



**Análise da performance de biorreatores
em bandejas múltiplas
para fermentação em estado sólido
usando o simulador EMSO**

Marina de Gusmão Bastos

Projeto de Final de Curso

Orientador

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.


Dezembro de 2011


Análise da performance de biorreatores em bandejas múltiplas para fermentação em estado sólido usando o simulador EMSO

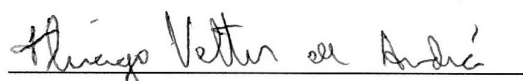
Marina de Gusmão Bastos

Projeto Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenharia Química.

Aprovada por


Aline Machado de Castro, DSc.


Tito Lívio Moitinho Alves, DSc.


Thiago Vetter de Andréa, BSc.

Orientada por


Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, DSc.

Rio de Janeiro, RJ-Brasil
Dezembro de 2011

Bastos, Marina de Gusmão.

Análise da performance de biorreatores em bandejas múltiplas para fermentação em estado sólido usando o simulador EMSO / Marina de Gusmão Bastos. Rio de Janeiro: UFRJ / EQ, 2011.

xiii, 73 p.;il.

(Projeto Final) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2011.

Orientador Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva.

1. Fermentação em Estado Sólido. 2. Simulação de Biorreatores. 3. EMSO. 4. Projeto Final (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva. I. Título.

À minha família, aos meus amigos e aos meus mestres.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço ao meu orientador, professor Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, pela dedicação, instrução e paciência durante o projeto. Sem ele, este trabalho seria impossível de ser concluído a tempo.

Agradeço aos professores Argimiro Resende Secchi e David Alexander Mitchell que foram muito prestativos e me ajudaram sempre que precisei.

Agradeço à minha família, sempre presente ao meu lado, seja nos momentos bons, seja nos momentos ruins.

Agradeço também aos meus amigos, principalmente ao Samir Silva Abunahman, pelo grande apoio empregado a mim, sempre me incentivando a ir em frente quando mais precisei.

Por último, agradeço à banca julgadora pela disponibilidade e interesse no meu trabalho.

Resumo do Projeto Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Engenharia Química.

Análise da performance de biorreatores em bandejas múltiplas para fermentação em estado sólido usando o simulador EMSO.

Marina de Gusmão Bastos

Dezembro, 2011

Orientador: Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

A fermentação em estado sólido é um processo capaz de produzir diversos compostos de interesse comercial como alcoóis, polissacarídeos, ácidos, enzimas, fungos e bactérias, com aplicações em indústrias de alimentos, farmacêuticas, de cosméticos, pigmentos, entre outras. Além disso, ao empregar resíduos ou subprodutos agroindustriais como substratos, a fermentação em estado sólido se apresenta como uma tecnologia capaz de diminuir possíveis problemas ambientais, bem como, de agregar valor a essas matérias-primas. Uma das dificuldades para a aplicação industrial deste método é o pequeno número de trabalhos específicos sobre biorreatores e como conseqüência, a falta de entendimento das condições de operação dos mesmos. Nesse sentido, esse trabalho teve como fim a avaliação do comportamento transiente de um biorreator de fermentação em estado sólido utilizando *Aspergillus niger* em leito empacotado com múltiplas camadas. A modelagem matemática empregada foi a mesma descrita na literatura (Mitchell et al., Biochemical Engineering Journal, v. 48, 2010) com implementação no simulador de processos EMSO. Foram avaliados os perfis de diferentes variáveis relevantes ao processo, como temperatura e produção de biomassa, em função do tempo. A análise foi realizada para um biorreator com uma única camada e, em seguida, considerando dez camadas conectadas em série. Posteriormente, foi estudada a influência da inserção do termo de troca de calor com as vizinhanças nas equações de balanço de energia pela análise do comportamento da temperatura e biomassa viável no biorreator de dez camadas. Por último, foi analisado o desempenho do sistema para o biorreator com maior número de camadas, variando de dez a trinta.

ÍNDICE

Capítulo I - Introdução	1
I.1 Motivação	5
I.2 Objetivos	6
I.3 Organização do Texto	6
Capítulo II - Revisão Bibliográfica	7
II.1 Biorreatores de fermentação em estado sólido	7
II.1.1 Grupo 1: Biorreatores de bandeja.....	8
II.1.2 Grupo 2: Biorreatores de leito empacotado	9
II.1.3 Grupo 3: Tambores Rotativos e Tambores Agitados.....	11
II.1.4 Grupo 4: Biorreator de mistura contínua com circulação de ar forçado	13
II.1.5 Grupo 4: Biorreator de mistura intermitente com circulação de ar forçado.....	14
II.2 Simuladores de Processos.....	15
II.2.1 O EMSO	15
II.2.2 Motivos para escolha do EMSO	17
Capítulo III – Modelagem Matemática.....	18
III.1 Sistema e operação do biorreator	19
III.1.1 Aproximação de N tanques em série	20
III.1.2 Modelagem térmica bifásica	21
III.2 Desenvolvimento do modelo	22
III.2.1 Sub-Modelo Cinético - Produção de biomassa.....	22
III.2.2 Sub-modelo de equilíbrio/transporte: Balanços de Massa de Água e Balanços de Energia.....	23
III.2.2.1 Balanço de massa de água líquida na fase sólida.....	23
III.2.2.2 Balanço de massa de água líquida na fase gás	24
III.2.2.3 Balanço de energia para a fase sólida.....	25
III.2.2.4 Balanço de energia para a fase gasosa.....	25
III.2.3 Isoterma de sorção para medições de atividade de água.....	26
Capítulo IV – Resultados.....	30
IV.1 Condições de operação para as simulações	30
IV.2 Resultados para uma bandeja isolada	32
IV.2.1 Crescimento da Biomassa	32

IV.2.2 Teor de água e temperatura nos sólidos	33
IV.2.3 Temperatura e umidade no gás	38
IV.3 Resultados para dez camadas em série	40
IV.3.1 Crescimento da Biomassa.....	40
IV.3.2 Teor de água e temperatura nos sólidos	42
IV.3.3 Temperatura e umidade no gás	45
IV.4 Estudo da influência do número de pratos.....	47
IV.5 Estudo da influência da troca térmica com a vizinhança	49
Capítulo V - Conclusão	52
Referências Bibliográficas	55
Apêndice	60
A.1 Modelo da simulação do biorreator de leito empacotado de FES sem troca térmica com a vizinhança	60
A.2 Modelo da simulação do biorreator de leito empacotado de FES com troca térmica com a vizinhança	65
A.3 Flowsheet da simulação do biorreator de leito empacotado de FES com uma camada isolada.....	71
A.4 Flowsheet da simulação do biorreator de leito empacotado de FES com dez camadas ligadas em série	72

ÍNDICE DE TABELAS

TABELA 1. PRODUTOS QUE PODEM SER OBTIDOS POR FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO A PARTIR DE DIFERENTES RESÍDUOS E FUNGOS FILAMENTOSOS. RETIRADO DE PINTO <i>ET AL</i> , 2005.....	4
TABELA 2. EQUAÇÕES DO MODELO MATEMÁTICO PARA CADA CAMADA.	28
TABELA 3. VALORES UNIDADES DAS VARIÁVEIS E DOS PARÂMETROS PRESENTES NO MODELO MATEMÁTICO.	31

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1. TRABALHOS PUBLICADOS SOBRE FES E INDEXADOS PELA WEB OF SCIENCE. RETIRADO DE GRAJALES AGUDELO, 2010.	5
FIGURA 2. CARACTERÍSTICAS BÁSICAS DOS TIPOS DE BIORREADORES PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO, CLASSIFICADOS DE ACORDO COM A AGITAÇÃO E A AERAÇÃO. RETIRADO DE DE LIMA, 2009.	8
FIGURA 3. DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DO BIORREATOR EM BANDEJA. RETIRADO DE ALI E ZULKALI, 2011.	9
FIGURA 4. DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DO BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO COM FLUXO DE AR VERTICAL E HORIZONTAL. RETIRADO DE ALI E ZULKALI, 2011.....	10
FIGURA 5. REPRESENTAÇÃO DO REATOR EM LEITO EMPACOTADO COM MÚLTIPLAS CAMADAS. RETIRADO DE MITCHELL ET AL, 2010.....	10
FIGURA 6. DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DO BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO ZYMATIS. RETIRADO DE ALI E ZULKALI, 2011.....	11
FIGURA 7. DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DO BIORREATOR DE TAMBOR ROTATIVO E TAMBOR AGITADO. RETIRADO DE ALI E ZULKALI, 2011.	12
FIGURA 8. DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DE BIORREADORES DE MISTURA CONTÍNUA COM CIRCULAÇÃO DE AR FORÇADO. (A) BIORREATOR DE AGITAÇÃO AERADA. (B) BIORREATOR DE LEITO FLUIDIZADO GÁS-SÓLIDO. RETIRADO DE ALI E ZULKALI, 2011.	14
FIGURA 9 - LAYOUT DO SIMULADOR EMSO.	16
FIGURA 10. ESTRUTURA DE MODELO DE BIORREADORES COMPOSTO DE SUB-MODELOS DE CINÉTICA E DE EQUILÍBRIO/TRANSPORTE. RETIRADO DE MITCHELL ET AL.,2003.	18
FIGURA 11. DETALHES DA GAVETA. RETIRADO DE MITCHELL ET AL, 2010.....	19
FIGURA 12. REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA CAMADA DENTRO DE UMA GAVETA, INDICANDO OS FENÔMENOS BIOLÓGICOS E DE TRANSPORTE CHAVES INCLUÍDOS NO MODELO. RETIRADO DE MITCHELL ET AL.	20
FIGURA 13. EVOLUÇÃO TEMPORAL DE BIOMASSA VIÁVEL, X_v , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA.	33

FIGURA 14. EVOLUÇÃO TEMPORAL DOS SÓLIDOS SECOS, M , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA.	34
FIGURA 15. . EVOLUÇÃO TEMPORAL DO TEOR DE ÁGUA NOS SÓLIDOS, W , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA.....	35
FIGURA 16. EVOLUÇÃO TEMPORAL DO TEOR DE ÁGUA NOS SÓLIDOS, W , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA PARA 200H DE SIMULAÇÃO.	36
FIGURA 17. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA TEMPERATURA NOS SÓLIDOS, T_s , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA, LEVANDO EM CONTA SOMENTE O TERMO DE CRESCIMENTO DE BIOMASSA NO BALANÇO DE ENERGIA DA FASE SÓLIDA.....	37
FIGURA 18. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA TEMPERATURA NOS SÓLIDOS, T_s , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA SEM CONSIDERAR O TERMO TROCA DE ENERGIA SENSÍVEL ENTRE A FASE SÓLIDA E A FASE GASOSA ($h(T_s - T_g)$).....	37
FIGURA 19. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA TEMPERATURA NOS SÓLIDOS, T_s , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA.....	38
FIGURA 20. EVOLUÇÃO TEMPORAL PARA O TEOR DE ÁGUA NO GÁS, H , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA.....	39
FIGURA 21. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA TEMPERATURA DO GÁS, T_g , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM UMA BANDEJA.....	40
FIGURA 22. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA BIOMASSA TOTAL, X_t , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM DEZ CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	41
FIGURA 23. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA BIOMASSA VIÁVEL, X_v , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM DEZ CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	41

FIGURA 24. EVOLUÇÃO TEMPORAL DE SÓLIDOS SECOS, M , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM DEZ CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	42
FIGURA 25. EVOLUÇÃO TEMPORAL DO TEOR DE ÁGUA NOS SÓLIDOS PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM DEZ CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	43
FIGURA 26. EVOLUÇÃO TEMPORAL DO TEOR DE LÍQUIDO NOS SÓLIDOS, W , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM DEZ CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE PARA 200H DE SIMULAÇÃO.	44
FIGURA 27. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA TEMPERATURA DOS SÓLIDOS, T_s , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM DEZ CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	45
FIGURA 28. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA TEMPERATURA DO GÁS, T_g , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM DEZ CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	46
FIGURA 29. EVOLUÇÃO TEMPORAL DO TEOR DE ÁGUA NO GAS, H , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM DEZ CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	46
FIGURA 30. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA BIOMASSA VIÁVEL, X_v , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM VINTE CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	48
FIGURA 31. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA BIOMASSA VIÁVEL, X_v , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO COM TRINTA CAMADAS LIGADAS EM SÉRIE.....	49
FIGURA 32. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA BIOMASSA VIÁVEL, X_v , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO COM DEZ CAMADAS EM SÉRIE PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO CONSIDERANDO A TROCA TÉRMICA COM A VIZINHANÇA.	50
FIGURA 33. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA TEMPERATURA DOS SÓLIDOS, T_s , PARA UM BIORREATOR DE LEITO EMPACOTADO COM DEZ CAMADAS EM SÉRIE PARA FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO CONSIDERANDO A TROCA TÉRMICA COM A VIZINHANÇA.....	51

NOMENCLATURA

A	Área do leito (normal ao fluxo de ar)
A_D	Fator de frequência de morte
a_W	Atividade de água na fase sólida
a_{Wg}	Atividade de água na fase gasosa
C_{PM}	Capacidade calorífica dos sólidos secos
C_{PW}	Capacidade calorífica da água líquida
C_{PA}	Capacidade calorífica do ar seco
C_{PV}	Capacidade calorífica do vapor de água
E_{aD}	Energia de ativação para a morte
G	Fluxo de ar
h	Coefficiente de transferência de calor convectivo
H	Umidade da fase gasosa
H_{IN}	Umidade do ar de entrada
k_D	Constante específica de taxa de mortalidade
k_W	Coefficiente de transferência de massa de água
M	Sólidos secos
R	Constante universal dos gases
P	Pressão dentro do biorreator
t	Tempo
T_{IN}	Temperatura do ar de entrada
T_G	Temperatura do gás
T_S	Temperatura dos sólidos
V	Volume de uma camada do leito
W	Teor de água líquida nos sólidos
W_{sat}	Teor de saturação da água líquida
X_M	Biomassa Máxima
X_T	Biomassa Total
X_V	Biomassa Viável
Y_{XS}	Rendimento real do crescimento de biomassa a partir do substrato

Y_w	Rendimento de água durante o crescimento
Y_Q	Rendimento do calor metabólico durante o crescimento
ε	Porosidade do leito
λ	Entalpia de vaporização da água
μ	Taxa específica de crescimento
μ_{opt}	Taxa de crescimento ótimo sob condições ideais
μ_T	Taxa de crescimento fracionária específica em função da temperatura dos sólidos
μ_w	Taxa de crescimento fracionário específico em função da atividade de água de sólidos
ρ	Densidade do ar (base seca)

Capítulo I - Introdução

A fermentação em estado sólido (FES) pode ser definida como um processo biológico sobre um meio sólido insolúvel, o qual age como suporte físico e como fonte de nutrientes para os microorganismos. A quantidade de água nesse meio deve ser suficiente para garantir o crescimento microbiano e as atividades metabólicas das células, uma vez que não exceda a capacidade de retenção de água do substrato sólido. Este processo usualmente ocorre de forma natural e pode ser utilizado em aplicações industriais para elaborar o produto desejado, quando operado sob condições controladas (Durand *et al.*, 1988; Pandey, 1992; Pandey *et al.*, 2000; Rodriguez, 2005; Rani *et al.*, 2009). Em outras palavras, a FES consiste no processo de crescimento de microorganismos sobre substratos sólidos sem a presença de água livre. A água presente nesses sistemas encontra-se ligada à fase sólida, formando uma fina camada na superfície das partículas (Raimbault, 1998).

Uma das razões do grande sucesso da FES é a ampla gama de produtos que pode ser obtida, tais como alcoóis, polissacarídeos, ácidos, enzimas, fungos e bactérias, com aplicações em indústrias de alimentos, farmacêuticas, de cosméticos e de pigmentos, entre outras. Além destes produtos, a FES pode ser empregada para produzir uma grande variedade de biomoléculas complexas, as quais dificilmente podem ser obtidas por síntese química (Ignatius, 2002). Mas, em alguns casos é necessário fazer um pré-tratamento para adequar o substrato às condições adequadas de cultivo, como por exemplo, redução do tamanho das partículas por hidrólise enzimática, física ou química dos polímeros de açúcar, adição de nutrientes, adequação do pH e umidade e, cozimento com vapor para eliminar contaminantes ou pré-degradar a estrutura molecular (Eduardo, 2009). Outro fator que faz com que a FES seja de interesse para os pesquisadores é a seletividade do microorganismo com o substrato, com uma conseqüente melhora nas condições do processo e um produto final mais puro (Rani *et al.*, 2009).

A FES é uma técnica milenar no Oriente, particularmente na Ásia, para produção de alimentos fermentados, onde o cultivo dos fungos é feito em ausência de água sobre um substrato sólido, como grãos de cereal, feijão e arroz, entre outros. Porém, hoje em dia, em especial no ocidente, a indústria de fermentação dá preferência ao cultivo de fungos e alguns outros microorganismos por fermentação utilizando normalmente substratos líquidos, técnica conhecida como fermentação submersa (FSb) (Ignatius, 2002; Rodriguez, 2005).

Comparando-se a FES com a FSb, pode-se ressaltar uma série de vantagens da FES, dentre as quais destacam-se (Hesseltine, 1972; Aidoo *et al.*, 1982; Lonsane *et al.* 1992; Fernandez *et al.* 1996):

- Menor espaço requerido, pois o baixo conteúdo de umidade possibilita um pequeno volume de reator por massa de substrato usado.
- Menores custos de implantação e energéticos.
- Maior concentração de produtos.
- Menor possibilidade de contaminação devido à menor atividade de água.

No entanto, existem também algumas desvantagens (Hesseltine, 1972; Aidoo *et al.*, 1982; Lonsane *et al.* 1992; Fernandez *et al.* 1996):

- O cultivo em estado sólido é restrito a microorganismos que se adaptem às condições de baixa disponibilidade de água.
- Heterogeneidade térmica do sistema devido à menor capacidade de dissipação de calor através do meio poroso.
- Distribuição desigual de umidade e de substratos o que pode tornar estes não completamente acessíveis aos microorganismos.
- Possibilidade de colapso da matriz porosa durante o processo em decorrência do consumo de substrato.
- Tempos de cultivo costumam ser mais longos.

Mundialmente, as atuais linhas de pesquisa em FES são o enriquecimento protéico de resíduos agroindustriais, onde microorganismos selecionados aumentam o teor protéico desses materiais, de modo a serem utilizados na alimentação humana ou animal, a destoxificação de resíduos, por meio da eliminação de substâncias recalcitrantes que impedem sua aplicação intensiva; e a produção de compostos de alto valor agregado, como enzimas e diferentes metabólitos (Raimbault, 1998; Pandey, 2003). Em escala comercial, uma das principais aplicações da FES é a produção de ácido cítrico a partir de farelo de trigo. Esse processo representa um quinto de todo o citrato produzido anualmente no Japão (Pandey *et al.*, 2001).

Os substratos para FES são, em geral, resíduos ou subprodutos da agroindústria (Pandey, 2003). Farelos, cascas e bagaços são materiais considerados viáveis para a biotransformação. Estes e outros exemplos estão apresentados na Tabela 1. A maioria desses substratos são recursos naturais renováveis e, por serem produzidos em grandes quantidades, algumas vezes, acabam se tornando um problema ambiental. A FES se apresenta, então, como uma alternativa limpa para o descarte desses materiais.

A estrutura da matéria prima tem como seus principais componentes celulose, hemicelulose, lignina, amido, pectina e proteínas, o que os caracteriza como materiais extremamente heterogêneos, e que servem tanto como fonte de carbono e energia quanto de suporte para o crescimento microbiano (Pandey, 2003).

Tabela 1. Produtos que podem ser obtidos por fermentação em estado sólido a partir de diferentes resíduos e fungos filamentosos. Retirado de Pinto *et al*, 2005.

Produto / Processo	Microorganismos principais	Substratos
Enzimas		
Pectinases	<i>Lentinus edodes</i>	Resíduos de frutas
	<i>Aspergillus carbonarius</i>	Farelo de trigo
	<i>Aspergillus niger</i>	Polpa de café
Hemicelulases	<i>Trichoderma longibrachiatum</i>	Farelo de trigo
	<i>Aspergillus tamarii</i>	Farelo de trigo / Sabugo de milho / Bagaço de cana
Celulases	<i>Trichoderma reesei</i>	Palha de trigo
Amilases	<i>Aspergillus niger</i>	Farelo de trigo
	<i>Aspergillus niger</i>	Resíduos de chá
Protease	<i>Rhizopus oryzae</i>	Farelo de trigo
Lipases	<i>Penicillium restrictum</i>	Torta de babaçu
Fitase	<i>Aspergillus niger</i>	Farelo de trigo / Farinha de soja
Tanase	<i>Aspergillus niger</i>	Farelo de trigo
Substâncias orgânicas		
Ácido cítrico	<i>Aspergillus niger</i>	Resíduo de maçã
	<i>Aspergillus niger</i>	Bagaço de cana
	<i>Aspergillus niger</i>	Resíduos de goiaba
	<i>Aspergillus niger</i>	Resíduos de abacaxi
Ácido giberélico	<i>Gibberella fujikoroii</i>	Farelo de trigo
Pigmentos	<i>Monascus purpureus</i>	Arroz
Carotenóides	<i>Penicillium sp.</i>	Sabugo de milho
Enriquecimento protéico	<i>Penicillium decumbens</i>	Palha de milho
	<i>Rhizopus oligosporus</i>	Farinha de colza
Biorremediação	<i>Pleurotus ostreatus</i>	Materiais lignocelulósicos
Biopolpação	<i>Pleurotus sp.</i>	Farelo de trigo

Diferentes tipos de microorganismos como bactérias, leveduras e fungos filamentosos podem crescer em substratos sólidos (Aidoo *et al.*, 1982). Contudo, são os fungos filamentosos os mais adaptáveis a esse tipo de processo, pois são capazes de crescer em ambiente com pouca água. Além disso, sua forma de crescimento, por meio de hifas, favorece a colonização do meio (Durand, 2003).

