



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA – UFPB

CENTRO DE TECNOLOGIA – CT

CURSO DE GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA QUÍMICA

MARCELO CAMILO GOMES

**DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE DE SIMULAÇÃO EM LINGUAGEM  
EXCEL/VBA: PROCESSO DE PRODUÇÃO BIOTECNOLÓGICA DE ETANOL**

João Pessoa, PB

2020

MARCELO CAMILO GOMES

**DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE DE SIMULAÇÃO EM LINGUAGEM  
EXCEL/VBA: PROCESSO DE PRODUÇÃO BIOTECNOLÓGICA DE ETANOL**

Trabalho Final de Curso apresentado ao Centro de Tecnologia, da Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Flávio Luiz Honorato da Silva

João Pessoa, PB

2020

### **Catálogo na publicação**

#### **Seção de Catalogação e Classificação**

G633d Gomes, Marcelo Camilo.

Desenvolvimento de software de simulação em linguagem excel/vba: processo de produção biotecnológica de etanol / Marcelo Camilo Gomes. - João Pessoa, 2020.  
56 f. : il.

Orientação: Flávio Luiz Honorato da Silva.  
TCC (Especialização) - UFPB/CT.

1. Biorreator. 2. Fermentação. 3. Janela. 4. Modelo. 5. Programa. I. Silva, Flávio Luiz Honorato da. II. Título.

UFPB/BC

## ATA DE DEFESA PÚBLICA DE TRABALHO FINAL DE CURSO

Aos 27 dias do mês de março de 2020, no horário de 14h00 às 16h00 horas, foi realizada, em meio virtual, a defesa pública do *Trabalho Final de Curso* do curso de Engenharia Química/UFPB do discente **Marcelo Camilo Gomes**, cujo projeto de pesquisa intitula-se: **Desenvolvimento de Software de Simulação em Linguagem Excel/VBA: Processo de Produção Biotecnológica de Etanol**.

A Banca Examinadora, constituída pelo orientador Prof. Dr. Flávio Luiz Honorato da Silva, pela Profa. Dra. Vivian Stumpf Madeira e Profa. Dra. Julice Dutra Lopes emitiu o seguinte parecer:

Nota do Orientador(a): 10,0

Nota do 1º Avaliador(a): 9,0

Nota do 2º Avaliador(a): 9,5

Foi aprovado(a) com média GERAL: 9,5

Eu, Prof. Dr. Flávio Luiz Honorato da Silva, orientador e presidente da banca de defesa de TRABALHO FINAL DE CURSO, lavrei a presente ata que segue por mim assinada e pelos demais membros da banca examinadora.

---

Prof. Dr. Flávio Luiz Honorato da Silva

---

Profa. Dra. Vivian Stumpf Madeira

---

Profa. Dra. Julice Dutra Lopes

## AGRADECIMENTOS

No final dessa jornada, é belo poder perceber o tamanho que foi a minha evolução durante a graduação, todas os desafios que tive que enfrentar e que me fizeram entender melhor quem eu sou, pois não cruzei essa jornada sozinho, e à muitas pessoas demonstro gratidão.

À minha família, que sempre se mostrou interessada mesmo o curso sendo muito distante de suas áreas, sempre torceram para o meu sucesso e apoiaram minhas decisões sem questionar os motivos, com certeza deixaram o caminho menos tortuoso para que eu pudesse atravessá-lo.

A meus amigos, que apenas suas presenças me davam forças para não desanimar nas decaídas, eles que passavam por situações semelhantes, mas todos ignoravam as coisas ruins passávamos para apoiar uns aos outros, espero que eu também tenha sido um bom amigo e tenha retribuído o presente que me deram.

À Bruna Karoline, que sempre respeitou meu tempo e me apoiava, consolava nos tempos ruins e parabenizava nos bons, foi o principal suporte que tive nos momentos mais difíceis, serei eternamente grato pelo amor que me foi dado por você.

A meus colegas, poucos, mas de qualidade, nosso pequeno grupo é maior do que muitas coisas desse mundo, e só nós entendemos pelo o que estávamos passando, compartilhar esses momentos com vocês foi um prazer enorme.

Um obrigado especial à Rodrigo Rafael, que me recebeu para fazer esse trabalho na iniciação científica e juntos construímos um programa o qual estamos imensamente orgulhosos, sem nosso trabalho complementar, nada disso seria possível.

Aos professores, por exercerem a mais nobre profissão.

Ao curso de engenharia química, que não só me formou como profissional, mas também como ser humano.

Sou grato a todos vocês.

“Knowledge without learning is equivalent to fixed stars without planets. Their lights will only illuminate the darkness without any effect.”

–Daehlich Sauken

## **RESUMO**

Os avanços das capacidades computacionais possibilitaram o acesso à grandes feitos tecnológicos no mundo produtivo, a modelagem e simulação de processos é um exemplo disso, por serem eficientes e de baixo custo, servem como importante ferramenta no planejamento até a execução de diversos processos, como também como ferramenta de ensino. Este trabalho teve como objetivo fornecer um programa capaz de simular o bioprocessos de fermentação alcoólica em linguagem *Visual Basic for Application* (VBA) em *Microsoft Excel*, a partir de uma modelagem semiempírica, de interface simples e acessível. O programa simula o processo de fermentação alcoólica em um reator CSTR sem reciclo de células e apresenta cálculos de balanço de massa e de energia.

**Palavras-chave:** Biorreator. Fermentação. Janela. Modelo. Programa.

## **ABSTRACT**

Advances in computational power have achieved great technological feats in the productive world, modeling and simulation of processes is an example of this, as they are efficient and low cost, they serve as an important tool in planning and execution of several processes, as well as a teaching tool. This work aims to provide a program capable of simulating the alcoholic fermentation phenomenon in Visual Basic for Application (VBA) language in Microsoft Excel from a semi-empirical modeling with a simple and accessible interface. The program simulates the alcoholic fermentation process on a CSTR reactor without cell recycling and shows calculations such as mass and energy balance.

**Key-words:** Bioreactor. Fermentation. Window. Model. Program.

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	<b>13</b>
<b>2. OBJETIVOS</b> .....	<b>15</b>
<b>2.1. Objetivo Geral</b> .....	<b>15</b>
<b>2.2. Objetivos Específicos</b> .....	<b>15</b>
<b>3. REVISÃO TEÓRICA</b> .....	<b>16</b>
<b>3.1. Biorreatores e bioprocessos</b> .....	<b>16</b>
3.1.1. Processos descontínuos .....	17
3.1.2. Processos contínuos.....	17
<b>3.2. Fermentação alcoólica</b> .....	<b>18</b>
3.2.1. Influência da temperatura na fermentação alcoólica .....	19
<b>3.3. Modelos Cinéticos</b> .....	<b>20</b>
3.3.1. Tipos de inibição .....	21
3.3.1.1. Substrato limitante.....	23
3.3.1.2. Inibição pelo substrato.....	23
3.3.1.3. Inibição pelo produto.....	24
3.3.1.3.1. Inibição linear pelo produto.....	25
3.3.1.3.2. Inibição exponencial pelo produto .....	25
3.3.1.3.3. Inibição pelo produto não-linear generalizada (parabólica e de potência).....	25
3.3.1.4. Inibição por altas concentrações de biomassa .....	26
<b>3.4. Modelagem e simulação</b> .....	<b>27</b>
<b>4. METODOLOGIA</b> .....	<b>28</b>
<b>4.1. Modelos utilizados</b> .....	<b>28</b>
<b>4.2. Balanço de Massa</b> .....	<b>30</b>
<b>4.3. Balanço de energia</b> .....	<b>31</b>
<b>4.4. Critérios de parada</b> .....	<b>35</b>
<b>4.5. Rendimento (<math>\eta</math>)</b> .....	<b>36</b>

<b>4.6. Produtividade.....</b>	<b>36</b>
<b>4.7. Dimensionamento das placas e efetividade do trocador de calor.....</b>	<b>36</b>
<b>5. RESULTADOS .....</b>	<b>37</b>
<b>5.1. Apresentação e escolha de modelos.....</b>	<b>38</b>
5.1.1. Janelas dos modelos cinéticos .....	39
<b>5.2. Janela da entrada de dados e balanço de massa .....</b>	<b>43</b>
<b>5.3. Janela para o balanço de energia .....</b>	<b>46</b>
5.3.1. Cálculo da área de troca térmica.....	47
<b>5.4. Janela de resultados .....</b>	<b>48</b>
5.4.1. Dimensionador do trocador de calor .....	52
<b>5.5. Dados da planilha Excel.....</b>	<b>53</b>
<b>6. CONCLUSÃO.....</b>	<b>54</b>
<b>7. PERSPECTIVAS PARA TRABALHOS FUTUROS .....</b>	<b>54</b>
<b>8. REFERÊNCIAS .....</b>	<b>55</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Tabela de consulta inserida no programa com os sete modelos cinéticos e seus respectivos inibidores considerados. ....	21
Figura 2 - Gráficos de Lineweaver-Burk para três tipos de inibição enzimática. ....	22
Figura 3 - Velocidade de reação do substrato em função de sua concentração, com inibição pelo substrato. ....	24
Figura 4 - Esquema da configuração do trocador de calor .....	32
Figura 5 - Rotina de cálculo para encontra valor de Área Total de Troca Térmica (A) para uma Temperatura Limite determinada .....	34
Figura 6 - Fluxograma geral do programa.....	37
Figura 7 - Janela "Apresentação" .....	38
Figura 8 - Janela para escolha entre os modelos cinéticos .....	39
Figura 9 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Monod .....	40
Figura 10 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Ghose e Tyagi ..	40
Figura 11 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Levenspiel .....	41
Figura 12 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Sevely et al. ....	41
Figura 13 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Jin et al. ....	42
Figura 14 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Lee; Pagan; Rogers .....	42
Figura 15 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Tosetto.....	43
Figura 16 - Janela de entrada de dados: (a) sem cálculo de trocador de calor e (b) com cálculo de trocador de calor e temperatura .....	44
Figura 17 - Mensagem de erro quando o botão "Calcular" é apertado sem todas as caixas de texto terem valores válidos, no exemplo, várias caixas estão vazias.....	45
Figura 18 - Janela de entrada de dados para o balanço de energia.....	46
Figura 19 - Caixas de texto inativadas de acordo com a opção selecionada. ....	47
Figura 20 - Janela para inserção de critérios para cálculo da área de troca térmica.....	48
Figura 21 - Terceira página da janela de resultados intitulada "Sobre" .....	49
Figura 22 - Primeira página da janela de resultados intitulada "Balanço de massa".....	50
Figura 23 - Segunda página da janela de resultados intitulada "Balanço de energia"....	51
Figura 24 - Janela para cálculo de dimensionamento das placas do trocador de calor ..	52
Figura 25 - Planilha Excel ao apertar o botão "Mostrar Planilha" .....	53

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Dimensão de biorreatores para alguns processos fermentativos .....	17
Tabela 2 – Condições de inibições consideradas (marcadas com “X”) para cada modelo cinético presente no software de simulação. ....	29
Tabela 3 - Valores de constantes cinéticas para os modelos cinéticos inseridos .....	30
Tabela 4 - Equações de balanço de massa utilizadas no programa. ....	31
Tabela 5 - Propriedades Físico-químicas e suas respectivas sugestões de valores pelo programa.....	35
Tabela 6 - Entrada de dados utilizada como exemplo para exibição de resultados.....	49

## 1. INTRODUÇÃO

Com o desenvolvimento crescente das capacidades computacionais, gradativamente as máquinas passaram a executar mais tarefas trabalhosas de natureza matemática, que seriam inviáveis de serem elaboradas por mãos humanas ao mesmo passo. Esse caminho que a tecnologia atual se encontra deu origem à uma linha de pesquisa bastante prática que ainda se encontra em aperfeiçoamento, a modelagem e a simulação. Com essa ferramenta, o pesquisador é capaz de, através de um modelo matemático, simular alguma característica ou fenômeno da realidade com a ajuda de *softwares*, e assim, analisando os resultados desta simulação, ele é capaz de fazer alterações em parâmetros para prever e estudar o comportamento deste fenômeno em questão, sem precisar da execução material, muitas vezes custosa em tempo e dinheiro.

Outro tema muito recorrente na atualidade é sobre o uso de combustíveis obtidos através da biomassa vegetal, a qual é constituída de uma potencial fonte de carbono e energia, podendo ser empregada em vários bioprocessos na obtenção de produtos com alto valor agregado (SOUZA JÚNIOR, 2017), objeto de estudo no setor de combustíveis como fonte alternativa. O etanol, por exemplo, possui um complexo processo amplamente estudado em países como o Brasil, onde sua produção e exportação estão entre as maiores do mundo desde 1970 (CASTRO et al., 2015). Seu principal método de obtenção é a fermentação alcoólica, representando 95% em comparação ao álcool sintético (BERG; LICHT, 2008). Por estes motivos, a fermentação alcoólica é um ótimo objeto de pesquisa para a implementação da modelagem e simulação, visto que há uma infinidade de parâmetros experimentais disponíveis, além de potencialmente beneficiar o grande mercado de etanol do País.

