



OTIMIZAÇÃO DO PERFIL DE ALIMENTAÇÃO E DE AQUECIMENTO PARA A MAXIMIZAÇÃO DE ETANOL EM UM REATOR EM BATELADA-ALIMENTADA USANDO ALGORITMO GENÉTICO

Freitas, H.F.S^{1,2}, Andrade, C.M.G³

RESUMO: O objetivo do presente trabalho consistiu na otimização da quantidade de produção de etanol em um processo fermentativo do tipo batelada-alimentada, representado um modelo cinético de fermentação, através de um determinado número de ações de controle em respeito às variáveis controladas, a saber: vazão de alimentação da dorna, temperatura do fluido na jaqueta de troca térmica acoplada ao reator e a vazão mássica para o referido fluido. Foi desenvolvido um código de algoritmo genético na linguagem computacional Python de codificação versátil, de modo a permitir resolver o problema de meta-otimização que se apresenta. Após as simulações e otimização, os resultados indicam que a rotina proposta foi capaz de maximizar a quantidade de etanol produzida na dorna, contendo-se uma concentração de final de produto de aproximadamente 85,94 kg/m³ para um tempo de fermentação de 24 h, com um volume final contido na dorna de aproximadamente 236,32 m³.

PALAVRAS-CHAVE: Biotecnologia, Etanol, Otimização, Engenharia Bioquímica, Algoritmo Genético

1 INTRODUÇÃO

Em tempos atuais, a busca por fontes alternativas de energia renováveis é um tema recorrente, especialmente em relação à demanda emergente para a substituição de combustíveis fósseis por alternativas ambientalmente mais adequadas, como os biocombustíveis. Entre estas fontes energéticas alternativas, o etanol distingue-se devido ao seu amplo espectro de possíveis matérias-primas para sua produção, fonte de energia de carbono quase neutro, entre outras (BAYENS *et al.*, 2015, BAI *et al.*, 2008).

Os chamados processos biotecnológicos, nos quais os produtos formados são obtidos a partir do metabolismo de microorganismos de trabalho, tem representado cada vez mais um setor mais expressivo dos produtos industrializados, contemplando a produção desde medicamentos, alimentos, defensivos agrícolas e combustíveis, ramo este que tem bastante expressão no cenário brasileiro em razão da expressiva produção nacional de etanol. À medida que este composto é o resultado do metabolismo do organismo responsável pela fermentação, frequentemente a *S. cerevisiae*, um complexo processo não-linear ocorre no meio reacional, relacionada ao próprio desenvolvimento biológico deste agente em questão. Neste sentido, o controle das condições ambientais do biorreator, como a temperatura do meio, a concentração de nutrientes, o pH, entre outros, podem afetar o desempenho dos microorganismos. A temperatura é um dos principais fatores responsáveis pela influência no metabolismo da *S. cerevisiae*, especialmente quando analisados em termos da sua taxa de crescimento; Outro fator importante é a vazão de alimentação para biorreatores do tipo batelada-alimentada, o qual implicará diretamente na disponibilidade de nutrientes para o seu consumo (AMILLASTRE *et al.*, 2012, SARKAR & MODAK, 2008).

No presente trabalho o estudo política de alimentação ideal e condições térmicas foi realizada em um processo de produção de bioetanol *in silico* descontínuo alimentado com base no modelo apresentado em Costa Filho *et al.* (2009), usando um algoritmo genético. O controle térmico e de alimentação foi estudado utilizando abordagem turno multivariada, descrevendo ambos os parâmetros através deslocamentos lineares sequenciais, com o objetivo de maximizar a produção de etanol no fermentador encamisado, e também preservar a estabilidade do processo de fermentação em relação às condições ambientais.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

No desenvolvimento do presente trabalho foi utilizado um código *in-house* de otimização do tipo algoritmo genético (GA) desenvolvido em linguagem Python, garantindo a flexibilidade e reprodutibilidade da ferramenta. No

1. Aluno de doutorado no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química (PEQ), Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá

2. Docente do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte (IFRN), Campus Apodi, Curso de Biocombustíveis, Apodi/RN.