Não obstante, devido ao uso potencial de rejeitos sólidos provenientes de atividades agro-industriais, o interesse pelas pesquisas relacionadas à FES cresceu significativamente desde 1990 até hoje, como pode ser observado na Figura 1. Nesta estão resultados compilados da base de dados *Web of Science*, onde o total de artigos publicados advém da busca através da expressão booleana *Bioreactor AND Solid State Fermentation* (Grajales Agudelo, 2010).

É de se observar que enquanto há um crescimento expressivo no total de artigos científicos sobre FES, o número de trabalhos específicos sobre biorreatores permanece estável e em pequeno número, revelando uma carência de pesquisas com este enfoque.

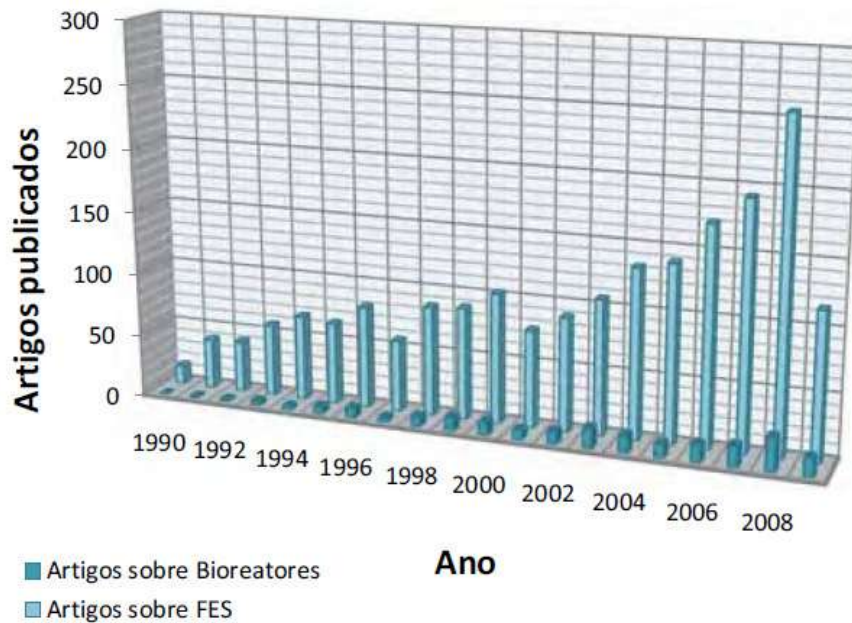


Figura 1. Trabalhos publicados sobre FES e indexados pela Web of Science. Retirado de Grajales Agudelo, 2010.

I.1 Motivação

Diante do pequeno número de trabalhos específicos sobre biorreatores para FES, o conhecimento dos mecanismos de transferência de calor e das condições de operação em reatores de FES mostra-se fundamental, sendo uma importante ferramenta para o projeto de reatores e para o controle dos processos fermentativos (Saucedo-castañeda *et al.*, 1990).

I.2 Objetivos

Tendo em vista que o aumento de escala de biorreatores para FES é fortemente dependente do profundo entendimento das condições de operação do mesmo, esse trabalho teve como fim a avaliação do comportamento transiente de um biorreator em fermentação em estado sólido utilizando *Aspergillus niger* em leito empacotado com múltiplas camadas. Para tal, a abordagem de Mitchell *et al.*, 2010 para a modelagem matemática do biorreator em FES foi implementada no simulador de processos EMSO. As simulações tiveram como objetivo a avaliação do perfil de variáveis relevantes ao processo, como temperatura e produção de biomassa, para uma única camada e diferentes camadas do biorreator.

I.3 Organização do Texto

Este trabalho está dividido em cinco capítulos, organizados como se segue. O capítulo I apresenta a introdução com a contextualização do cenário industrial, motivação e objetivos do trabalho. Já o capítulo II contém a revisão bibliográfica sobre o funcionamento e projeto de diferentes tipos de biorreatores para FES e uma descrição sucinta sobre o pacote de simulação de processos escolhido, o EMSO. No capítulo III está a modelagem matemática, a descrição do sistema a ser tratado, as suposições levantadas no modelo e o equacionamento resultante. O capítulo IV, por sua vez, traz os resultados obtidos com as simulações. Por fim, o capítulo V encerra o trabalho com as conclusões em relação aos resultados e sugestões para trabalhos futuros. Ao final, se encontra o apêndice com os códigos de programação das modelagens feitas no simulador EMSO.

Capítulo II - Revisão Bibliográfica

II.1 Biorreatores de fermentação em estado sólido

Nos processos de fermentação, o biorreator deve criar um ambiente adequado para o crescimento e atividade dos microorganismos. Para isto, os biorreatores para FES devem possuir as seguintes características (Raghavarao *et al.*, 2002):

- Prevenir a entrada de organismos contaminantes.
- Evitar a emissão de microorganismos, produtos e substrato para o ambiente.
- A arquitetura interna tem que promover aeração eficiente, para levar oxigênio aos organismos e remover calor metabólico.
- Manter a uniformidade e integridade do substrato.
- Facilitar as etapas do processo como preparação do substrato, esterilização, recuperação de biomassa e carga e descarga do equipamento.

O projeto de biorreatores em FES pode ser baseado em semelhanças de operação que permite dividi-los em grupos. Neste trabalho, a divisão terá como base suas formas de mistura e aeração, como exemplificado na Figura 2.

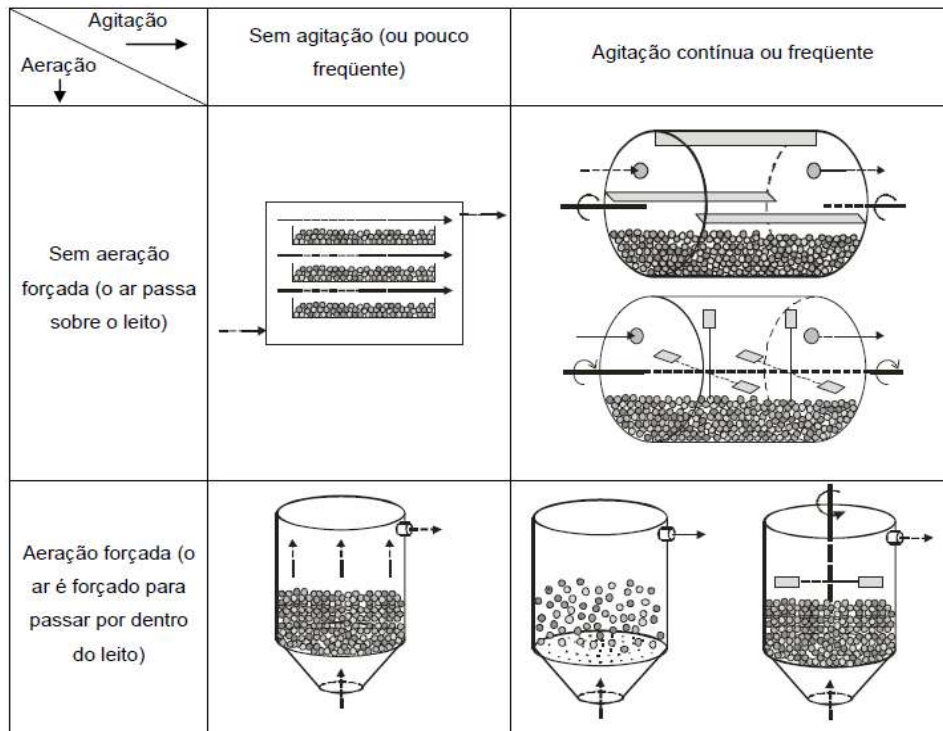


Figura 2. Características básicas dos tipos de biorreatores para fermentação em estado sólido, classificados de acordo com a agitação e a aeração. Retirado de De Lima, 2009.

Os biorreatores, nesse estudo, serão divididos em quatro grupos como se segue.

Grupo 1: Aeração não-forçada, sem mistura

Grupo 2: Aeração Forçada, sem mistura

Grupo 3: Aeração não forçada, mistura contínua ou intermitente

Grupo 4: Aeração Forçada, mistura contínua ou intermitente

II.1.1 Grupo 1: Biorreatores de bandeja

São os mais simples biorreatores usados em FES. As bandejas podem ser construídas usando madeira, metal (ferro ou alumínio) ou plástico. Se for de ferro, deve ser de aço inoxidável ou pintado para evitar corrosão.

O fundo da bandeja deve ser perfurado de modo a sustentar o substrato e permitir a aeração.

Usualmente as bandejas são organizadas umas sobre as outras com espaçamento adequado entre elas, a camada de meio sólido é de no máximo

15 cm. Um esquema representativo do biorreator de bandeja é mostrado na Figura 3. As bandejas são colocadas em uma câmara onde o ambiente é criado para manter a temperatura e umidade durante a fermentação. O topo da bandeja é normalmente aberto, a base e os lados podem ser perfurados para permitir a aeração. A temperatura é geralmente controlada pela circulação de ar. A fermentação do koji é tradicionalmente feita em biorreatores de bandeja desde que começou a ser produzido em escala comercial.

Muitas modificações na estrutura têm sido propostas e usadas de modo a melhorar a eficiência do processo e melhorar a manipulação.

Biorreatores de bandeja têm sido usadas em escala de laboratório, de planta piloto e em escala industrial (Pandey *et al.*, 2001). Entretanto, esses biorreatores requerem uma área operacional grande, trabalho intensivo e não permitem a manipulação mecânica. Por estas razões, não são de uso atrativo.

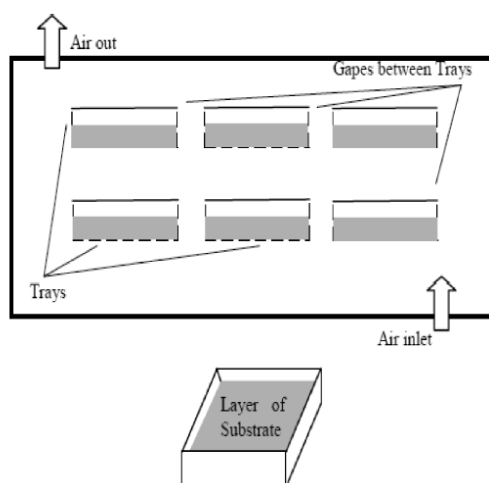


Figura 3. Diagrama esquemático do biorreator em bandeja. Retirado de Ali e Zulkali, 2011.

II.1.2 Grupo 2: Biorreatores de leito empacotado

Este tipo de biorreator é operado sob condições onde aeração é forçada e o leito de substrato não sofre mistura. Este modo de operação é apropriado para os processos em FES em que não é desejável a mistura no leito durante a fermentação devido aos efeitos deletérios sobre o crescimento microbiano, ou seja, o uso deste biorreator é o mais indicado para processos

utilizando fungos filamentosos, uma vez que a mistura danifica a estrutura das hifas.

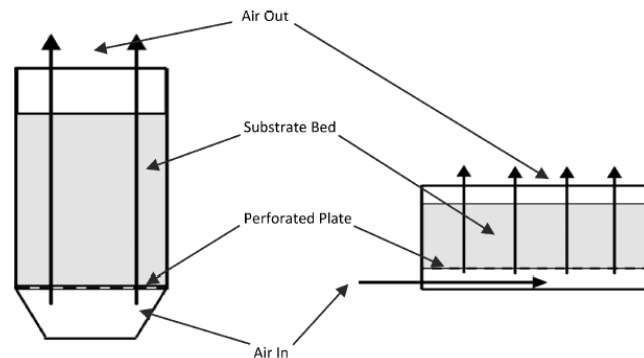


Figura 4. Diagrama esquemático do biorreator de leito empacotado com fluxo de ar vertical e horizontal. Retirado de Ali e Zulkali, 2011.

Devido ao fluxo unidirecional de ar, é impossível não haver um aumento na temperatura entre o ar que entra e o que sai do reator. Uma estratégia para minimizar esse aumento de temperatura em reatores de leito empacotado é a divisão do leito em camadas, criando o “leito empacotado em múltiplas camadas”, representado pela Figura 5 (Lu *et al.*, 1998).

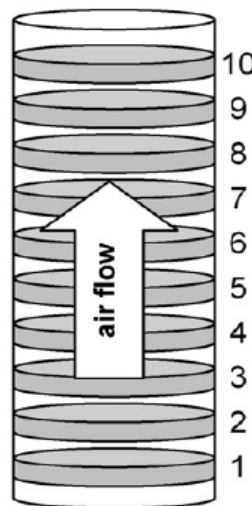


Figura 5. Representação do reator em leito empacotado com múltiplas camadas. Retirado de Mitchell *et al.*, 2010.

A fim de reduzir a necessidade de uma aeração forte, foi desenvolvido por Roussos *et al.*, 1993, o biorreator de leito compactado Zymatis. Neste projeto, a remoção de calor é feita pela inserção de placas de transferência de calor estreitamente espaçadas internamente no leito, como mostra a Figura 6.

Assim os gradientes de temperatura nesse biorreator são menores comparados aos biorreatores de leito compactado tradicionais.

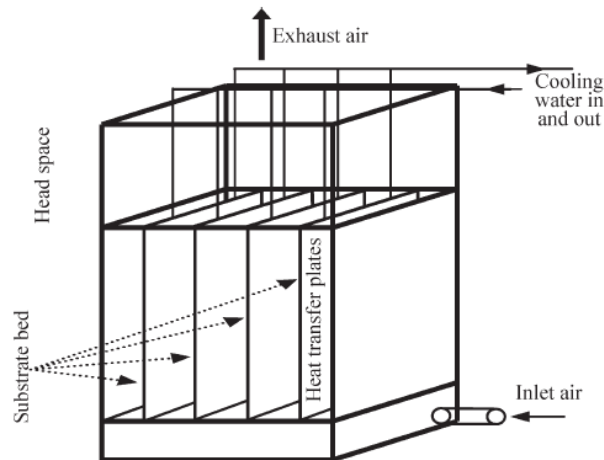


Figura 6. Diagrama esquemático do biorreator de leito empacotado Zymatis. Retirado de Ali e Zulkali, 2011.

O principal problema associado à ampliação de escala dos biorreatores de leito empacotado é a remoção do calor gerado pelas atividades metabólicas dos microorganismos. As altas temperaturas nos processos fermentativos podem comprometer o metabolismo microbiano e desnaturar enzimas, de modo que o controle desta variável é chave para ter um processo estável e de produtividade elevada (Rani *et al.*, 2009).

II.1.3 Grupo 3: Tambores Rotativos e Tambores Agitados

O leito nestes tipos de biorreatores é misturado de forma contínua ou intermitente e com uma frequência de minutos a horas. O ar é circulado através do *headspace*, que é a fração gasosa superior ao leito do biorreator do leito, mas não de maneira forçada. Dois biorreatores tem esse modo de operação, usando diferentes mecanismos para agitação, o tambor rotativo e o tambor agitado (Ali e Zulkali, 2011)..

O biorreator de mistura intermitente funciona como um biorreator de bandeja durante o período estático e como um biorreator de rotação contínua durante o período de rotação. Devido às condições do período de estática, é necessário limitar a altura do leito de substrato, a fim de se alcançar uma boa

transferência de O_2 e CO_2 e evitar o acúmulo de calor no substrato (Ali e Zulkali, 2011).

Os biorreatores de tambor rotativo consistem de um cilindro horizontal que gira ao redor de seu eixo. A entrada de ar costuma ser localizada em uma das extremidades do cilindro, e a saída na oposta. Os biorreatores de tambor agitado possuem pás para agitação interna, promovendo uma maior homogeneização dos perfis de temperatura e de concentração no leito. A Figura 7 apresenta um diagrama esquemático desses biorreatores. Muitas vezes, biorreatores de tambor agitado permitem a instalação de bicos aspersores de água, além de encamisamento. Estes dispositivos, junto com a própria agitação, permitem um melhor controle e homogeneidade da temperatura no leito (Nagel *et al.*, 2001), através do resfriamento evaporativo e troca convectiva nas paredes.

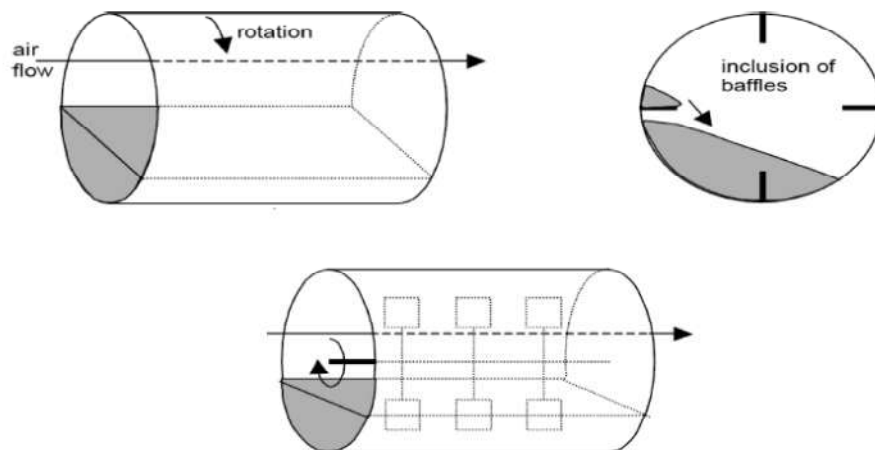


Figura 7. Diagrama esquemático do biorreator de tambor rotativo e tambor agitado. Retirado de Ali e Zulkali, 2011.

Apesar da redução dos gradientes no interior do leito em comparação com as bandejas, muitas culturas de fungos não se desenvolvem adequadamente devido às forças de cisalhamento (Pandey *et al.*, 2001).

II.1.4 Grupo 4: Biorreator de mistura contínua com circulação de ar forçado

Os biorreatores desta classe podem ser agrupados de acordo com a forma que o leito é agitado. Eles podem ser semelhantes aos tambores agitados, que utilizam misturadores mecânicos, semelhantes aos tambores rotativos, que realizam a rotação do corpo do biorreator, e também podem ser homogeneizados através do movimento do ar. Neste último caso, são denominados biorreatores de leito fluidizado (De Lima, 2009).

Biorreatores de leito fluidizado são cilindros verticais dentro dos quais existe uma placa perfurada onde o ar é forçado a passar em alto fluxo, suspendendo o sólido e permitindo que a mistura do sólido-ar atue como um fluido. A altura do biorreator deve ser o suficiente para permitir que o leito seja fluidizado. A maior vantagem deste tipo de biorreator é a alta taxa de transferência de calor e aeração, resultante da enorme área da interface do sólido com o ar (De Lima, 2009).

Existem inúmeras maneiras diferentes em que biorreatores podem ser agitados, portanto, biorreatores deste grupo podem ter aparências bastante distintas, dependendo de como a agitação é obtida, como mostrado nas Figuras 8 e 9. As eficiência de mistura e aeração variam significativamente com esses designs.

A capacidade e eficácia dos biorreatores em leito fluidizado de gás-sólido dependem das propriedades do substrato. Se o substrato é pegajoso, formará grandes aglomerados que não poderão ser fluidizados.

O substrato deve ter o mesmo tamanho de partícula. Quando há diferenças de tamanho, as partículas de pequeno tamanho tendem a fluidizar mais que as maiores.

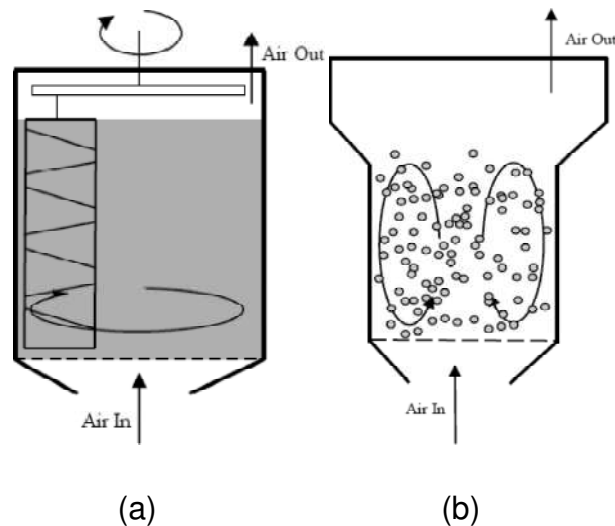


Figura 8. Diagrama esquemático de biorreatores de mistura contínua com circulação de ar forçado. (a) Biorreator de agitação aerada. (b) Biorreator de leito fluidizado gás-sólido. Retirado de Ali e Zulkali, 2011.

