da engenharia. É essencial que a comunicação entre os dispositivos destinados ao monitoramento e controle de processos químicos/bioquímicos no âmbito industrial seja realizada da maneira mais efetiva possível.

O padrão de comunicação denominado *Object Linking and Embedding (OLE)* e *Object for Process Control (OPC)*, baseado no protocolo desenvolvido pela Microsoft (*Component Object Model – COM*), é considerado o mais utilizado pela indústria atualmente e se configura como uma ferramenta eficiente no que diz respeito ao estabelecimento de interfaces

para aplicações em processos (FRANCO *et al.*, 2010). Essa tecnologia inteligente estabelece as regras, para que sejam desenvolvidos sistemas com interfaces padrões para comunicação dos dispositivos de campo (CLPs, sensores, balanças) com sistemas de monitoramento, supervisão e gerenciamento (FONSECA, 2002).

Na literatura, o controle de processo industrial pode ser classificado em três níveis, conforme está descrito a seguir, sendo a integração dos mesmos considerados de extrema relevância para a indústria (FRANCO *et al.*, 2010):

- i. *Nível de campo* - a presença de dispositivos inteligentes por redes *fieldbus* se torna cada vez mais comum;
- ii. *Nível de processo* - são disponibilizados os dados por meio dos sistemas de controle distribuído e os sistemas de supervisão e aquisição de dados;
- iii. *Nível gerencial* - é utilizado sistemas de bancos de dados e planilhas.

Segundo Franco (2010, p. 322), o OPC:

[...] é um padrão de comunicação de dados em que várias informações localizadas em diversos pontos (controladores, dispositivos de E/S, banco de dados, etc.) podem ser conectadas diretamente a um “Cliente”, o qual pode executar, entre outras, funções de Interface Homem-Máquina (IHM), de supervisão e de tratamento gráfico. A fim de realizar essa comunicação, o OPC utiliza-se de um protocolo universal para envio de dados entre “Servidores” (fontes de dados) e “Clientes” (aplicações), eliminando, dentro do possível, o uso de drivers e conversores, na maioria das vezes proprietários que criam uma dependência, muitas vezes, custosa e ineficiente, entre o usuário e o fornecedor do sistema proprietário.

O padrão OPC é formado por um conjunto de especificações para comunicação no ambiente industrial, “criado com a colaboração de vários dos mais importantes fornecedores de hardware e software para automação, em conjunto com a Microsoft” (SANTOS, 2007), além de possibilitar que as variáveis dos dispositivos estejam disponíveis em um modo padrão, em que diversos clientes possam simultaneamente acessá-las (BOFF *et al.* 2004 apud FRANCO, 2010). Vale ressaltar ainda que tal tecnologia é capaz de conceder troca de dados em tempo real entre aplicativos de forma aberta e simplificada.

A utilização dos servidores OPC em relação ao desenvolvimento de projetos concede algumas vantagens, tais como: uniformidade de interface para diferentes redes e protocolos; conexão plena com a rede; eliminação da necessidade de *drivers* de comunicação; integração entre distintas ferramentas de supervisão; melhoria do desempenho da comunicação entre dispositivos de automação; e redução dos custos e tempos para desenvolvimento de interfaces e *drivers* de comunicação, com conseqüente redução do custo de integração de sistemas (MACIEL, 2003).

A medida em que a automação de processos foi ganhando espaço no âmbito industrial, o desenvolvimento de sistemas de supervisão aconteceu de forma natural. Existem diversos sistemas voltados para a área de comunicação entre softwares de controle para processos químicos/bioquímicos no mercado. A grande maioria deles possuem pacotes de licença disponíveis para venda, e outra parte disponibilizam uma versão mais simples de forma gratuita para serem utilizados em ambiente acadêmico. Um dos sistemas mais conhecidos e utilizados industrialmente é o *SCADA (Supervisory Control and Data Acquisition)*, desenvolvido especificamente para monitorar processos produtivos permitindo a coleta de dados em tempo real e a disponibilização destes para o setor operacional distribuídos pela produção a qualquer hora.

No geral, eles consistem em ferramentas direcionadas para a monitoração de variáveis em tempo real, através de gráficos e objetos, diretamente relacionados com as variáveis físicas do processo, permitindo o tratamento das informações de forma simples e organizada. Uma das grandes vantagens desse tipo de sistema é a possibilidade de os operadores monitorarem e controlarem todos os processos, por meio da coleta de informações de qualquer tipo de equipamento de controle, conseguindo gerenciar toda a produção de forma interativa e transparente (SANTOS, 2007).

Neste trabalho, para a simulação do processo em estudo, foram utilizados dois softwares: o primeiro, com foco no comportamento do processo e o segundo, responsável pelo monitoramento, supervisão e controle do mesmo. Para que esta supervisão aconteça de forma eficiente, é necessária a construção das chamadas telas de supervisão, cuja ilustração será mostrada nos resultados discutidos.

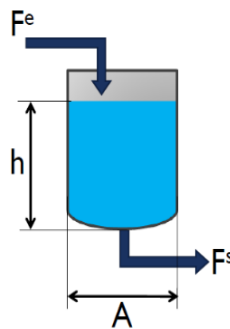
4 METODOLOGIA

O objeto de estudo deste trabalho consiste em um processo reacional de fermentação de glicose a etanol conduzido em um reator em batelada. Como parte da metodologia, foi utilizado como estratégia inicial de aprendizado, o estudo – incluindo a modelagem e a simulação – de dois processos mais simples (estudos de caso), sendo eles: um tanque de armazenamento e um processo reativo simples em um reator contínuo de mistura perfeita. A aplicação dessa estratégia permitiu o conhecimento e a familiarização com a modelagem e simulação de processos químicos e bioquímicos. A seguir, estão descritos os estudos de caso utilizados e o processo reacional fermentativo, principal objetivo do presente trabalho.

4.1 ESTUDO DE CASO: TANQUE DE ARMAZENAMENTO

O primeiro processo consiste em um reator batelada. Com o sistema devidamente modelado, foi possível simular o balanço de massa em ambiente de simulação computacional, na qual se pode obter o comportamento do nível dentro do tanque (Figura 2). Tendo como: F_e a vazão de entrada; F_s a vazão de saída; A sendo a área do tanque e h a altura do nível do tanque.

Figura 2 - Tanque de Armazenamento



Fonte: Construída pela autora.

As instruções específicas no software utilizado são geralmente dadas e executadas linha a linha. Dentro do programa é possível efetuar uma sequência de comandos que são arquivadas num arquivo, chamado de “ficheiro”. Ficheiros que contêm código nessa linguagem específica, são chamados M-files. Uma M-file consiste numa sequência de comandos próprios e característicos desse software específico que pode fazer referência a

outras M-files. Existem dois tipos de M-files que são mais utilizados: *scripts* e *function* (FALCAO, 2001).

Inicialmente, o balanço de massa foi realizado de forma analítica e em seguida foi implementado no software de simulação de processos. No aplicativo foi criado primeiramente um *script*, no qual os comandos digitados inicialmente foram: o nome do programa a ser analisado e os comandos de limpeza de variáveis e de tela (janela de comandos). Logo depois, foram adicionados os parâmetros (os dados ou condições iniciais), sendo utilizado o símbolo % para se digitar algum comentário.

Em seguida, foi determinado o número de iterações a serem implementadas no programa bem como o intervalo de tempo de simulação. Utilizando-se de uma estrutura de laço condicional de comando, o algoritmo continuou a ser construído possibilitando a resolução dos cálculos dentro de tal estrutura até que o número de iterações estabelecido fosse concluído.

Uma vez que a descrição matemática do processo é feita por equações diferenciais, é necessário um método capaz de solucionar tal equação fornecendo as informações previamente requeridas. No software utilizado, existem alguns pacotes numéricos de resoluções de equações diferenciais. No presente trabalho, foi utilizado um pacote específico que resolve equações diferenciais não-rígidas utilizando método numérico de ordem média. Para sua resolução, este pacote exige um intervalo de tempo bem definido e condições iniciais para as variáveis que serão analisadas.

O comando de resolução de equações diferenciais chama um novo arquivo (ficheiro), denominado de *function*. É neste arquivo que as equações serão propriamente resolvidas e, em seguida, retornam seus valores para o arquivo principal. Esse procedimento é repetido por n vezes, de acordo com o número de iterações estabelecido pelo usuário.