Para se obter uma boa modelagem e simulação, deve-se escolher sabiamente as ferramentas a serem utilizadas de forma a obter um resultado satisfatório. Neste trabalho foram utilizados balanços de massa para cada um dos parâmetros de saída (concentração de células, de substrato e de produto) e temperatura. Estes balanços de massa variam com o tempo obedecendo a um modelo cinético que descreve o comportamento da fermentação alcoólica levando em consideração possíveis inibidores, onde foram apresentados variados modelos cinéticos diferentes com a finalidade de abrir as possibilidades para um usuário do software (programa computacional amigável). A variação temporal foi feita através do método de *Runge-Kutta* de quarta ordem, ou RK4,

método interativo para resolução numérica em soluções de equações diferenciais ordinárias. Este método já se provou ser robusto na resolução de equações desta natureza em várias linguagens consistentemente, além disso, é um dos métodos mais utilizados durante a graduação em Engenharia Química, este fator é de suma importância visto que um dos alvos deste programa são os alunos graduandos do curso. A ferramenta para a simulação será o *Microsoft Excel Visual Basic for Application* por motivos de acessibilidade, quase toda linguagem é capaz de mostrar resultados em RK4, além do fato que o *Microsoft Excel* faz parte do pacote *Office*, o mais popular pacote nos computadores no Brasil, e o *Visual Basic for Application (VBA)* pela capacidade da criação de janelas facilitadoras de uso do programa.

## **2. OBJETIVOS**

### **2.1. Objetivo geral**

Desenvolver um programa que seja capaz de simular o processo da fermentação alcoólica para todos os parâmetros e modelos cinéticos e todas as variáveis de entrada inseríveis, com o uso de janelas no VBA para um fácil manuseio do usuário e de resultados visuais de forma a parecer um programa executável.

### **2.2. Objetivos específicos**

- Prover resultados para todos os modelos cinéticos disponibilizados para escolha do usuário: Monod, Ghose e Tyagi, Levenspiel, Sevenly Et Al., Jin Et Al., Lee; Pagan; Rogers, e Tosetto.
- Possuir um robusto modelo matemático capaz de representar fenômenos reais de forma consistente.
- Fornecer boas estimativas de parâmetros para cada modelo e ser capaz de utilizar de parâmetros fornecidos pelo próprio usuário do programa.
- Executar todo o programa de forma leve e rápida com os resultados visuais de fácil entendimento para o usuário.
- Fornecer uma interface de fácil utilização de forma a atender qualquer necessidade que possa surgir durante o uso.

### **3. REVISÃO TEÓRICA**

#### **3.1. Biorreatores e bioprocessos**

O crescimento da biotecnologia é notório nas últimas décadas, de acordo com a C & E News (FOGLER, 2014), o número de produtos químicos, produtos para agricultura e produtos alimentícios produzidos através da biossíntese aumentou consideravelmente, em 2007, companhias adquiriram mais de \$24 bilhões de dólares em novos financiamentos no setor. O uso de microrganismos em processos diversos é uma área de pesquisa em ascensão e abrange cada vez mais novas áreas como no setor de geração de energia a partir da fonte solar, como aperfeiçoamento e inovação em processos já bem estruturados como diversos conhecidos na indústria química. Entre estes processos metabólicos, há o caso da fermentação alcoólica, que apesar de apenas serem processados industrialmente por volta do século XIX com a criação do método Melle-Boinot, que se trata de um processo em batelada com reciclo de células (ANDRIETTA, 1994). O processo já era utilizado pela humanidade desde o período pré-cristão, principalmente na elaboração de bebidas alcoólicas.

Por definição, biorreatores correspondem a um volume onde ocorrem reações bioquímicas com a ação de biocatalisadores, podendo ser enzimas ou células vivas (SCHMIDELL et al., 2001), essas reações bioquímicas variam representam vários aspectos do metabolismo das células, como a transformação de energia química e a construção, decomposição e digestão de componentes celulares (FOGLER, 2014). Os volumes dos biorreatores também variam bastante de acordo com o processo, podendo ter dezenas de litros até centenas de metros cúbicos. A Tabela 1 exemplifica algumas relações entre volumes de fermentadores e seus respectivos produtos.

Tabela 1 - Dimensão de biorreatores para alguns processos fermentativos

<b>Volume do Biorreator (m<sup>3</sup>)</b>	<b>Produto</b>
<b>1 a 20</b>	Enzimas de diagnóstico, substâncias para biologia molecular
<b>40 a 80</b>	Algumas enzimas e antibióticos
<b>100 a 150</b>	Penicilina, antibióticos aminoglicosídicos, proteases, amilases, transformação de esteroides, aminoácidos.
<b>450</b>	Aminoácidos (ácido glutâmico)

Fonte: CRUZ [201-]

### 3.1.1. Processos descontínuos

Também conhecido como processos em batelada, acontecem em etapas, com enchimento do reator, reação e esvaziamento, é um método muito utilizado para processos de menor escala, testes de novos produtos ou reações, produção de produtos finos, e processos difíceis de serem realizados em regime contínuo, por sua conformação, é possível atingir altas conversões ou produtos mais puros devido à possibilidade de estender o tempo de reação por longos períodos, porém, isso também reflete em um alto custo de mão de obra para cada batelada, além de outras desvantagens como variabilidade de produtos entre bateladas, dificuldade de produção em larga escala e perda de produtividade por tempo ocioso (FOGLER, 2014).

A etapa inicial é o enchimento do tanque, geralmente pela sua parte superior, podendo ser categorizada em simples ou alimentados, na batelada simples, a fermentação só tem início após total preenchimento do tanque, após isso, ocorre a mistura do fermento ao mosto, este método é mais utilizado em fermentações laboratoriais e farmacêuticas, pois se mostra inviável em processos industriais. A batelada alimentada, o mosto e o fermento misturam-se junto ao enchimento do reator, otimizando assim a produção (CRUZ, 201-).

### 3.1.2. Processos contínuos

Segundo Andrietta (1994), a utilização do processamento contínuo da fermentação no Brasil aumentará por razão dos processos mais recentes serem mais confiáveis e requerem um menor custo de produção, porém não foi apenas a complexidade do processo contínuo que causou a relativa demora da implantação generalizada no país, pois o processo Melle-Boinot ainda trazia resultados satisfatórios e suficientes, como também as primeiras plantas contínuas que surgiram no Brasil apresentaram problemas gerais, este não relacionado com o processo em si, pois em outros países na mesma época já utilizavam do processamento contínuo na produção de etanol (ANDRIETTA, 1994). Sendo esta afirmação realizada em 1994, pode-se observar que atualmente há um grande aumento dos processos contínuos em destilarias de etanol no Brasil.

Segundo Borzani (ANDRIETTA, 1994) ressalta as vantagens dos processos fermentativos contínuos como maior produtividade, pois o tempo é melhor aproveitado para produção já que não há limpeza de tanques tão frequentes como processos de batelada e semi-batelada, maior uniformidade do produto, pois com o alcance do estado estacionário no processo contínuo, o produto formado será uniforme, e maior adaptabilidade ao controle automático.

### **3.2. Fermentação alcoólica**

De forma simplificada, a fermentação alcoólica se trata de um processo biológico onde acontece a conversão de açúcares fermentescíveis em etanol e dióxido de carbono como produtos, pela ação de bactérias ou leveduras. Este processo é anaeróbico, ou seja, não necessita da presença de oxigênio. A fonte de açúcar muitas vezes define o produto final comercializado, ao longo da história, as próprias bebidas produzidas representaram fatores marcantes da cultura local devido à matéria-prima correspondente à região e a bebida alcoólica da mesma, por exemplo, o arroz no Japão, matéria-prima do saquê, ou a cana-de-açúcar no Brasil, da cachaça.

O processo da fermentação alcoólica foi manipulado pelo ser humano bem antes do entendimento detalhado de seu mecanismo, porém, apenas em 1857 que o fenômeno foi aceito pela comunidade científica como metabolismo de leveduras graças aos trabalhos de Pasteur (ANDRIETTA, 1994), desde então, várias pesquisas foram desenvolvidas nessa área para complementar os entendimentos sobre o processo a fim de aperfeiçoar a produção do álcool etílico, produto muito presente no mercado mundial.

A protagonista deste processo é a levedura *Saccharomyces cerevisiae*, fungo mais utilizado nos processos de produção de etanol mundialmente, esta espécie está associada à produção de vinho desde 3150 A.C. e evidências em alguns tanques indicam possibilidade da sua existência na produção em até 7000 a.C. Essa relação sugere que a levedura evoluiu como uma espécie domesticada apenas para produção de etanol, derivada da espécie *Saccharomyces paradoxus*, parente mais próximo encontrado na natureza em cascas de árvores mortas e solos associados. Vale salientar que atualmente existem muitas espécies derivadas da *Saccharomyces cerevisiae*, resultado de cruzamentos com outras espécies com o objetivo de dar valor ou características únicas para um produto específico (FAY; BENAVIDES, 2005).

Este trabalho foi baseado em um processo de fermentação alcoólica utilizando a levedura *Saccharomyces cerevisiae* como biomassa atuante, devido à vasta literatura disponível quanto à sua utilização, e ao espaço que o fungo possui no setor sucroalcooleiro mundial.

### 3.2.1. Influência da temperatura na fermentação alcoólica

A temperatura é uma propriedade de essencial conhecimento na maioria das reações químicas, sua influência nas cinéticas variam para cada processo, mas é fato que a tecnologia aplicada à produção industrial tem a temperatura como uma das principais propriedades a serem controladas, inúmeros são os processos que dependem desta variável bem definida por questões de produtividade e segurança.

O mesmo é válido para a fermentação alcoólica, muitas células usadas em bioprocessos são microrganismos termolábeis, ou seja, sensíveis a temperatura ao ponto de que a solução preferencialmente deve estar na faixa de temperatura viável para o microrganismo respectivo, para a *Saccharomyces cerevisiae*, considerada resistente à altas temperaturas, a faixa ótima de temperatura está entre 26 °C e 35 °C (FERRARI, 2003).

Um dos obstáculos referentes ao processo da fermentação alcoólica é aumento da temperatura gradual de acordo com a conversão do substrato, a levedura, ao consumir o açúcar produzindo etanol, também libera energia em forma de calor, aumentando a temperatura do sistema, podendo assim comprometer a cinética de reação, em outras palavras, a reação em questão trata-se de uma reação exotérmica, por esse motivo, a partir

de determinadas escalas de produção, a necessidade de um trocador de calor para resfriar o sistema se torna crucial para viabilidade produtiva, já que o aumento da temperatura causado pela reação é diretamente proporcional à quantidade de açúcar consumido.

### 3.3. Modelos Cinéticos

Conforme Schmidell et al. (2001), o estudo cinético de um processo fermentativo consiste na análise da evolução dos valores de concentração de um ou mais componentes do sistema de cultivo, em função do tempo de fermentação, neste caso, esses componentes são as leveduras ou número de microrganismos, representado por  $X(t)$ , produtos da fermentação ou concentração de etanol, representado por letra  $P(t)$ , e o próprio substrato representado pela letra  $S(t)$ , com a letra “t” referente à variação temporal do tempo de fermentação.

Cada um desses componentes apresentam um comportamento previsível até certo ponto, a concentração do substrato tende a cair pois é consumida para formar o produto, cuja concentração tende a aumentar já que está sendo produzido pelas células, e estas geralmente têm um leve acréscimo devido à sua reprodução. Tais comportamentos irão variar de acordo com as condições da operação, e uma característica diferente dessas demonstra inconsistência na modelagem ou nas condições escolhidas, por exemplo, se a quantidade de microrganismos decai muito, isso quer dizer que as leveduras estão morrendo, e conseqüentemente, o processo é indesejável, o mesmo pode ser dito se o substrato não estiver sendo consumido e o produto não estiver sendo gerado.

Todo o processo fermentativo tem como seu núcleo o metabolismo celular, pois é ele que irá ditar a variação destas três variáveis, para isso, as condições das leveduras devem ser atendidas ao mais próximo possível de um ponto perfeito de operação, vale salientar que tais condições são relativas, pois dependem do objetivo a ser alcançado com a fermentação em questão (SCHMIDELL et al., 2001), neste caso, o objetivo deste processo é a maior produtividade do etanol, ou seja, deseja-se o maior acréscimo da concentração do produto no menor intervalo de tempo possível.