II.1.5 Grupo 4: Biorreator de mistura intermitente com circulação de ar forçado

Biorreatores de agitação intermitente permitem que a água seja adicionada de modo relativamente uniforme durante os períodos de movimento do leito. Esta estratégia de cultivo pode ser uma solução promissora, uma vez que muitos processos com fungos conseguem tolerar eventos infreqüentes de agitação sem sofrer efeitos deletérios sobre o crescimento cinético, se os períodos de agitação forem relativamente curtos (De Lima, 2009).

A aeração forçada possibilita a utilização de leitos maiores do que os biorreatores de bandejas, em virtude da disponibilidade de oxigênio e da remoção do calor através dos mecanismos de convecção e evaporação.

Em geral, estes biorreatores podem ser descritos como os de leito empacotado onde ar passa através do leito. Um dispositivo de agitação, que pode ser pás mecânicas ou fluxo de ar, é usado para misturar o leito periodicamente e ao mesmo tempo, água é borrifada se necessário. Estes biorreatores possuem as vantagens dos biorreatores de mistura intermitente tal como a prevenção da queda de pressão no leito.

II.2 Simuladores de Processos

Simuladores de processos são programas computacionais que visam a representação do comportamento de um processo sob certas condições de operação, sendo indispensáveis no atual cenário tecnológico. Conseqüentemente, se tornam foco de muita pesquisa e desenvolvimento para melhorar suas performances (Nunes e Raoni, 2011).

Para utilizar um simulador, os modelos devem conter todas as equações matemáticas ou sequências lógicas que representem um equipamento ou fenômeno. O modelo deve ser capaz de gerar saídas a partir de dados de entrada, que devem ser fornecidas pelo usuário. Além disso, a fim de haver conexão entre os modelos, é recomendado que haja um padrão nas correntes de entrada e saída de cada modelo (ou seja, elas devem possuir as mesmas variáveis).

II.2.1 O EMSO

EMSO é a sigla para *Environment for Modeling, Simulation and Optimization*, sendo este um *software* de simulação de processos do projeto ALSOC. Sua construção foi iniciada em 2001, pelo então aluno de mestrado da Universidade Federal do Rio Grande do Sul Rafael de Pelegrini Soares. ALSOC é a sigla utilizada para identificar o projeto de um **A**mbiente **L**ivre para **S**imulação, **O**timização e **C**ontrol de Processos, que é o resultado de um esforço da aproximação universidade-indústria através da padronização e distribuição sem custo de especificações e ferramentas de *software* entre universidades e empresas consorciadas (Nunes e Raoni, 2011).

No EMSO tem-se um ambiente gráfico onde o usuário pode representar processos complexos simplesmente selecionando e conectando os modelos dos equipamentos, em forma de blocos. Na maioria dos casos, os modelos disponíveis na biblioteca de modelos do EMSO (EML - *EMSO Modeling*

Library) podem ser utilizados sem modificações. Mas, se houver em um sistema algum equipamento inexistente na EML, o usuário pode desenvolver seus próprios modelos utilizando a linguagem de modelagem do sistema.

A linguagem de modelagem do EMSO se apresenta na forma equacional, não envolvendo a programação dos métodos numéricos associados à sua resolução. Por essa simplicidade do código, a elaboração de novos equipamentos e sua modelagem é facilitada.

Para elaborar as simulações de processo deste trabalho, utilizaram-se basicamente dois arquivos. O primeiro foi um modelo representativo de uma camada do biorreator de leito empacotado apresentando as devidas equações para sua modelagem, suas variáveis, parâmetros e condições iniciais. O segundo foi o *Flow Sheet*, que representa o processo com as conexões dos modelos representativos. Por exemplo, na simulação de um biorreator de 10 camadas, essas foram conectadas pelo comando *CONNECTIONS*. A Figura 9 apresenta o layout do programa.

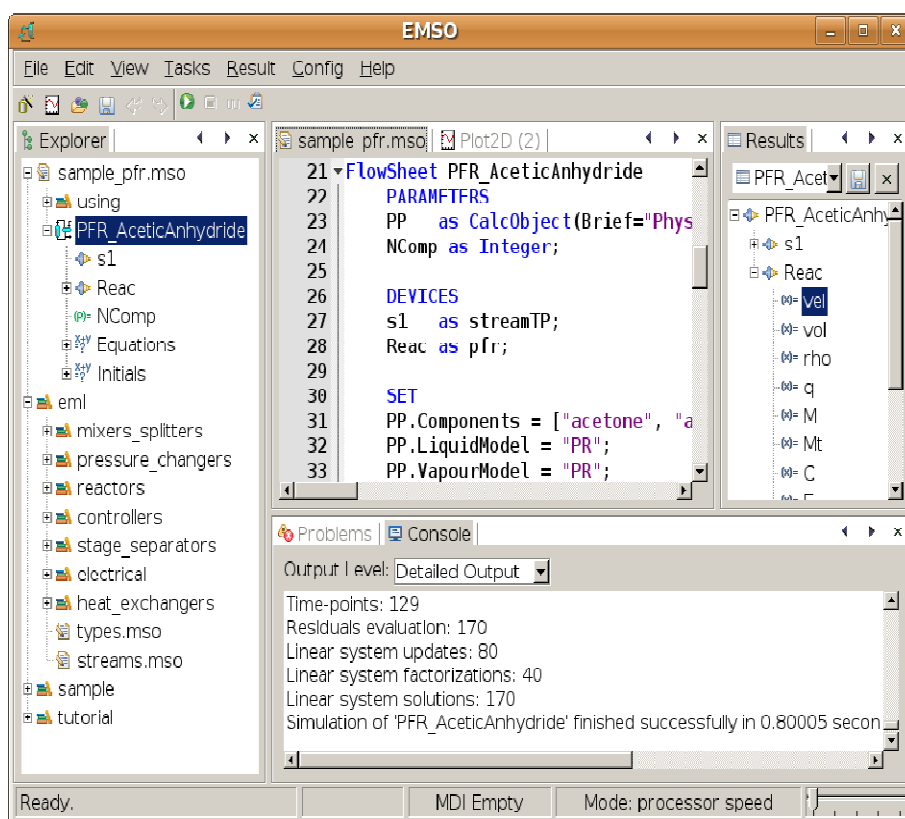


Figura 9 - Layout do simulador EMSO.

II.2.2 Motivos para escolha do EMSO

A escolha do simulador EMSO como o simulador utilizado neste trabalho se deu basicamente por este ser um simulador orientado a equações. Isso implica que:

- Os métodos numéricos para a resolução das equações dos modelos, além destes, são separados.
- Os modelos são escritos em linguagem própria de modelagem.
- Os códigos de modelagem são abertos, o que possibilita estudos e elaborações de diferentes modelos.
- O EMSO foi elaborado com um sistema orientado a objetos, facilitando assim a criação de novos modelos a partir de outros já existentes.

Além disso, o EMSO ainda apresenta mais vantagens fundamentais para a sua escolha, tais como:

- Gratuidade para uso acadêmico e instituições de pesquisa.
- Realização de simulações dinâmicas.
- Eficiência computacional.
- Facilidade de manipulação dos resultados, podendo exportá-los em formato de arquivo de Excel.

Capítulo III – Modelagem Matemática

A modelagem matemática é uma ferramenta essencial para a otimização de bioprocessos. Ela não só pode orientar os modelos de projeto e operação de biorreatores, como também pode fornecer entendimentos de como os vários fenômenos dentro do sistema de fermentação se combinam para controlar o desempenho global do processo. No entanto, somente a partir da última década que esforços significativos foram realizados para desenvolver modelos matemáticos de fermentação em estado sólido (FES).

Modelos de biorreatores podem ser considerados com dois sub-modelos: o sub-modelo de cinética e o sub-modelo de equilíbrio/transporte como apresentado na Figura 9.

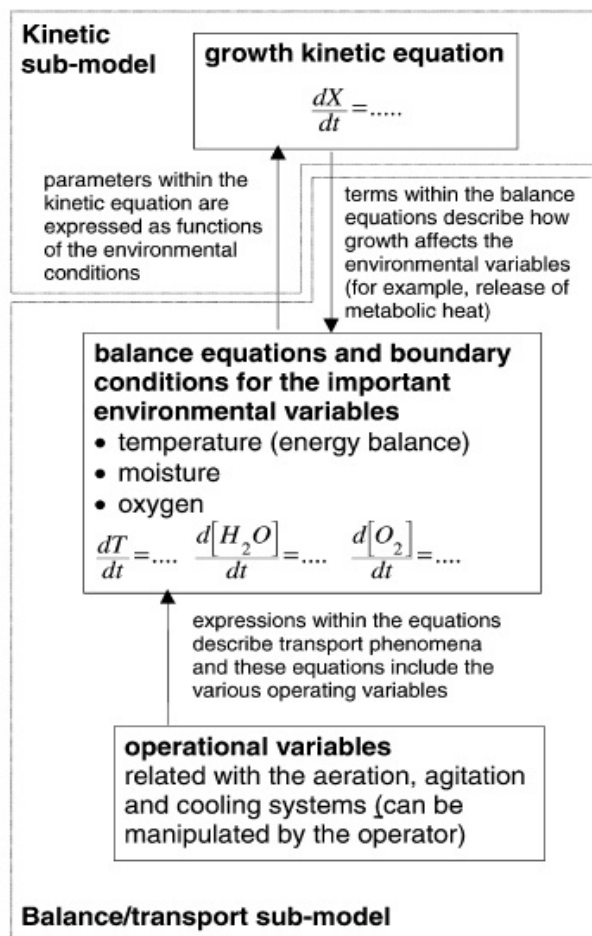


Figura 10. Estrutura de modelo de biorreatores composto de sub-modelos de cinética e de equilíbrio/transporte. Retirado de Mitchell *et al.*,2003.

O sub-modelo de equilíbrio/transporte descreve a transferência de massa e de calor que ocorre nas fases sólida, líquida, gasosa e entre elas, enquanto o sub-modelo de cinética descreve como a taxa de crescimento do microorganismo afeta as variáveis chaves do ambiente como temperatura, umidade, produção de calor, etc. (Mitchell *et al.*,2003).

III.1 Sistema e operação do biorreator

Este trabalho trata de um biorreator de leito empacotado em multi camadas, onde o ar é alimentado na parte inferior do biorreator e o deixa no topo (Mitchell *et al.*, 2010). Portanto, esse biorreator se classifica como do Grupo 2 (ver seção II.1.2). O biorreator analisado por Mitchell *et al.*, 2010, possui dez camadas individuais de substrato, cada uma com dez centímetros de altura, de tal forma que a altura total do leito no biorreator é 1 metro, ou seja, não foi considerado o espaçamento entre as gavetas. Cada camada de substrato é mantida em uma gaveta com uma base perfurada como mostra a Figura 10. Considera-se que o ar é forçado a passar através do leito de substrato em cada camada e que não há transferência de calor através das paredes laterais das gavetas, como apresentado na Figura 11.

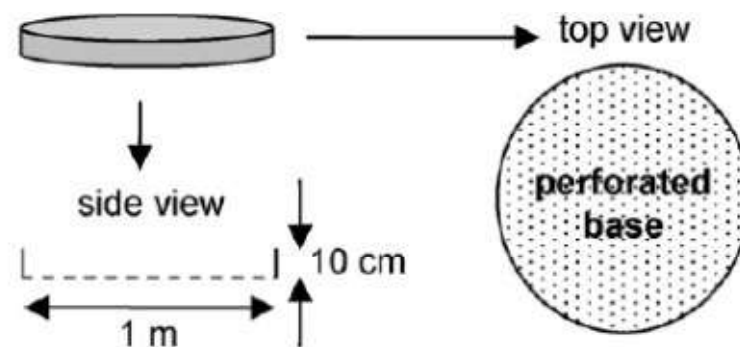


Figura 11. Detalhes da gaveta. Retirado de Mitchell *et al.*, 2010.

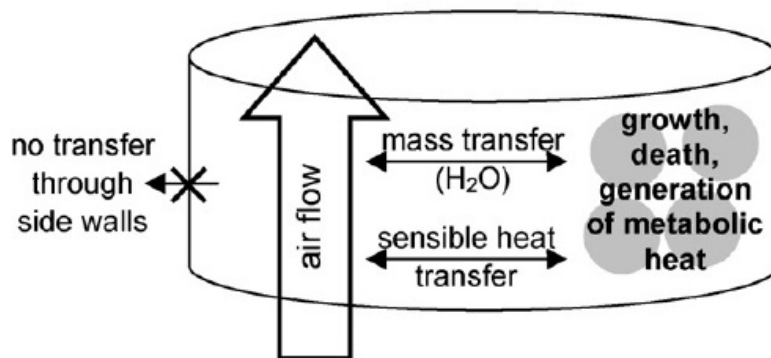


Figura 12. Representação esquemática da camada dentro de uma gaveta, indicando os fenômenos biológicos e de transporte chaves incluídos no modelo. Os círculos em cinza representam as partículas de substrato que constituem a fase sólida. Retirado de Mitchell et al.

Cada camada individual do biorreator possui um conteúdo de massa seca total (incluindo a biomassa, substrato disponível e substrato residual), não existindo gradientes espaciais de temperatura, umidade e concentração de biomassa em qualquer momento. Portanto, a modelagem é toda baseada na aproximação de parâmetros concentrados (Incropera, 2003).

Além disso, os modelos matemáticos deste trabalho consideram as seguintes hipóteses:

- O balanço de massa de oxigênio não é considerado, pois estudos anteriores mostram que em biorreatores aerados, a transferência de oxigênio não é um fator limitante (Gowthaman *et al.*, 1993).
- Não há queda de pressão no leito.
- Não há gradientes radiais pela abordagem de parâmetros concentrados.
- A porosidade do leito é constante, desconsiderando os efeitos espaciais do crescimento do microorganismo no leito.

III.1.1 Aproximação de N tanques em série

A abordagem de N tanques em série simplifica a modelagem heterogênea espacial de biorreatores na FES, evitando o aparecimento de equações diferenciais parciais. Esta abordagem já foi usada com sucesso anteriormente na modelagem de transferência de calor e de massa em reatores

de leito empacotado em FES (Mitchell et al., 2010; Sahir e Kumar, 2007) e é uma técnica bem estabelecida da engenharia química. Apesar de diferenças finitas (Mitchel e von Meien, 2002) e colocação ortogonal (Mitchell e Von Mein,2000; Sangsurasak e Mitchell,1998) serem utilizados para resolver equações diferenciais parciais em modelos de biorreatores em FES, a aplicação destes métodos numéricos requer conhecimento especializado e conduz para programas computacionais bastante complexos. A abordagem de N tanques em série conduz apenas à equações diferenciais ordinárias, que podem ser facilmente empregadas, especialmente para geometrias simples, como cúbica, mapeando por completo o espaço do reator, apenas variando o número de tanques.

Sendo assim, a metodologia de N tanques em série foi adotada para discretizar o espaço axial do biorreator em tanques bem misturados de tal forma que a homogeneidade espacial de potenciais escalares como temperatura e biomassa dentro das camadas do biorreator possa ser assegurada. Nos modelos utilizados neste trabalho, cada camada de 10 cm de altura, é modelada como um único tanque de mistura perfeita. Sendo assim, como no reator há 10 camadas, são 10 tanques conectados em série.

III.1.2 Modelagem térmica bifásica

Para a avaliação térmica de leitos recheados com partículas fixas percoladas por ar, há dois tipos de modelagem que podem ser feitas: a modelagem de duas fases e a de uma fase, sendo esta última também chamada de pseudo-homogênea. Em muitos modelos o estado pseudo-homogêneo é assumido, ou seja, as fases de sólido e de ar inter-partícula não são tratados separadamente, pela suposição de equilíbrio térmico e umidade entre eles. Tais hipóteses são prováveis naqueles casos onde a água é adicionada de forma intermitente durante a operação. Em configurações de leito fixo, que são desprovidos de mistura, a atividade de água do substrato muda durante o crescimento dos fungos (von Meien e Mitchell, 2002). Portanto, para o presente estudo, o modelo matemático para o leito empacotado em multi camadas deve

tratar as fases sólida e gás separadamente e incluir a transferência de massa de água entre eles.

III.2 Desenvolvimento do modelo

A presente seção aborda as equações utilizadas no modelo matemático implementado no software EMSO. Ela se divide em três subseções. A primeira é referente às equações diferenciais que constituem o sub-modelo cinético, ou seja, as equações de variação temporal da biomassa total, da biomassa viável e dos sólidos secos totais (biomassa viva e morta, além do substrato). A segunda subseção representa o sub-modelo de equilíbrio/transporte, onde se encontra as equações de balanço de massa de água na fase sólida e na fase gasosa e os balanços de energia nessas mesmas fases. A última subseção apresenta alguns cálculos auxiliares e as considerações adotadas no modelo em termos das isotermas de sorção para medições de atividade de água.

III.2.1 Sub-Modelo Cinético - Produção de biomassa

A produção de biomassa fúngica é descrita por uma equação logística de crescimento. Na fermentação em estado sólido (FES), a temperatura pode aumentar além da temperatura ideal, causando morte celular. A biomassa total (X_t , Kg de biomassa/Kg de sólidos) é, portanto, composta de células vivas e mortas. Por sua vez, a biomassa viável (X_v , Kg de biomassa/Kg de sólidos) é constituída da biomassa total menos a biomassa morta.

A variação da biomassa total (X_t , Kg de biomassa/Kg de sólidos) e a variação da biomassa viável (X_v , Kg de biomassa/Kg de sólidos) em uma camada são escritas respectivamente como:

$$\frac{dX_t}{dt} = \mu X_v \left(1 - \frac{X_t}{X_m}\right) \quad (1)$$

$$\frac{dXv}{dt} = \mu Xv \left(1 - \frac{Xt}{Xm}\right) - k_D Xv \quad (2)$$

onde k_D é a taxa específica de morte (h^{-1}), Xm é a biomassa máxima e μ é a taxa específica de crescimento (h^{-1}).

É importante mencionar que a biomassa viável e outras variáveis utilizadas nesse modelo são de difícil medição na fermentação em estado sólido. No entanto, o enfoque desse trabalho é o modelo matemático em si, de modo que os problemas de medição associados não serão discutidos.

O balanço temporal de massa de sólidos secos totais (M , Kg sólidos/ m^3), isto é, a soma da biomassa seca e de substrato residual seco, é necessário, pois nem todo o substrato consumido é convertido em biomassa, uma vez que uma porção é perdida na forma de CO_2 e outros produtos. Esse balanço segue a Equação 3.

$$V \frac{dM}{dt} = V \frac{1 - \left(\frac{1}{Y_{XS}}\right)}{1 - Xt \left(\frac{1}{Y_{XS}}\right)} M \frac{dXt}{dt} \quad (3)$$

onde Y_{XS} (Kg de biomassa/Kg substrato) representa o rendimento real do crescimento de biomassa a partir do substrato e V (m^3) o volume de uma camada do leito.

A modelagem do termo de morte celular k_D apresentado na Equação 2 é baseado em formulações completamente empíricas (Mitchell *et al.*, 2002) e sua equação está na Tabela 2. A equação de μ será abordada em uma próxima seção (Seção III.2.3).

III.2.2 Sub-modelo de equilíbrio/transporte: Balanços de Massa de Água e Balanços de Energia

II.2.2.1 Balanço de massa de água líquida na fase sólida

A variação temporal do teor de água líquida no sólido (W , Kg água/Kg sólido) é descrita pela Equação 4:

$$V \frac{d(WM)}{dt} = Y_w V \frac{d(XvM)}{dt} - k_w (W - W_{sat}) V \quad (4)$$

onde Y_w (Kg de água/Kg substrato) representa o rendimento de água durante o crescimento microbiano, k_w (Kg de sólidos/s/m³) o coeficiente de transferência de massa de água, sendo sua equação empírica (Marques *et al.*,2006) e apresentada na Tabela 2 e W_{sat} (Kg água/kg sólido) o teor de água que os sólidos teriam se estivessem em equilíbrio com a fase gás. O cálculo do teor de água, W_{sat} , será abordado na Seção III.2.3.

Pode-se perceber que a variação temporal do teor de água líquida no sólido é afetada pela produção metabólica de água durante o crescimento fúngico (primeiro termo do lado direito da equação) e pela transferência evaporativa de água entre a fase sólida e a fase gasosa (segundo termo do lado direito da equação).

II.2.2.2 Balanço de massa de água líquida na fase gás

A variação temporal do vapor de água na fase gasosa (H , Kg de vapor/Kg ar seco) se encontra na Equação 5.

$$V \varepsilon \rho \frac{dH}{dt} = GA(H_{in} - H) + k_w(W - W_{sat})V \quad (5)$$

sendo que ε , ρ (Kg de ar seco/m³), G (J/mol) e A (m²) representam, respectivamente, a porosidade do leito, a densidade do ar, o fluxo de ar e a área transversal de uma camada do leito.