3. Docente no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química (PEQ), Departamento de Engenharia Química (DEQ), Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá/PR



processo fermentativo simulado em questão, o controle da alimentação do reator e da temperatura da jaqueta de transferência térmica em torno do mesmo foram representados no GA utilizando uma abordagem de codificação em variáveis reais (*real-coded approach*) referentes aos seus set-points, no tocante a implementação de um número N (a determinar) de ações de controle lineares (portanto, um número definido de intervalos) durante o tempo de fermentação, o que caracteriza-se como um problema de meta-otimização. Nas seções seguintes, o desenvolvimento experimental do presente trabalho será brevemente descrito, em termos do modelo cinético utilizada para a descrição do processo de fermentação, a composição da situação em estudo neste trabalho como um problema de meta-otimização, e a metodologia empregada na simulação e otimização do processo.

2.1 Modelagem do processo fermentativo

O modelo de cinética da fermentação empregado para descrever o processo é apresentado em Costa Filho *et al.* (2009), descrevendo os produtos de fermentação alcoólica em termos de um produto (etanol), substrato (glicose), e biomassa. O modelo em questão explora os efeitos nocivos da temperatura e da concentração de etanol na biota da levedura, segmentando a biomassa em termos de uma parcela viável, para a qual apresenta uma atividade metabólica normal, e uma parcela não viável, que não apresenta mais funcionalidade em termos de produção de etanol, devido à toxicidade do meio. O modelo é apresentado através das equações abaixo.

$$\frac{dV}{dt} = F \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dt} = \left[\frac{Q_{ferm}}{\rho_B c_{pB}} \right] \left(\mu \frac{X_V}{Y_{XS}} + m_X X_V \right) + \left[\frac{UA}{M_J c_p} \right] (T - T_J) \quad (2)$$

$$\frac{dX_V}{dt} = \mu X_V - K_D X_V - \frac{dV}{dt} \frac{1}{V} X_V \quad (3)$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dV}{dt} \frac{1}{V} (S_{IN} - S) - \mu \left(\frac{X_V}{Y_{XS}} \right) - m_X X_V \quad (4)$$

$$\frac{dE}{dt} = Y_{EX} \mu X_V + m_E X_V - \frac{dV}{dt} \frac{1}{V} E \quad (5)$$

$$\frac{dX_{NV}}{dt} = K_D X_V - \frac{dV}{dt} \frac{1}{V} X_{NV} \quad (6)$$

Nas equações acima mencionadas os termos V , T , T_J , S , E , X_V , X_{NV} representam o volume no tanque de fermentação (metros cúbicos), a temperatura do meio de fermentação ($^{\circ}\text{C}$), a temperatura do fluido na jaqueta que reveste o reator, a concentração de glicose (kg/m^3), a concentração de etanol no meio reacional (kg/m^3), e a concentração de biomassa viável e não viável (kg/m^3), respectivamente. Os termos ρ e c_p representam a densidade e a capacidade térmica da água, $1000 \text{ kg}/\text{m}^3$ e $1 \text{ kJ}/(\text{kg}^{\circ}\text{C})$, respectivamente, e ρ_B e c_{pB} representam, respectivamente, a densidade do mosto contido no interior da dorna de fermentação e a capacidade térmica, para os quais os valores foram assumidos como equivalentes aos da água. Os termos S_{IN} , m_E , m_X representam respectivamente a concentração de glicose na corrente de alimentação da dorna, para a qual o valor de $250 \text{ kg}/\text{m}^3$ foi utilizado no presente trabalho, a produção de etanol associado com o crescimento celular, o qual é de $0,1 \text{ kg}/(\text{kg h})$, e o coeficiente de manutenção de células, considerado como $0,2 \text{ kg}/\text{kg}$. Quanto aos termos Q_{ferm} e U , o primeiro representam respectivamente a liberação de calor devido à natureza exotérmica da reação de fermentação, para a qual foi utilizada o valor de $678,3 \text{ kJ}/\text{kg}$ no presente trabalho, e o coeficiente global de troca térmica para a jaqueta do tanque de fermentação, para a qual o valor de $1,0 \text{ (kJ / h.m}^2.^{\circ}\text{C)}$ foi utilizado. A área de troca térmica, entre o revestimento e tanque de fermentação e o meio de fermentação, $A \text{ (m}^2)$, é calculada a partir da expressão $A = 2\pi V_T / r_T$, onde V_T representa o volume do tanque de fermentação (m^3), e r_T o raio tanque de fermentação, o qual foi considerado $1,2 \text{ m}$ para o presente trabalho. As relações constitutivas utilizados na definição do modelo são apresentados nas equações abaixo.