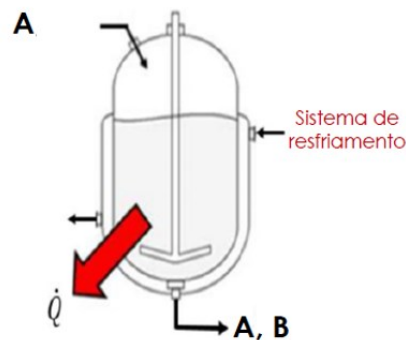
Como saída de dados, uma vez concluídos todos os cálculos, o software utilizado disponibiliza algumas opções, dentre as quais a mais utilizada é a geração de gráficos. Com comandos específicos para tal, é possível plotar vários gráficos em uma mesma figura e, assim, tornar a análise das variáveis mais funcional. É possível obter gráficos bidimensionais ou tridimensionais com qualquer tipo de escala e coordenadas.

4.2 ESTUDO DE CASO: PROCESSO REACIONAL EM REATOR CSTR

A segunda parte do processo de aprendizado consistiu na modelagem e simulação de um processo genérico conduzido em um reator do tipo mistura perfeita (CSTR), conforme

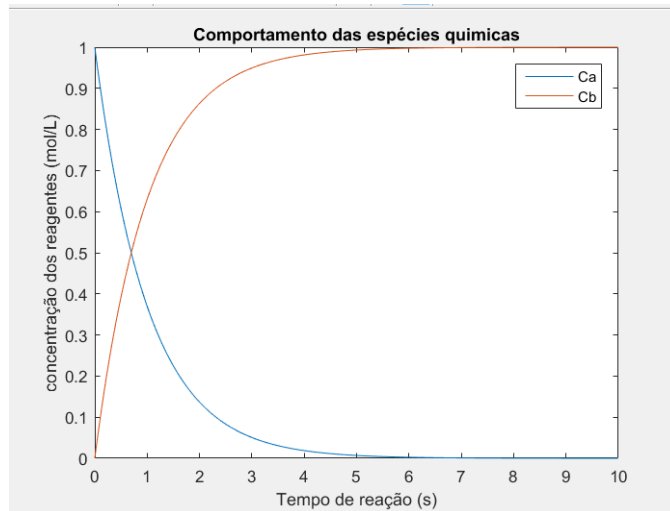
ilustra a Figura 3. Realizaram-se o balanço de massa global e o balanço por componente para uma reação simples, do tipo $A \rightarrow B$, de primeira ordem, irreversível e exotérmica (processo que ocorre a liberação de calor no meio). Com o sistema devidamente modelado, foi possível simular o balanço de massa em ambiente computacional, obtendo o comportamento das concentrações de A e B, bem como da conversão como tempo.

Figura 3 - Reator CSTR.



Fonte: Construída pela autora.

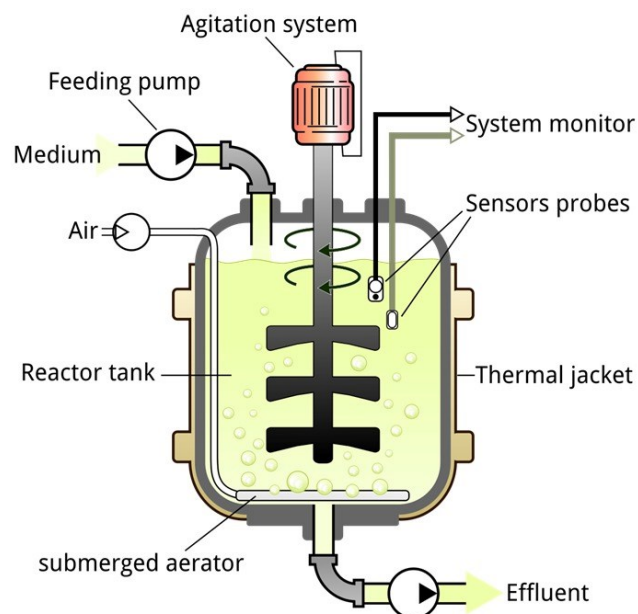
Inicialmente, repetiu-se o mesmo procedimento aplicado ao sistema em batelada descrito anteriormente. Posteriormente foram definidas as variáveis das concentrações, o número de iterações e o passo de tempo a ser incorporado nos cálculos. Dentro do comando da estrutura de laço condicional utilizado, foram fornecidos os dados das concentrações, as condições iniciais e de tempo, e a chamada do arquivo da função onde serão solucionadas as equações diferenciais ordinárias características do processo. Por fim, foram implementados os comandos para se obter a saída de dados através do gráfico, expresso pela Gráfico 4, e encerrada a estrutura de laço condicional. Sendo C_a representada pela curva azul à concentração do substrato e C_b a curva vermelha representando a concentração do produto formado.

Gráfico 4 - Comportamento das concentrações.

Fonte: Construído com os dados da pesquisa.

4.3 DESCRIÇÃO DO PROCESSO REACIONAL: FERMENTAÇÃO DA GLICOSE À ETANOL

A metodologia utilizada neste trabalho foi desenvolvida baseada em um processo reacional de fermentação de glicose a etanol conduzido em um reator em batelada, conforme exposto na Figura 4.

Figura 4 - Diagrama do sistema conduzido em um reator batelada.

Fonte: Construído pela autora.

A reação acontece em fase líquida e pode ser representada, de forma simplificada, pela Equação 19.



Por se tratar de um sistema em batelada, pode-se afirmar que não existe entrada ou saída de reagentes ou produtos durante o processamento da reação, sendo toda a mistura reacional retirada ao final do processo de uma só vez (FOGLER, 2014). Considerando no processo reacional o CO₂ dentro da produção da glicose a etanol.

O sistema em batelada, ilustrado na Figura 8, pode ser representado pelos modelos matemáticos, descritos através dos balanços de massa e entalpia, sendo associados aos conceitos cinéticos do processo. Os dados cinéticos e os parâmetros do modelo foram obtidos na literatura e encontram-se sumarizados na Tabela 1.

Tabela 1- Parâmetros e Condições Operacionais do Reator em Batelada.

Parâmetros	Siglas	Valores
C _C	Concentração celular	1,0 g/dm ³
C _S	Concentração de substrato	250 g/dm ³
C _p *	Concentração do produto na qual todo metabolismo cessa	93 g/dm ³
N	Constante empírica	0,52
μ _{máx}	Velocidade específica de crescimento máximo	0,33 h ⁻¹
K _S	Constante de <i>Monod</i>	1,7 g/dm ³
K _d	Velocidades específicas de morte natural	0,01 h ⁻¹
Y _{C/S}	Coefficiente de rendimento de células em relação ao substrato	0,08 g/g
Y _{P/S}	Coefficiente de rendimento do produto em relação ao substrato	0,45 g/g
Y _{P/C}	Coefficiente de rendimento do produto em relação às células	5,6 g/g
M	Manutenção da célula	0,03 (g de substrato)/(g de células . h)

Fonte: FOGLER, 2009.

De acordo com Fogler (2009), os parâmetros são descritos a partir das leis de velocidade, na qual a lei mais comumente utilizada para expressar a velocidade de crescimento de novas células, é a equação de *Monod* para crescimento exponencial:

$$r_g = \mu * C_c \quad (20)$$

O termo r_g corresponde à velocidade de crescimento celular, expresso em $\text{g/dm}^3 \cdot \text{s}$, o termo C_c refere-se à concentração celular (g/dm^3) e a velocidade específica de crescimento, medida em s^{-1} , é expressa pelo termo μ . Esta, por sua vez, pode ser expressa matematicamente pela Equação 21:

$$\mu = \mu_{m\acute{a}x} * \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \quad (21)$$

Em que, o termo K_s refere-se à constante de *Monod*, expresso em g/dm^3 , o termo C_s corresponde à concentração de substrato em g/dm^3 e por último o termo $\mu_{m\acute{a}x}$ que expressa à velocidade específica de crescimento máximo (s^{-1}).