De acordo com a Equação 5, a variação do vapor de água na fase gasosa é afetada pela diferença entre a vazão mássica do vapor d'água que entra e a que sai da bandeja do reator (primeiro termo do lado direito da equação), e também pela transferência de massa devido à evaporação de

água da fase sólida para a fase gasosa (segundo termo do lado direito da equação), de acordo com a equação abaixo.

III.2.2.3 Balanço de energia para a fase sólida

A variação temporal da energia sensível na fase sólida é descrita pela Equação 6.

$$VM(C_{PM} + C_{PW}W) \frac{dT_S}{dt} = VY_Q M \frac{dX}{dt} - h(T_S - T_G)V - k_W(W - W_{sat})V\lambda \quad (6)$$

onde T_S ($^{\circ}\text{C}$), C_{PM} (J/Kg água/ $^{\circ}\text{C}$), C_{PW} (J/Kg ar seco/ $^{\circ}\text{C}$), Y_Q (J/Kg de biomassa), h (J/s/m³/ $^{\circ}\text{C}$), T_G ($^{\circ}\text{C}$) e λ (J/Kg de água) representam, respectivamente, a temperatura do sólido, a capacidade calorífica dos sólidos secos, a capacidade calorífica da água líquida, o rendimento do calor metabólico durante o crescimento microbiano, o coeficiente de transferência de calor convectivo, a temperatura do gás e a entalpia de vaporização da água. A correlação de h é empírica (Marques *et al*,2006) e apresentada na Tabela 2.

Pela análise da Equação 6 nota-se que a variação temporal da energia sensível na fase sólida depende da liberação de calor metabólico perdido no processo de crescimento do microorganismo (primeiro termo do lado direito da equação), da troca de energia sensível entre os sólidos e a fase gasosa (segundo termo do lado direito da equação) e da remoção de energia do sólido como calor latente de evaporação (terceiro termo do lado direito da equação).

III.2.2.4 Balanço de energia para a fase gasosa

A variação temporal da energia sensível da fase gasosa (ar seco e vapor de água no ar) dentro do leito é apresentada na Equação 7.

$$V\varepsilon\rho(C_{PA} + C_{PV}H) \frac{dT_G}{dt} = GAC_{PA}(T_{in} - T_G) - GAC_{PV}(H_{in}T_{in} - HT_G) + h(T_S - T_G)V \quad (7)$$

onde C_{PA} (J/Kg de água/ °C) e C_{PV} (J/Kg de água/ °C) representam, respectivamente, a capacidade calorífica do ar seco e do vapor de água.

A variação temporal da energia sensível da fase gasosa é função da variação entre a energia sensível do ar seco que entra e sai pelo fluxo de ar (primeiro termo do lado direito da equação), da variação entre a energia sensível do vapor de água que entra e sai pelo fluxo de ar (segundo termo do lado direito da equação) e da troca de energia sensível entre os sólidos e a fase gasosa (terceiro termo do lado direito da equação).

III.2.3 Isoterma de sorção para medições de atividade de água

Como os processos dentro do biorreator são afetados pelos fenômenos de transporte de calor e de transferência de umidade, a taxa específica de crescimento (μ, h^{-1}), é modelada como função da temperatura e atividade de água dos sólidos. Estudos anteriores (Mitchell *et al.*, 2002) propuseram uma equação na qual μ é a média geométrica de cada fração de taxa específica de crescimento.

$$\mu = \mu_{opt} \sqrt{(\mu_T \mu_W)} \quad (8)$$

onde μ_{opt} (h^{-1}) é a taxa de crescimento ótimo sob condições ideais, μ_T (adimensional) é a taxa de crescimento fracionária específica em função da temperatura dos sólidos e μ_W (adimensional) é a taxa de crescimento fracionário específico em função da atividade de água de sólidos. As equações de μ_T e μ_W são correlações empíricas e encontram-se na Tabela 2.

Para calcular μ_W , a atividade de água dos sólidos na fermentação (a_W), a qualquer tempo t , é necessária.

Estudos anteriores (Marques *et al.*, 2006) compararam isotermas da soja natural e de soja fermentada com *Rhizopus oryzae* e concluíram que o efeito da biomassa microbiana na isoterma dos sólidos em fermentação deve ser levado em consideração nos modelos matemáticos de biorreatores de fermentação em estado sólido. No entanto, quase todos os modelos atuais

assumem implicitamente que a isoterma de sólidos em fermentação é igual a isoterma do substrato em si.

O presente modelo leva em conta que a isoterma de sorção do material sólido muda, uma vez que parte do substrato sólido original é convertida em biomassa fúngica (Marques *et al.*, 2006). Isso é feito usando a equação de Handerson para descrever isotermas de sorção para o substrato residual sólido (Equação 9) e para a biomassa (Equação 10) separadamente, com os mesmos valores de parâmetros utilizados por Marques *et al.*, 2006. Esses valores foram baseados em estudos utilizando soja como substrato. Dessa forma, o substrato do presente trabalho deve possuir características semelhantes.

$$a_W = 1 - \exp(-4.988 W^{0.7202}) \quad (9)$$

$$a_W = 1 - \exp(-2.5503 W^{0.3596}) \quad (10)$$

O substrato sólido residual e a biomassa são assumidos ter a mesma atividade de água (a_W), portanto o teor de água da fase sólida total (biomassa mais substrato) é dada pela Equação 11, que é resolvida pelo método da biseção de Newton.

$$W = (1 - X_T) \left(\frac{\ln(1 - a_W)}{-4.988} \right)^{1/0.7202} + X_T \left(\frac{\ln(1 - a_W)}{-2.5503} \right)^{1/0.3596} \quad (11)$$

A estratégia utilizada para o cálculo do teor de água que os sólidos teriam se estivessem em equilíbrio com a fase gás (W_{sat}) é a utilizada por Marques *et al.* 2006, pela Equação 12.

$$W_{sat} = (1 - X_T) \left(\frac{\ln(1 - a_{Wg})}{-4.988} \right)^{1/0.7202} + X_T \left(\frac{\ln(1 - a_{Wg})}{-2.5503} \right)^{1/0.3596} \quad (12)$$

Atividade de água na fase gás (a_{Wg}) é necessária para este cálculo e é calculada de acordo com von Meien e Mitchell, 2002.

$$a_{wg} = \frac{P_w}{P_{sat}} \quad (13)$$

onde P_w (Pa) é a pressão de vapor de água na fase gás a uma determinada temperatura e P_{sat} (Pa) é a pressão de vapor saturado de água nessa mesma temperatura. A Equação de Antoine fornece a pressão de saturação (P_{sat}) de vapor de água como uma função da temperatura (T , °C).

$$P_{sat} = 133.322 \exp\left(18.3036 - \frac{3,816.44}{T + 227.02}\right) \quad (14)$$

A umidade na saturação H_{sat} (kg de vapor /kg de ar seco) é dada por:

$$H_{sat} = 0.62413 \frac{P_{sat}}{P - P_{sat}} = \frac{0.62413}{\frac{P}{P_{sat}} - 1} \quad (15)$$

Por fim,

$$a_{wg} = \frac{P}{P_{sat}\left(1 + \frac{0.62413}{H}\right)} \quad (16)$$

As equações utilizadas no modelo estão apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2. Equações do modelo matemático para cada camada.

Equações Diferenciais	
$\frac{dXt}{dt} = \mu Xv \left(1 - \frac{Xt}{Xm}\right)$	(1)
$\frac{dXv}{dt} = \mu Xv \left(1 - \frac{Xt}{Xm}\right) - k_D Xv$	(2)
$V \frac{dM}{dt} = V \frac{1 - \left(\frac{1}{Y_{XS}}\right)}{1 - Xt \left(\frac{1}{Y_{XS}}\right)} M \frac{dXt}{dt}$	(3)
$V \frac{d(WM)}{dt} = Y_w V \frac{d(XvM)}{dt} - k_w (W - W_{sat}) V$	(4)
$V \varepsilon \rho \frac{dH}{dt} = GA(H_{in} - H) + k_w (W - W_{sat}) V$	(5)
$VM(C_{PM} + C_{PW}W) \frac{dT_s}{dt} = VY_Q M \frac{dXt}{dt} - h(T_s - T_G)V - k_w (W - W_{sat})V\lambda$	(6)

Equações para cálculos suplementares	
$\mu = \mu_{opt}\sqrt{(\mu_T\mu_W)}$	(8)
$W = (1 - X_T) \left(\frac{\ln(1 - a_W)}{-4.988} \right)^{1/0.7202} + X_T \left(\frac{\ln(1 - a_W)}{-2.5503} \right)^{1/0.3596}$	(11)
$W_{sat} = (1 - X_T) \left(\frac{\ln(1 - a_{Wg})}{-4.988} \right)^{1/0.7202} + X_T \left(\frac{\ln(1 - a_{Wg})}{-2.5503} \right)^{1/0.3596}$	(12)
$Psat = 133.322 \exp \left(18.3036 - \frac{3,816.44}{T + 227.02} \right)$	(14)
$a_{Wg} = \frac{P}{Psat \left(1 + \frac{0.62413}{H} \right)}$	(16)
$k_w = (7.304 - 0.00177(T_G + 273))W - 2.202 + 0.00618(T_G + 273)$	(17)
$\mu_T = \frac{8.3148 \times 10^{11} \exp \left(-\frac{70,225}{R(T_S + 273)} \right)}{1 + 1.3 \times 10^{47} \exp \left(-\frac{283,356}{R(T_S + 273)} \right)}$	(18)
$\mu_W = 1.011325 \exp (618.9218a_W^3 - 1863.527a_W^2 + 1865.097a_W - 620.6684)$	(19)
$k_D = A_D \exp \left(\frac{-E_{aD}}{R(T_S + 273)} \right)$	(20)
$h = 44209.85 \left[\frac{G(T_G + 273)}{0.0075P} \right]^{0.6011}$	(21)

Capítulo IV – Resultados

A modelagem matemática apresentada no capítulo anterior foi implementada no software EMSO (Nunes e Raoni, 2011). Os códigos-fonte desta implementação estão colocados no Apêndice. Foram feitas simulações para avaliar o perfil das variáveis chaves do processo como temperatura e crescimento da biomassa em função do tempo para um biorreator de leito empacotado com uma só camada e com dez camadas em série. O intervalo de tempo padrão considerado para as simulações foi de 50 horas. O sistema algébrico diferencial formado pela modelagem do biorreator foi resolvido usando o método das linhas implementado no EMSO, com base na rotina DASSLC (Secchi, 2011). Para todas as simulações foram feitos testes para garantir a convergência da evolução temporal. Foi usada a tolerância absoluta e relativa padrão do EMSO e passo de tempo igual a 0,1 h. Analisou-se também a influência da troca de calor com a vizinhança externa, alterando as equações de balanço de energia do modelo para incluir esse termo, e a significância da quantidade de camadas consideradas na simulação do biorreator. Os resultados dessas simulações são apresentados no presente capítulo.

IV.1 Condições de operação para as simulações

A Tabela 3 mostra os valores dos parâmetros e das variáveis de estado nas condições iniciais (H_0 , M_0 , T_{G0} , T_{S0} , W_0 , X_{T0} e X_{V0}). Esses parâmetros e variáveis são utilizados igualmente para todas as camadas no instante inicial da simulação.

O fluxo de ar (G) foi escolhido de modo a se obter a velocidade superficial de 5 cm/s, que representa uma média dos valores utilizados em vários estudos anteriores sobre biorreatores em FES. Esse fluxo de ar, que chega à camada do fundo, possui a temperatura estabelecida (T_{in}) de 306 K e umidade (H_{in}) correspondente a 99% da saturação a 306 K. O alto valor de H_{in} se justifica, pois valores menores favorecem a evaporação, que pode ocasionar

a secagem do leite a níveis que restringem o crescimento microbiano. Para todas as outras camadas, T_{in} e H_{in} , constituem a temperatura e a umidade do fluxo de ar advindos da camada imediatamente inferior. Todos os valores foram os mesmos utilizados por Mitchell *et al.*, 2010 e encontram-se na Tabela 3.

Tabela 3. Valores e unidades das variáveis e dos parâmetros presentes no modelo matemático.

Variável/Parâmetro	Valor (ou valor inicial) e unidades
A	0.785 m ²
A _D	8.0164 x 10 ⁻¹⁰⁰ h ⁻¹
a _w	Adimensional
a _{wg}	Adimensional
C _{PM}	2500 J Kg de água ⁻¹ °C ⁻¹
C _{PW}	4187 J Kg de água ⁻¹ °C ⁻¹
C _{PA}	1000 J Kg de água ⁻¹ °C ⁻¹
C _{PV}	1791 J Kg de água ⁻¹ °C ⁻¹
E _{aD}	621729.234 J mol ⁻¹
G	0.057 Kg de ar seco m ⁻² s ⁻¹
h	J s ⁻¹ m ⁻³ °C ⁻¹
H	H ₀ = 0.032 Kg de vapor Kg ar seco ⁻¹
H _{IN}	0.032 Kg de vapor Kg ar seco ⁻¹
k _D	h ⁻¹
k _w	Kg de sólidos s ⁻¹ m ⁻³
M	M ₀ = 250 Kg de sólidos m ⁻³
R	8.314 J mol ⁻¹ °C ⁻¹
P	101325 Pa
t	t ₀ = 0 h
T _{IN}	33 °C
T _G	T _{G0} = 33 °C
T _S	T _{S0} = 33 °C
V	0.0785 m ³
W	W ₀ = 0.895 Kg de água Kg de sólidos ⁻¹
W _{sat}	Kg de água Kg de sólidos ⁻¹
X _M	0.250 Kg de biomassa Kg de sólidos ⁻¹
X _T	X _{T0} = 0.002 Kg de biomassa Kg de sólidos ⁻¹
X _V	X _{V0} = 0.002 Kg de biomassa Kg de sólidos ⁻¹
Y _{XS}	0.5 Kg de biomassa Kg de substrato ⁻¹

Variável/Parâmetro	Valor (ou valor inicial) e unidades
Y_w	0.5 Kg de água Kg de substrato ⁻¹
Y_Q	8.366×10^6 J Kg de biomassa ⁻¹
ε	0.5 Adimensional
λ	2,414,300 J Kg de água ⁻¹
μ	h ⁻¹
μ_{opt}	h ⁻¹
μ_T	Adimensional
μ_W	Adimensional
ρ	1.14 Kg de ar seco m ⁻³

IV.2 Resultados para uma bandeja isolada

IV.2.1 Crescimento da Biomassa

A Figura 12 apresenta os resultados para o crescimento de biomassa total, X_t , e viável, X_v . É possível notar que as duas variáveis possuem comportamento idêntico. Isto ocorre, pois o termo de contribuição da morte celular ($k_D X_v$) na Equação 2 para o crescimento de biomassa viável é desprezível. Nota-se ainda que somente a partir da décima hora ocorre o crescimento significativo da biomassa, o qual acontece de forma progressiva até a sua estabilização cerca de 40 horas depois do início do processo. O comportamento do gráfico segue o de crescimento logístico de biomassa como citado anteriormente na Seção III.2.1

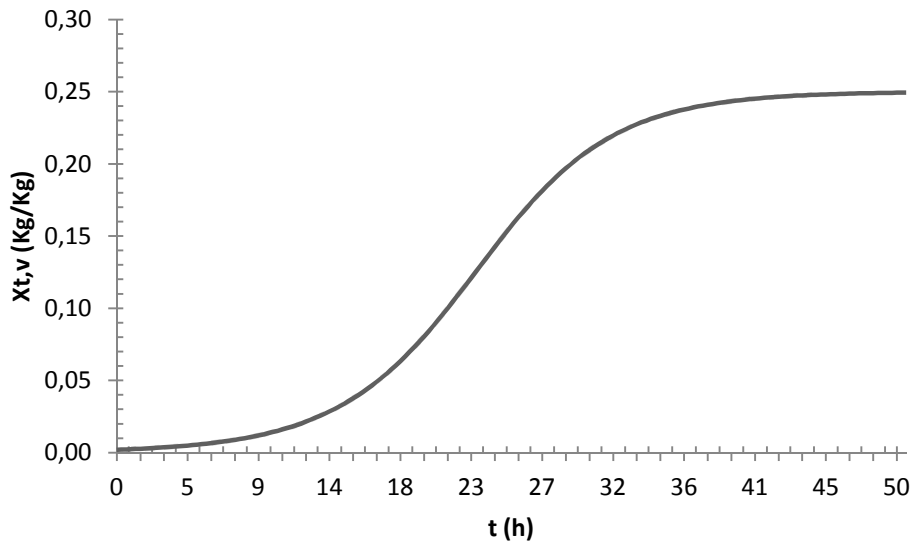


Figura 13. Evolução temporal de biomassa viável, X_v , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja.

IV.2.2 Teor de água e temperatura nos sólidos

A evolução temporal dos sólidos secos, M , é apresentada pela Figura 13. Analisando-a, percebe-se que seu comportamento está de acordo com o crescimento da biomassa, Figura 12. Isso acontece, pois à medida que ocorre o crescimento da biomassa, água é gerada, diminuindo progressivamente a quantidade de sólidos secos. Outro fator responsável pela diminuição dos sólidos é a liberação de CO_2 durante o crescimento microbiano. Quando já não há mais crescimento celular, o teor de sólidos secos alcança, então, um valor estacionário.

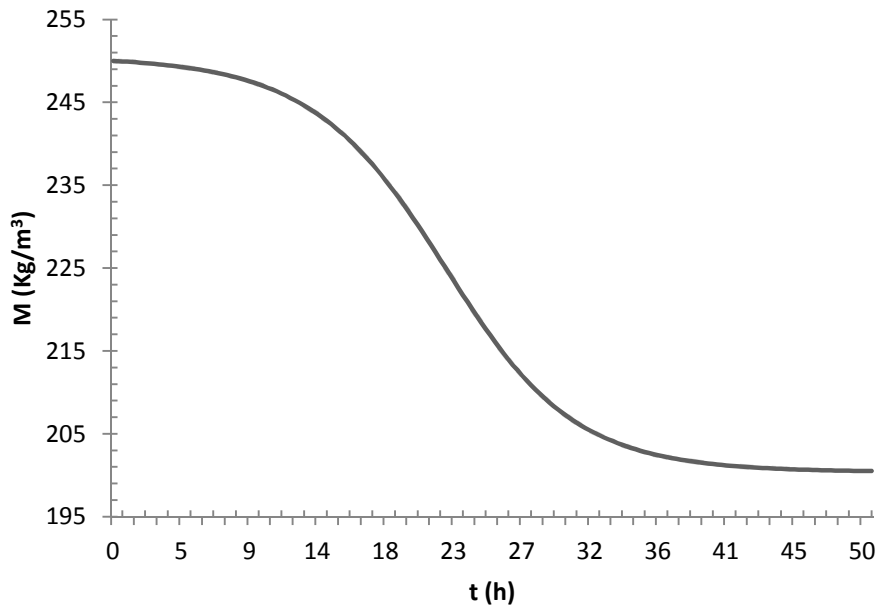


Figura 14. Evolução temporal dos sólidos secos, M , para um biorreator de leite empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja.

A variação temporal do teor de água nos sólidos, W , é realizada em termos de Kg de água/Kg de sólidos, sendo mostrada na Figura 14. Percebe-se uma acentuada redução do teor de água nos sólidos nas primeiras 34 horas de simulação. Tal fato pode ser explicado pelo baixo acúmulo de água nos sólidos. Quando se analisa a Equação 4, percebe-se que o teor de água nos sólidos é função tanto da quantidade de água produzida pelo crescimento microbiano como da taxa de vaporização de água da fase sólida para a gasosa. Dessa forma, devido ao aumento da temperatura do gás, T_g , causada pelo crescimento celular na camada, ocorre o aumento do coeficiente de transferência de massa de água, K_w (Ver Equação 17 na Tabela 2), que atua no arraste de água da fase sólida para fase gasosa. O aumento da temperatura do gás está reportado na Seção IV.2.3.

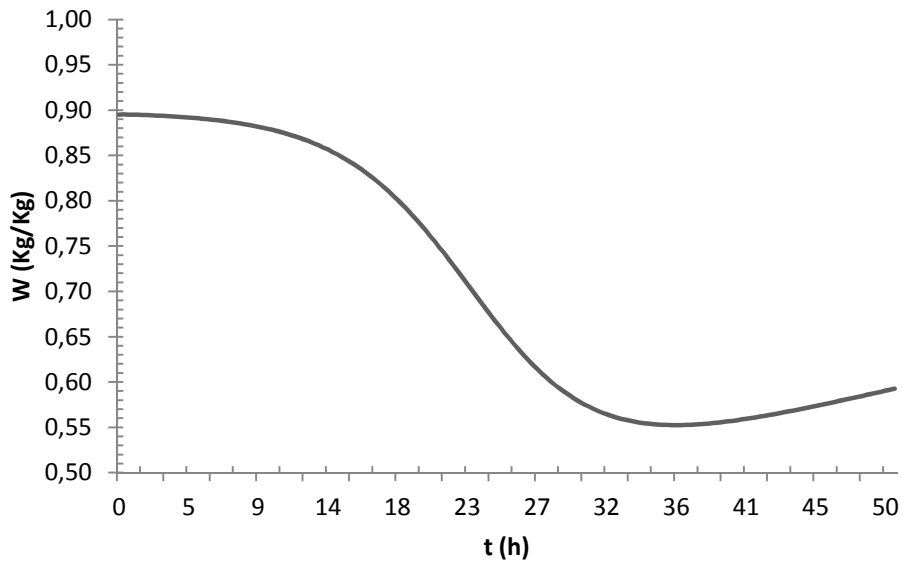


Figura 15. . Evolução temporal do teor de água nos sólidos, W , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja.