$$\mu = \mu_{MAX} \left(\frac{S}{K_S + S} \right) (\exp[-K_I S]) \left(1 - \frac{E}{E_{MAX}} \right)^{1.5} \left[1 - \frac{(X_V + X_{NV})}{X_{MAX}} \right] \quad (7)$$

$$K_I = 1.393 \cdot 10^{-4} (\exp[0.1004T]) \quad (8)$$

$$E_{MAX} = -0.4421T^2 + 26.41T - 279.75 \quad (9)$$

$$X_{MAX} = -0.3279T^2 + 18.484T - 191.06 \quad (10)$$

$$\mu_{MAX} = 1.57 \left(\exp \left[\frac{-41.47}{T} \right] \right) - 1.29 \cdot 10^4 \left(\exp \left[\frac{-431.4}{T} \right] \right) \quad (11)$$



$$K_D = \left(4.10^{13} \exp \left[\frac{-21110,72}{T+273,15} \right] \right) \exp[(7.421.10^{-3}T^2 - 0.4654T+7.69)E] \quad (12)$$

$$Y_{XS} = 2.704[\exp(-0.1225T)] \quad (13)$$

$$Y_{ES} = 0.6911[\exp(-0.0139T)] \quad (14)$$

$$Y_{EX} = 0.2556[\exp(0.1086T)] \quad (15)$$

Nas Equações (7) a (15), os termos μ , μ_{MAX} , E_{MAX} , X_{MAX} , e K_I representam, respectivamente, a taxa de crescimento específico e o seu valor máximo (h^{-1}), a concentração máxima não-inibitória de etanol e de glicose (kg/m^3), e o coeficiente de inibição pelo substrato (kg^{-1}/m^3). O termo K_S representar a constante de saturação do substrato, para o qual foi utilizado o valor de $4,1 kg/m^3$, K_D do coeficiente de morte celular (h^{-1}), e Y_{XS} , Y_{ES} , Y_{EX} respectivamente o fator de rendimento de conversão de biomassa em função do consumo de substrato (kg/kg), o fator de rendimento de conversão de etanol em função do consumo de substrato (kg/kg), e o fator de rendimento de conversão de etanol com base na produção de biomassa (kg/kg). O referido modelo foi escolhido a fim de explorar o efeito da temperatura e concentração de etanol no meio de fermentação, e o impacto sobre o número de células viáveis de *S. cerevisiae*, uma complexa relação não linear intrínseca ao referido processo biotecnológico. O efeito da corrente de alimentação de substrato sobre a temperatura foi considerada insignificante, uma vez que reactor é considerado perfeitamente agitado.

2.2 O problema de meta-otimização

No presente trabalho, um procedimento de otimização do número de ações de controle linear para a taxa de alimentação, a vazão mássica fluxo de fluido para troca térmica na jaqueta da dorna de fermentação a temperatura do líquido neste equipamento, chamados de *shifts*, uma vez que podem representar mudanças suaves ou abruptas no perfil de controle das referidas variáveis. A descrição matemática genérica das equações lineares de ação de controle é apresentada na Equação (16).

$$V = (V_{MAX} - V_{MIN})\alpha_V + V_{MIN} \quad (16)$$

Na equação acima, o termo V representa a variável a ser otimizada para uma ação de controle específica, na qual o *set-point* da variável é determinado pelo termo α_V . A ação de controle irá ocorrer durante um intervalo específico de tempo, entre t_{V0} e t_V (variável temporal). Assim, três variáveis devem ser otimizadas para cada ação de controle. As variáveis *set-point* foram definidas no intervalo de $[0,1]$, no qual o primeiro valor corresponde ao limite inferior da variável operacional, e a segunda o seu limite superior, conforme descrito na Equação (16). Os limites para cada variável controlada são apresentados na Tabela I. De acordo com as equações do modelo apresentados nas seções anteriores, as variáveis controladas são a temperatura do fluido na jaqueta de aquecimento da dorna (T_J), o fluxo de alimentação para o reator (F) e o fluxo de massa do fluido na jaqueta (M_J).