Segundo Fogler (2009), os valores típicos tabelados para o crescimento de $\mu_{m\acute{a}x}$ e K_s são, respectivamente, $1,3\text{h}^{-1}$ e $2,2 \times 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$. Combinando as equações 20 e 21, pode-se chegar à equação de *Monod* relativa à velocidade de crescimento celular expressa pela Equação 22:

$$r_g = \frac{\mu_{m\acute{a}x} * C_s * C_c}{K_s + C_s} \quad (22)$$

Para a maioria dos microorganismos, o valor de K_s é muito pequeno, sendo assim a lei de velocidade para esses casos, pode ser reescrita como a Equação 23:

$$r_g = \mu_{m\acute{a}x} * C_c \quad (23)$$

Fogler (2014) afirma que em muitos sistemas o produto tem a influência de inibir a velocidade de crescimento. Tais inibições podem acontecer de diversas maneiras, existem diferentes equações para tentar descrever cada uma delas. Uma dessas leis de velocidade pode ser matematicamente representada pela Equação 24, obtida empiricamente:

$$r_g = k_{obs} \frac{\mu_{máx} C_s C_c}{k_s + C_s} \quad (24)$$

Em que,

$$k_{obs} = \left(1 - \frac{C_p}{C_p^*}\right)^n \quad (25)$$

Sendo o termo C_p^* a concentração do produto na qual todo metabolismo cessa, na unidade de g/dm^3 . Enquanto o termo n representa uma constante empírica. De acordo com Fogler (2014), para a fermentação de glicose a etanol, utilizam-se os seguintes valores para tais parâmetros de inibição: $n=0,52$ e $C_p^* = 93 \text{ g/dm}^3$.

A lei que resume a velocidade de morte celular de um ambiente inóspito é definida por:

$$r_d = (k_d + k_t C_t) C_c \quad (26)$$

Em que o termo C_t representa a concentração de uma substância tóxica para a célula, e as velocidades específicas de morte k_d e k_t são referentes, respectivamente, à morte natural e à morte causada pela substância tóxica (FOGLER, 2009).

O sistema microrganismo/nutriente e as condições ambientais – tais como, pH, temperatura e potencial de oxirredução – influenciam diretamente na estequiometria reacional de crescimento celular, aumentando a complexidade desta etapa, especialmente se mais de um nutriente contribui para o crescimento das células. De modo a simplificar essa complexidade e aprofundar mais o assunto, considerar-se-á que no meio reacional está presente apenas um nutriente. Assim sendo, temos a seguinte equação:



De modo a relacionar o substrato consumido com as novas células formadas e o produto gerado, pode ser introduzido o conceito de rendimento, descrito matematicamente pela Equação 28:

$$Y_{C/S} = \frac{\text{Massa das novas células formadas}}{\text{Massa de substrato consumido}} = \frac{\Delta C_c}{\Delta C_s} \quad (28)$$

O termo $Y_{C/S}$ diz respeito ao coeficiente de rendimento das células e do substrato, ou seja, representa o quanto de células novas foram formadas a partir da massa inicial de substrato no meio. O coeficiente $Y_{S/C}$, por sua vez, pode ser obtido pelo inverso da equação acima e descreverá a quantidade de substrato que deve ser consumido para aumentar a concentração de células.

Fogler (2009) afirma que o produto pode ser formado durante as diferentes fases do ciclo de crescimento celular. Sendo assim, quando o produto é formado apenas na fase de crescimento exponencial, a velocidade de formação deste pode ser dada pela Equação 29:

$$r_p = Y_{p/c} * r_g = Y_{p/c} * \mu C_c = Y_{p/c} * \frac{\mu_{m\acute{a}x} * C_s * C_c}{K_s + C_s} \quad (29)$$

Em que o termo $Y_{p/c}$ representa o coeficiente de rendimento do produto em relação às células, podendo ser descrito matematicamente como segue:

$$Y_{p/c} = \frac{\text{Massa do produto formado}}{\text{Massa das células novas formadas}} \quad (30)$$

Para o caso de o produto só ser formado durante a fase estacionária, quando não ocorre crescimento celular, pode-se relacionar a formação do produto ao consumo de substrato através da Equação 31:

$$r_p = Y_{p/s} * (-r_s) \quad (31)$$

O termo $-r_s$ se refere à velocidade de consumo do substrato. E o coeficiente de rendimento estequiométrico que relaciona a quantidade de produto formado por massa de substrato consumido é descrito matematicamente pela expressão:

$$Y_{p/s} = \frac{\text{Massa do produto formado}}{\text{Massa do substrato consumido}} \quad (32)$$

Quando o substrato é consumido para produzir novas células, parte dele deve ser usada para manter as atividades cotidianas das células, onde o termo de manutenção, correspondente a utilização, é dado pela Equação 33:

$$m = \frac{\text{Massa do substrato consumido para a manutenção}}{\text{Massa de células} \cdot \text{Tempo}} \quad (33)$$

4.3.1 Balanço de massa

Partindo da equação geral do balanço molar em um reator batelada e fazendo as considerações adequadas, pode-se obter a equação de projeto correspondente:

$$\text{ACÚMULO} = \text{ENTRADA} - \text{SAÍDA} + \text{GERAÇÃO} \quad (34)$$

Reescrevendo em termos reacionais, tem-se:

$$\begin{bmatrix} \text{Velocidade de} \\ \text{acúmulo de} \\ \text{células ou substrato} \\ \text{g/s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Vazão mássica} \\ \text{de entrada} \\ \text{de células ou substrato} \\ \text{g/s} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Vazão mássica} \\ \text{de saída} \\ \text{de células ou substrato} \\ \text{g/s} \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} \text{Velocidade de} \\ \text{geração/consumo} \\ \text{de substrato} \\ \text{g/s} \end{bmatrix}$$

Uma vez que a fermentação, nesse caso, está sendo analisada em um reator batelada, a Eq. 34 se reduz a:

$$\begin{bmatrix} \text{Velocidade de} \\ \text{acúmulo de} \\ \text{substrato} \\ \text{g/s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Velocidade de} \\ \text{geração/consumo} \\ \text{de substrato} \\ \text{g/s} \end{bmatrix} \quad (35)$$

Assim, sendo a equação de projeto de um reator batelada pode ser dada pela Equação 36, sendo o termo j utilizado para expressar alguma espécie química.

$$\frac{dC_j}{dt} = r_j \quad (36)$$

De acordo com Fogler (2014), o crescimento de microrganismos pode ser considerado de duas maneiras distintas. Na primeira, considera-se o número de células vivas, enquanto na

outra é considerada a massa de células vivas. Neste trabalho, a modelagem será desenvolvida baseada na segunda maneira. Nesse contexto, no processo reacional em questão deseja-se observar o comportamento tanto das células quanto do substrato e do produto formado, tornando-se necessário a aplicação de um balanço de massa para cada.

Aplicando o passo a passo do algoritmo no balanço de massa de microrganismo em um reator batelada, onde $v=v_0=0$ (vazões de entrada e saída), pode-se obter uma expressão para o comportamento das células, conforme mostram as Equações 37 e 38. Sendo o r_g e r_d , a velocidade de crescimento celular ($\text{g/dm}^3.\text{s}$) e velocidade de morte celular ($\text{g/dm}^3.\text{s}$), respectivamente.

$$V \frac{dC_c}{dt} = r_g V - r_d V \quad (37)$$

Dividindo a equação anterior pelo volume do reator, V, obtém-se:

$$\frac{dC_c}{dt} = r_g - r_d \quad (38)$$

De forma semelhante, pode-se obter o balanço de massa para o substrato, representado matematicamente pelas Equações 39 e 40:

$$\frac{V dC_s}{dt} = r_s V \quad (39)$$

Neste ponto é importante ressaltar que a velocidade de consumo do substrato, representada pelo termo $-r_s$, é resultado da sua utilização para o crescimento e para a manutenção celular. Dessa forma, a equação anterior pode ser assim reescrita:

$$\frac{V dC_s}{dt} = r_s V = Y_{s/c} (-r_g) V - r_{sm} V \quad (40)$$

O termo r_{sm} representa a velocidade de consumo do substrato quanto utilizado para manutenção celular e pode ser dado pela Equação 41:

$$r_{sm} = m * C_c \quad (41)$$

Seguindo o mesmo procedimento, a expressão que representa o balanço de massa para o produto do processo reacional em estudo é dada pela Equação 42:

$$V \frac{dC_p}{dt} = r_p V \quad (42)$$

Sabendo que para crescimento celular, o termo da velocidade de formação do produto pode ser dado por $r_p = r_g * Y_{P/C}$, então a Equação 43 torna:

$$V \frac{dC_p}{dt} = r_g * Y_{P/C} \quad (43)$$

E ainda, tendo em vista que a velocidade de formação do produto pode ser relacionada à velocidade do consumo do substrato, quando $m = 0$ (manutenção celular), então o balanço de massa do produto também pode ser matematicamente descrito como segue:

$$V \frac{dC_p}{dt} = Y_{p/s} (-r_s) V \quad (44)$$

De posse das informações sobre as leis de velocidade e da estequiometria do processo reacional em análise, pode-se substituir a Equação 25 na Equação 24 e assim obter:

$$r_g = \mu_{\max} \left(1 - \frac{C_p}{C_p^*} \right)^{0,52} \frac{C_s C_c}{K_s + C_s} \quad (45)$$