Percebe-se pela Figura 14 que o sistema não atingiu o equilíbrio. Portanto, quando um período de tempo maior é analisado, como mostrado na Figura 15, fica claro que o ponto onde W é 0,55 Kg de água/ Kg de sólido é, na verdade, o mínimo da curva e que o teor de sólidos secos na água cresce chegando a alcançar um valor maior que o inicial. Isso ocorre pois após 36 horas de processo já não há crescimento da biomassa, como pode ser comprovado na Figura 12, e a temperatura do gás acaba por diminuir, o que reduz a taxa de vaporização de água, fazendo com que o teor de água na bandeja cresça em ritmo acelerado. É válido ressaltar que a Figura 14 representa o resultado para o modelo matemático, sendo necessária a confirmação experimental para a validação da simulação.

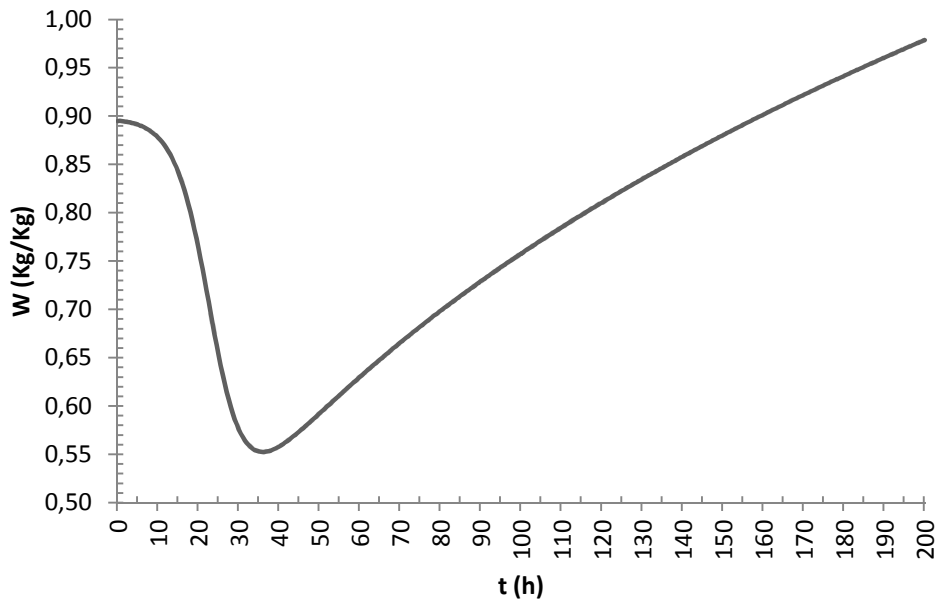


Figura 16. Evolução temporal do teor de água nos sólidos, W , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja para 200h de simulação.

O comportamento térmico dos sólidos é representado pela Equação 6, sendo afetado pelo crescimento de biomassa (pelo termo $VY_Q M \frac{dX_t}{dt}$), pela troca de calor convectiva entre as fases sólida e gás (pelo termo $h(T_s - T_g)$) e, por fim, pelo calor de evaporação da água (pelo termo $k_w(W - W_{sat})V\lambda$). Para melhor compreensão do comportamento da temperatura do gás, T_g , no leito poroso foram avaliadas algumas condições na modelagem da equação da energia para os sólidos.

Primeiro simulou-se a evolução temporal da temperatura dos sólidos se somente o termo referente ao crescimento de biomassa fosse levado em conta na Equação 6. O resultado encontra-se apresentado na Figura 16.

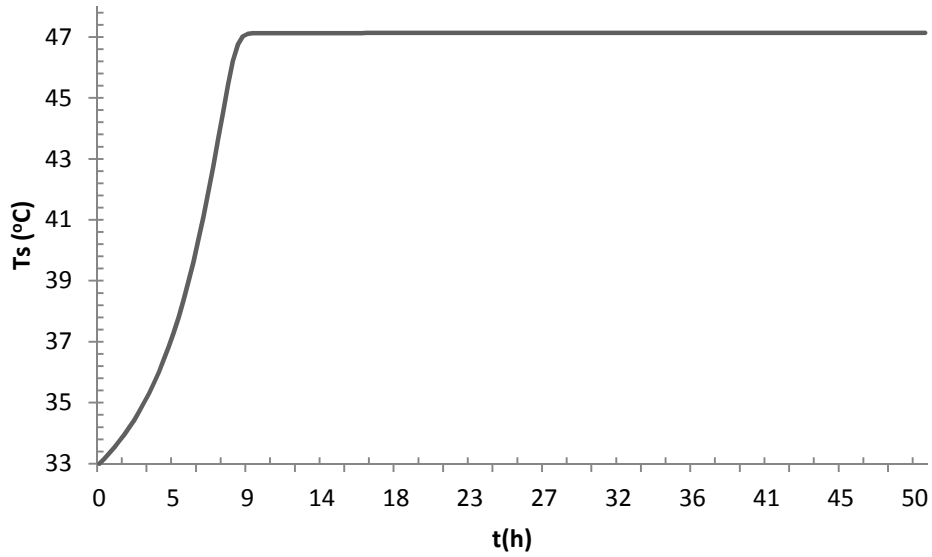


Figura 17. Evolução temporal da temperatura nos sólidos, T_s , para um biorreator de leite empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja, levando em conta somente o termo de crescimento de biomassa no balanço de energia da fase sólida.

Percebe-se analisando a Figura 16 que a temperatura na bandeja ultrapassaria os 47°C. Em seguida, simulou-se o comportamento térmico dos sólidos sem levar em conta o termo de troca de energia sensível entre a fase sólida e a fase gasosa no balanço de energia da fase sólida. O resultado dessa simulação encontra-se na Figura 17.

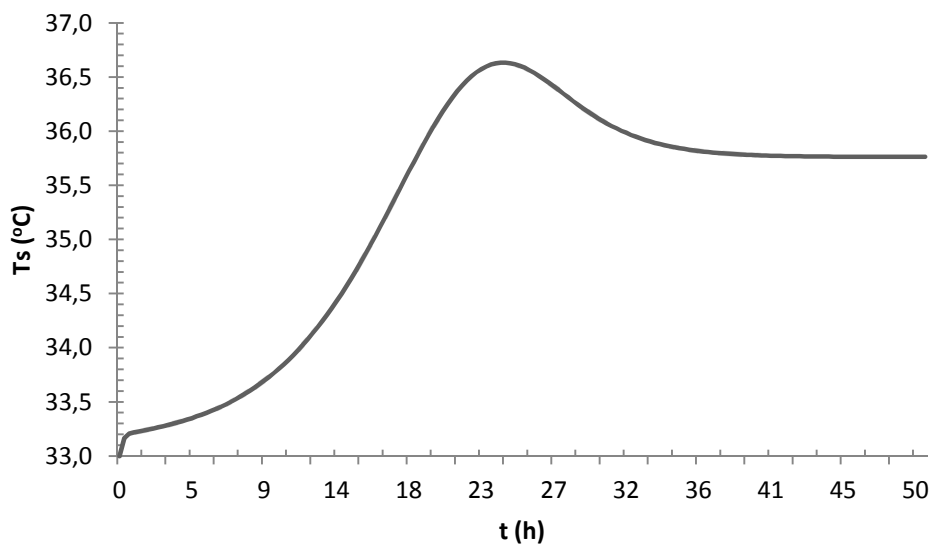


Figura 18. Evolução temporal da temperatura nos sólidos, T_s , para um biorreator de leite empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja sem considerar o termo troca de energia sensível entre a fase sólida e a fase gasosa ($h(T_s - T_g)$).

Por último, foi realizada a simulação considerando todos os termos constituintes da Equação 6, que está representada pela Figura 18.

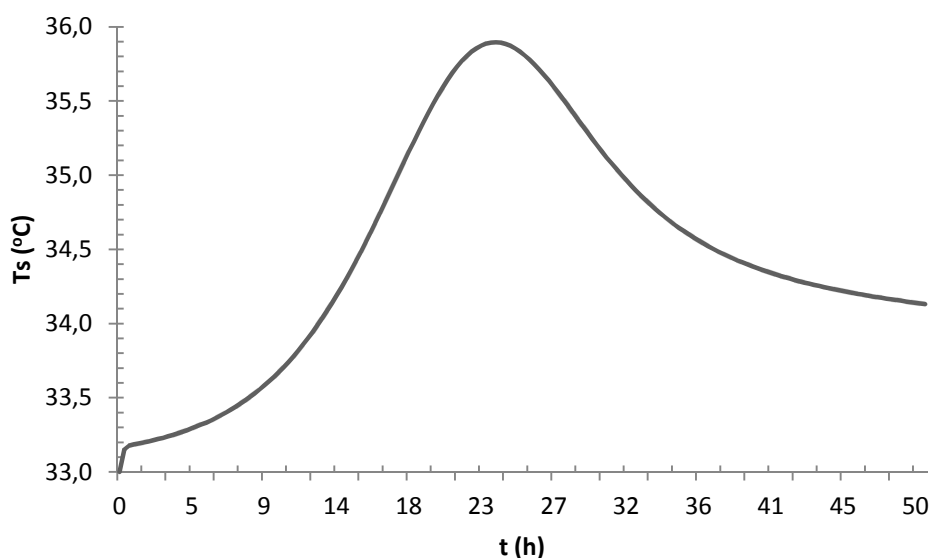


Figura 19. Evolução temporal da temperatura nos sólidos, T_s , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja.

Comparando-se os máximos de temperatura da Figura 16 e Figura 18, percebe-se que a inserção do fluxo de ar na base, permitiu que parte do calor produzido fosse arrastado do sólido para a fase gasosa, diminuindo a temperatura dos sólidos. Percebe-se também, ao comparar a Figura 17 com a Figura 18, que o termo de troca convectiva só se faz presente quando não há mais crescimento celular. Desse modo, o termo de transferência entre fases que mais contribui para o arraste de água da fase sólida para a gasosa é o de remoção de energia do sólido como calor latente de evaporação.

IV.2.3 Temperatura e umidade no gás

A evolução temporal do teor de água na fase gasosa, H , representado pela Figura 19, acompanha o comportamento da temperatura do gás, T_g , em função do tempo, mostrado na Figura 20. Isso ocorre, pois conforme a temperatura do gás cresce ou diminui, mais ou menos água é arrastada da fase sólida para a

fase gás, devido a forte influência do termo de troca de calor por evaporação da água, $k_w(W - W_{sat})V$, no balanço temporal de umidade. Como a variação da temperatura do gás durante o intervalo considerado na simulação é de pouco mais de 2 graus Celsius, não foi possível verificar diferenças significativas na umidade (apenas na 3ª casa decimal).

Comparando-se a evolução temporal da temperatura do gás, T_{g0} , com a da temperatura dos sólidos, T_s , apresentada pelas Figuras 20 e 18, respectivamente, percebe-se que elas são praticamente iguais. Isso mostra o quão influente é o termo referente à troca de energia sensível entre as fases, $h(T_s - T_g)$, comum aos balanços de energia de ambas as fases.

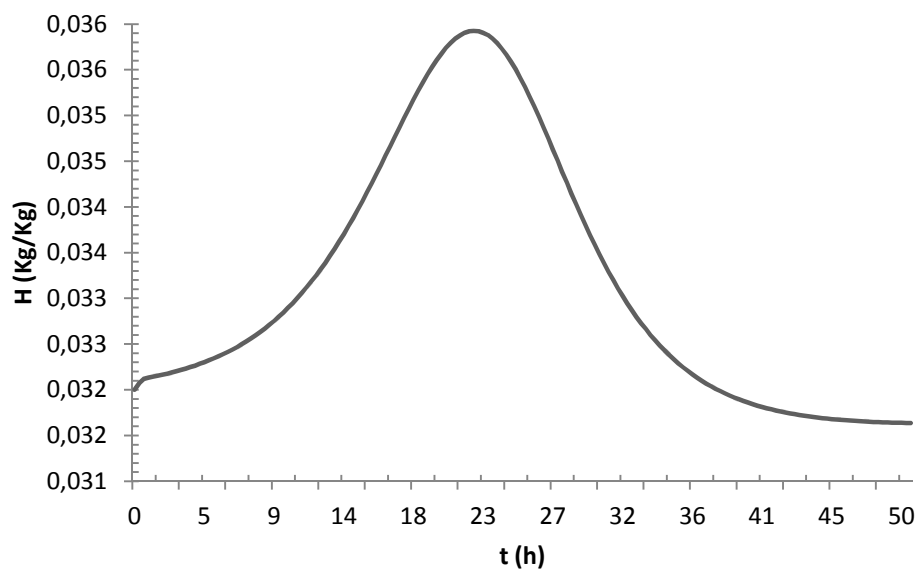


Figura 20. Evolução temporal para o teor de água no gás, H , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja.

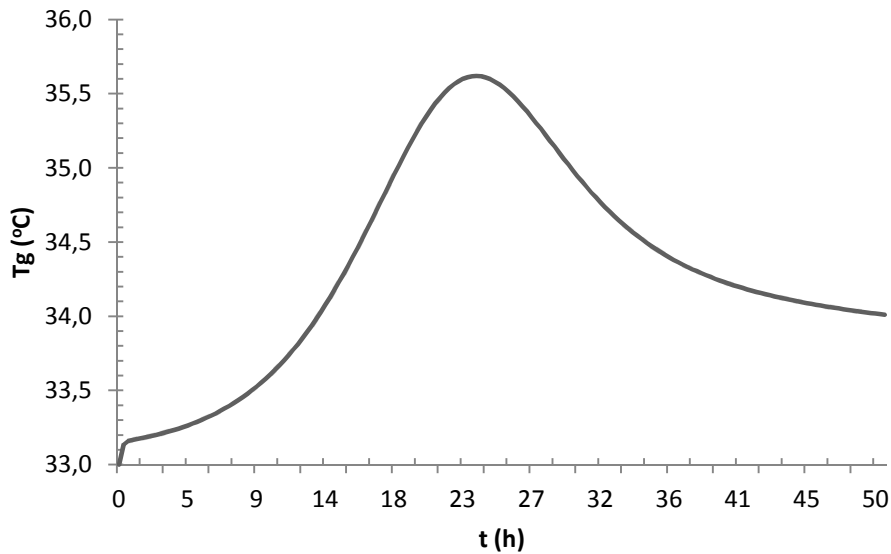


Figura 21. Evolução temporal da temperatura do gás, T_g , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com uma bandeja.

IV.3 Resultados para dez camadas em série

IV.3.1 Crescimento da Biomassa

As Figura 21 e 22 representam respectivamente o comportamento da biomassa total, X_t , e da biomassa viável, X_v , em função do tempo, para dez camadas ligadas em série em um biorreator de multi camadas em leito empacotado. Note que a numeração das camadas sempre segue uma ordem crescente, sendo 1 a primeira camada do biorreator. Analisando ambas as figuras, percebe-se que quanto mais acima está a camada, maior é a quantidade de biomassa morta na mesma, chegando a ultrapassar 30% da biomassa total no último prato. Isso ocorre pois o gás é aquecido ao passar sucessivamente pelas bandejas devido ao calor gerado pelo crescimento celular. Assim, as camadas do topo que entram em contato com o ar que acumulou calor durante toda a sua trajetória ao longo do biorreator, acabam tendo morte celular mais elevada. Na última camada, percebe-se que entre 16

e 26 horas de operação, as taxas de morte e a de crescimento entram praticamente em equilíbrio, como mostra a Figura 22.

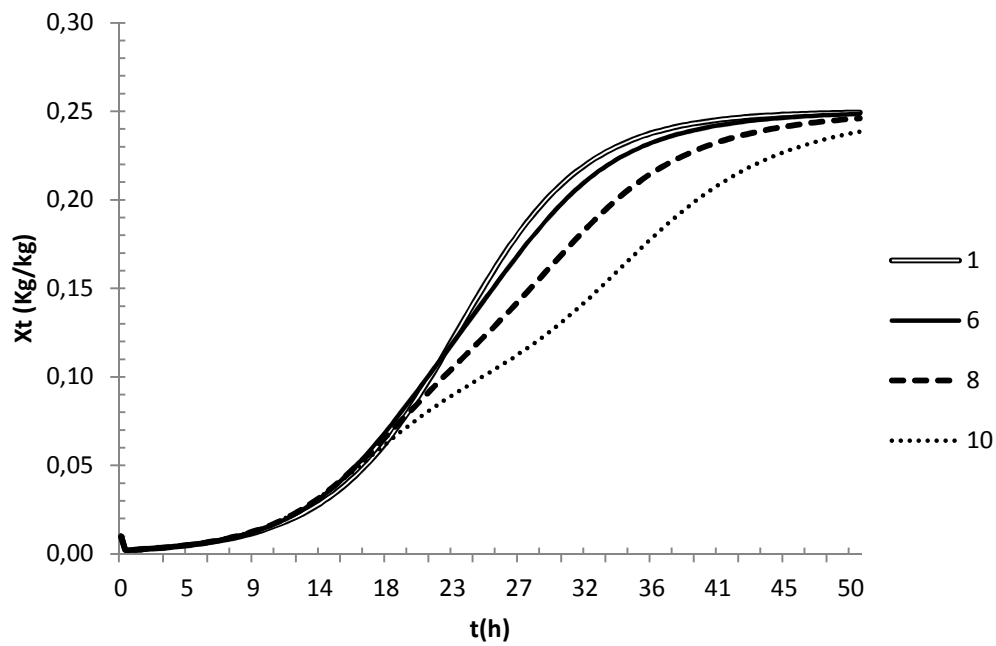


Figura 22. Evolução temporal da biomassa total, X_t , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com dez camadas ligadas em série.

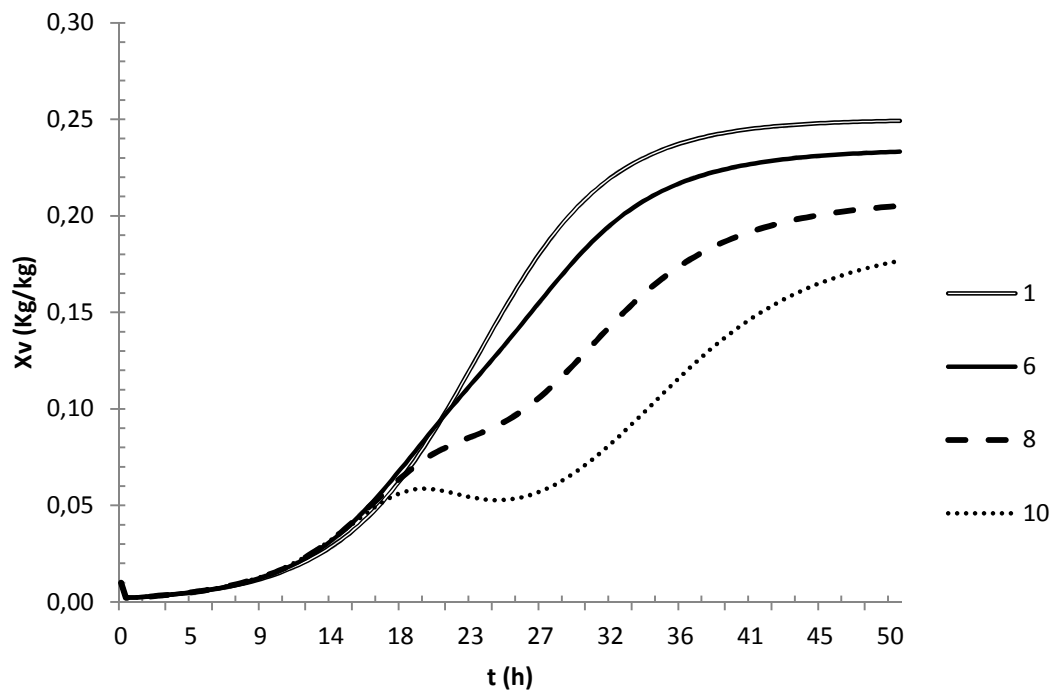


Figura 23. Evolução temporal da biomassa viável, X_v , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com dez camadas ligadas em série.

IV.3.2 Teor de água e temperatura nos sólidos

A evolução temporal de sólidos secos, M , para as dez camadas em série se comporta como o esperado e é mostrado na Figura 23. Enquanto ocorre o crescimento da biomassa e a conseqüente produção de água e CO_2 , a quantidade de sólidos secos diminui. Essa queda é mais lenta para as bandejas superiores já que nelas ocorre morte celular considerável e, portanto, menor produção de água. A partir do momento que o crescimento da biomassa termina, os sólidos secos chegam a um valor estacionário.