Tabela I: Limites das variáveis controladas

Variável	Limite inferior	Limite superior
F	1 m ³ /h	10 m ³ /h
T_J	28 °C	40 °C
M_J	10 ⁻⁶ kg/h	10 ⁶ kg/h

Assim, a otimização do número de ações de controle realizadas ao longo para cada uma das variáveis controladas foi realizada utilizando uma codificação discreta (*integer-coded*) no código GA desenvolvido, explorando a sua versatilidade. Para cada conjunto de ações de controle propostos para as três variáveis (F , T_J e M_J), uma rotina de otimização incidental foi empregada usando o GA com a codificação em variáveis reais (*real coded*) já descrita, para a otimização do *set-point* para cada variável controlada, bem como o intervalo de tempo em que irá ocorrer a ação de controle. A função objetivo utilizada para o GA incidental foi a quantidade final de etanol no interior do biorreator, para a qual deseja-se a maximização, valor este que foi ponderado pelo número total de ações de controle, evitando assim que um número excessivo de ações de controle seja proposto, o que é indesejável para o âmbito de controle de processos. Assim, a função objetivo a ser calculada para o código GA principal é determinada pela expressão $OBJ = E_F V_F / N_{AC}$. Na equação descrita, o termo OBJ representa o valor da função objetivo para o GA principal (codificação discreta, responsável por otimizar o número total de ações de



controle), E_f e V_f a concentração final de etanol no interior do tanque de fermentação (kg/m^3) e o volume final no mesmo (m^3), cujo produto representam o valor função objetivo para o GA *incidental* (codificação em variáveis reais, responsável por otimizar a faixa de tempo de cada uma das ações de controle e o *set-point* destas durante os referidos intervalos), e N_{AC} o número total de ações de controle.

2.3 A simulação do processo e otimização

O processo de simulação e otimização foi realizado em através do já descrito código *in-house*, utilizando um computador com processador i5 e 8 GB de RAM, rodando o sistema operacional Linux (kernel 3.13). O processo global exigiu cerca de 48 horas de tempo total de processamento. O código de otimização de codificação versátil foi desenvolvido na linguagem computacional Python usando a estrutura de indexação de matriz otimizada *ndarray*, disponível na biblioteca Numpy (Walt *et al.*, 2011), e os GA principal e incidental utilizaram as configurações referentes ao algoritmo genético presentes nas Tabelas II e III.

Tabela II: Configuração empregada para o GA principal (número de ações de controle) e incidental (set-points e faixas de tempo de aplicação das ações) referente às taxas de crossover e mutação.

GA	Taxa de crossover	Taxa de mutação
GA 1 (principal)	60%	3%
GA 2 (incidental)	80%	1%

Tabela III: Configuração empregada para o GA principal (número de ações de controle) e incidental (set-points e faixas de tempo de aplicação das ações) referentes aos operadores de crossover e mutação.

GA	Operador de crossover	Operador de mutação
GA 1 (principal)	Aritmético	Gaussiano
GA 2 (incidental)	Aritmético	Gaussiano

A simulação do processo de fermentação, descrito através do modelo apresentado nas Equações 1-15, foi realizada através da integração do referido modelo sobre o tempo de processo, para o qual foi utilizado o tempo de simulado de 24 horas. A integração foi realizada através da utilização da biblioteca *Scipy* (Jones *et al.*, 2001), que encapsula a rotina *ODEPACK* (Hindmarsh, 1983; Radhakrishnan&Hindmarsh, 1993; Brown &Hindmarsh, 1984). As configurações iniciais empregadas para o processo de fermentação simulado foram: volume do tanque inicial (V_0) de 20 m^3 , temperatura inicial (T_0) de $25 \text{ }^\circ\text{C}$, concentração inicial da biomassa de levedura (X_0) de 31 kg/m^3 . A concentração inicial de etanol, glicose e biomassa não viáveis (E_0 , S_0 e X_{NV0} , respectivamente) foram consideradas nulas. A concentração de glicose nacorrente de alimentação do biorreator, S_{IN} , foi de 200 kg / m^3 .