Considerando na expressão que descreve a velocidade de morte celular, que não tenha a concentração de uma substância tóxica à célula e nem a velocidade específica de morte causada pela substância tóxica, então a Equação 46 se torna:

$$r_d = k_d C_c \quad (46)$$

Combinando as equações anteriores, podem-se obter os balanços para célula, substrato e produto, respectivamente:

$$\frac{dC_c}{dt} = \mu_{m\acute{a}x} \left(1 - \frac{C_p}{C_p^*}\right)^{0,52} \frac{C_s C_c}{K_s + C_s} - k_d C_c \quad (47)$$

$$\frac{dC_s}{dt} = -Y_{s/c} \mu_{m\acute{a}x} \left(1 - \frac{C_p}{C_p^*}\right)^{0,52} \frac{C_s C_c}{K_s + C_s} - m C_c \quad (48)$$

$$\frac{dC_p}{dt} = Y_{p/c} r_g \quad (49)$$

A modelagem adequada do processo em estudo possibilitou a simulação dos balanços de massa no ambiente computacional de maneira efetiva, permitindo a análise do comportamento das concentrações celular, do substrato e do produto com o tempo, bem como verificar a influência temporal nas velocidades específicas de crescimento celular (r_g), de morte celular (r_d), de consumo de substrato para a manutenção (r_{sm}) e a forma empírica da equação de Monod para a inibição por produto (K_{obs}).

Todo o procedimento de simulação empregado nos casos de aprendizado descritos no primeiro subtópico desta seção foi implementado para o caso em análise da fermentação, adaptando-se o que era necessário. Os resultados obtidos pela aplicação dessa modelagem serão analisados e discutidos no tópico seguinte.

Uma vez que o processo fermentativo foi modelado e simulado no software computacional, o passo seguinte consistiu em estudar o *software* responsável pela construção das telas de supervisão e, assim, tornar possível a comunicação entre os dois *softwares* para a simulação do monitoramento, supervisão e controle do processo fermentativo em estudo.

O *Elipse Scada*® é uma plataforma de simulação computacional de processos que permite a visualização do processo e a integração do usuário ao mesmo através de telas de supervisão construídas. Esse recurso facilita o monitoramento e o controle de processos ao evitar que os responsáveis se dirijam ao ambiente real todas as vezes que acontece algum distúrbio ou anomalia nos processos, economizando tempo e direcionando os esforços para solucionar o problema de maneira mais efetiva.

4.4 CONSTRUÇÃO DA TELA DE SUPERVISÃO

Para que haja a comunicação entre softwares é necessário que exista uma ferramenta ou tecnologia que permita isso. No caso dos softwares utilizados para a simulação do processo reacional em estudo, a tecnologia que permite a comunicação entre eles é a *OPC (Object for Process Control)*, cuja funcionalidade foi descrita no item 3.6.

O primeiro passo para iniciar a comunicação é realizar a ativação da tecnologia OPC em um dos softwares. Nesse caso, a ativação foi realizada no software de simulação utilizado para descrever o comportamento do processo reacional. Uma vez feito isso, o passo seguinte consistiu na criação da tela de supervisão para o processo em estudo, no segundo software.

Para isso, inicialmente foi necessário a realização do *tagueamento* das variáveis a serem monitoradas, ou seja, a identificação delas. A escolha dessas variáveis não é feita de maneira aleatória, mas é baseada na relevância destas para o processo. Isto é, num sistema de supervisão é importante que se monitore as variáveis que mais podem influenciar no rendimento do processo.

Em seguida, os esforços foram direcionados para a criação de elementos que compusessem a tela de supervisão propriamente dita, como os *displays* para acompanhamento do comportamento das variáveis ao longo do processo, o botão *on/off* para dar início ao processo, a construção de gráficos, entre outros.

A comunicação entre os dois softwares utilizados no processo em questão foi realizada da seguinte maneira: inicialmente, foram digitados no software de simulação os comandos de conexão com o software de supervisão e a criação de um grupo de *tags*; em seguida, foi implementado o acesso ao segundo software através de comandos de identificação das *tags* criadas anteriormente. No algoritmo, esses comandos foram implementados antes da entrada de dados do processo reacional de fermentação estudado.

Após as condições iniciais do processo e antes da estrutura de laço condicional, foram implementados os comandos para mostrar na tela de supervisão os valores de 5 parâmetros escolhidos para acompanhamento do processo: rendimento substrato/células (Y_{sc}), velocidade específica de crescimento máximo (u_{max}), constante de Monod (K_s), velocidade de morte celular (K_d) e concentração do produto na qual todo o metabolismo cessa (C_{p_x}). Na simulação em questão, tais parâmetros mantiveram seus valores constantes ao longo de todo processo, mas a implementação foi realizada para mostrar que em uma situação real, os valores podem variar e serem monitorados ou controlados, se necessário.

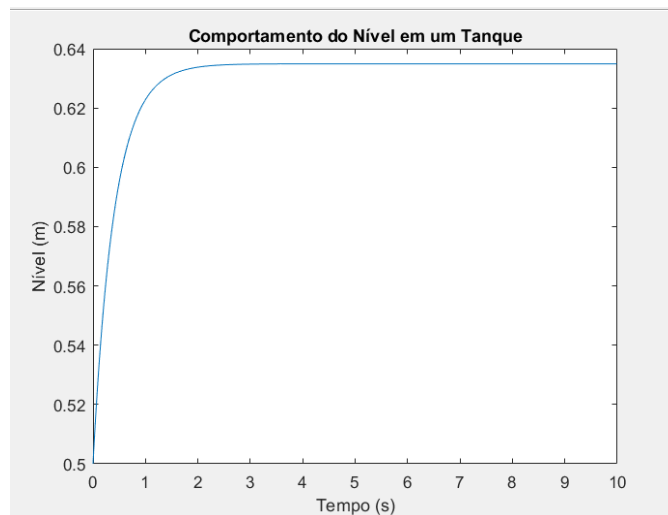
Em seguida, já dentro da estrutura de laço condicional, mas antes dos comandos de resolução das equações diferenciais ordinárias correspondentes aos balanços de massa do processo reacional estudado, foram implementados comandos para a atualização dos valores dos parâmetros mencionados anteriormente ao longo de todas as iterações. E por fim, ainda dentro da estrutura de laço condicional, porém após toda a estrutura de cálculo das concentrações de produto, substrato e células ao longo do processo, comandos de atualização dos valores dessas variáveis foram implementados com o objetivo de monitoramento e controle do rendimento do processo. Uma vez concluída esta etapa, o passo seguinte consistiu em iniciar a simulação nos dois softwares e analisar o comportamento das variáveis escolhidas ao longo do processo.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 ESTUDOS DE CASO

No processo de aprendizagem, pelos resultados obtidos para o primeiro caso do tanque de armazenamento, ilustrado no Gráfico 5, pode ser observado o comportamento do nível do tanque ao longo do processo de simulação, partindo de um valor inicial de 0,5m de nível de líquido no tanque. O intuito é ver como o nível varia com o tempo, através da utilização do *software* computacional. A partir da modelagem e da simulação do processo em questão foi possível visualizar como o nível de líquido em um tanque de armazenamento se comporta, considerando a vazão de alimentação maior do que a vazão de saída, conforme ilustra a figura 9.