O estudo cinético de um processo pode ser extremamente complexo, já que as condições de cultivo sofrem influência de variáveis como temperatura, pH, etc., e ainda assim podem ser sensíveis à inibidores que dificultam a metabolização do substrato em produto, que são comparados de acordo com o fator de conversão (SCHMIDELL et al.,

2001). Porém os estudos sobre os tipos de inibidores já são muito bem estruturados por vários autores que estudaram seus modelos a fundo, neste programa, foram introduzidos sete diferentes modelos cada um deles com o nome de seu(s) autor(es) com as descrições das condições que caracterizam os tipos de inibidores que atuam no modelo respectivo, os sete modelos são: Monod (1949), Ghose e Tyagi (1979), Levenspiel (1980), Sevelly et al. (1980), Jin et al. (1981), Lee; Pagan; Rogers (1983) e Tosetto (2002).

### 3.3.1. Tipos de inibição

Para cada modelo apresentado, tem-se as condições para uso de tal modelo, com seus tipos de inibidores que foram considerados nos estudos de cada um destes autores, a Figura 1 é uma imagem de uma tabela que foi inserida no programa para consulta pelo usuário, pois estas informações são importantes para total compreensão do procedimento, além de também possivelmente auxiliar o usuário na escolha de seu modelo para a posterior simulação.

Figura 1 - Tabela de consulta inserida no programa com os sete modelos cinéticos e seus respectivos inibidores considerados.

<i>Autores</i>	<i>Modelo</i>	<i>Condições</i>	
<i>Monod (1949)</i>	$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \cdot \frac{S_i}{K_S + S_i}$	✓ Substrato limitante	✓ Sem inibição pelo substrato
<i>Ghose e Tyagi (1979)</i>	$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \cdot \frac{S_i}{\left(S_i + K_S + \frac{S_i^2}{K_i}\right)} \cdot \left(1 - \frac{P_i}{P_{m\acute{a}x}}\right)$	✓ Substrato limitante ✓ Inibição pelo substrato	✓ Inibição linear pelo produto
<i>Levenspiel (1980)</i>	$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \cdot \left(1 - \frac{P_i}{P_{m\acute{a}x}}\right)^{Y_N} \cdot \left(\frac{S_i}{K_S + S_i}\right)$	✓ Substrato limitante ✓ Sem inibição pelo substrato	✓ Inibição de potência pelo produto
<i>Sevelly et al. (1980)</i>	$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \cdot \left(\frac{S_i}{K_S + S_i}\right) \cdot \left(\frac{K_P}{P_i + K_P}\right) \cdot \left(1 - \frac{P_i}{P_{m\acute{a}x}}\right)$	✓ Substrato limitante ✓ Sem inibição pelo substrato	✓ Inibição parabólica pelo produto
<i>Jin et al. (1981)</i>	$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \cdot e^{-K_1 P_i - K_2 S_i} \cdot \left(\frac{S_i}{K_S + S_i}\right)$	✓ Substrato limitante ✓ Inibição exponencial pelo substrato	✓ Inibição exponencial pelo produto
<i>Lee; Pagan; Rogers (1983)</i>	$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \cdot \left(\frac{S_i}{K_S + S_i}\right) \cdot \left(1 - \frac{P_i}{P_{m\acute{a}x}}\right)^{Y_N} \cdot \left(1 - \frac{X_i}{X_{m\acute{a}x}}\right)^{Y_M}$	✓ Substrato limitante ✓ Sem inibição pelo substrato	✓ Inibição de potência pelo produto ✓ Inibição por altas concentrações de biomassa
<i>Tosetto (2002)</i>	$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \cdot \frac{S_i}{\left(S_i + K_S + \frac{S_i^2}{K_i}\right)} \cdot \left(1 - \frac{P_i}{P_{m\acute{a}x}}\right)^{Y_N}$	✓ Substrato limitante ✓ Inibição pelo substrato	✓ Inibição de potência pelo produto

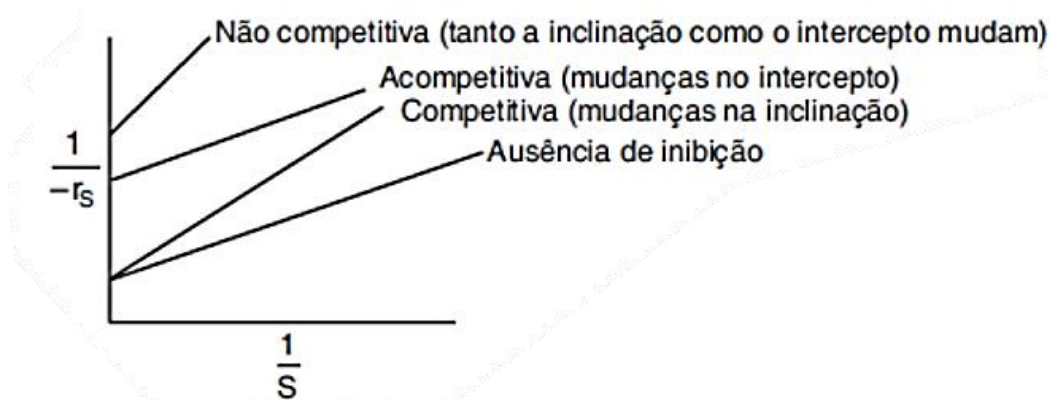
Fonte: Adaptado de Porto (2005)

Como se pode ser visto Figura 1, alguns modelos se mostram mais complexos que outros, aumentando o número de variáveis a serem inseridas, o programa fornece um valor médio para cada um destes parâmetros cinéticos, no caso de o usuário não possuir

tal informação, porém para melhores resultados os valores preferencialmente devem corresponder a exatamente o processo a ser simulado.

Os tipos inibições foram determinados pelo estudo cinético de Lineweaver-Burk, que a partir do inverso da equação de Monod (Equação 1), plotou seu conhecido gráfico com o inverso da taxa de crescimento no eixo das ordenadas e o inverso da concentração de substrato no eixo das abscissas e comparou com uma reação sem inibidores, analisando os comportamentos das semirretas ele pôde definir os tipos de inibições em três tendências, o gráfico citado deste estudo pode ser visualizado na Figura 2.

Figura 2 - Gráficos de Lineweaver-Burk para três tipos de inibição enzimática.



Fonte: Fogler (2014, p.303)

De forma resumida, a inibição competitiva ocorre quando um intermédio se une à enzima ou espécie ativa competitivamente com o substrato, tal interação reflete somente na alteração da inclinação da reta ausente de inibição, pois a competição aumenta a constante de Michaelis ( $K_s$ ) aparente, já que uma concentração de substrato maior é necessária para decompor o substrato (FOGLER, 2014).

A inibição incompetitiva ocorre quando o inibidor se liga ao complexo enzima-substrato, ou seja, o inibidor não compete com o substrato pela enzima em si, por esse motivo, a inclinação da reta não é alterada, e sim o local onde o intercepto acontece no eixo das ordenadas. Por fim, a inibição mista ou não competitiva ocorre quando o inibidor interage com diferentes tipos de sítios ativos do biocatalisador, fazendo com que ambas conformações possam ser alcançadas por diferentes caminhos (FOGLER, 2014), alterando assim, a reta tanto na inclinação, quanto na posição do intercepto.

As equações que serão descritas a seguir são referentes apenas ao seu tipo de inibição, e não representam o modelo cinético em sua totalidade, essa consideração será identificada pelo termo  $\mu^*$ .

#### 3.3.1.1. Substrato limitante

A fermentação alcoólica é limitada pelo substrato universalmente entre os modelos cinéticos, isso se deve ao fato de que a levedura só poderá produzir o etanol na presença de açúcar para metabolizá-lo, este comportamento entre velocidade de crescimento microbiano ( $\mu$ ) e concentração do substrato (S) foi primeiramente observado em 1949 por Monod, a equação que descreve isso é o próprio modelo de Monod (Equação 1), muitos outros modelos são derivados dessa equação inicial, a qual apenas adicionam fatores mais complexos em consideração às inibições.

$$\mu = \mu_{\text{máx}} \frac{S_i}{K_s + S_i} \quad (1)$$

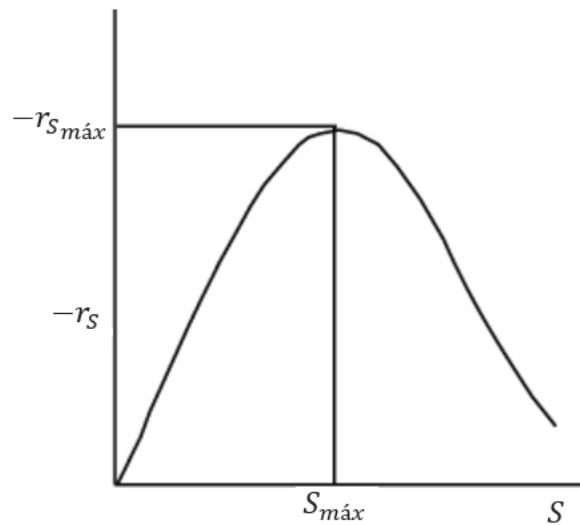
#### 3.3.1.2. Inibição pelo substrato

A inibição pelo substrato ocorre quando o próprio substrato interfere nos sítios ativos das enzimas ou células vivas, este termo presente em alguns modelos cinéticos possui a seguinte representação matemática vista na Equação 2, proposto por Ghose e Tyagi em 1979.

$$\mu^* = \frac{\mu_{\text{máx}} S_i}{\left( S_i + K_s + \frac{S_i^2}{K_i} \right)} \quad (2)$$

Em baixas concentrações do substrato, a velocidade de consumo do substrato cresce linearmente com o aumento de sua concentração, até certo ponto onde começa a decrescer e diminuir em altas concentrações, formando um perfil semelhante a uma parábola que apresenta ponto de velocidade máxima em um certo valor de concentração de substrato (FOGLER, 2014), tal comportamento está descrito resumidamente na Figura 3.

Figura 3 - Velocidade de reação do substrato em função de sua concentração, com inibição pelo substrato.



Fonte: Fogler, (2014, p.304)

H. Scott Fogler também afirma que em biorreatores de batelada alimentada e CSTRs frequentemente se opera com a concentração do substrato próximo ao valor de  $S_{máx}$  para maximizar a velocidade de reação e conversão do substrato.

### 3.3.1.3. Inibição pelo produto

Um estudo sobre a relação entre a concentração de etanol e à taxa de crescimento da *Saccharomyces cerevisiae* foi feito por Luong em 1985, onde o autor descreve os possíveis graus de inibição que o etanol pode afetar nas leveduras, comparando com estudos disponíveis na literatura da época. Ele afirma que a inibição ocorre quando o etanol se acumula no caldo fermentado de maneira a suprimir a atividade metabólica dos microrganismos.

Com dados experimentais, Luong afirmou que o aumento da concentração do etanol afetava apenas o termo referente à taxa de crescimento microbiano máxima ( $\mu_{máx}$ ), tratando assim de um mecanismo de inibição incompetitiva. Estudos mais recentes sugerem que a temperatura também interfere na maneira com que a *Saccharomyces cerevisiae* resiste ao etanol presente, Castro et al. (2015) concluíram que em temperaturas mais baixas, a levedura era capaz de produzir mais etanol total, porém necessitando de um maior tempo de fermentação para isso.

### 3.3.1.3.1. Inibição linear pelo produto

Luong (1985) descreveu quatro tipos de inibições pelo produto em seu trabalho, começando pela inibição linear, representada na Equação 3.

$$\mu^* = \mu_{\text{máx}} \left( 1 - \frac{P_i}{P_{\text{máx}}} \right) \quad (3)$$

Essa equação foi inicialmente derivada de experimentos de Hinshelwood et al. (1946) com a bactéria *lactis aerogenes*, posteriormente Holzberg et al. sugeriram que abaixo de um limite inferior de 26 g/L de etanol, a inibição pelo produto não ocorria e após este valor o comportamento se mostrava linear. Com Ghose e Tyagi (1979), um dos modelos inseridos no programa, o qual o estudo foi feito com a *Saccharomyces cerevisiae*, também foi observado esse comportamento linear, utilizando hidrolisado de celulose como substrato (LUONG, 1985).

### 3.3.1.3.2. Inibição exponencial pelo produto

Aiba et al. e Nagatami et al. (apud LUONG, 1985) propuseram o seguinte modelo exponencial (Equação 4) sobre a inibição pelo etanol.

$$\mu^* = \mu_{\text{máx}} e^{-K_1 P_i} \quad (4)$$

Onde a constante  $K_1$  varia com o método de cultura (batelada ou contínuo).

Analogamente, existe também a inibição exponencial pelo substrato, como foi proposto no modelo de Jin et al. (1981), onde ambas inibições exponenciais são consideradas.