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A maximização da quantidade de etanol produzido no processo de fermentação simulado foi desenvolvido utilizando a metodologia descrita nas secções anteriores. Através da utilização do algoritmo de meta-otimização, uma matriz otimizada das ações de controle foi obtido (representados pelos termos N_F , N_{Tj} , N_{Mj} , respectivamente), para o qual o montante resultante de etanol ($V_f E_f$) produzidos e volume de conteúdo do reactor (FV) no final do processo e o volume do tanque de fermentação é apresentada na Tabela IV.

Tabela IV: Resultados obtidos no presente trabalho

N_F	N_{Tj}	N_{Mj}	E_f	V_f	$E_f V_f$
4	4	2	$85,94 \text{ kg/m}^3$	$236,32 \text{ m}^3$	20287.21 kg



Nas Figuras 1 e 2, são apresentados os perfis de fermentação (X , S , E) e o perfil dos *set-points* para o processo de fermentação (F , T_j , M_j) determinado pela rotina de meta-otimização.

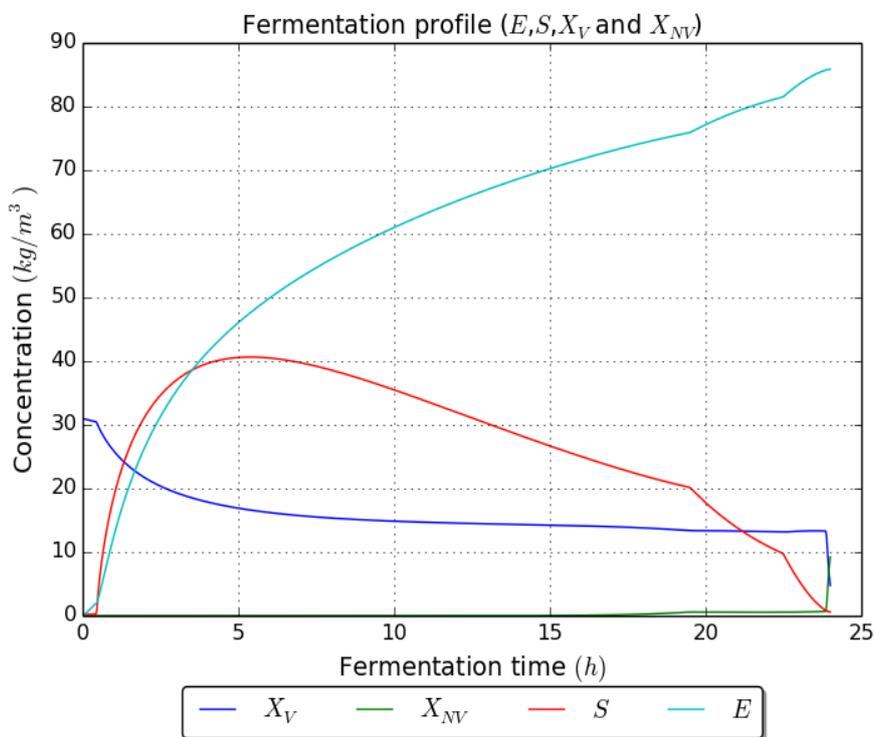


Figura 1: Perfil de fermentação para o processo

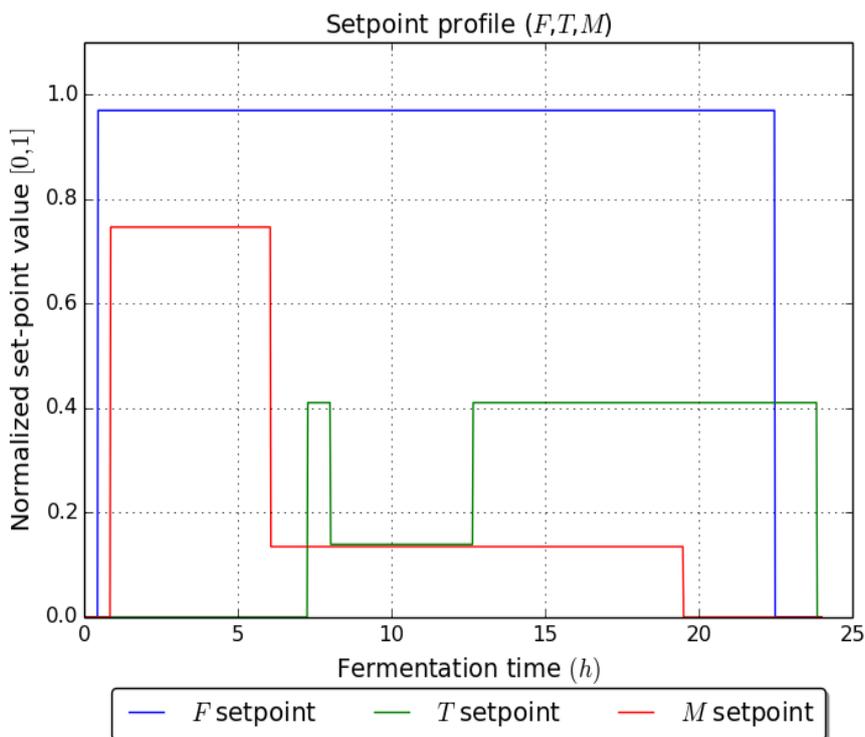


Figura 2: Perfil de *set-point* para as variáveis controladas ao longo do processo



4 CONCLUSÃO

Os resultados indicam que a rotina de meta-otimização proposta neste trabalho foi capaz de maximizar a produção do etanol na dorna de fermentação ao longo do tempo de processo, tal como apresentado na Figura 1, minimizando paralelamente a formação de biomassa não viável e estresse exercido na parcela viável da biomassa através da inibição pelo produto e substrato.

Em termos gerais, a elevada concentração de produto final indica que a estratégia de otimização para o controle de variáveis operacionais desenvolvidos no presente trabalho mostrou-se eficiente em termos dos objetivos propostos