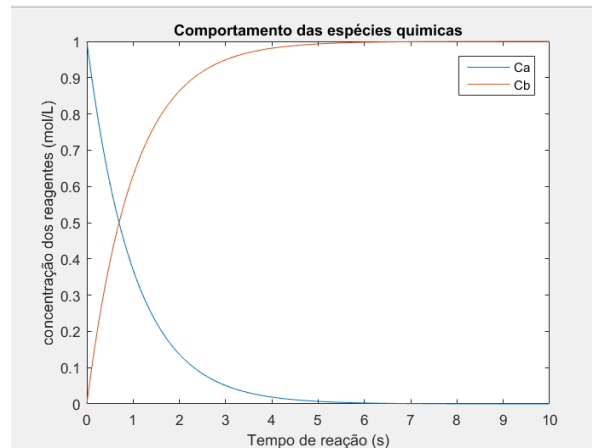
Gráfico 5 - Comportamento do Nível em um Tanque.



Fonte: Construído com os dados da pesquisa.

Para o segundo estudo de caso, o objetivo era observar o comportamento das concentrações do reagente (A) e do produto (B) ao longo do processo reacional descrito na seção anterior, atentando-se ao consumo de A proporcionalmente, enquanto B é gerado. O resultado obtido pode ser visto no Gráfico 6.

Observa-se inicialmente o consumo do reagente simultaneamente à produção do componente B, até que em um certo momento as curvas de concentração se interceptam e a reação atinge o seu equilíbrio químico. A partir desse ponto, a reação continua acontecendo até o consumo total do componente A.

Gráfico 6 - Comportamento das concentrações.

Fonte: Construído com os dados da pesquisa.

5.2 UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE PARA ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DO PROCESSO

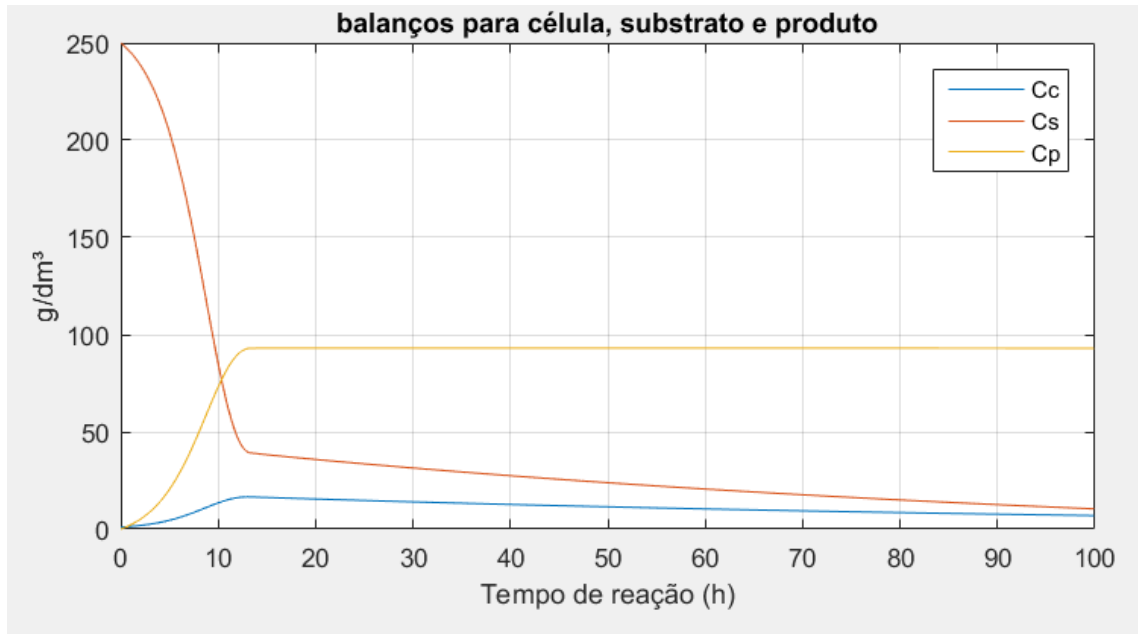
Para o processo reacional estudado neste trabalho, onde objetivou-se mostrar como acontece um processo fermentativo em um reator batelada, mediante a fermentação da glicose a etanol, por meio do microrganismo *Saccharomyces cerevisiae*, serão vistos através das simulações, via modelagem e utilização de *softwares* computacionais, os resultados e seus respectivos pontos operacionais, os quais serão apresentados, discutidos e comparados aos dispostos na literatura. Para a simulação do processo foram considerados os balanços demonstrados na seção anterior, dadas pelas Equações 47, 48 e 49.

Através da modelagem matemática é possível representar o sistema graficamente em todos os seus estados reacionais. No Gráfico 7, encontra-se representado o comportamento das concentrações celular (C_c), do substrato (C_s) e produto (C_p), levando em consideração os parâmetros expressos na seção 4.3 da Tabela 1. No momento em que as células dos microrganismos começam a consumir o substrato, a formação do produto é iniciada na mesma proporção, ou seja, estas concentrações estão diretamente relacionadas.

É possível notar que a concentração do produto atingiu seu ponto máximo depois de 12h de fermentação, período no qual também se observa o mínimo valor da concentração de substrato, isto se deve ao fato de a levedura estar metabolizando a glicose tanto para o crescimento celular, quanto para a formação do etanol. A partir das 12h de fermentação a concentração de substrato diminui, indicando a fase de morte celular, neste período além da baixa concentração de substrato, há uma grande concentração de etanol que pode estar agindo como inibidor do crescimento celular. Visualiza-se o mesmo resultado descrito na literatura.

De acordo com o que foi descrito por Fogler (2014), ao continuar o procedimento de integração no tempo, chegará um momento que a concentração do substrato (seu valor numérico) se tornará negativo.

Gráfico 7 - Comportamento das concentrações C_c (células), C_s (substrato) e C_p (produto).



Fonte: Construído com os dados da pesquisa.

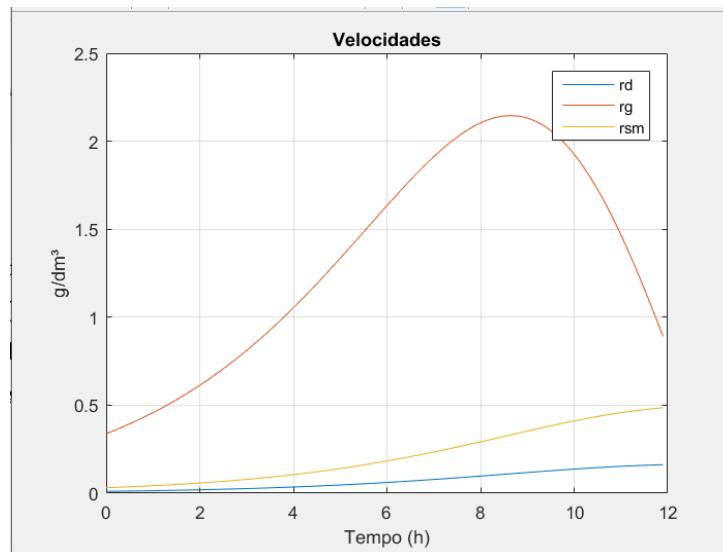
Segundo Silva (2010), em seu trabalho, apesar da levedura do gênero *Saccharomyces* ser capaz de produzir etanol utilizando o glicerol como sua fonte de alimentação, foi analisado que ela não é capaz de produzir etanol em quantidades bastante expressivas a partir da utilização desta fonte. Levando em conta isto, observa-se na Figura 11, que após as 13h, a concentração do produto permanece constante (não conseguindo uma quantidade elevada de produção do etanol), mesmo continuando a ocorrer o consumo do substrato.

A análise da influência temporal nas velocidades específicas de crescimento celular (r_g), de morte celular (r_d), de consumo de substrato para a manutenção (r_{sm}) e a forma empírica da equação de Monod para a inibição por produto (K_{obs}), podem ser vistas nas Figuras 15 e 16. De acordo com Ferreira (2005), durante a maioria das fermentações descontínuas, a velocidade específica de crescimento é constante e independente da concentração de nutrientes, que encontra-se variando.

No Gráfico 8, observa-se o gráfico das velocidades específicas, em um certo ponto visualiza-se o início da desaceleração celular, que é onde começa a diminuir devido ao esgotamento de um ou mais componentes do meio de cultura, quando o crescimento celular

atinge seu ponto máximo, ocorre um equilíbrio entre a velocidade de crescimento e a velocidade de morte do microrganismo, posteriormente começa seu estado de declínio, a concentração celular diminui a uma velocidade que excede a velocidade de produção de células, ocorrendo a lise celular, já a velocidade de consumo de substrato para essa manutenção por unidade de volume é proporcional à concentração de células.