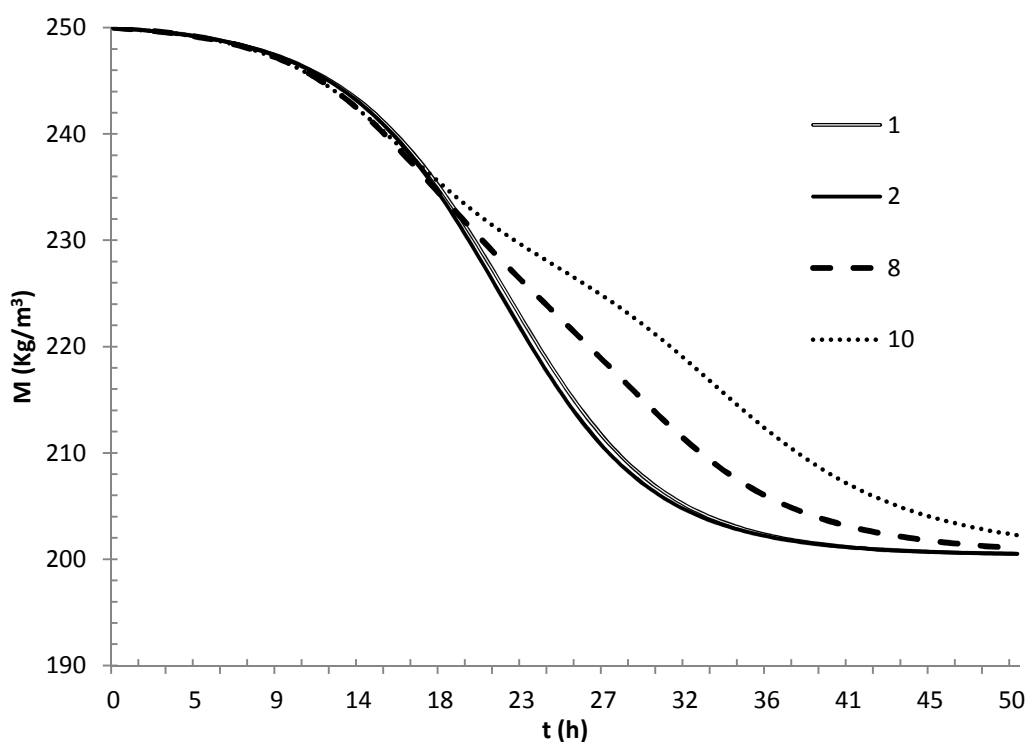


Figura 24. Evolução temporal de sólidos secos, M , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com dez camadas ligadas em série.

A Figura 24 representa o resultado para a simulação do comportamento do teor de água nos sólidos, W , em função do tempo. O teor de água nos sólidos está em termos de Kg de água/ Kg de sólidos. Dessa forma, essa grandeza diminui à medida que a quantidade de água produzida diminui. Nas primeiras 30 horas de operação, quando ainda ocorre crescimento celular, percebe-se, analisando a Figura 24, que as últimas camadas têm uma queda mais lenta do

teor de água nos sólidos. Isso ocorre pois como visto anteriormente, nessas camadas há um maior arraste de água da fase sólida para a gasosa, devido às maiores temperaturas.

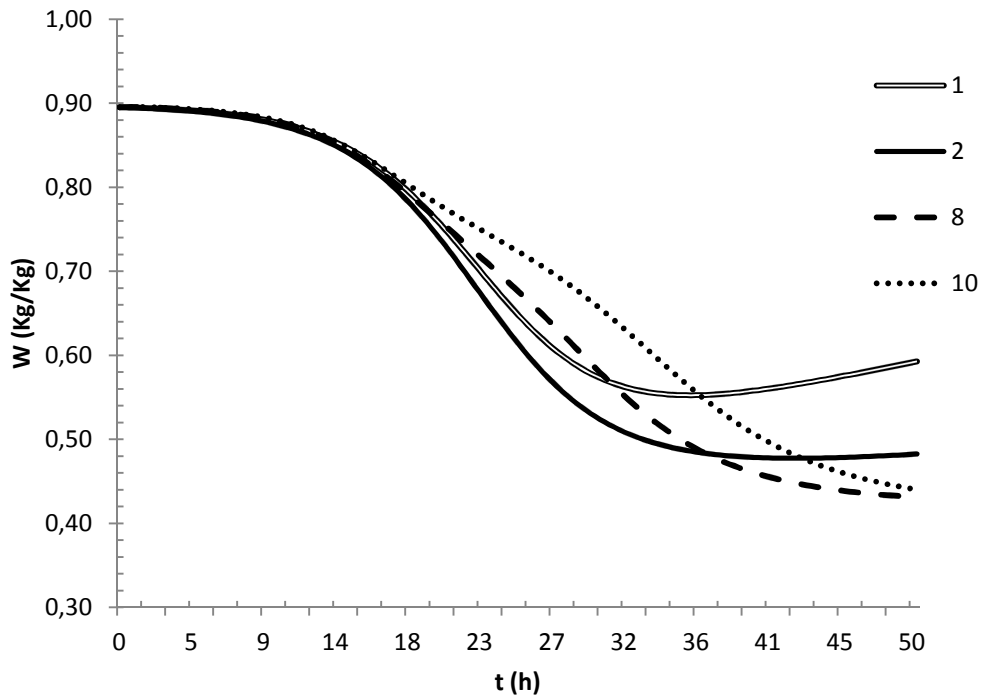


Figura 25. Evolução temporal do teor de água nos sólidos para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com dez camadas ligadas em série.

Quando o comportamento é analisado para um intervalo de tempo maior (por exemplo, 200 horas), como apresentado na Figura 25, percebe-se que nas primeiras bandejas, ocorre o acúmulo contínuo de água após a parada de crescimento da biomassa, tendência vista anteriormente na Figura 15. No entanto, quando as bandejas do topo são analisadas, percebe-se que o aumento do teor de água nos sólidos ocorre em ritmo muito lento, mostrando o quanto a perda de biomassa pelo aumento da temperatura foi significativa.

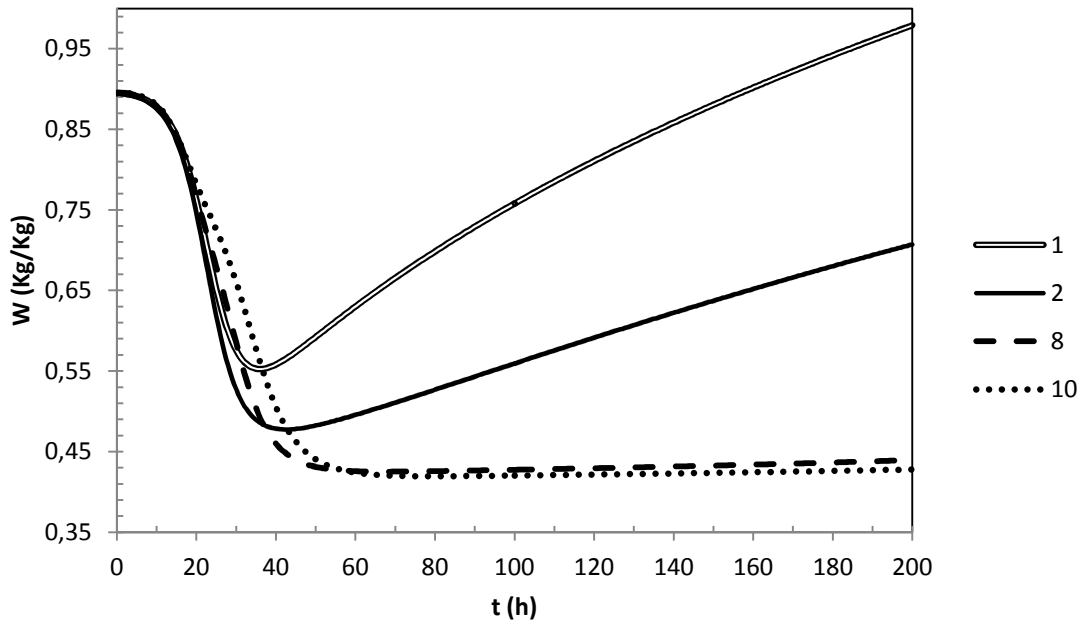


Figura 26. Evolução temporal do teor de líquido nos sólidos, W , para um biorreator de leite empacotado para fermentação em estado sólido com dez camadas ligadas em série para 200h de simulação.

Por meio da análise da Figura 26, que apresenta o comportamento da temperatura dos sólidos em função do tempo para as dez camadas em série, percebe-se que as temperaturas nos últimas bandejas estão bem acima da temperatura ótima de crescimento de biomassa, chegando a superar 45°C na última bandeja. O comportamento da temperatura dos sólidos é explicado baseando-se na análise da evolução temporal da temperatura do gás, T_g , o qual é mostrado na Figura 27. A temperatura dos sólidos, T_s , aumenta nas 24h iniciais de simulação pois nesse período ocorre o crescimento celular, liberando calor para o meio. O gás que entra na primeira camada percorre as camadas superiores captando o calor liberado pelo crescimento microbiano até alcançar as camadas do topo, causando o forte aquecimento do meio sólido. Quando o crescimento celular cessa, a temperatura diminui até alcançar um valor estacionário.

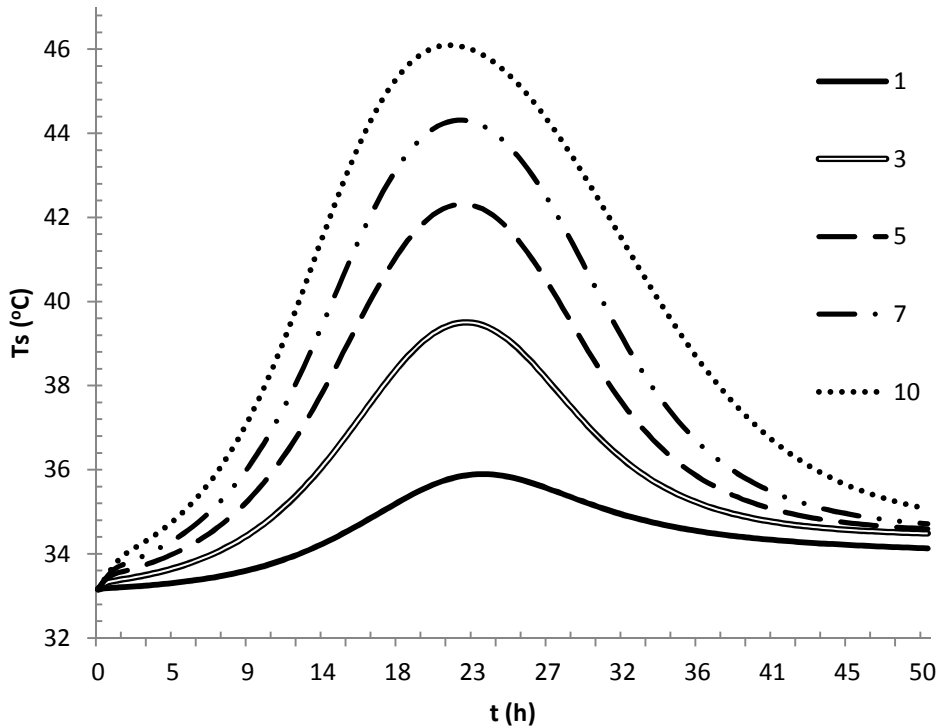


Figura 27. Evolução temporal da temperatura dos sólidos, T_s , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com dez camadas ligadas em série.

IV.3.3 Temperatura e umidade no gás

A Figura 28 mostra o comportamento em função do tempo da umidade do gás. De acordo com o esperado, os gráficos de evolução temporal da temperatura do gás, T_g , e da umidade no gás, H , estão intimamente ligados, apresentando comportamentos similares em todos os pratos. Como foi visto anteriormente, o primeiro prato não apresenta variação significativa na umidade, diferentemente dos pratos do topo, onde a umidade mais que dobra do seu valor inicial. Tal comportamento decorre do maior arraste de água da fase sólida para a fase gasosa, promovido pela maior temperatura do gás.

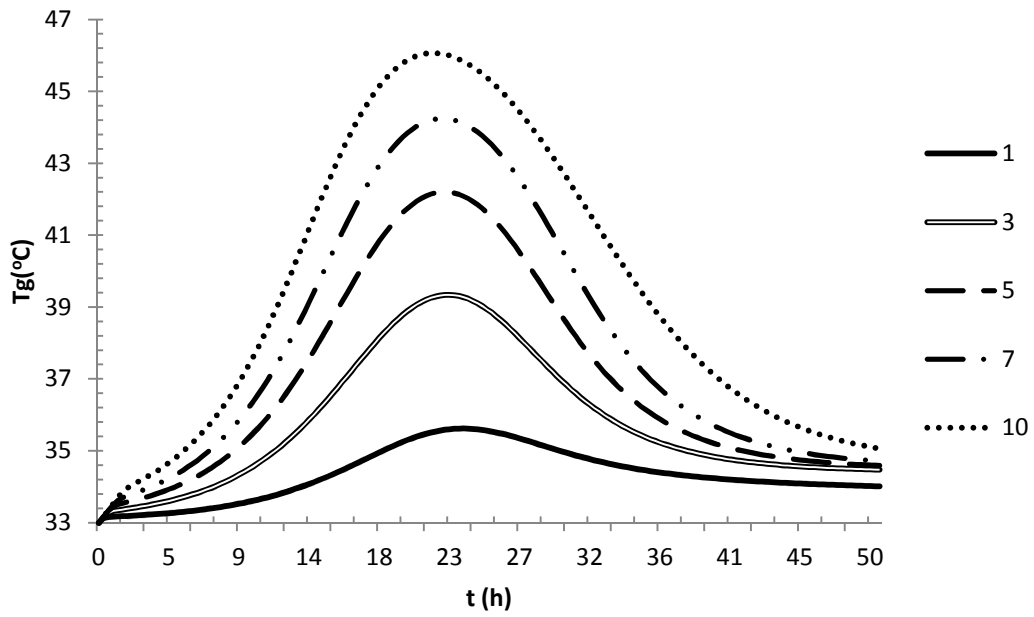


Figura 28. Evolução temporal da temperatura do gás, T_g , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com dez camadas ligadas em série.

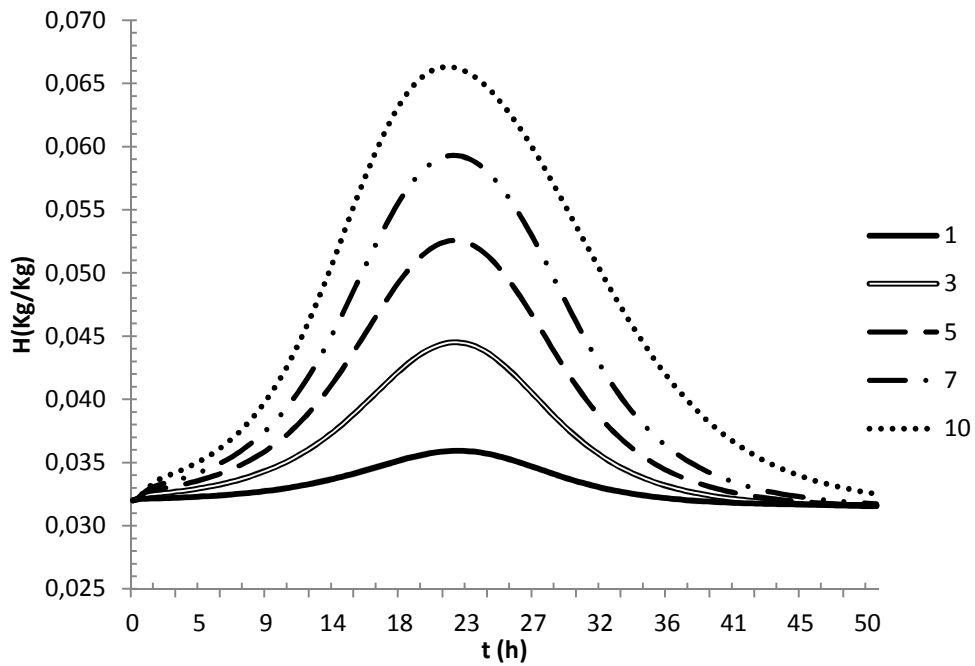


Figura 29. Evolução temporal do teor de água no gás, H , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com dez camadas ligadas em série.

IV.4 Estudo da influência do número de pratos

Para estudar a influência do número de pratos no sistema, foram realizadas simulações com 20 e 30 camadas no biorreator analisando o comportamento da biomassa viável, X_t , com o tempo. Os resultados dessas simulações são mostrados nas Figuras 29 e 30.

Analisando as Figuras 29 e 30, pode-se perceber que quanto maior o número de bandejas, maior o tempo necessário para que o último prato chegue a um valor estacionário de biomassa viável. Para a simulação com 1, 10, 15, 20 e 30 bandejas, o tempo necessário para a estabilização da biomassa viável é de aproximadamente 40, 55, 69, 83 e 105 h, respectivamente. Analisando o comportamento da biomassa viável para dez camadas ligadas em série, Figura 22, nota-se que esse tempo se torna mais acentuado a partir do sexto prato. A simulação com vinte camadas, Figura 29, mostra uma tendência diferente da observada na Figura 22. A partir da 12^a camada, o valor da biomassa viável final aumenta no último prato, ultrapassando o valor atingido na camada inferior. A 20^a camada, por exemplo, possui biomassa final maior do que a obtida na 9^a camada. Esse comportamento pode ser explicado uma vez que o gás que chega às camadas de topo é aquecido durante todo o seu percurso de subida até atingi-las. A partir do momento em que o crescimento celular é estabilizado nas camadas próximas à base do biorreator, a temperatura nessa região diminui fazendo com que o ar que chega ao topo não esteja tão aquecido. Tal fato permite, assim, a retomada do crescimento celular nas camadas superiores.

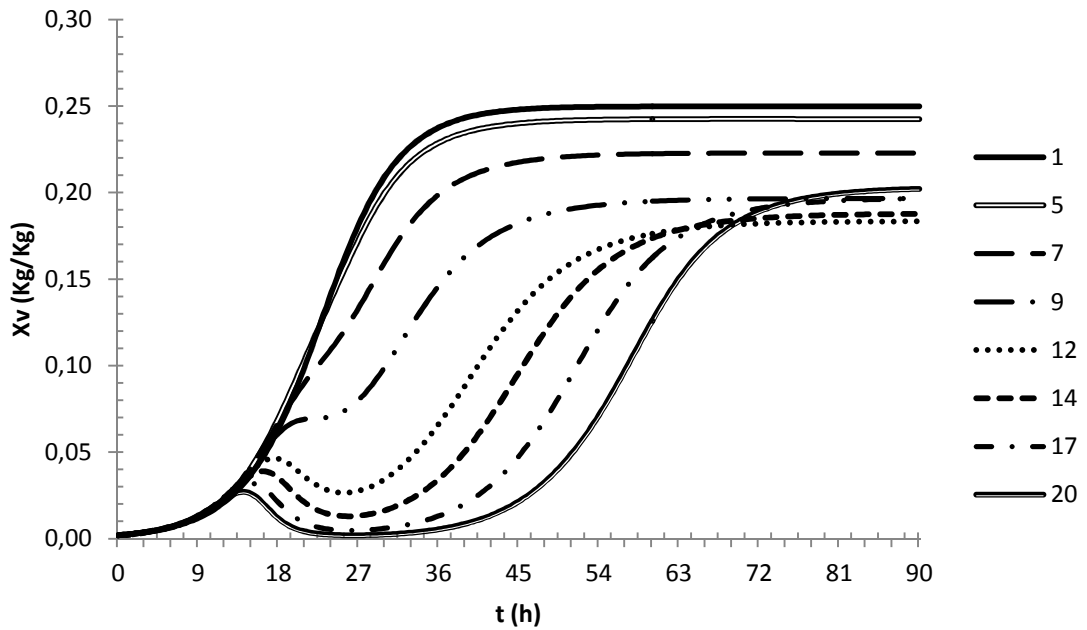


Figura 30. Evolução temporal da biomassa viável, X_v , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com vinte camadas ligadas em série.

Observando agora o comportamento da biomassa viável para trinta camadas, pela Figura 30, percebe-se que a tendência de crescimento para as últimas camadas ainda ocorre. No entanto, esse crescimento é bem menor. Por exemplo, a biomassa viável final da trigésima camada é ligeiramente maior que na vigésima (diferença somente na 3^o casa decimal).