REFERÊNCIAS

BAEYENS, Jan, KANG, Qian, APPELS, Lise, DEWIL, Raf, Lv, Yongqin, TAN, Tianwei. **Progress in Energy and Combustion Science**, Vol. 47, 2015, p. 60-88.

BAI, F.W., ANDERSON, W.A., MOO-YOUNG, M., **Biotechnology Advances**, Vol. 26, 2008, p. 89-105.

AMILLASTRE, Emilie, LARA, César-Arturo Aceves-, URIBELARREA, Jean-Louis, ALFENORE, Sandrine, GUILLOUET, Stéphane E. **Bioresource Technology**, Vol. 117, 2012, p. 242-250.

SARKAR, D., MODAK, J.M. **Computers & Chemical Engineering**, Vol. 28, 2008, p. 789-798.

MAGAZONI, Felipe Costa, MONTEIRO, Julieta Barbosa, DEUCHER, Ricardo, COSTA FILHO, Marcus Vinícius Americano da, CARDEMIL, José Miguel, COLLE, Sergio. Cooling of ethanol fermentation process using absorption chillers. In: 22nd International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems, Foz do Iguaçu, Paraná, Brasil, 2009.

WALT, Stéfan van der, COLBERT, S. Chris, VAROQUAUX, Gaël. **Computing in Science & Engineering**, Vol. 13, 2011, p. 22-30.

JONES E., OLIPHANT E., PETERSON P., *et al.* **SciPy: Open Source Scientific Tools for Python**, 2001, Disponível em: <www.scipy.org>. Acesso em: 30/06/2015.

HINDMARSH, A. C. ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers. *In: Scientific Computing*, R. S. Stepleman *et al.* (Eds.), North-Holland, Amsterdam, 1983, p. 55-64.

RADHAKRISHNAN, K., HINDMARSH, A. C. "Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations," LLNL report UCRL-ID-113855, Dezembro, 1993.

BROWN, P.N., HINDERMASH, A.C., **Journal of Applied Mathematics and Computing**, Vol. 31, 1989, p. 40-91.