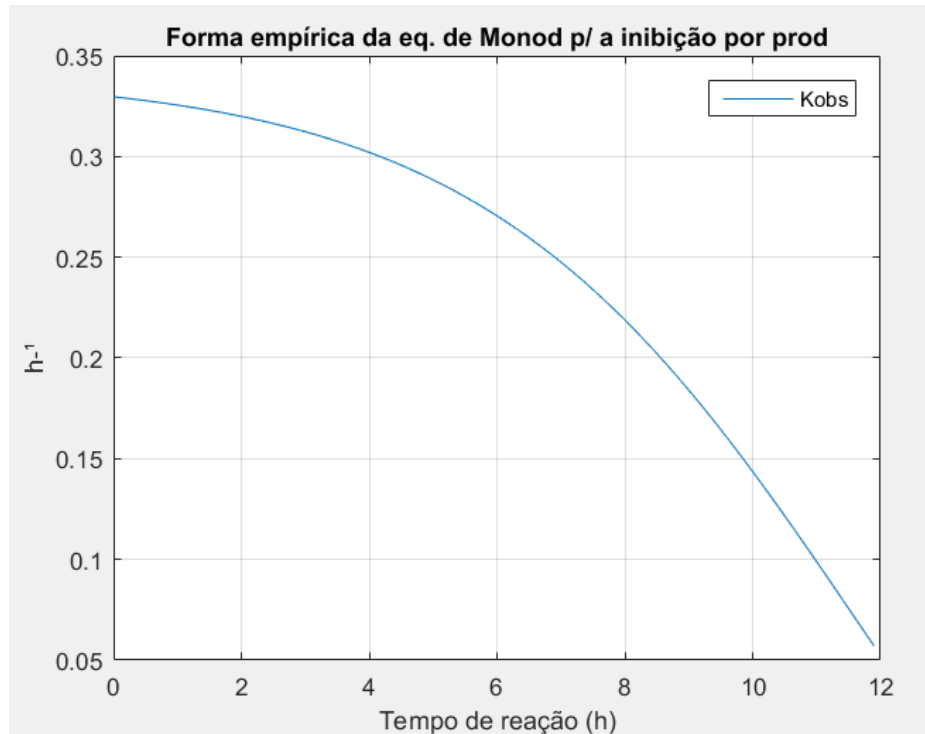
Gráfico 8 – Velocidades específicas de rd (linha azul), rg (curva vermelha) e rsm (linha laranja).



Fonte: Construído com os dados da pesquisa.

A forma empírica da equação de Monod para a inibição por produto pode ser vista no Gráfico 9. Guidini (2013) expressa em seu trabalho que a relação entre velocidade de crescimento e concentração de nutriente foi observada em 1949 por Monod, sendo uma equação simples e popular para descrever o crescimento microbiano, onde assume a presença de substrato como limitante para o crescimento. Todos os resultados obtidos por meio da simulação do processo de fermentação estudado estão de acordo com a literatura (FOGLER, 2014).

Gráfico 9 - Forma empírica da equação de Monod para a inibição por produto (K_{obs}).

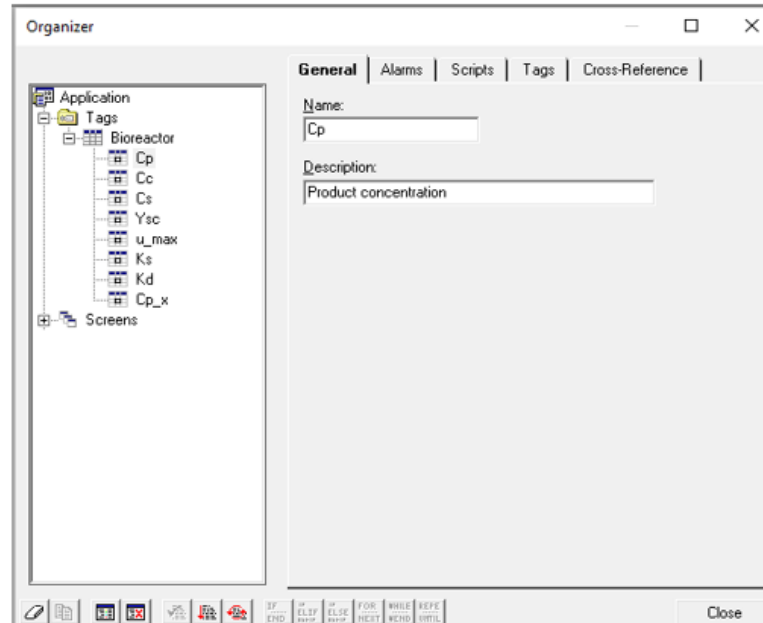


Fonte: Construído com os dados da pesquisa.

5.3 UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE PARA A CONSTRUÇÃO DE TELAS DE SUPERVISÃO

A construção da tela de supervisão, no software utilizado, foi realizada de acordo com a metodologia descrita na seção anterior. O *tagueamento* permite, entre outras coisas, a identificação das variáveis de maior relevância no processo. No presente trabalho, a concentração do produto (etanol) pode ser influenciada, entre outras variáveis, pela quantidade de substrato e/ou de microrganismos alimentados ao processo, sendo estas as principais variáveis a serem monitoradas no sistema. Na Figura 5 pode ser observada a criação de um grupo (*Bioreactor*) onde foram alocadas as variáveis e os parâmetros escolhidos para serem monitorados durante o processo.

Figura 5 - Criação das tags para as variáveis e parâmetros do processo reacional analisado.

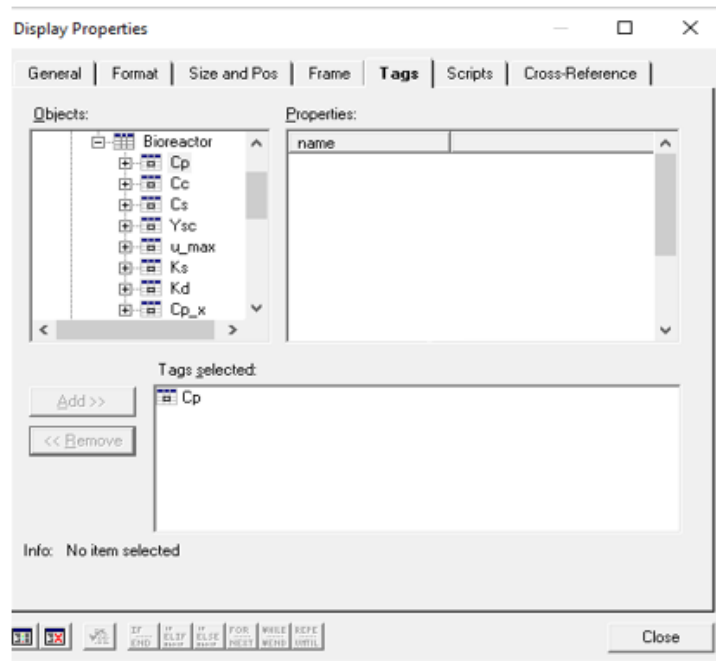


Fonte: Construída pela autora.

Com o grupo de *tags* criado, foi necessário definir a quantidade de variáveis e/ou parâmetros a serem identificados. Nesse caso, optou-se por criar um total de 8 *tags* entre variáveis (concentrações do produto, de células e substrato) e parâmetros (rendimento substrato/células, velocidade específica de crescimento máximo (u_{max}), constante de Monod (K_s), velocidade de morte celular (K_d) e concentração do produto na qual todo o metabolismo cessa (C_{p_x})). Apesar de seus valores terem sido mantidos constantes, esses parâmetros foram acrescentados à tela de supervisão para simular uma situação real na qual seus valores podem variar ao longo do processo e afetar o rendimento do produto desejado.

Na Figura 6 encontram-se ilustrados o processo de criação dos dispositivos de apresentação de informações, os chamados *displays*, cuja finalidade é mostrar os valores atualizados das variáveis que são calculados a cada iteração pelo software de simulação, bem como os valores dos parâmetros escolhidos.