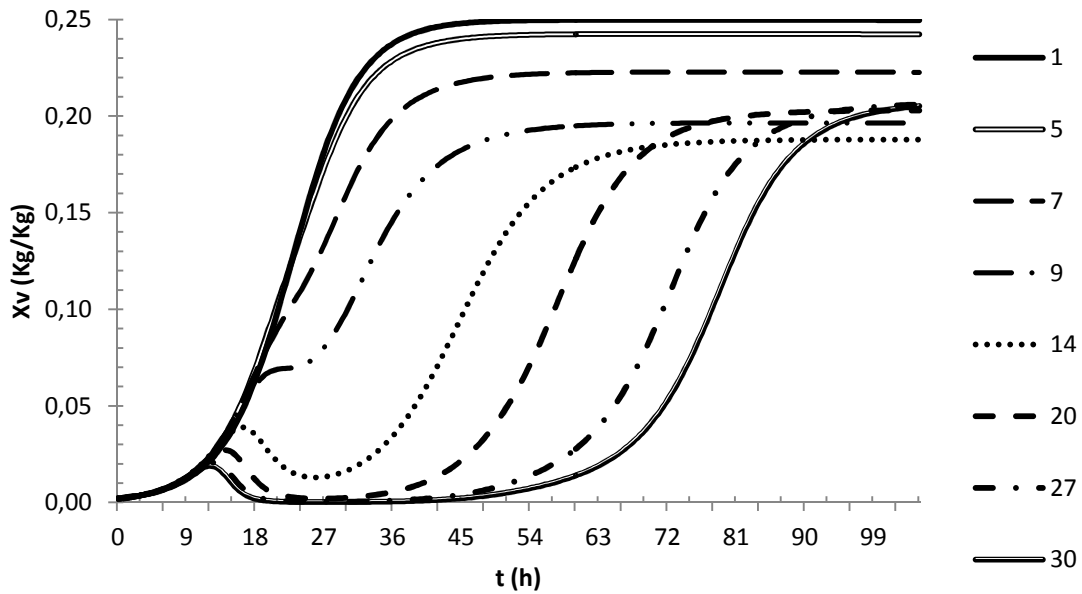


Figura 31. Evolução temporal da biomassa viável, X_v , para um biorreator de leito empacotado para fermentação em estado sólido com trinta camadas ligadas em série.

Percebe-se também que em ambas as Figuras 29 e 30, a partir da décima camada, uma curva de máximo é formada, tendo o seu pico até as 20 primeiras horas de processo. Após o pico, a biomassa viável começa a cair, chegando a atingir valores na ordem de 10^{-4} kg de biomassa/kg de sólidos na 30ª camada, para depois começar a subir novamente. É importante enfatizar que o comportamento mostrado por essas figuras se baseia somente no modelo matemático, de forma que a recuperação da biomassa pode não ser possível na prática.

IV.5 Estudo da influência da troca térmica com a vizinhança

Para analisar a influência da troca térmica com a vizinhança externa ao biorreator na simulação com múltiplas camadas para fermentação em estado sólido, deve-se adicionar um termo referente à transferência de calor entre o meio (sólido e gás) e a vizinhança nas Equação 6 e 7. Este procedimento leva

às Equações 22 e 23, referentes à equação da energia para os sólidos e para o gás respectivamente.

$$VM(C_{PM} + C_{PM}W) \frac{dT_S}{dt} = VY_QM \frac{dX_t}{dt} - h(T_S - T_G)V - k_W(W - W_{sat})V\lambda - h_{ov}A(1 - \varepsilon)(T_S - T_{surr}) \quad (22)$$

$$V\varepsilon\rho(C_{PA} + C_{PV}H) \frac{dT_G}{dt} = GAC_{PA}(T_{in} - T_G) - GAC_{PV}(H_{in}T_{in} - HT_G) + h(T_S - T_G)V - h_{ov}A(T_G - T_{surr}) \quad (23)$$

onde h_{ov} representa o coeficiente global de transferência de calor entre o sistema e a vizinhança, sendo seu valor igual a $15 \text{ J s}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ }^\circ\text{C}$ (Nagel *et al.*) e, T_{surr} , a temperatura na vizinhança, que é considerada constante e igual a $33 \text{ }^\circ\text{C}$ (Brijwani, 2011). Todas as outras equações consideradas nas simulações anteriores também serão utilizadas nesta modelagem matemática e permanecem iguais.

As Figuras 31 e 32 representam os resultados para a evolução temporal da biomassa viável, X_v , e da temperatura dos sólidos, T_s , respectivamente.

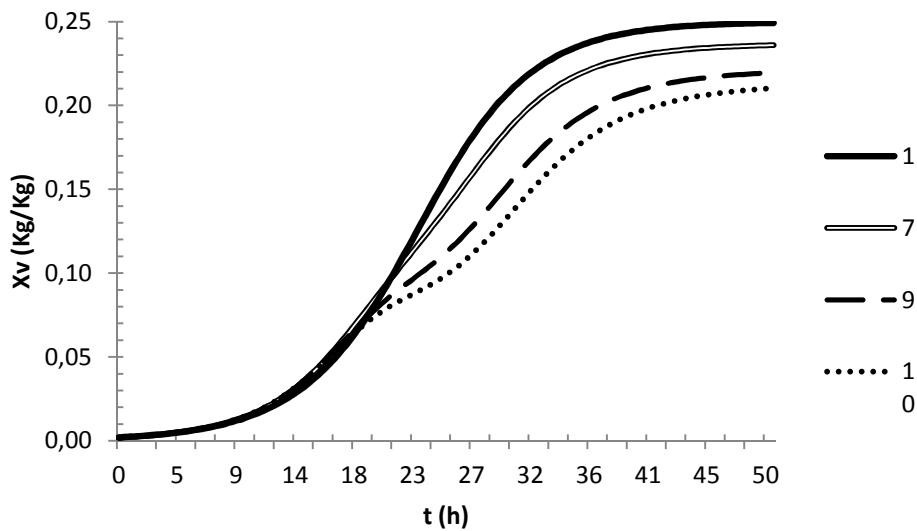


Figura 32. Evolução temporal da biomassa viável, X_v , para um biorreator de leito empacotado com dez camadas em série para fermentação em estado sólido considerando a troca térmica com a vizinhança.

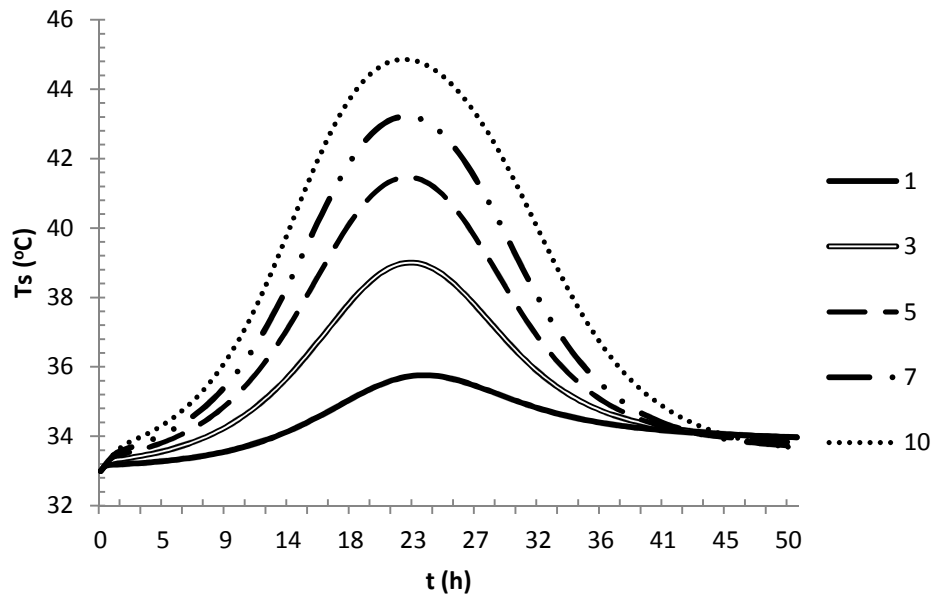


Figura 33. Evolução temporal da temperatura dos sólidos, T_s , para um biorreator de leito empacotado com dez camadas em série para fermentação em estado sólido considerando a troca térmica com a vizinhança.

Ao compararmos a Figura 31 com o resultado da simulação do crescimento da biomassa viável quando não há troca térmica com a vizinhança, Figura 22, percebe-se que há um leve aumento da biomassa viável quando a troca térmica com a vizinhança é levada em conta, e esse aumento se torna mais significativo nas últimas camadas, chegando a alcançar um aumento relativo de cerca de 17% na última. Isso ocorre, pois a troca térmica com a vizinhança contribui para dissipar o calor acumulado nos últimos pratos, o que leva a uma diminuição branda na temperatura dos sólidos, cerca de 1°C na última camada, comparando os pontos máximos das curvas dos dois gráficos.

Capítulo V - Conclusão

O presente trabalho teve o intuito de analisar o comportamento dinâmico de um biorreator de leito empacotado com aeração forçada para fermentação em estado sólido, cuja modelagem foi baseada em trabalho da literatura (Mitchell *et al.*, 2010) e implementada no simulador de processos EMSO. Foram analisados os casos do biorreator com uma única bandeja e dez bandejas ligadas em série, assim como a influência da troca térmica com a vizinhança externa e do aumento do número de bandejas utilizadas no processo de fermentação. Apesar dos modelos matemáticos serem consistentes, é imprescindível a realização de testes experimentais para a avaliação dos resultados.

Quando analisada a simulação do biorreator com uma bandeja isolada, percebe-se o crescimento expressivo de biomassa somente 10 horas depois do início da operação sendo que a estabilização da biomassa viável ocorre após 40 horas. A troca de calor e massa no meio possui grande influência nos resultados e foi verificada a importância de fornecer um fluxo de ar constante para a diminuição da temperatura dos sólidos e manutenção da umidade na bandeja. Foi possível verificar ainda que após a etapa de crescimento de biomassa o teor de água na bandeja aumenta de forma acelerada, ultrapassando o valor inicial e sem chegar a um valor estacionário após 200 horas de operação. O comportamento dinâmico do gás alimentado é intrinsecamente dependente dos balanços de massa e energia dos sólidos na bandeja. Portanto, é possível verificar que se trata de um processo com tempo de operação relativamente longo e bastante suscetível à efeitos de troca de calor e massa.

Para aumentar a capacidade do processo, utilizou-se a configuração de um biorreator com 10 bandejas de fermentação ligadas em série. Neste caso, nota-se que o fluxo de ar passa a ter uma ação negativa no crescimento microbiano nas bandejas do topo do biorreator. Isto ocorre devido ao aquecimento sucessivo do ar ao percorrer as bandejas em toda a extensão vertical do biorreator. Com o aumento da temperatura, a quantidade de sólidos secos nas bandejas de topo são maiores que no fundo ocasionando maior

arraste de água para o ar que atravessa as bandejas. Ressalta-se que a análise das 10 camadas ligadas em série, os perfis temporais de biomassa viável e temperatura de sólidos obtidos neste trabalho estão condizentes com os encontrados por Mitchell *et al.*, 2010, validando a implementação no simulador de processos EMSO.

Em análise ao aumento do número de bandejas utilizadas no processo, verificou-se que o tempo de estabilização da biomassa no sistema também aumenta significativamente. Isto ocorre pela grande diferença entre os processos de calor e massa nas várias bandejas. É possível verificar que em dados instantes, altas temperaturas são obtidas nas bandejas de topo com conseqüente aumento na taxa de morte celular. Somente após a estabilização da biomassa nas primeiras bandejas, as últimas bandejas são capazes de produzir biomassa.

Por fim, verificou-se a influência da troca térmica com a vizinhança externa a um biorretator com 10 bandejas conectadas em série. Este efeito foi obtido introduzindo estes termos na equação da energia dos sólidos e do gás. Foi percebido aumento da biomassa viável em relação ao caso sem o efeito das vizinhanças, sendo este mais significativo para os pratos mais altos chegando a alcançar 17% a mais de biomassa para o 10^o prato. A adição destes termos de troca de calor aumenta a dispersão de energia no meio e contribui para evitar a morte celular e, conseqüentemente, o aumento de biomassa nas bandejas. Nota-se ainda que a adição dos termos de troca térmica com a vizinhança nos modelos é de extrema importância para a obtenção de resultados mais condizentes com a realidade, uma vez que estes biorreatores usualmente não possuem isolamento térmico em sua operação.

Em análise conjunta dos resultados, é possível verificar a importância da análise prévia da modelagem do processo em vista de sua otimização, como adotar o número ideal de bandejas ou considerar sistemas para evitar a morte celular. Tendo isso em vista, são sugeridos alguns itens para trabalhos futuros:

- ▲ Simulação do biorreator de bandejas no EMSO acoplado o outros equipamento de processo, como trocadores de calor, bombas, compressores, linhas de alimentação, etc.

- ⤴ Otimização dos parâmetros de operação utilizando o simulador de processos EMSO.
- ⤴ Utilização de sistemas de controle já implementados no EMSO para ajuste da temperatura e umidade ideais para crescimento de biomassa.
- ⤴ Modificação da modelagem da fermentação em estado sólido, considerando a injeção adicional de ar em cada bandeja para melhor controle de temperatura.
- ⤴ Simulação do biorreator por parâmetros distribuídos, utilizando técnicas de Fluidodinâmica Computacional.

Referências Bibliográficas

1. ABUNAHMAN, S. S. “Modelagem, Simulação e Adequação de um Separador Trifásico em uma Plataforma de Petróleo Utilizando o EMSO”. Projeto Final de Graduação em Engenharia Química. UFRJ/EQ, 2011
2. AIDOO, K. E.; HENDY, R.; WOOD, J. B. “Solid substrate fermentation”. *Advances in Applied Microbiology*, v. 28, p. 201 – 237, 1982.
3. BRIJWANI, K. “Solid state fermentation of soybean hulls for cellulolytic enzymes production: physicochemical characteristics, and bioreactor design and modeling”. Tese de Doutorado em Engenharia Química. Kansas State University, 2011.
4. DE LIMA, T. “Modelo de inferência para a estimação da umidade do leito de um biorreator de fermentação no estado sólido”. Dissertação de Mestrado em Engenharia Química. UFPR, 2009.
5. DURAND, A.; DE LA BROISE, D.; BLACHERE, H. “Laboratory scale bioreactor for solid state processes”. *Journal of Biotechnology*, v. 8, p. 59 – 66, 1988.
6. EDUARDO, M. “Ampliação de escala em fermentação semi sólida: balanços de massa e de energia aplicados a cultivos de *Monascus sp.* em bioreator do tipo tambor com agitação interna”. Dissertação de Mestrado em Engenharia Química. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2009.
7. EML – Emso Modeling Library;
8. FERNANDEZ, M.; PEREZ-CORREA, J. R.; SOLAR, I.; AGOSIN, E. “Automation of a solid substrate cultivation pilot reactor”. *Bioprocess Engineering*, v. 16, p.1– 4, 1996.

9. GOWTHAMAN, M. K.; GHILDYAL, N. P.; RAO, K.; KARANTH, N.G. "Interaction of transport resistances with biochemical reaction in packed-bed solid-state fermenters - the effect of gaseous concentration gradients". *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* 56, p. 233-239, 1993.
10. GOWTHAMAN, M. K.; RAO, K.; GHILDYAL, N. P.; KARANTH, N.G. "Gas concentration and temperature-gradients in a packed-bed solid-state fermenter". *Biotechnology Advances* 11, p. 611-620, 1993.
11. GRAJALES AGUDELO, L M. "Avaliação de um biorreator rotativo para fermentação em estado sólido". Dissertação de Mestrado em Engenharia e Ciência de Alimentos. Universidade Estadual Paulista, 2010.
12. HESSELTINE, C. W. *Solid state fermentations*. *Biotechnology & Bioengineering*, v. 14, p. 517 – 532, 1972.
13. IGNATIUS, N. F. J. *Process control of solid-state fermentation: simultaneous control of temperature and moisture content*. Tese de Doutorado em Engenharia Química. Wageningen Universiteit, 2002.
14. INCROPERA, F. P.; WITT, D. P.; "Introdução a Transferência de Calor", LTC, 2003.
15. LONSANE, B. K.; SAUCEDO-CASTANEDA, G.; RAIMBAULT, M.; ROUSSOS, S.; VINIEGRA-GONZALEZ, G.; GHILDYAL, N. P.; RAMAKRISHNA, M.; KRISHNAIAH, M. M. "Scale-up strategies for solid state fermentation systems". *Process Biochemistry*, London, v. 27, p. 259 – 273, 1992.
16. LU, M.Y; MADDOX, I.S; BROOKS, J.D "Application of a multi-layer packed-bed reactor to citric acid production in solid-state fermentation using *Aspergillus niger*", *Process Biochemistry* 33, p.117–123, 1998.

17. MANUAL EMSO;
18. MARQUES, B.C; BARGA, M.C.; BALMANT, W.; LUZ JR, L.F.L.; KRIEGER, N.; MITCHELL, D.A. "A model of the effect of the microbial biomass on the isotherm of the fermenting solids in solid-state fermentation", *Food Technology and Biotechnology* 44, p.457-463, 2006.
19. MITCHELL, D.A; CUNHA, L. E. N; MACHADO, A. V. L; LUZ, L. F. D; KRIEGER, N. "A model-based investigation of the potential advantages of multi-layer packed beds in solid-state fermentation". *Biochemical Engineering Journal* 48, p.195-203, 2010.
20. MITCHELL, D.A; VON MEIEN, O.F. "Mathematical modeling as a tool to investigate the design and operation of the Zymotis packed-bed bioreactor for solid-state fermentation", *Biotechnology and Bioengineering* 68, p.127-135, 2000.
21. MITCHELL, D.A; VON MEIEN, O.F. "A two-phase model for water and heat transfer within an intermittently-mixed solid-state fermentation bioreactor with forced aeration", *Biotechnology and Bioengineering* 79, p. 416-428, 2002.
22. MITCHELL, D.A; VON MEIEN, O.F; KRIEGER, N. "Recent developments in modeling of solid-state fermentation: heat and mass transfer in bioreactors". *Biochemical engineering journal* 13, p. 137-147, 2006.
23. NAGEL, F.-J.J.I.; TRAMPER, J.; BAKKER, M.S.N.; RINZEMA, A. "Temperature control in a continuously mixed bioreactor for solid-state fermentation". *Biotechnology and Bioengineering*, v.72, n.2, p.219-230, 2001.

24. NUNES, D. G.; RAONI, R. L. B. "Utilização do Simulador de Processos EMSO para Aplicação de Análise Preliminar de Perigos em Processos Dinâmicos". Projeto Final de Graduação. Universidade Federal do Rio de Janeiro, EQ, 2011
25. PANDEY, A. "Recent process developments in solid state fermentation". Process Biochemistry, London, v. 27, n. 2, p. 109 – 117, 1992.
26. PANDEY, A.; SOCCOL, C. R.; LEON, J. A. R. Solid state fermentation in biotechnology: Fundamentals and applications. New Delhi: Asiatech, 2001
27. PANDEY, A. Solid state fermentation. Biochemical Engineering Journal, v.13, n.2/3, p.81-84. 2003.
28. PANDEY, A.; SOCCOL, C. R.; MITCHELL, D. "New developments in solid state fermentation: I-bioprocesses and products". Process Biochemistry, London, v. 35, n. 10, p. 1153 – 1169, 2000
29. PINTO; BRIO; ANDRADE; FRAGA; TEIXEIRA. Comunicado técnico. Embrapa, 2005
30. RAGHAVARAO, K. S. M. S.; RANGHANATHAN, T. V.; KARANTH, N. G. "Some engineering aspects of solid state fermentation". Biochemical Engineering Journal, Amsterdam, v. 13, p. 127 – 135, 2002.
31. RAIMBAULT, M. "General and microbiological aspects of solid substrate fermentation". Electronic Journal of Biotechnology, v.1, n.3, 1998.
32. RANI, R.; KUMAR, A.; SOCCOL, C. R.; PANDEY, A. "Recent advances in solid-state fermentation". Biochemical Engineering Journal, Amsterdam, v. 44, p. 13–18, 2009.

33. RODRIGUEZ, S.; SAROMÁN, M. "Application of solid-state fermentation to ligninolytic enzyme production". *Biochemical Engineering Journal*, Amsterdam, v. 22, p. 211–219, 2005.
34. ROUSSOS, S., RAIMBAULT, M., PREBOIS, J. P., LONSANE, B. K., *Appl. Biochem. Biotech.* 42, 1993.
35. SAHIR, A.H; KUMAR, S. "Modelling of a packed bed solid-state fermentation bioreactor using the N-tanks in series approach". *Biochemical Engineering Journal* 35, p. 20-28. 2007.
36. SANGSURASAK, P.; MITCHELL, D.A. "Validation of a model describing 2-dimensional heat transfer during solid-state fermentation in packed bed bioreactors", *Biotechnology and Bioengineering* 60, p. 739-749, 1998.
37. SAUCEDO-CASTAÑEDA, G., GUTIERREZ-ROJAS, M; BACQUET G., RAIMBAULT M., VINIEGRA-GONZÁLEZ, G. "Heat transfer simulation in solid substrate fermentation". *Biotechnology and Bioengineering*, n. 35, p. 802-808, 1990.
38. SECCHI, A. R. "Simulador Dinâmico de Processos Orientado por Equação – Aula 1". 2011.

Apêndice

Nos códigos de programação do EMSO mostrados neste Apêndice, a unidade graus Celsius ($^{\circ}\text{C}$) foi substituída por graus Kelvin (K), uma vez que esse simulador não possui graus Celsius como opção de unidade de temperatura. No entanto, essa é uma questão apenas de nomenclatura, não interferindo nos resultados obtidos.