### 3.3.1.3.3. Inibição pelo produto não-linear generalizada (parabólica e de potência)

Levenspiel propôs uma equação não linear generalizada (Equação 5) para a consideração do produto etanol como inibidor:

$$\mu^* = \mu_{\text{máx}} \left( 1 - \frac{P_i}{P_{\text{máx}}} \right)^n \quad (5)$$

O expoente “n” definirá o comportamento da inibição dependendo de seu valor, por exemplo, se  $n = 1$ , trata-se da inibição linear pelo produto (Equação 3), se  $n = 0,5$ , trata-

se da inibição parabólica, essa que foi sugerida por Bazua e Wilke (apud LUONG, 1985) para descrever a inibição do produto na *Saccharomyces cerevisiae*, porém, no mesmo estudo, essa equação não mostrou resultados satisfatórios em alcançar os dados experimentais, por esse motivo, a relação parabólica da inibição pelo etanol sofreu mudanças em sua equação com a adição de termos experimentais como pode ser visto na Figura 1, no modelo de Sevely et al (1980). A outra possibilidade para o valor de “n” é a inibição de potência pelo produto, onde o fator de potência “Yn” representa o expoente da equação em questão.

#### 3.3.1.4. Inibição por altas concentrações de biomassa

O estudo sobre a inibição causada pela elevada concentração celular teve caminho similar ao da inibição pelo produto e seu equacionamento toma forma semelhante (Equação 6):

$$\mu^* = \mu_{\text{máx}} \left(1 - \frac{X_i}{X_{\text{máx}}}\right)^{Y_m} \quad (6)$$

Os primeiros modelos para o processo de fermentação alcoólica desconsideravam a morte de células e perda de viabilidade com o tempo de fermentação, com o foco na análise dos perfis de concentração, diferentes autores identificavam uma quantidade considerável de células inativas quando em processos em alta concentração de biomassa, Lafforgue et al (apud JARZEBSKI; MALINOWSKI; GOMA, 1989) afirmaram em suas análises que até um quarto do total da biomassa de seu estudo era composto de células inativas ao final do processo, portanto essa perda não poderia ser negligenciada, os autores posteriormente, concluíram que a taxa de morte era diretamente ligada na concentração inicial de células e nas condições de viabilidade microbiana (JARZEBSKI; MALINOWSKI; GOMA, 1989). Com isso em mente, pesquisadores conseguiram descrever a influência da fase inativa de células composta na biomassa como inibição causada pela mesma, e a equação geral que descreve bem essa característica é a Equação 6, usada em diferentes trabalhos como por exemplo o de Lee e seus colegas, modelo o qual está inserido no programa.

### 3.4. Modelagem e simulação

Um modelo matemático consiste em um conjunto de equações capazes de representar um comportamento real, um bom modelo consegue prever o comportamento real de um fenômeno a partir da inserção das variáveis de entrada, normalmente, as relações são expressas na forma de equações matemáticas, como no caso de balanços de massa e energia, mas também podem ser especificadas como expressões lógicas ou relações de causa/efeito, além disso, também podem utilizar ou não de dados experimentais, de forma à incorporar estes dados a fim de descrever melhor um processo (SOUZA, 2013).

Um tipo de modelo matemático muito utilizado na engenharia são as Equações Diferenciais Ordinárias, as EDOs são equações que estudam intervalos infinitesimais, chamados de diferenciais, assim, com a soma de todos os cálculos em cada intervalo, consegue-se representar o fenômeno em questão em um intervalo maior determinado, a resolução destas equações muitas vezes se mostram complexas para um trabalho manual, porém, diversos métodos matemáticos e computacionais são utilizados no auxílio desta resolução, um deles é o método de Runge-Kutta, método amplamente estudado nos cursos de engenharia pela sua considerável simplicidade e vasta aplicabilidade.

O método Runge-Kutta, ou RK, é um método que tenta prever o comportamento de uma curva ajustando retas infinitesimais, ao manipular a variável diferencial de acordo com a ordem utilizada e o passo de cálculo. Como supracitado, o método RK pode ser calculado em diferentes ordens, podendo ser inteiras ou mistas, e seu valor interfere principalmente na quantidade de retas aproximadas criadas por iteração, ou seja, na quantidade de incrementos aplicados à variável, alterando assim a precisão da aproximação. Muitas vezes o Runge-Kutta de quarta ordem já é suficiente para resolver múltiplas EDOs no campo da engenharia e por isso é a mais comumente utilizada nos cursos de graduação ao redor do mundo, porém, com o avanço das capacidades computacionais, já foram desenvolvidos métodos mais complexos como ordens de passo variado, ou de décima-segunda ordem, utilizadas por exemplo em equações altamente oscilantes.

## 4. METODOLOGIA

Todo o código do programa foi elaborado no *Excel Visual Basic for Application*, para entrada de dados, direcionamento de cálculos e apresentação de resultados, foram usados Formulários (*Userforms*) e Módulos, ferramentas da linguagem utilizada, referentes às janelas e aos cálculos, respectivamente. Cada formulário também têm seu código, estes mais ligados aos botões de comando de direcionamento do programa, como também códigos para evitar erros, como por exemplo, impedir o usuário de inserir valores inválidos nas caixas de texto, a inserção de letras em caixas onde só são válidos valores numéricos apresentará uma mensagem de erro, ao invés de prosseguir para um cálculo o qual causaria fim da execução. Além dos mais comuns formulários sobre coleta de dados, há também do tipo consulta (e.g. Figura 1) e o formulário de apresentação de resultados.

Tratando de uma modelagem semi-empírica, muitos dados usados nos cálculos são dados obtidos experimentalmente, principalmente aqueles relacionados aos modelos cinéticos, assim como valores de propriedades físicas como por exemplo massa específica de uma substância, dados desta natureza serão apresentados com uma sugestão do programa, com a possibilidade de alteração pelo usuário caso necessário.

### 4.1. Modelos utilizados

Para utilizar de um modelo cinético, os autores citados faziam seus respectivos estudos com foco central na cinética de reação com o objetivo de representar o processo averiguando os cálculos com seus dados experimentais. As Equações de 1 a 6 são referentes aos tipos de inibições que estão sendo consideradas pelos autores inseridos no programa, e cada uma delas mostra apenas sua relação com a velocidade máxima de crescimento microbiano separadamente, com a exceção de Monod, todos os outros cientistas utilizaram mais de um tipo de inibição em seus modelos cinéticos, a Tabela 2 consegue resumir quais tipos de inibição foram aplicados em cada modelo.

Tabela 2 – Condições de inibições consideradas (marcadas com “X”) para cada modelo cinético presente no software de simulação.

<b>Autores</b> <b>Condições</b>	<b>Monod</b> <b>(1949)</b>	<b>Ghose</b> <b>e</b> <b>Tyagi</b> <b>(1979)</b>	<b>Levenspiel</b> <b>(1980)</b>	<b>Sevely</b> <b>et al.</b> <b>(1980)</b>	<b>Jin et</b> <b>al.</b> <b>(1981)</b>	<b>Lee;</b> <b>Pagan;</b> <b>Rogers</b> <b>(1983)</b>	<b>Tosetto</b> <b>(2002)</b>
<b>Substrato limitante</b>	X	X	X	X	X	X	X
<b>Inibição pelo substrato</b>		X					X
<b>Inibição exponencial pelo substrato</b>					X		
<b>Inibição linear pelo produto</b>		X					
<b>Inibição exponencial pelo produto</b>					X		
<b>Inibição parabólica pelo produto</b>				X			
<b>Inibição de potência pelo produto</b>			X			X	X
<b>Inibição por altas concentrações de biomassa</b>						X	

Fonte: Autor (2020)

Para cada um destes modelos, o programa conta com sugestões de valores para as respectivas constantes cinéticas, as quais poderão ter seus valores alterados pelo usuário como opção, a Tabela 3 apresenta os valores cinéticos iniciais do programa.

Tabela 3 - Valores de constantes cinéticas para os modelos cinéticos inseridos

Constante	Monod (1949)	Ghose e Tyagi (1979)	Levenspiel (1980)	Sevely et al. (1980)	Jin et al. (1981)	Lee; Pagan; Rogers (1983)	Tosetto (2002)
$K_S$ [g/L]	3	0,48	0,222	5	0,22	1,6	21
$\mu_{m\acute{a}x}$ [h <sup>-1</sup> ]	0,2	0,4	0,42	0,3	0,453	0,24	0,5
$K_i$ [g/L]	-	204,49	-	-	-	-	15,5
$K_P$ [g/L]	-	-	-	4,5	-	-	-
$K_1$ [g/L]	-	-	-	-	0,06035	-	-
$K_2$ [g/L]	-	-	-	-	0,0055	-	-
$P_{m\acute{a}x}$ [g/L]	-	87	87,5	85	-	90	88
$X_{m\acute{a}x}$ [g/L]	-	-	-	-	-	100	-
$Y_N$	-	-	0,41	-	-	1	0,7
$Y_M$	-	-	-	-	-	1	-

Fonte: PORTO (2005)

Além destas constantes, também foram sugeridos valores referentes aos rendimentos em células  $\left(Y_{\frac{X}{S}}\right)$  e em etanol  $\left(Y_{\frac{P}{S}}\right)$  em 0,026 e 0,445, respectivamente.

#### 4.2. Balanço de Massa

Os balanços de massa utilizados para o cálculo das concentrações de células, produto e substrato estão dispostos na Tabela 4 a seguir. É importante salientar que o termo  $\mu$  (velocidade de crescimento microbiano) é referente ao modelo cinético selecionado.

Tabela 4 - Equações de balanço de massa utilizadas no programa.

<b>Balanço de massa</b>	
de células (sem reciclo de células)	$\frac{d(X)}{dt} = D(X_o - X) + \mu X$
para o produto	$\frac{d(P)}{dt} = D(P_o - P) + \frac{Y_P}{Y_X} \mu X$
para o substrato	$\frac{d(S)}{dt} = D(S_o - S) - \frac{\mu X}{Y_{X/S}}$

Fonte: Estanislau (2019)

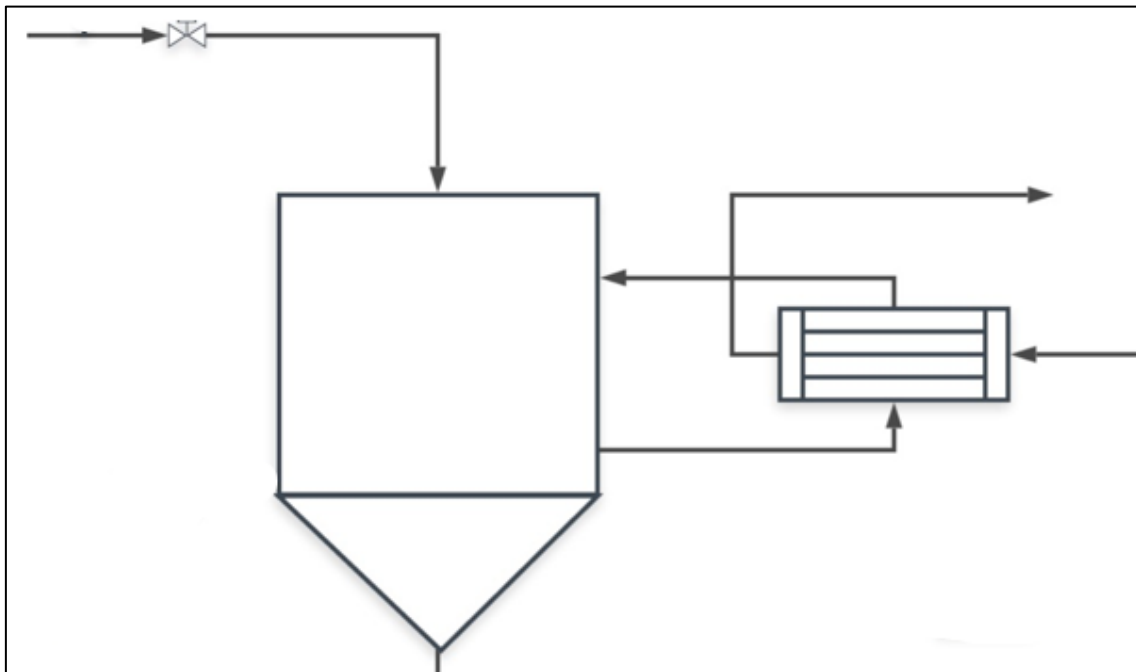
As equações descritas na Tabela 4 apresentam termos semelhantes que caracterizam seu perfil de concentração ao longo do tempo, dito isso, independente dos dados de entrada para o balanço de massa, alguns comportamentos são esperados para cada uma das três variáveis, são eles: a concentração de substrato irá diminuir com o tempo, pois será consumido; a concentração de células aumenta ligeiramente, pois uma menor parte do metabolismo é direcionado ao crescimento celular e a maior parte direcionada à produção de etanol; a concentração de etanol parte da origem, pois é suposto que ainda não há produto no tempo inicial do processo e essa concentração aumenta com o passar do tempo; as curvas alcançarão um estado estacionário simultaneamente, e as três propriedades são contínuas e com valores positivos. Os dados inseridos como entrada ditarão resultados como rendimento, produtividade, tempo de residência, entre outros.