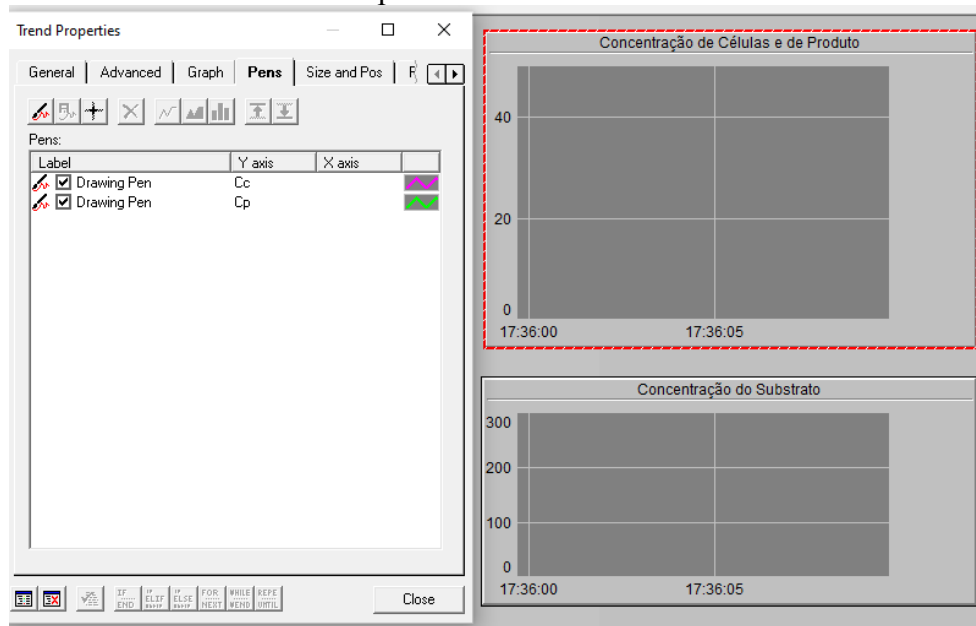
Figura 6 - Criação dos displays para apresentação das informações das variáveis e parâmetros do processo analisado.



Fonte: construída pela autora.

O acompanhamento do comportamento das variáveis do processo foi realizado por meio de gráficos. A criação destes elementos no software de supervisão encontra-se ilustrada na Figura 7. Com o intuito de obter uma avaliação mais clara e precisa, optou-se por analisar o comportamento da concentração do substrato separadamente da concentração de células e produto devido à diferença de escala existente.

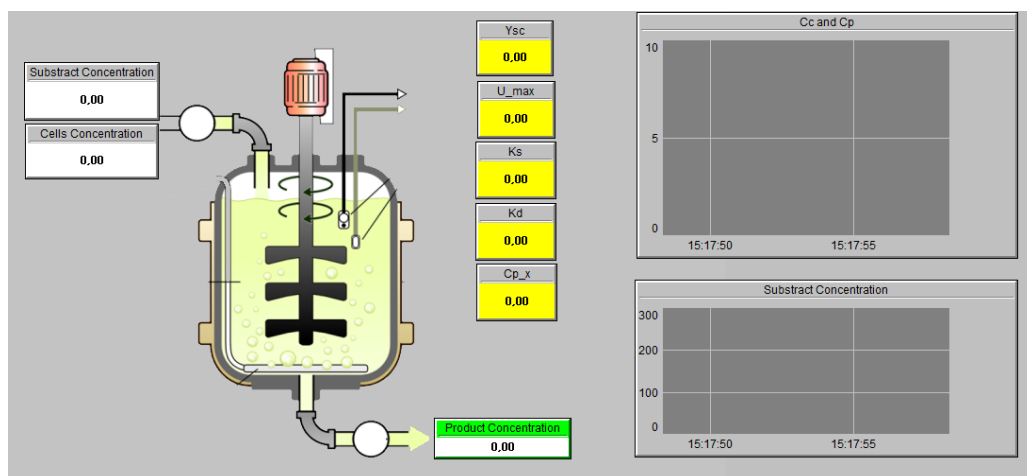
Figura 7 - Criação dos elementos gráficos para o acompanhamento do comportamento do processo analisado.



Fonte: construída pela autora.

Para tornar a tela de supervisão mais didática, foi acrescentada uma ilustração de um biorreator para representar o equipamento no qual o processo de fermentação analisado seria conduzido. Na Figura 8 pode ser observada a tela de supervisão construída com a finalidade de monitoramento e controle das variáveis e parâmetros do processo.

Figura 8 - Tela de supervisão criada para o processo analisado.



Fonte: Construída pela autora.

Uma vez iniciada a simulação do processo nos softwares utilizados, os valores de C_c , C_s e C_p são calculados pela resolução das equações diferenciais que descrevem os balanços de massa e são atualizados em tempo real na tela de supervisão esquematizada na Figura 17. Simultaneamente, pode-se acompanhar o comportamento dessas variáveis nos gráficos implementados. Numa situação real, ao ser percebido alguma alteração no comportamento das variáveis, seria possível intervir de modo imediato através de comandos na tela de supervisão no ajuste real de seus valores, através da automação existente no processo industrial.

6 CONCLUSÃO

O processo fermentativo conduzido em um reator batelada de forma descontínua, ocorrendo a transformação da glicose a etanol, mostrou-se concordante com o apresentado na literatura. Nesse sentido, o processo foi modelado, simulado em um programa computacional e visualizado em telas de supervisão, com o intuito de se analisar o comportamento de todas as variáveis dentro do sistema, o domínio do processo fermentativo, além da possibilidade monitoramento e controle do mesmo.

A metodologia empregada a partir da modelagem matemática e aplicada aos *softwares* computacionais referente ao processo reacional em estudo permitiu analisar a influência e o comportamento de cada variável dentro do sistema. A utilização dos *softwares* em processos fermentativos possibilita que o setor operacional responsável pelo monitoramento e controle dos processos consigam supervisionar o ambiente sem a necessidade de deslocamento ao ambiente real todas as vezes que acontecer algum problema nos processos, tornando possível economizar tempo e permitindo solucionar os problemas de maneira mais efetiva.

Embora os resultados obtidos tenham sido eficientes para atingir ao objetivo em estudo e estejam de acordo com a literatura, trata-se de um estudo inicial. Tornando-se necessária a incorporação de fatores, como um sistema de controle, à tela de supervisão para que o monitoramento, de fato, proporcione a reprodução mais próxima possível à realidade industrial.

REFERÊNCIAS

- ALVES, Fabiano. **Modelagem e simulação de biorreator operando com fungos *Trametes versicolor* para produção de enzima lacase**. 2010. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos)-Escola de Engenharia Mauá, São Caetano do Sul, São Paulo, 2010.
- BIROL, Gülnur; Doruker, Pemra; Kirdar, Betül; Önsan, Ilsen; Ülgen, Kutlu. Descrição matemática da fermentação do etanol por *Saccharomyces cerevisiae* imobilizada. **Bioquímica de processo**. 1998; 33(7):763–71.
- BOFF, Sacha Geyger; PAGANO, Daniel Juan; PLUCENIO, Agostinho; ALVES, Raul. Aplicação de um SCADA a uma unidade experimental de coluna de destilação. In: 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, 2005, Salvador, BA. **Anais Salvador**: Editora Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás – IBP, 2005.
- BONOMI, A.; SCHMIDELL, W. Modelagem matemática e simulação de processos fermentativos. **Biotecnologia industrial**, v. 2, p. 123-178, 2001.
- BORZANI, Walter; AQUARONE, Eugênio; LIMA, Urgel de Almeida. SCHIMIDELL, Willibaldo; *Biotecnologia Industrial*; Volume 2; **Editora Edgard Blucher LTDA**, 2001; 522p.
- BUENO, Tarcila. **Modelagem, Simulação de Bioprocessos uma Abordagem introdutória**. Curitiba, 2006.
- CARLINI, M., CASTELLUCCI, S., MONETI, M. Produção de biogás a partir de estrume de aves de capoeira e de soro de leite de queijo em condições mesófilas em reatores contínuo. 70th Conference of the ATI Engineering Association. **Published by Elsevier Ltd**, 2015.
- CORAZZA, Marcos L.; RODRIGUES, Dina G.; NOZAKI, Jorge. Preparação e caracterização do vinho de laranja. **Química nova**, v. 24, n. 4, p. 449-452, 2001.
- DA SILVA, Caroline Leite *et al.* Modelagem e estimação de parâmetros do processo de produção de etanol em reator batelada por *Saccharomyces cerevisiae*. **Scientia Plena**, v. 12, n. 5, 2016.

