



UNIVERSIDADE FEDERAL DE TOCANTINS
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE PALMAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM AGROENERGIA DIGITAL

MARIANA MOREIRA SIDEL MAIA

**SIMULAÇÃO DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR E MASSA NA PRODUÇÃO DE
CELULASES POR FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO EM BIORREATOR DE
BANDEJAS**

Palmas (TO)
2024

MARIANA MOREIRA SIDEL MAIA

**SIMULAÇÃO DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR E MASSA NA PRODUÇÃO DE
CELULASES POR FERMENTAÇÃO EM ESTADO SÓLIDO EM BIORREATOR DE
BANDEJAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Agroenergia Digital da Universidade Federal de Tocantins em 2024. Foi avaliada para obtenção do título de Mestre em Agroenergia e aprovada em sua forma final pelo orientador e pela banca examinadora.

Orientadora: Prof^ª Dra. Lina María Grajales Agudelo

Co-orientadora: Prof^ª Dra. Fernanda Perpétua Casciotori

Data de aprovação: 01/08/2024

Banca Examinadora:

Prof^ª Dra. Lina María Grajales Agudelo

Prof^ª Dra. Fernanda Perpétua Casciotori

Prof^ª Dra. Claudia Gutiérrez Antonio

Prof^ª Dra. Juliana Lobo

Palmas (TO)
2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Tocantins

- M217s Maia, Mariana Moreira Sidel.
 Simulação da transferência de calor e massa na produção de celulases por
 fermentação em estado sólido em biorreator de bandejas. / Mariana Moreira
 Sidel Maia. – Palmas, TO, 2024.
 65 f.
- Dissertação (Mestrado Acadêmico) - Universidade Federal do Tocantins –
 Câmpus Universitário de Palmas - Curso de Pós-Graduação (Mestrado) em
 Agroenergia, 2024.
 Orientadora : Lina Maria Grajales Agudelo
 Coorientadora : Fernanda Perpétua Casciatori
1. Fenômenos de transporte. 2. Celulases. 3. Biorreator. 4. Fermentação em
 estado sólido (FES). I. Título

CDD 333.7

TODOS OS DIREITOS RESERVADOS – A reprodução total ou parcial, de qualquer
forma ou por qualquer meio deste documento é autorizado desde que citada a fonte.
A violação dos direitos do autor (Lei nº 9.610/98) é crime estabelecido pelo artigo 184
do Código Penal.

**Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica da
UFT com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).**

A Deus;

Ao meu esposo Thales, meu porto seguro, por todo companheirismo e apoio;

Aos meus filhos José Pedro e Maria Antônia, minha maior riqueza, pelos sorrisos e amor
incondicional;

Aos meus pais, meus maiores exemplos, por me permitirem chegar até aqui;

DEDICO.

AGRADECIMENTOS

A Deus e Nossa Senhora, por ter me sustentado até aqui. Gratidão por ter me permitido sonhar e realizar esse sonho.

À professora Dra. Lina, orientadora dessa tese, por todo ensinamento e dedicação ao longo desses três anos. Seu incentivo e aconselhamento foram fundamentais ao longo desta caminhada, foi um presente ser sua orientada, meu sincero muito obrigada;

À professora Dr^a Fernanda pela co-orientação e pelos grandes esforços despendidos mesmo à distância;

Aos meus pais, José Sidel e Maria Madalena Sidel, que sempre me ensinaram que a maior herança deixada a um filho é o estudo, graças a eles, pude chegar até aqui. A vocês, meu muito obrigada por todo amor e dedicação.

Ao meu esposo Thales, por todo apoio e incentivo durante essa longa e desafiadora caminhada, obrigada por não me deixar desistir nos momentos em que eu pensei não ser possível conseguir, você foi fundamental nessa jornada.

Ao meu filho José Pedro, que esteve comigo desde o início dessa caminhada e a minha filha Maria Antônia, que chegou na reta final dessa dissertação, obrigada por todos sorrisos e traquinagens, e por entenderem os momentos de ausência, vocês são minha maior motivação.

Ao meu irmão Salmo Sidel e minha cunhada Carolina D'Oliveira, por sempre se fazerem presentes e jamais medirem esforços quando eu precisei de ajuda.

Ao meu irmão Stenio Sidel, por ter me apresentado o mestrado.

Aos colegas que fiz ao longo desses anos no Mestrado, em especial a Taís e a Ana Carolina.

A todas as pessoas que, direta ou indiretamente, contribuíram para com a realização desta dissertação de Mestrado.

À Universidade Federal do Tocantins, à Pós-Graduação da Agroenergia e a professora Dr^a Flávia pela oportunidade de ingresso no mestrado.

Aos membros da Comissão Examinadora da minha Qualificação, professora Dr^a Juliana Lobo (UFRRJ) e professora Dr^a Claudia Gutiérrez (Facultad de Ingeniería Universidad Autónoma de Querétaro) que, por meio de suas sugestões, contribuíram para com o direcionamento das etapas finais do trabalho.