### 4.3. Balanço de energia

O processo de fermentação alcoólica libera energia na forma de calor, por esse motivo, junto com o fato de que leveduras são microrganismo termolábeis, justifica-se uma atenção mais detalhada sobre a temperatura do sistema. A análise da temperatura pode ser feita a partir de um balanço de energia. Dependendo da escala de produção, o calor liberado pelas leveduras durante a reação não pode ser negligenciado por causa da diferença de temperatura resultante. Na produção industrial, a solução para este problema é a adição de um trocador de calor com um fluido de refrigeração, geralmente água em

temperatura ambiente. Tal equipamento é projetado de tal forma à misturar o volume do reator ao mesmo tempo em que resfria a solução, evitando assim a necessidade de um agitador mecânico, o qual traria outros empecilhos como redução de volume útil e morte de células devido ao movimento agressivo, esta configuração está demonstrada na Figura 4 a seguir.

Figura 4 - Esquema da configuração do trocador de calor



Fonte: Vasconcelos et al. (2019)

Como o volume de entrada do fluido quente (mosto) se localiza no fundo do reator e sua saída se localiza no topo, o líquido de seu interior é misturado, esta configuração é importante para poder considerar uma mistura perfeita, e assim, partir para aplicações das equações em um CSTR. De acordo com Fogler (2014), o cálculo referente ao balanço de energia para um CSTR com troca térmica e grande vazão de fluido de refrigeração está descrito na Equação 7.1.

$$X_{EB} = \frac{\left( \frac{UA}{F_{A0}} (T - T_a) \right) + \sum \Theta_i C_{P_i} (T - T_0)}{-\Delta H_{Rx}^0} \quad (7.1)$$

Outra forma de representá-la, manipulando os termos e deixando a equação em função da variação de temperatura com o tempo tem-se a Equação 7.2.

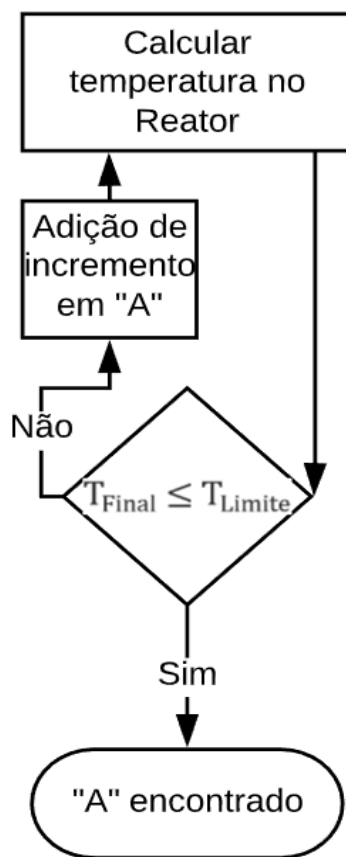
$$\frac{dT}{dt} = \left( \frac{X_{EB}(-\Delta H_{R_x}^{\circ}) - \frac{UA}{F_{A0}}(T - T_a)}{\sum \Theta_i C_{P_i}} \right) \frac{1}{\tau} \quad (7.2)$$

A consideração para uma grande vazão de fluido de refrigeração está relacionado com a sua variação de temperatura com o fim de facilitar os cálculos, com o argumento de que a temperatura do fluido refrigerante não varia muito se seu tempo de troca térmica for curto, isso de fato é uma aproximação válida em muitos casos de vazão elevada, porém como o programa procura atender a qualquer valor de vazão de fluido refrigerante inserível, esse termo não poderá ser negligenciado. Com a necessidade de um balanço de energia para a temperatura do fluido de refrigeração, Fogler (2014) também fornece um cálculo para a temperatura de saída do mesmo (Equação 8), assim, o balanço de energia do reator se completa.

$$T_{a2} = T - (T - T_{a1}) \exp\left(\frac{-UA}{F_{re} C_{P_{re}} \rho_{re}}\right) \quad (8)$$

Com as Equações 7.2 e 8 acopladas, o algoritmo revelará a temperatura final do reator, dito isso, o usuário do programa pode optar por apenas solicitar este cálculo, ou de determinar uma temperatura final limite, ajustando as dimensões do trocador de calor de modo a não ultrapassar este valor, modificando a área de troca térmica, que em um trocador do tipo placas, resultaria na alteração do número de placas ou área de cada placa. Esta apuração de ciclos de cálculos e testes lógicos podem ser observados na Figura 5.

Figura 5 - Rotina de cálculo para encontrar valor de Área Total de Troca Térmica (A) para uma Temperatura Limite determinada



Fonte: Autor (2020)

Para as propriedades físico-químicas do sistema, também foram feitas sugestões que estão dispostas na Tabela 5.

Tabela 5 - Propriedades Físico-químicas e suas respectivas sugestões de valores pelo programa

Propriedade	Valor sugerido pelo programa
$C_{P_{\text{Água}}}$	4.190 J/kg°C
$C_{P_{\text{Glicose}}}$	221 J/mol°C
$C_{P_{\text{Etanol}}}$	2.472,1 J/kg°C
$\Delta H_{\text{Rx}}^{\circ}$	-76.000 J/mol
$\rho_{\text{Água}} (\sim 30^{\circ}\text{C})$	995,6 kg/m <sup>3</sup>
U	3.000 W/m <sup>2</sup> °C

Fonte: Autor (2020)

A partir dos balanços feitos, e próximo passo é aplicá-los ao método de RK4 no código do programa para assim partir para a obtenção dos devidos resultados, vale salientar que, apesar das 5 equações de balanço, sendo elas localizadas na Tabela 4 e nas Equações 7.2 e 8, apenas 4 serão inseridas ao método RK4, pois a Equação 8 referente à temperatura de saída do fluido refrigerante não se trata de uma EDO, ao invés disso, seu valor é calculado em cada iteração, variando ao mesmo passo que o resto das equações acopladas.

#### 4.4. Critérios de parada

Uma adição importante feita ao código de cálculo principal são os critérios de parada, que seriam condições as quais deve-se interromper o módulo de cálculo, são eles: se o tempo de iteração alcançar o tempo máximo escolhido pelo usuário; se os valores de concentração de células, substrato e produto não variarem em relação a uma tolerância determinada de 0,00001 g/L em um passo de 0,001 hora; e se o substrato for totalmente consumido ( $S = 0$ ).

#### 4.5. Rendimento ( $\eta$ )

$$\eta = \frac{P}{0,511 \times S_0} \times 100\% \quad (9)$$

O rendimento ( $\eta$ ) da fermentação alcoólica é calculado através da Equação 9, onde o valor 0,511 é referente ao rendimento teórico de conversão da glicose em etanol, em gramas de glicose por gramas de etanol.

#### 4.6. Produtividade

Produtividade é definido por um volume produzido em um determinado intervalo de tempo, para o caso da fermentação alcoólica, este volume será a concentração do produto etanol produzida e o intervalo de tempo será a quantidade de horas necessárias até o sistema alcançar o estado estacionário, ou seja, o máximo de produção de etanol do processo em questão. A Equação 10 descreve o cálculo da produtividade.

$$\text{Produtividade} \left[ \frac{\text{g}}{\text{L h}} \right] = \frac{P}{t} \quad (10)$$

#### 4.7. Dimensionamento das placas e efetividade do trocador de calor

Quando o valor da área total de troca térmica ( $A$ ) for inserido ou calculado, como opção adicional, o usuário poderá fazer um simples dimensionamento das placas do trocador, determinando assim o número de placas totais e a área de cada uma delas simultaneamente, a Equação 11 apresenta como este cálculo é feito.

$$A = N_p \times A_{up} \quad (11)$$

Onde  $N_p$  é o número de placas e  $A_{up}$  é a área da unidade de placa.

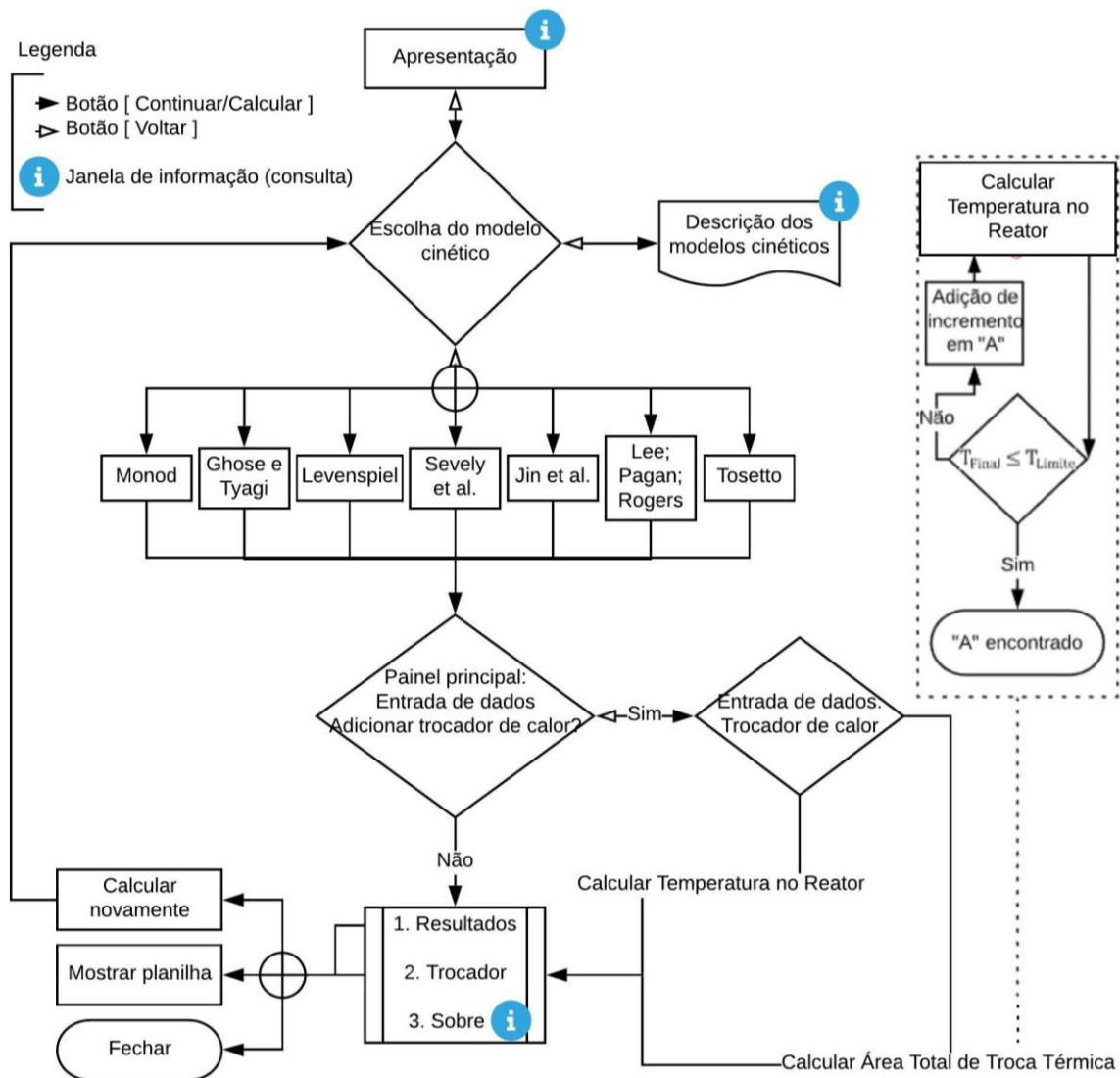
Além do número e tamanho das placas, outra propriedade importante sobre o dimensionamento é a efetividade de troca térmica ( $\varepsilon$ ), ou seja, a relação entre a taxa real de transferência de calor e a máxima troca possível, a Equação 12 trata o cálculo da efetividade.

$$\varepsilon = \frac{Q_{\text{real}}}{Q_{\text{máx}}} \times 100\% \quad (12)$$

## 5. RESULTADOS

O programa foi desenvolvido com sucesso, sua interface apresentou-se simples e direta, com botões de direcionamento em todas as janelas para fácil navegação, mensagens de advertência são exibidas para evitar erros, e seus resultados são apresentados de forma clara e consistente. A Figura 6 mostra o algoritmo geral que detalha todos os caminhos possíveis que o usuário pode explorar como também apresenta as escolhas que deverão ser feitas até a obtenção dos resultados, além disso, conta com botões de recálculo e de mostrar a planilha no caso do usuário desejar analisar os dados com maior detalhe.