DODIĆ Jelena M.; VUČUROVIĆ Damjan G.; DODIĆ SINISA N.; GRAHOVAC Jovana A.; POPOV Stevan D.; NEDELJ ković Natasa M. Modelagem cinética da produção de etanol por lotes a partir de suco bruto de beterraba sacarina. **Appl Energy**. 2012; 99:192–7.

EVANS, L. **Modelagem de processos: o que está por vir**. Progresso da Engenharia Química. Oct. 1990.

FANTOZZI, F.; PISTOLESI, V.; MASSOLI, A.; PUGLIESE, A.; BIDINI, G. 69th Conference of the Italian Thermal Machines Engineering Association. Digestão anaeróbia de leite estragado em reatores descontínuos: viabilidade técnica e econômica. 2015, Published by **Elsevier Ltd**. 2015.

FERREIRA, Erica. Contribuição para o estudo da otimização da fermentação alcoólica operando em batelada-alimentada. 2005.

FOGLER, H. Scott. **Elementos de engenharia das reações químicas: Comsol Multiphysics**. 4ª edição, LTC, 2009.

FOGLER, H. Scott. Cálculo de reatores: o essencial da engenharia das reações químicas. 1 ed. Rio de Janeiro, **LTC**. 2014.

FONSECA, Marcos de Oliveira. Comunicação OPC—Uma abordagem prática. **VI Seminário de Automação de Processos, Associação brasileira de metalurgia e materiais**. Vitória, 2002.

FRANCO, Ivan Carlos; SCHMITZ, Jones Erni; FILETI, Ana Maria Frattini; SILVA, Flávio Vasconcelos. Utilização do protocolo de comunicação OLE for ProcessControl em processos industriais. **Exacta**, v. 8, n. 3, p. 319-329, 2010.

GUIDINI, Carla Zanella. Fermentação alcoólica em batelada alimentada empregando *Saccharomyces cerevisiae* de características floculantes. 2013.

JÚNIOR, Adalício Uzêda Antunes. Aplicação de ferramenta computacional para monitoramento do comportamento de um processo químico. **Revista Química: ciência, tecnologia e sociedade**, v. 4, n. 1, 2015.

LEANDRO, Gean C. **Desenvolvimento de Software acadêmico para Engenharia Química, utilizando linguagem Fortran e Python - Cálculo de Reatores**. 2018. Tese de

Bacharel em Engenharia Química. Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR. 2018.

LOZANO, J. E., ELUSTONDO, M. P. e ROMAGNOLI, J. A. Estudos Contrai em um evaporador industrial de suco de maçã, **Journalof food science**, Vol.49, p.1422 a 1427, 1984.

MACIEL, P. H. S. Configuração de OPC clientno elipse E3, 2003.

MENDESA, Álvaro José Boareto; VALDMANA, Belkis; DE SOUZA JÚNIOR, Maurício Bezerra. Uma revisão de modelagem matemática em bioprocessos. Parte I: Fundamentos básicos e classificação. **Ciência e Tecnologia**, p. 40. 2011.

NASCIMENTO, Amanda Isabelly Leite Figueiredo; JÚNIOR, Antonio Martins Oliveira; ABUD, Ana Karla Souza. Avaliação do Modelo de Monod para fermentação em caldo residual da casca de jaboticaba. **Scientia Plena**, v. 14, n. 6, 2018.

Nilsen, Jens; Villadsen, John; Lidén, Gunnar;Princípios de engenharia de bioreação.2003. 2ª ed, Kluwer **Academic / Plenum Publishers**: New York, 2003.

OLIVEIRA, S. C.; ZYMBERKNOPF, L.; STREMEL, D. P. Estratégias de redução de modelos matemáticos aplicadas ao processo de produção de etanol em biorreator tubular de leito fixo com separadores externos gás-líquido. **Blucher Chemical Engineering Proceedings**, v. 1, n. 2, p. 11502-11509, 2015.

PACHECO, Thalyta. F. **Fermentação alcoólica com leveduras de características floculantes em reator tipo torre com escoamento ascendente**. 94 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química - UFU, Uberlândia, 2010.

PORTO, Lia M. **Modelagem de processo industrial de fermentação alcoólica contínua com reatores de mistura ligados em série**. Tese de mestrado. Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

QAZIZADA, Mohammad Emal. Projeto de um fermentadoragitado por batelada para produção de etanol. **Published by Elsevier Ltd**. International Conference on Manufacturing Engineering and Materials, ICMEM 2016, 6-10 June 2016, Nový Smokovec, Slovakia.

ROSÁRIO, João Mauricio. **Automação Industrial**. São Paulo: Baraúna, 2009. (p. 15, p. 7879, p. 201-202).

SANTOS, Hugo Gaspar. Desenvolvimento de um supervisor modular para uma célula flexível de manufatura. 2007.

SAWAKI, R. V.; PARENTE, J. E. C.; ALEXANDRE, A. C.; RIBEIRO, E. F.; NASCIMENTO, R. F. Modelagem e simulação do desempenho de reatores de fluxo contínuo e em batelada no tratamento de efluente têxtil utilizando o software livre python. **Blucher Chemical Engineering Proceedings**, v. 1, n. 3, p. 2648-2654, 2015.

SILVA, J. L. **Modelagem e simulação de reatores autoclave para produção de PEBD**. 2012. Dissertação (Mestrado em Engenharia, Programa De Pós-Graduação Em Engenharia Química) (Área de Concentração: Modelagem e Simulação de Processos) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

SILVA, Juciane de Souza. **Processo fermentativo para produção de etanol utilizando glicerol bruto como substrato**. 2010. Dissertação (Mestrado em Engenharia, Programa De Pós-Graduação Em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2010.

SILVA, Maxwell Gomes da. **Modelagem e simulação de uma coluna de destilação para separação dos componentes reacionais do biodiesel em MATLAB**. 2007. Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade Federal do Rio Grande do Norte.

SILVA, Michel Brasil; DE OLIVEIRA, Danielle Spohr. Modelagem e simulação da produção de etanol via fermentação alcoólica da glicose. **Unoesc & Ciência-ACET**, v. 8, n. 2, p. 119-128, 2017.

SINCLAIR, Charles Gordon et al. **Cinética de fermentação e modelação**. Open University Press, 1987.

SINGH, Van P. Modelação e Simulação de Sistemas. 260 p. 1ª Ed. **New Age International Publishers**. Índia, 2009.

SOUZA, Leiliane do Socorro Sodré de et al. **Avaliação do processo de produção de etanol pela fermentação do caldo de mandiocaba (ManihotesculentaCrantz)**. (Dissertação de mestrado). Universidade Federal do Pará, Belém. 2013.

SCHULTZ, Guilhermina; LAUER, Joice; LOPES, Junara M.; RANGEL, Rainer S.; SIMONELLI, George. Modelagem e Simulação dos Reatores Químicos BR e PFR no EMSO. **Enciclopédia Biosfera**, Centro Científico Conhecer - Goiânia, v.10, n.18; p. 3756. 2014.

SCHWAAB, Marcio; Pinto, José Carlos; *Análise de Dados Experimentais I: Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros*, **E-papers Serviços Editoriais**: Rio de Janeiro, Brasil, 2007.

VALDMAN, Belkis; Folly, Rossana; Salgado, Andréa; *Dinâmica, controle e instrumentação de processos*, **Editora UFRJ**: Rio de Janeiro, Brasil, 2008.

VIEGAS, Marcelo Caldeira. *Otimização de sistema de fermentação alcoólica contínua utilizando reatores tipo torre e leveduras com características floculantes*. 2003.

VOLESKY, Bohumil; VOTRUBA, Jaroslav. *Modelação e otimização de processos fermentativos*. **Elsevier**, 1992.

WESTPHALEN, DenisLibert. **Modelagem, simulação e otimização de sistemas de evaporação**. 1999. Tese (Doutorado em Engenharia Química) (Área de Concentração: Desenvolvimento de processos químicos) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1999.