A.1 Modelo da simulação do biorreator de leito empacotado de FES sem troca térmica com a vizinhança

```
using "streams";

death_frequency as positive (Default=1,final Unit='1/h');
mass_per_mass as positive (Brief = "Mass fraction", Default=0.01,
Upper=1, final Unit='kg/kg');
vol_heat_trans_coeff as positive (Brief = "Volumetric heat transfer
coefficient", Default=1, Upper=1e5, final Unit = 'kW/m^3/K');
vol_mass_trans_coeff as positive (Brief = "Volumetric mass transfer
coefficient", Default=1, Upper=1e5, final Unit = 'kg/m^3/s');

Model Simulacao1

PARAMETERS

#
# Model parameters
#

# Parameter to the growth rate
Miopt as frequency(Brief="maximum specific growth rate constant",
DisplayUnit = '1/h');

# Parameters to the death rate
Ad as death_frequency (Brief="frequency factor for death");
EaD as energy_mol(Brief="activation energy of the solids phase",
DisplayUnit = 'J/mol');
```

```

# Yield of mass and heat biomass from dry substrate
Yxs as mass_per_mass(Brief="yield of biomass from dry substrate");
Yw  as mass_per_mass(Brief="yield of water during growth");
Yq  as energy_mass(Brief="yield of metabolic heat during growth",
DisplayUnit = 'J/kg');

# Bed physical properties
eps as fraction(Brief="bed porosity");
Cpm as cp_mass(Brief="heat capacity of dry solids", DisplayUnit =
'J/kg/K');

# Air physical properties
Rho as dens_mass(Brief="dry air density", DisplayUnit='kg/m^3');
Cpa  as cp_mass(Brief="heat capacity of dry air", DisplayUnit =
'J/kg/K');

# Water physical properties
Cpw as cp_mass(Brief="heat capacity of liquid water", DisplayUnit =
'J/kg/K');
Cpv as cp_mass(Brief="heat capacity of water vapor", DisplayUnit =
'J/kg/K');
lambda as enth_mass(Brief="enthalpy of water evaporation", DisplayUnit
= 'J/kg');

# Operational conditions
P as pressure (DisplayUnit='Pa');
G as flux_mass(Brief="air flux");
A as area(Brief="bed area");
V as volume(Brief="volume of one layer");
R as Real(Brief="Ideal gas constant", Unit='J/mol/K');

#
#   Initial Conditions
#
# Temperatures
Tg0  as temperature(Brief="gas temperature IC");
Ts0  as temperature(Brief="solids temperature IC");

# Biomass quantities

```

```

Xm as mass_per_mass(Brief="maximum biomass IC");
Xt0 as mass_per_mass(Brief="total biomass IC");
Xv0 as mass_per_mass(Brief="viable biomass IC");

# Dry solids quantity
M0 as dens_mass(Brief="dry solids IC");

# Gas phase humidity
H0 as mass_per_mass(Brief="gas phase humidity IC");

# Contents of water in solids
W0 as mass_per_mass(Brief="solids water content IC");

VARIABLES

#
# Variables to be solved
#

# inlet stream
in Tgi as temperature(Brief="inlet gas temperature");
in Hi as mass_per_mass(Brief="inlet gas phase humidity");

# outlet stream
out Tgo as temperature(Brief="outlet gas temperature");
out Ho as mass_per_mass(Brief="outlet gas phase humidity");

Xv as mass_per_mass(Brief="viable biomass");
Xt as mass_per_mass(Brief="total biomass");
M as dens_mass(Brief="dry solids");
W as mass_per_mass(Brief="solids water content");
Ts as temperature(Brief="solids temperature");

#
# Auxiliar variables
#

Mi as frequency(Brief="specific growth rate", DisplayUnit = '1/h');
Mit as positive(Brief="temperature parcel on growth rate");
Miw as positive(Brief="water activity parcel on growth rate");

```

```

Kd  as death_frequency(Brief="temperature effect on death rate");
Kw  as vol_mass_trans_coeff(Brief="convective mass transfer
coefficient", DisplayUnit = 'kg/m^3/s');
h   as vol_heat_trans_coeff(Brief="convective heat transfer
coefficient", DisplayUnit = 'J/s/m^3/K');
Awg as fraction(Brief="water activity of the gas phase");
Wsat as positive(Brief="equilibrium solids water content",
DisplayUnit='kg/kg');
Psat as pressure(Brief="saturation vapor pressure", DisplayUnit='Pa');
Aw   as positive;
W1   as positive;
W2   as positive;

```

EQUATIONS

"Total Biomass"

```
diff(Xt) = Mi*Xv*(1-Xt/Xm);
```

"Viable Biomass"

```
diff(Xv) = Mi*Xv*(1-Xt/Xm) - Kd*Xv;
```

"Dry solids"

```
V*diff(M) = V*((1-(1/Yxs))/(1-(Xt*(1-(1/Yxs)))))*M*diff(Xt);
```

"Liquid water in the solid phase"

```
V*diff(W*M) = Yw*V*diff(Xt*M) - Kw*V*(W-Wsat);
```

"Water vapor in the gas phase"

```
V*eps*Rho*diff(Ho) = G*A*(Hi-Ho) + Kw*V*(W-Wsat);
```

"Energy balance on the solids phase"

```
V*M*(Cpm+Cpw*W)*diff(Ts) = V*Yq*diff(Xt*M) - h*(Ts-Tgo)*V - Kw*(W-
Wsat)*V*lambda;
```

"Energy balance on the gas phase"

```
V*eps*Rho*(Cpa+Cpv*Ho)*diff(Tgo) = G*A*Cpa*(Tgi-Tgo) - G*A*Cpv*(Hi*Tgi-
Ho*Tgo) + h*(Ts-Tgo)*V;
```

"Effect of temperature on the specific death rate"

```
Kd = Ad*exp(-EaD/(R*(Ts+273*'K')));
```

"Effect of temperature on the specific growth rate"

$$Mit = (8.3148e11 * \exp(-70225 * 'kJ/kmol' / (R * (Ts + 273 * 'K')))) / (1 + 1.3e47 * \exp(-283356 * 'kJ/kmol' / (R * (Ts + 273 * 'K'))));$$

"Effect of water activity on the specific growth rate"

$$Miw = 1.011325 * \exp(618.9218 * (Aw)^3 - 1863.527 * (Aw)^2 + 1865.097 * Aw - 620.6684);$$

"Specific growth rate constant"

$$Mi = Miopt * \text{sqrt}(Mit * Miw);$$

"Solids to air water mass transfer coefficient" # *'m/s/K'

$$h = 44209.85 * 'kg/m/s^3/K' * ((G * 'm/s/K' * (Tgo + 273 * 'K')) / (0.0075 * P))^0.6011);$$

"Solid to air water mass transfer coefficient"

$$Kw = ((7.304 - 1.77e-2 * (Tgo / 'K' + 273)) * W - 2.202 + 6.18e-3 * (Tgo / 'K' + 273)) * 'kg/m^3/s';$$

"Water activity of the solids phase(aw) for a given water content"

$$W = W1 + W2;$$

$$Aw = 1 - \exp(-4.988 * \text{abs}(W1 / (1 - Xt))^0.7202);$$

$$Aw = 1 - \exp(-2.5503 * \text{abs}(W2 / Xt)^0.3596);$$

"Solids water content if the solids were in equilibrium with the gas phase"

$$Wsat = (1 - Xt) * ((\ln(1 - Awg) / -4.988)^{1/0.7202}) + Xt * ((\ln(1 - Awg) / -2.5503)^{1/0.3596});$$

"Saturation water vapor pressure on the gas phase"

$$Psat = 133.322 * 'Pa' * \exp(18.3036 - (3816.44 / ((Tgo / 'K' + 273)) - 46.13));$$

"Water activity on the gas phase at a given humidity"

$$Awg = P / (Psat * (1 + (0.62413 / Ho)));$$

SET

$$A = 0.785 * 'm^2';$$

$$Cpm = 2500 * 'J/kg/K';$$

$$Cpw = 4187 * 'J/kg/K';$$

$$Cpa = 1000 * 'J/kg/K';$$

```

Cpv = 1791 * 'J/kg/K';
Xm = 0.250;
Yxs = 0.5;
Yw = 0.3;
Miopt = 0.236 * '1/h';
lambda = 2414300 * 'J/kg';
EaD = 621729.234 * 'J/mol';
V = 0.0785 * 'm^3';
Ad = 8.0164e100 * '1/h';
R = 8.314 * 'J/mol/K';
P = 101325 * 'Pa';
G = 0.057 * 'kg/m^2/s';
Rho = 1.14 * 'kg/m^3';
eps = 0.5;
Yq = 8.366e6 * 'J/kg';

```

```

#
# Defining initial values
#

```

```

INITIAL

```

```

Xt = 0.002;
Xv = 0.002;
M = 250 * 'kg/m^3';
W = 0.895;
Ho = 0.032;
Tgo = 33 * 'K';
Ts = 33 * 'K';

```

```

end

```

A.2 Modelo da simulação do biorreator de leito empacotado de FES com troca térmica com a vizinhança

```

using "streams";

```

```

death_frequency as positive (Default=1,final Unit='1/h');

```

```

mass_per_mass as positive (Brief = "Mass fraction", Default=0.01,
Upper=1, final Unit='kg/kg');
area_heat_trans_coeff as positive (Brief = "Area heat transfer
coefficient", Default=1, Upper=1e5, final Unit = 'J/s/m^2/K');
vol_heat_trans_coeff as positive (Brief = "Volumetric heat transfer
coefficient", Default=1, Upper=1e5, final Unit = 'kW/m^3/K');
vol_mass_trans_coeff as positive (Brief = "Volumetric mass transfer
coefficient", Default=1, Upper=1e5, final Unit = 'kg/m^3/s');

Model Simulacao2

#
# Model parameters
#

# Parameter to the growth rate
Miopt as frequency(Brief="maximum specific growth rate constant",
DisplayUnit = '1/h');

# Parameters to the death rate
Ad as death_frequency (Brief="frequency factor for death");
EaD as energy_mol(Brief="activation energy of the solids phase",
DisplayUnit = 'J/mol');

# Yield of mass and heat biomass from dry substrate
Yxs as mass_per_mass(Brief="yield of biomass from dry substrate");
Yw as mass_per_mass(Brief="yield of water during growth");
Yq as energy_mass(Brief="yield of metabolic heat during growth",
DisplayUnit = 'J/kg');

# Bed physical properties
eps as fraction(Brief="bed porosity");
Cpm as cp_mass(Brief="heat capacity of dry solids", DisplayUnit =
'J/kg/K');

# Air physical properties
Rho as dens_mass(Brief="dry air density", DisplayUnit='kg/m^3');
Cpa as cp_mass(Brief="heat capacity of dry air", DisplayUnit =
'J/kg/K');

# Water physical properties

```



```

Cpw as cp_mass(Brief="heat capacity of liquid water", DisplayUnit =
'J/kg/K');
Cpv as cp_mass(Brief="heat capacity of water vapor", DisplayUnit =
'J/kg/K');
lambda as enth_mass(Brief="enthalpy of water evaporation", DisplayUnit
= 'J/kg');

# Operational conditions
P as pressure (DisplayUnit='Pa');
G as flux_mass(Brief="air flux");
A as area(Brief="bed area");
V as volume(Brief="volume of one layer");
R as Real(Brief="Ideal gas constant", Unit='J/mol/K');

# Surroundings conditions
Tsur as temperature(Brief="surroundings temperature", DisplayUnit =
'K');
hv as area_heat_trans_coeff(Brief="overall heat transfer coefficient
system-surroundings", DisplayUnit = 'J/s/m^2/K');

#
# Initial Conditions
#
# Temperatures
Tg0 as temperature(Brief="gas temperature IC");
Ts0 as temperature(Brief="solids temperature IC");

# Biomass quantities
Xm as mass_per_mass(Brief="maximum biomass IC");
Xt0 as mass_per_mass(Brief="total biomass IC");
Xv0 as mass_per_mass(Brief="viable biomass IC");

# Dry solids quantity
M0 as dens_mass(Brief="dry solids IC");

# Gas phase humidity
H0 as mass_per_mass(Brief="gas phase humidity IC");

# Contents of water in solids

```

```

W0    as mass_per_mass(Brief="solids water content IC");

VARIABLES

#
# Variables to be solved
#

# inlet stream
in Tgi as temperature(Brief="inlet gas temperature");
in Hi  as mass_per_mass(Brief="inlet gas phase humidity");
# outlet stream
out Tgo as temperature(Brief="outlet gas temperature");
out Ho  as mass_per_mass(Brief="outlet gas phase humidity");

Xv as mass_per_mass(Brief="viable biomass");
Xt as mass_per_mass(Brief="total biomass");
M  as dens_mass(Brief="dry solids");
W  as mass_per_mass(Brief="solids water content");
Ts as temperature(Brief="solids temperature");

#
# Auxiliar variables
#

Mi  as frequency(Brief="specific growth rate", DisplayUnit = '1/h');
Mit as positive(Brief="temperature parcel on growth rate");
Miw as positive(Brief="water activity parcel on growth rate");
Kd  as death_frequency(Brief="temperature effect on death rate");

Kw      as  vol_mass_trans_coeff(Brief="convective mass transfer
coefficient", DisplayUnit = 'kg/m^3/s');
h       as  vol_heat_trans_coeff(Brief="convective heat transfer
coefficient", DisplayUnit = 'J/s/m^3/K');
Awg as fraction(Brief="water activity of the gas phase");
Wsat  as  positive(Brief="equilibrim solids water content",
DisplayUnit='kg/kg');
Psat as pressure(Brief="saturation vapor pressure", DisplayUnit='Pa');
Aw  as positive;
W1  as positive;
W2  as positive;

```

EQUATIONS

"Total Biomass"

$$\text{diff}(X_t) = M_i \cdot X_v \cdot (1 - X_t / X_m);$$

"Viable Biomass"

$$\text{diff}(X_v) = M_i \cdot X_v \cdot (1 - X_t / X_m) - K_d \cdot X_v;$$

"Dry solids"

$$V \cdot \text{diff}(M) = V \cdot ((1 - (1 / Y_{xs})) / (1 - (X_t \cdot (1 - (1 / Y_{xs})))))) \cdot M \cdot \text{diff}(X_t);$$

"Liquid water in the solid phase"

$$V \cdot \text{diff}(W \cdot M) = Y_w \cdot V \cdot \text{diff}(X_t \cdot M) - K_w \cdot V \cdot (W - W_{\text{sat}});$$

"Water vapor in the gas phase"

$$V \cdot \epsilon \cdot \rho \cdot \text{diff}(H_o) = G \cdot A \cdot (H_i - H_o) + K_w \cdot V \cdot (W - W_{\text{sat}});$$

"Energy balance on the solids phase"

$$V \cdot M \cdot (C_{pm} + C_{pw} \cdot W) \cdot \text{diff}(T_s) = V \cdot Y_q \cdot \text{diff}(X_t \cdot M) - h_v \cdot A \cdot (1 - \epsilon) \cdot (T_s - T_{\text{surr}}) - h \cdot (T_s - T_{go}) \cdot V - K_w \cdot (W - W_{\text{sat}}) \cdot V \cdot \lambda;$$

"Energy balance on the gas phase"

$$V \cdot \epsilon \cdot \rho \cdot (C_{pa} + C_{pv} \cdot H_o) \cdot \text{diff}(T_{go}) = G \cdot A \cdot C_{pa} \cdot (T_{gi} - T_{go}) - G \cdot A \cdot C_{pv} \cdot (H_i \cdot T_{gi} - H_o \cdot T_{go}) + h \cdot (T_s - T_{go}) \cdot V - h_v \cdot A \cdot \epsilon \cdot (T_{go} - T_{\text{surr}});$$

"Effect of temperature on the specific death rate"

$$K_d = A_d \cdot \exp(-E_a / (R \cdot (T_s + 273 \cdot 'K')));$$

"Effect of temperature on the specific growth rate"

$$M_i = (8.3148 \cdot 10^{11} \cdot \exp(-70225 \cdot 'kJ/kmol' / (R \cdot (T_s + 273 \cdot 'K')))) / (1 + 1.3 \cdot 10^{47} \cdot \exp(-283356 \cdot 'kJ/kmol' / (R \cdot (T_s + 273 \cdot 'K'))));$$

"Effect of water activity on the specific growth rate"

$$M_i = 1.011325 \cdot \exp(618.9218 \cdot (A_w)^3 - 1863.527 \cdot (A_w)^2 + 1865.097 \cdot A_w - 620.6684);$$

"Specific growth rate constant"

$$M_i = M_{i \text{opt}} \cdot \sqrt{M_i \cdot M_i};$$

"Solids to air water mass transfer coefficient" # *'m/s/K'

$$h = 44209.85 \cdot 'kg/m/s^3/K' \cdot ((G \cdot 'm/s/K' \cdot (T_{go} + 273 \cdot 'K')) / (0.0075 \cdot P))^0.6011);$$

"Solid to air water mass transfer coefficient"
 $K_w = ((7.304 - 1.77e-2 * (T_{go}/'K'+273)) * W - 2.202 + 6.18e-3 * (T_{go}/'K'+273)) * 'kg/m^3/s';$

"Water activity of the solids phase(a_w) for a given water content"

$W = W_1 + W_2;$
 $A_w = 1 - \exp(-4.988 * \text{abs}(W_1 / (1 - X_t))^{0.7202});$
 $A_w = 1 - \exp(-2.5503 * \text{abs}(W_2 / X_t)^{0.3596});$

"Solids water content if the solids were in equilibrium with the gas phase"

$W_{sat} = (1 - X_t) * ((\ln(1 - A_{wg}) / -4.988)^{(1/0.7202)}) + X_t * ((\ln(1 - A_{wg}) / -2.5503)^{(1/0.3596)});$

"Saturation water vapor pressure on the gas phase"

$P_{sat} = 133.322 * 'Pa' * \exp(18.3036 - (3816.44 / ((T_{go}/'K'+273)) - 46.13));$

"Water activity on the gas phase at a given humidity"

$A_{wg} = P / (P_{sat} * (1 + (0.62413 / H_o)));$

SET

$A = 0.785 * 'm^2';$
 $C_{pm} = 2500 * 'J/kg/K';$
 $C_{pw} = 4187 * 'J/kg/K';$
 $C_{pa} = 1000 * 'J/kg/K';$
 $C_{pv} = 1791 * 'J/kg/K';$
 $X_m = 0.250;$
 $Y_{xs} = 0.5;$
 $Y_w = 0.3;$
 $M_{iopt} = 0.236 * '1/h';$
 $\lambda = 2414300 * 'J/kg';$
 $E_{aD} = 621729.234 * 'J/mol';$
 $V = 0.0785 * 'm^3';$
 $A_d = 8.0164e100 * '1/h';$
 $R = 8.314 * 'J/mol/K';$
 $P = 101325 * 'Pa';$
 $G = 0.057 * 'kg/m^2/s';$
 $\rho = 1.14 * 'kg/m^3';$
 $\epsilon = 0.5;$

```

Yq = 8.366e6 * 'J/kg';
Tsurr = 33 * 'K';
#
# Defining initial values
#

```

```

INITIAL

```

```

Xt = 0.002;
Xv = 0.002;
M = 250 * 'kg/m^3';
W = 0.895;
Ho = 0.032;
Tgo = 33 * 'K';
Ts = 33 * 'K';

```

```

end

```

A.3 Flowsheet da simulação do biorreator de leito empacotado de FES com uma camada isolada

```

using "Modelo_FES.mso";

FlowSheet Flowsheet_FES

VARIABLES
out Ho as positive;
out Tgo as Real (Unit = 'K');

DEVICES
tray1 as Simulacao1;

CONNECTIONS
Ho to tray1.Hi;
Tgo to tray1.Tgi;

SPECIFY

```

```

Ho = 0.032;
Tgo = 33 * 'K';
OPTIONS
TimeStep = 0.5;
TimeEnd = 50;
TimeUnit = 'h';

end

```

A.4 Flowsheet da simulação do biorreator de leite empacotado de FES com dez camadas ligadas em série

```
using "Modelo_FES_vizinhança";
```

Neste caso o programa está rodando o modelo presente no Apêndice A.2. Para rodar o modelo livre da interação com a vizinhança, Apêndice A.1, o código seria using "Modelo_FES".

```
FlowSheet Flowsheet_FES
```

```
PARAMETERS
```

```
N as Integer(Default=10);
```

```
VARIABLES
```

```
out Ho as positive;
```

```
out Tgo as Real (Unit = 'K');
```

```
DEVICES
```

```
tray(N) as Simulacao2;
```

Neste caso o programa está rodando o modelo presente no Apêndice A.2, para rodar o modelo livre da interação com a vizinhança, Apêndice A.1, o código seria tray(N) as Simulacao1.

```
CONNECTIONS
```

```
tray(1:N-1).Ho to tray(2:N).Hi;
```

```
Ho to tray(1).Hi;
```

```
tray(1:N-1).Tgo to tray(2:N).Tgi;
```

```
Tgo to tray(1).Tgi;
```

```
SPECIFY
Ho = 0.032;
Tgo = 33 * 'K';
```

```
OPTIONS
TimeStep = 0.5;
TimeEnd = 50;
TimeUnit = 'h';
end
```