Figura 6 - Fluxograma geral do programa



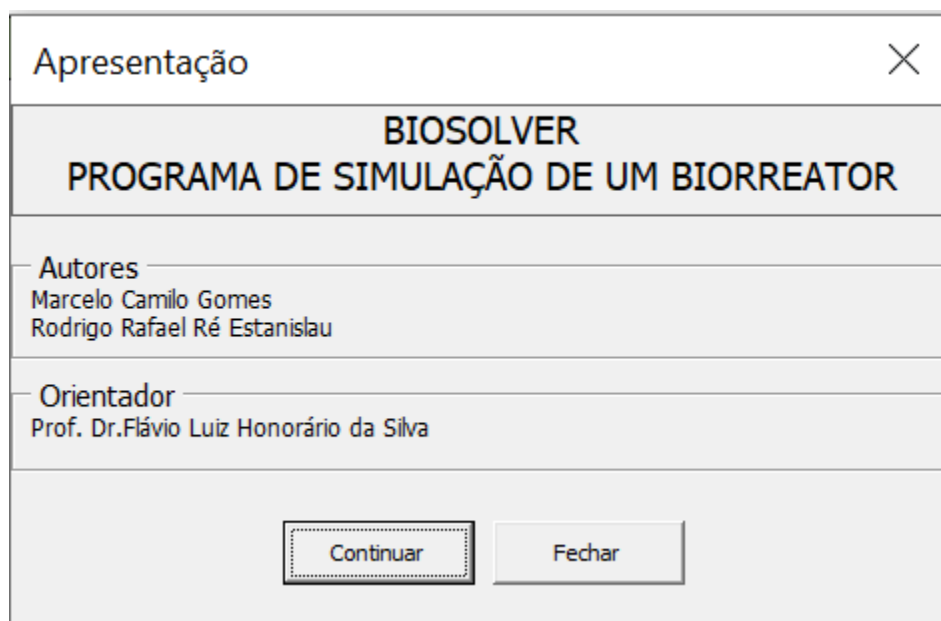
Fonte: Autor (2020)

O programa finalizado contém 15 formulários e 7 módulos, a Figura 6 consegue retratar a maioria das janelas presentes no programa, cada uma com seus respectivos botões de direcionamento. Os módulos do programa podem ser categorizados de acordo com sua função objetivo, entre eles, são dois com cálculos essenciais para o balanço, um responsável pela plotagem dos gráficos e recolhimento das saídas de resposta, um código de cálculo principal, que chama os cálculos requisitados pelo usuário e posteriormente o módulo responsável pelos resultados, um que contém todas as variáveis globais utilizadas no projeto, a fim de torná-las públicas e permitir interação entre diferentes módulos e formulários, um com o objetivo de tornar a execução do programa mais rápida, desativando funções desnecessárias do Excel tornando assim o programa mais leve, e finalmente a última responsável por fechar totalmente a aplicação quando o usuário pressionar o botão para fechar, pois normalmente esta ação apenas ocultaria a planilha.

### 5.1. Apresentação e escolha de modelos

Ao abrir o aplicativo no computador, o programa já inicia automaticamente seu código, ocultando a planilha Excel que normalmente abriria e mostrando a primeira janela intitulada “Apresentação” (Figura 7), contendo informações básicas como nome dos contribuintes, nome de registro do programa e sua função de forma resumida.

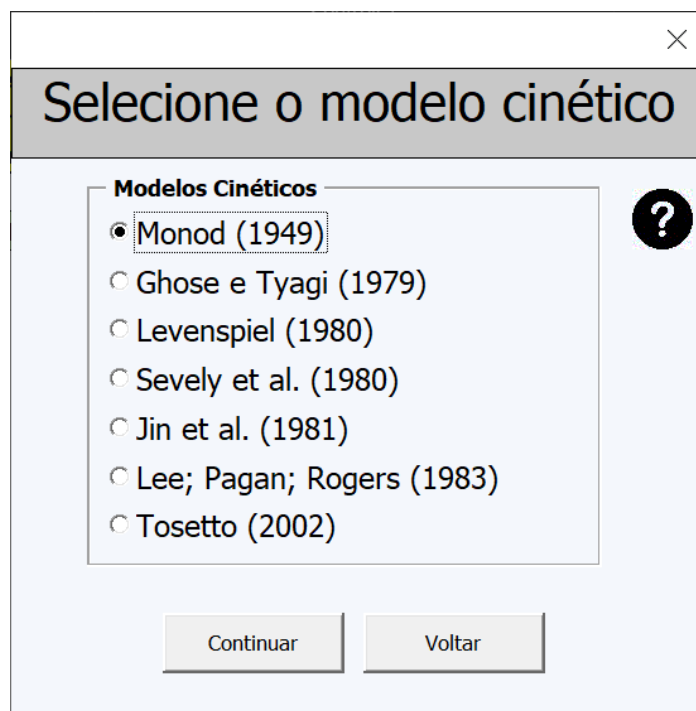
Figura 7 - Janela "Apresentação"



Fonte: Autor (2020).

Ao continuar, a próxima janela a ser apresentada é a escolha do modelo cinético (Figura 8), apresentando ao usuário a opção de modelo e sua respectiva data em ordem cronológica. No topo direito da janela há um ícone de interrogação, que ao ser selecionado abrirá uma nova janela com a descrição de cada modelo como já apresentado na Figura 1.

Figura 8 - Janela para escolha entre os modelos cinéticos



Fonte: Autor (2020).

#### 5.1.1. Janelas dos modelos cinéticos

Ao selecionar o botão continuar, o programa irá reconhecer a opção do modelo selecionada para prosseguir com a janela correspondente ao modelo escolhido, nas Figuras 9 a 16 estão as janelas para inserção de cada valor do modelo escolhido, com as respectivas sugestões de parâmetros cinéticos presentes na Tabela 3.

Para alteração dos valores, o usuário deve clicar nos botões de ativação, onde estão inseridos os títulos da propriedade, isso desbloqueará a caixa de texto para edição do valor.

Figura 9 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Monod

Parâmetros do modelo		
ks	3	g/L
mi máx	0,2	h <sup>-1</sup>

Continuar Voltar

Fonte: Autor (2020)

Figura 10 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Ghose e Tyagi

Parâmetros do modelo		
ks	0,48	g/L
mi máx	0,4	h <sup>-1</sup>
ki	203,49	g/L
P máx	87	g/L

Continuar Voltar

Fonte: Autor (2020)

Figura 11 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Levenspiel

Parâmetro	Valor	Unidade
ks	0,222	g/L
mi máx	0,42	h <sup>-1</sup>
YN	0,41	
P máx	87,5	g/L

Continuar Voltar

Fonte: Autor (2020)

Figura 12 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Sevely et al.

Parâmetro	Valor	Unidade
ks	5	g/L
mi máx	0,3	h <sup>-1</sup>
kp	4,5	g/L
P máx	85	g/L

Continuar Voltar

Fonte: Autor (2020)

Figura 13 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Jin et al.

Parâmetro	Valor	Unidade
ks	0,22	g/L
mi máx	0,453	h <sup>-1</sup>
k1	0,06035	g/L
k2	0,0055	g/L

Continuar Voltar

Fonte: Autor (2020)

Figura 14 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Lee, Pagan e Rogers.

Parâmetro	Valor	Unidade
ks	1,6	g/L
mi máx	0,24	h <sup>-1</sup>
P máx	90	g/L
X máx	100	g/L
YN	1	
YM	1	

Continuar Voltar

Fonte: Autor (2020)

Figura 15 - Janela de inserção de parâmetros cinéticos do modelo de Tosetto

Parâmetro	Valor	Unidade
ks	21	g/L
mi máx	0,5	h <sup>-1</sup>
YN	0,7	
P máx	88	g/L
ki	15,5	g/L

Continuar Voltar

Fonte: Autor (2020)

## 5.2. Janela da entrada de dados e balanço de massa

Logo após a seleção do modelo cinético, o usuário acessará o formulário principal, onde os dados sobre o balanço de massa deverão ser inseridos. É nesta janela em que os rendimentos em célula e em produto podem ser alterados. Além disso, é neste momento em que se deve selecionar ou não o cálculo da temperatura e do trocador de calor. Essas informações podem ser conferidas na Figura 16.

Figura 16 - Janela de entrada de dados: (a) sem cálculo de trocador de calor e (b) com cálculo de trocador de calor e temperatura

(a)

## Entrada de dados

**Balanco de massa**

t máximo		h
Volume		m <sup>3</sup>
Vazão		m <sup>3</sup> /h
$\tau$		h
X0		g/L
S0		g/L
Y x/s	0,026	g/g
Y p/s	0,445	g/g

**Adicionar cálculos de um trocador de calor?**

Não       Sim

Calcular
Voltar

(b)

## Entrada de dados

**Balanco de massa**

t máximo		h
Volume		m <sup>3</sup>
Vazão		m <sup>3</sup> /h
$\tau$		h
X0		g/L
S0		g/L
Y x/s	0,026	g/g
Y p/s	0,445	g/g

**Adicionar cálculo de um trocador de calor?**

Não       Sim

Calor específico da água (Cpa)	4190	J/kg°C
Calor específico da glicose (Cpg)	211	J/mol°C
Calor específico do etanol (Cpe)	2472.1	J/kg°C
Entalpia de reação	-76000	J/mol
Número de mols da glicose		mol
Calor de reação total		kJ
Massa específica da água (30°C)	995,6	kg/m <sup>3</sup>
Massa total de água		kg

Calcular
Voltar

Fonte: Autor (2020)

Neste formulário, algumas caixas de texto foram bloqueadas pelo fato que seus valores são inseridos automaticamente, o código para isso foi feito de tal maneira que, quando as células necessárias para o cálculo específico alterarem de valor, o programa testará as condições necessárias (e.g. se são valores numéricos, se o dividendo é diferente de zero, etc.) e em seguida fornecerá o valor na própria caixa instantaneamente, as caixas que atendem o mencionado são: o tempo de residência ( $\tau$ ), o número de mols da glicose, o calor de reação total e a massa total de água. Em outras palavras, nada precisa ser inserido na aba direita (Figura 16) para poder prosseguir.

Todas as outras caixas neste formulário são totalmente editáveis, porém nem todos os valores serão aceitos pelo programa, não só nesta janela, mas em todas aquelas onde possuem caixas de texto onde o usuário tem poder de digitação, foram criadas restrições para o botão de continuar, onde só serão aceitos valores compatíveis com os cálculos, ou seja, caixas vazias, casos onde o zero não pode ser aceito e letras onde só deveriam ter números. A Figura 17 mostra a mensagem de erro que aparecerá caso essas condições não forem aceitas.

Figura 17 - Mensagem de erro quando o botão "Calcular" é apertado sem todas as caixas de texto terem valores válidos. No exemplo, várias caixas estão vazias.

The screenshot shows a software interface titled "Entrada de dados". It contains two main sections: "Balanço de massa" and "Adicionar cálculo de um trocador de calor?".

**Balanço de massa**

t máximo		h
Volume		m <sup>3</sup>
Vazão		m <sup>3</sup> /h
$\tau$		h
X0		g/L
S0		g/L
Y x/s	0,026	g/g
Y p/s	0,445	g/g

**Adicionar cálculo de um trocador de calor?**

Não  Sim

Calor específico da água (Cpa)	4190	J/kg°C
se (Cpg)	211	J/mol°C
ol (Cpe)	2472.1	J/kg°C
	-76000	J/mol
se		mol
		kJ
a (30°C)	995,6	kg/m <sup>3</sup>
Massa total de água		kg

A Microsoft Excel dialog box is overlaid on the form, displaying the message "Digite valores válidos" (Enter valid values) and an "OK" button.

At the bottom of the form, there are two buttons: "Calcular" and "Voltar".

Fonte: Autor (2020)

### 5.3. Janela para o balanço de energia

Figura 18 - Janela de entrada de dados para o balanço de energia

×

## Entrada de dados: Trocador de calor

**Propriedades do sistema**

Trocador tipo Placas		Fluxo Contracorrente	
Calor específico da água (Cpa)	4190	J/kg°C	
Calor específico da glicose (Cpg)	211	J/mol°C	
Calor específico do etanol (Cpe)	2472.1	J/kg°C	
Entalpia de reação	-76000	J/mol	
Número de mols da glicose		mol	
Calor de reação total		kJ	
Massa específica da água (~30°C)	995,6	kg/m <sup>3</sup>	
Massa total de água		kg	
Vazão volumétrica no biorreator		m <sup>3</sup> /h	

**Qual propriedade deseja calcular?**

Temperatura do Reator     Área de troca térmica

Temperatura inicial (Biorreator)	30	°C
Temperatura final (Biorreator)	33	°C
Diferença de temperatura (Biorreator)	3	°C
Vazão do fluido refrigerante		m <sup>3</sup> /h
Temperatura Alimentação do fluido refrigerante	25	°C
Calor específico do fluido refrigerante	4190	J/kg°C
Massa específica do fluido refrigerante	995,6	kg/m <sup>3</sup>
Coefficiente global de transferência de calor (U)	3000	W/m <sup>2</sup> °C
Área de troca térmica (A)		m <sup>2</sup>
UA		W/°C

Fonte: Autor (2020)

A janela responsável pela entrada de dados para o balanço de energia (Figura 18) só será acionada se a opção “sim” for escolhida no formulário principal (Figura 16). Na aba esquerda estão dispostas várias propriedades do sistema que foram anteriormente inseridas pelo usuário, na aba direita, tem-se acesso à entrada de dados para o balanço de energia, com funcionamento semelhante à janela do balanço de massa, agora com mais uma opção sobre qual dado será inserido e qual deverá ser calculado, dependendo da opção selecionada, o programa sinalizará as caixas que não precisam ser inseridas para facilitar o entendimento da interface, essa sinalização é feita alterando a cor da fonte e da caixa, a fim de representar sua inativação, como visto na Figura 19.

Figura 19 - Caixas de texto inativadas de acordo com a opção selecionada.

Qual propriedade deseja calcular?		
<input checked="" type="checkbox"/> Temperatura do Reator <input type="checkbox"/> Área de troca térmica		
Temperatura inicial (Biorreator)	30	°C
Temperatura final (Biorreator)	33	°C
Diferença de temperatura (Biorreator)	3	°C
Vazão do fluido refrigerante		m <sup>3</sup> /h
Temperatura Alimentação do fluido refrigerante	25	°C
Calor específico do fluido refrigerante	4190	J/kg°C
Massa específica do fluido refrigerante	995,6	kg/m <sup>3</sup>
Coefficiente global de transferência de calor (U)	3000	W/m <sup>2</sup> °C
Área de troca térmica (A)		m <sup>2</sup>
UA		W/°C

Qual propriedade deseja calcular?		
<input type="checkbox"/> Temperatura do Reator <input checked="" type="checkbox"/> Área de troca térmica		
Temperatura inicial (Biorreator)	30	°C
Temperatura final (Biorreator)	33	°C
Diferença de temperatura (Biorreator)	3	°C
Vazão do fluido refrigerante		m <sup>3</sup> /h
Temperatura Alimentação do fluido refrigerante	25	°C
Calor específico do fluido refrigerante	4190	J/kg°C
Massa específica do fluido refrigerante	995,6	kg/m <sup>3</sup>
Coefficiente global de transferência de calor (U)	3000	W/m <sup>2</sup> °C
Área de troca térmica (A)		m <sup>2</sup>
UA		W/°C

Fonte: Autor (2020)

Da mesma maneira que o formulário sobre o balanço de massa, este também contém algumas caixas bloqueadas com valores automáticos, são elas: a diferença de temperatura no biorreator e a multiplicação entre o coeficiente global de transferência de calor (U) e a área de troca térmica (A), intitulado “UA”.

### 5.3.1. Cálculo da área de troca térmica

Ao selecionar a opção “Temperatura do Reator” na janela de entrada de dados do balanço de energia, o programa irá chamar o módulo de cálculo principal, o qual confere as opções selecionadas e chama os devidos cálculos de solução de EDO através do uso de diversas condições lógicas, porém na situação em que a opção “Área de troca térmica” for selecionada na mesma janela, haverá mais um passo antes da cálculo definitivo. Com a utilização do algoritmo para encontrar a área de troca térmica (Figura 5), uma nova janela surgirá (Figura 20) para recolher a temperatura limite, o intervalo estimado e o incremento que se deseja aplicar para o cálculo.

Figura 20 - Janela para inserção de critérios para cálculo da área de troca térmica

Critérios de cálculo		
Temperatura máxima (Biorreator)	33	°C
Estimativa inicial para Área		m <sup>2</sup>
Valor máximo para área		m <sup>2</sup>
Incremento por iteração	1,0	m <sup>2</sup>

**Obs.: Este método pode demorar alguns minutos**

Calcular Voltar

Fonte: Autor (2020)

Este método de cálculo requer um maior esforço computacional, pois o programa pode recalcular a quantidade de vezes necessária de acordo com o incremento e o intervalo escolhido, apesar disso, ao ter a possibilidade de escolher uma temperatura limite, o resultado obrigatoriamente atenderá a condição de temperatura do microrganismo, algo que não pode ser esquecido no projeto de um biorreator para produção biotecnológica de etanol.

#### 5.4. Janela de resultados

No termino do módulo principal, o código irá chamar o módulo responsável pela apresentação dos resultados, este apenas contém códigos referentes aos dois gráficos existentes, e ao recolhimento dos valores calculados, alguns deles presentes no projeto VBA, e outros presentes na planilha Excel. O formulário contém três páginas, uma para cada balanço e uma terceira com informações adicionais sobre o *software* desenvolvido incluindo contato dos desenvolvedores e um texto sobre a história do programa, como demonstrado na Figura 21.

Figura 21 - Terceira página da janela de resultados intitulada "Sobre"

Balanco de massa | Balanco de energia | Sobre

**Autores**  
 Marcelo Camilo Gomes  
 Rodrigo Rafael Ré Estanislau

**Orientador**  
 Prof. Dr. Flávio Luiz Honorário da Silva

**Sobre**  
 Este programa teve inicio em fevereiro de 2019 como projeto de iniciação tecnológica e teve esta versão finalizada em março de 2020 como trabalho final do curso. Seu objetivo, além de oferecer devidamente os resultados requisitados, é também de ser uma plataforma acessível para o usuário, trabalhar com a linguagem do VBA trouxe essa liberdade. O programa foi feito por alunos de Engenharia Química na Universidade Federal da Paraíba, pensado com a intenção de ser utilizado por alunos do curso como ferramenta de aprendizado, assim como foi para os alunos que o desenvolveram. No mais, aproveitem todo o nosso esforço. Qualquer dúvida ou sugestão pode entrar em contato conosco, estamos à disposição. Obrigado por utilizar o nosso Software!

**Contato**  
 marcelocamilogomes@gmail.com  
 rodrigoestanislau@hotmail.com  
 flavioluizh@yahoo.com.br

Fonte: Autor (2020)

Para apresentação das outras páginas deste formulário, a entrada de dados será de acordo com a Tabela 6 a seguir, para melhor visualização de seu funcionamento.

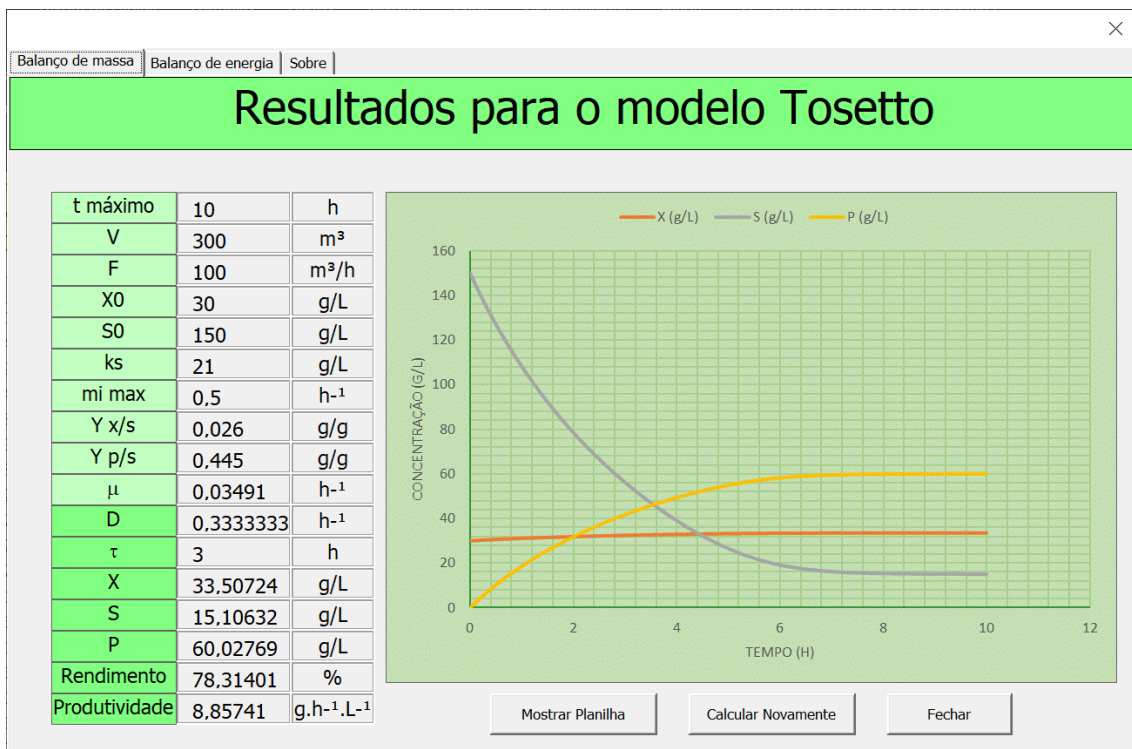
Tabela 6 - Entrada de dados utilizada como exemplo para exibição de resultados

DADOS	VALOR INSERIDO
Modelo cinético	Tosetto (2002)
$t_{\text{máximo}}$	10 h
Volume	300 m <sup>3</sup>
Vazão	100 m <sup>3</sup> /h
$X_0$	30 g/L
$S_0$	150 g/L
Adicionar cálculo de um trocador de calor?	Sim
Qual propriedade deseja calcular?	Área de troca térmica
Temperatura inicial	30 °C
Temperatura final	33 °C
Vazão do fluido refrigerante	360 m <sup>3</sup> /h
Temperatura de alimentação do fluido refrigerante	25 °C
Estimativa inicial para área	40 m <sup>2</sup>
Valor máximo para área	60 m <sup>2</sup>
Incremento por iteração	1 m <sup>2</sup>

Fonte: Autor (2020)

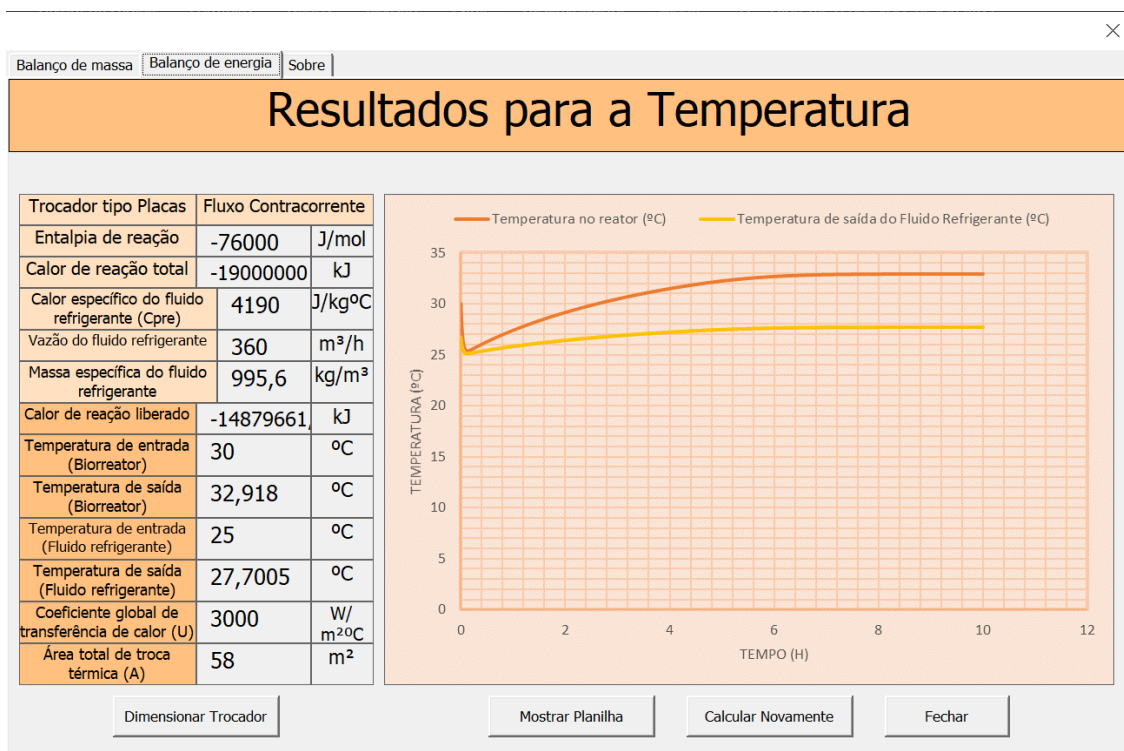
As escolhas das opções deste exemplo exigem o máximo da capacidade do programa, fazendo com que ele percorra o caminho mais longo através dos direcionamentos como demonstrados no fluxograma geral do projeto (Figura 6). Todos os outros valores utilizados foram aqueles ditos como sugestão do programa (Tabelas 3 e 5). As Figuras 22 e 23 são, respectivamente, o resultado para o balanço de massa e o balanço de energia.

Figura 22 - Primeira página da janela de resultados intitulada "Balanço de massa"



Fonte: Autor (2020)

Figura 23 - Segunda página da janela de resultados intitulada "Balanço de energia"



Fonte: Autor (2020)

As propriedades calculadas de interesse e seus respectivos valores foram: Rendimento a 78,31%; Produtividade a 8,86 g/Lh; Temperatura final no biorreator a 32,92 °C; Temperatura de saída do trocador de calor a 27,7 °C; e a área de troca térmica a 58 m². A partir destes resultados é evidenciado o sucesso do algoritmo em achar uma área de troca térmica dentro do intervalo inserido capaz de manter a temperatura do biorreator abaixo do limite.

Analisando os perfis das curvas apresentadas, é notável que o balanço de massa tem um perfil dentro do previsto, foi capaz de atingir um rendimento compatível com a realidade visto que trata-se de um modelo cinético bastante robusto, porém este resultado ainda não seria o ideal para uma produção industrial, pois este rendimento pode alcançar as margens de 85%, resultando numa maior produtividade. O botão "Calcular novamente" pode ser selecionado e todos os valores inseridos nas entradas de dados serão lembrados no decorrer da execução pela segunda vez, o usuário poderia assim, alterar apenas uma propriedade, e.g. concentração de substrato inicial, e continuar o programa até a apresentação de resultados novamente, para finalmente poder analisar o impacto dessa alteração feita.

Sobre o perfil das temperaturas na segunda página do formulário de resultados, também pode-se confirmar semelhança com o fenômeno real, pois a troca de temperatura em um trocador de calor inicia-se a partir do tempo zero, quando a reação ainda está iniciando, fazendo com que a temperatura do sistema se resfrie ligeiramente até que o rendimento da reação aumente, resultando na liberação de calor, e conseqüentemente em seu aumento da temperatura, a partir deste ponto, o trocador de calor se mostrou capaz de refrigerar o sistema dentro das condições desejadas pelo usuário. O estado estacionário pode ser evidenciado pelos dois gráficos no período de aproximadamente 7 horas.

#### 5.4.1. Dimensionador do trocador de calor

Uma opção adicional é colocada na segunda página do formulário de resultados, ao selecionar o botão “Dimensionar Trocador”, uma nova janela aparece com um simples cálculo de dimensionamento assim como o cálculo da efetividade, esta janela pode ser visualizada na Figura 24.

Figura 24 - Janela para cálculo de dimensionamento das placas do trocador de calor

Trocador de calor tipo placas		
Área total de troca térmica (A)	58	m <sup>2</sup>
Área da unidade de placa	0,8286	m <sup>2</sup>
Número de placas	70	placas
Capacidade calorífica do mosto	434739,73	kJ/h°C
Capacidade calorífica do fluido refrigerante	1501763,04	kJ/h°C
Efetividade	58,36	%

OK

Fonte: Autor (2020)

Os valores disponíveis na Figura 24 são referentes aos dados utilizados do exemplo (Tabela 6).

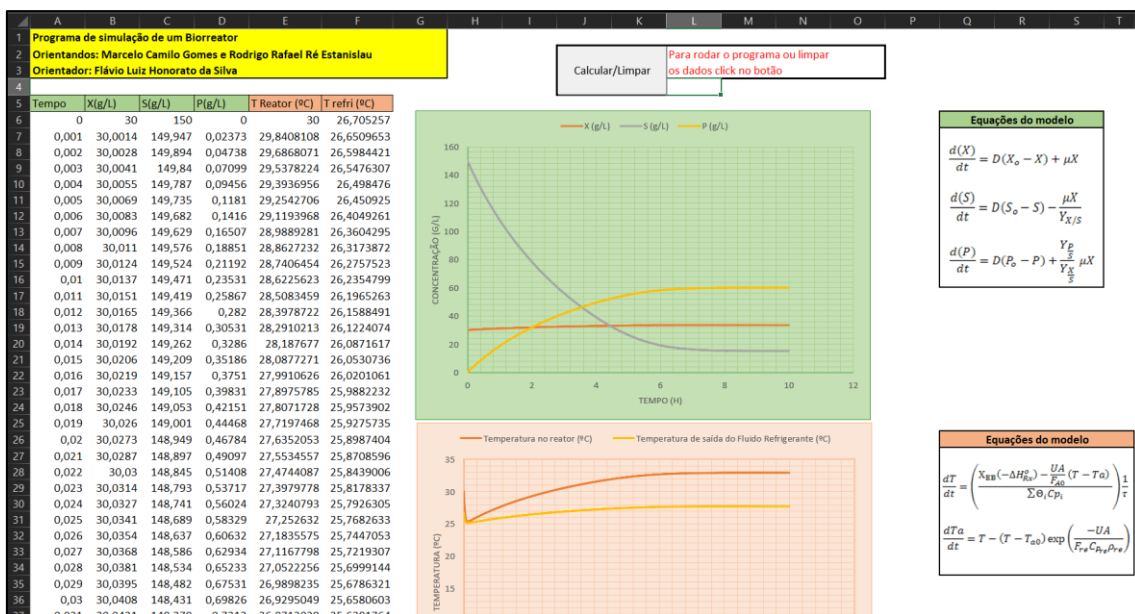
As únicas caixas de texto com inserção de valores habilitada são as da área de unidade de placa e a de número de placas, ao inserir o valor em qualquer uma das duas caixas, a

outra é preenchida automaticamente, além disso, ao inserir qualquer valor na área unitária de cada placa, este resultado também é automaticamente ajustado para corresponder ao número de placas calculado, isso foi feito para os casos em que a área inicialmente escolhida não se igualar à divisão exata de acordo com o número inteiro de placas calculado.

### 5.5. Dados da planilha Excel

Desde a execução do aplicativo até a apresentação dos resultados a planilha Excel permanece oculta, sua visualização só é possível ao pressionar o botão de comando “Mostrar Planilha” presente nas duas primeiras páginas da janela de resultados, nela estão presentes todos os pontos de ambos os gráficos, assim como abre a possibilidade de editá-los, essa função foi permitida para os usuários que desejarem analisar seus resultados mais a fundo, podendo escolher seus pontos específicos pelos gráficos a maneira que preferir, criar outros gráficos, ou utilizar dos pontos obtidos para outra tarefa alheia. As informações que estarão visíveis para o usuário podem ser visualizadas na Figura 25, ainda com os dados do exemplo proposto anteriormente.

Figura 25 - Planilha Excel ao apertar o botão "Mostrar Planilha"



Fonte: Autor (2020)

## **6. CONCLUSÃO**

O programa desenvolvido atendeu satisfatoriamente todos os objetivos propostos do trabalho, com uma breve observação sobre o quarto objetivo específico sobre execução rápida, pois existe uma condição específica em que o programa pode de fato demorar alguns segundos a mais que o usual, como descrito na seção 5.3.1. A interface foi desenvolvida de forma compreensível, para um uso intuitivo, impossibilitando a ocorrência de erros na inserção de dados.

As sugestões de propriedades proveram resultados satisfatórios para todos os modelos cinéticos utilizados, entre outros cálculos, podendo assim complementar a possível ausência destas informações de um usuário.

O acesso às janelas do projeto VBA é consistente e de fácil entendimento através dos botões, pode ser executado continuamente e dá liberdade ao usuário de ter acesso à planilha com todos os pontos calculados.

## **7. PERSPECTIVAS PARA TRABALHOS FUTUROS**

O programa ainda pode ser otimizado em diferentes pontos, por exemplo: em sua acessibilidade, com a adição de um conversor de unidades; adicionar mais considerações de cálculo para enriquecer a modelagem, como utilização de correlações matemáticas para ajuste de propriedades experimentais; implementação de novas funções, como reciclo de células e múltiplos reatores em série. Sugestões estas para torná-lo cada vez mais completo e robusto.

## 8. REFERÊNCIAS

ANDRIETTA, S.R. **Modelagem, simulação e controle de fermentação alcoólica contínua em escala industrial**. 1994. 178 f. Tese de doutorado - Faculdade de Engenharia de Alimentos, UNICAMP, Campinas, 1994.

ARAÚJO, Andressa Aziz Diniz. **Desenvolvimento de planilhas Excel para estimativas dos coeficientes de atividade e cálculos do equilíbrio líquido-vapor de misturas binárias em baixas pressões**. 2019. 59 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2019. Disponível em: <<https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/123456789/15625>>. Acesso em: 07 jan. 2020.

BERG, Christoph; LICHT, F.O. **World Fuel Ethanol**. Meti, [2008?], 52 slides, color. Disponível em: <<https://cannasystems.ca/pdf/EthanolReport.pdf>>. Acesso em: 10 jul. 2019.

CASTRO, A. L. M. et al. Influência da temperatura na resistência ao etanol da levedura *Saccharomyces cerevisiae* Y904. **Anais do Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica - COBEQ IC 2015**, Campinas, v. 3, n. 1, p.1-6, jun. 2015. Editora Edgard Blücher. <http://dx.doi.org/10.5151/chemeng-cobeqic2015-222-32884-250447>. Disponível em: <<http://www.proceedings.blucher.com.br/article-details/influencia-da-temperatura-na-resistncia-ao-etanol-da-levedura-saccharomyces-cerevisiae-y904-19795>>. Acesso em: 29 jan. 2020.

CRUZ, Sandra H da. **Processos industriais de condução da fermentação**. [Piracicaba]: Autora, [201-]. 58 slides, color. ESALQ/USP.

ESTANISLAU, Rodrigo Rafael Ré. **Desenvolvimento de software de modelagem e simulação para a obtenção biotecnológica de bioprodutos a partir do bagaço do sisal (*Agave sisalana*)**. João Pessoa: PROPESQ, 2019. 16 p. Programa de Iniciação Científica e Tecnológica.

FAY, Justin C.; BENAVIDES, Joseph A. Evidence for domesticated and wild populations of *Saccharomyces cerevisiae*. **Plos Genetics**, [s.l.], v. 1, n. 1, p.1-6, 2005. Public Library of Science (PLoS). <http://dx.doi.org/10.1371/journal.pgen.0010005>. Disponível em: <<https://journals.plos.org/plosgenetics/article?ia=10.1371/journal.pgen.0010005>>. Acesso em: 03 fev. 2020.

FERRARI, Fernanda Cristina dos Santos. **Fatores operacionais e cinética do processo fermentativo para otimização da produção de etanol em escala industrial**. 2013. 74 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Microbiologia Agropecuária, Universidade Estadual Paulista, Jaboticabal, 2013.

FOGLER, H. Scott. **Cálculo de reatores: o essencial da engenharia das reações químicas**. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda, 2014. 569 p. Tradução e revisão técnica: Flávio Faria de Moraes et al.

JARZEBSKI, A. B.; MALINOWSKI, J. J.; GOMA, G.. Modeling of ethanol fermentation at high yeast concentrations. **Biotechnology And Bioengineering**, [s.l.], v. 34, n. 9,

p.1225-1230, nov. 1989. Wiley. <http://dx.doi.org/10.1002/bit.260340915>. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/bit.260340915>>. Acesso em: 02 fev. 2020.

LUONG, J. H. T. **Kinetics of ethanol inhibition in alcohol fermentation**. Quebec: John Wiley & Sons, Inc, 1985. p. 280-285. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/bit.260270311>>. Acesso em: 01 fev. 2020.

Método de Runge-Kutta. In: WIKIPÉDIA, a enciclopédia livre. Flórida: Wikimedia Foundation, 2018. Disponível em: <[https://pt.wikipedia.org/w/index.php?title=M%C3%A9todo\\_de\\_Runge-Kutta&oldid=53639655](https://pt.wikipedia.org/w/index.php?title=M%C3%A9todo_de_Runge-Kutta&oldid=53639655)>. Acesso em: 28 jan. 2020.

PORTO, Lia de Mendonça. **Modelagem de processo industrial de fermentação alcoólica contínua com reatores de mistura ligados em série**. 2005. 122 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Química, Departamento de Processos Biotecnológicos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

SCHMIDELL, Willibaldo et al. **Biotecnologia Industrial**: Engenharia Bioquímica. [s.i.]: Edgard Blucher Ltda, 2001. 562 p. Disponível em: <[https://www.academia.edu/31932965/Biotecnologia\\_Industrial\\_Vol\\_2\\_Willibaldo\\_Schmidell?auto=download](https://www.academia.edu/31932965/Biotecnologia_Industrial_Vol_2_Willibaldo_Schmidell?auto=download)>. Acesso em: 29 jan. 2020.

SOUZA JUNIOR, Evanildo Francisco de. **Modelagem e simulação fenomenológica de biorreator para a produção de Xilitol a partir de sisal (*Agave sisalana*) Em Meio com *Candida guilliermondii***. 2017. 80 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2017. Disponível em: <<https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/123456789/13522>>. Acesso em: 28 jan. 2020.

SOUZA, Leiliane do Socorro Sodr  de. **Avalia o do processo de produ o de etanol pela fermenta o do caldo de mandiocaba (*manihot esculenta Crantz*)**. 2013. 84 f. Disserta o (Mestrado) - Curso de Engenharia Qu mica, Universidade Federal do Par , Bel m, 2013.

VASCONCELOS, Gabriela Rodrigues de et al. **Projeto de processos qu micos**: Usina de etanol. 2019. 72 f. Trabalho acad mico - Curso de Engenharia Qu mica, Departamento de Engenharia Qu mica, Universidade Federal da Para ba, Jo o Pessoa, 2019.

VASCONCELOS, Gabriela Rodrigues de et al. **Projeto de trocador de calor**. Jo o Pessoa: 2019. 10 slides, color.