À CAPES, fomentadora desta pesquisa científica, pelo apoio financeiro com Bolsa de Mestrado.

RESUMO

Os resíduos agroindustriais vêm se tornando uma matéria prima promissora quando se buscam alternativas sustentáveis ao uso de combustíveis fósseis. Diante deste cenário, as celulases vêm ganhando atenção global, devido a sua utilização para produção de biocombustíveis à base de biomassa de resíduos celulósicos, entre outras vantagens, por ser uma tecnologia de produção de combustível limpo e verde. Devido à relevância temática, a presente dissertação tem como objetivo adequar um modelo e simular a transferência de calor e umidade no processo de produção de celulases por Fermentação em Estado Sólido (FES) a partir do fungo *Myceliophthora thermophila* I1D3b, utilizando bagaço de cana e farelo de trigo como substratos em um biorreator de bandejas em escala piloto. Para isto, foram elencadas e adaptadas equações de equilíbrio individuais disponíveis na literatura, tanto para fase sólida quanto para fase gasosa e, um balanço de matéria para água. As demais propriedades físicas e térmicas do leito, condições do processo fermentativo e parâmetros microbianos foram extraídos de trabalhos encontrados na literatura científica. Posteriormente, elaborou-se uma rotina para simulação em MatLab® R2023b (MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, Estados Unidos) dos modelos propostos. Os modelos propostos foram capazes de prever os perfis de temperatura, umidade e a cinética de produção de celulases, ao longo do processo de cultivo e em qualquer posição do leito. Os resultados das simulações mostraram que a entrada de ar com 50% de umidade relativa causa um aumento na temperatura próximo a bordo de saída da bandeja e uma redução severa do conteúdo de umidade da matriz sólida até aproximadamente os primeiros 30 cm do comprimento total das bandejas do biorreator. Posteriormente, ar e sólido entram em equilíbrio e a secagem cessa. Mesmo ocorrendo um aumento na temperatura nas posições finais do leito, esta não se mostrou tão deletéria para o crescimento fúngico quanto a limitação pela sua atividade de água. Nos dados das simulações, foi observado então, que a secagem do leito é mais impactante ao crescimento fúngico, do que o aumento de temperatura, quando se trabalha com fungos termofílicos.

Palavras-chave: agroenergia, fenômenos de transporte, modelagem matemática, *Myceliophthora thermophila*, etanol de segunda geração, biocombustíveis.

ABSTRACT

Agro-industrial waste has become a promising raw material when seeking sustainable alternatives to the use of fossil fuels. In this scenario, cellulases have been gaining global attention due to their use in the production of biofuels based on cellulosic waste biomass, among other advantages, as it is a clean and green fuel production technology. Due to the thematic relevance, this dissertation aims to adapt a model and simulate the heat and moisture transfer in the cellulase production process by Solid State Fermentation (SSF) from the fungus *Myceliophthora thermophila* I1D3b, using sugarcane bagasse and wheat bran as substrates in a pilot-scale tray bioreactor. For this, individual equilibrium equations available in the literature were listed and adapted, both for the solid and gas phases, and a matter-to-water balance. The other physical and thermal properties of the bed, fermentation process conditions and microbial parameters were extracted from studies found in the scientific literature. Subsequently, a routine for simulation of the proposed models was developed in MatLab® R2023b (MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, United States). The proposed models were able to predict the temperature, humidity and cellulase production kinetics profiles throughout the cultivation process and in any position of the bed. The simulation results showed that the entry of air with 50% relative humidity causes an increase in temperature near the outlet edge of the tray and a severe reduction in the moisture content of the solid matrix up to approximately the first 30 cm of the total length of the bioreactor trays. Subsequently, air and solid reach equilibrium and drying ceases. Even though there is an increase in temperature at the final positions of the bed, this was not shown to be as deleterious to fungal growth as the limitation by its water activity. The simulation data showed that bed drying has a greater impact on fungal growth than temperature increases when working with thermophilic fungi.

Keywords: agroenergy, transport specifications, mathematical modeling, *Myceliophthora thermophila*, second-generation ethanol, biofuels

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Estrutura da parede celular da cana de açúcar

Figura 2 – Mercado global enzimático por setor econômico em 2021 e perspectivas para 2031

Figura 3 – Diferentes configurações de biorreatores para FES

Figura 4 – Bagaço de cana de açúcar e farelo de trigo na proporção 7:3

Figura 5 – Diagrama esquemático em 3D do biorreator de bandejas

Figura 6 – Esquema de uma das bandejas com fundo perfurado

Figura 7 – Corte total da vista frontal do biorreator de bandejas.

Figura 8 – Elemento de volume representativo (EVR) do leito de partículas

Figura 9 – Perfis preditos em função do tempo e da posição longitudinal nas bandejas, para entrada de ar com 50% de UR a 12 L/min: (a) Temperaturas da fase sólida; (b) Temperatura da fase gasosa; (c) Conteúdo de umidade da fase gasosa; (d) conteúdo de umidade da fase sólida; (e) concentração da biomassa fúngica; (f) Concentração de substrato.

Figura 10 – Detalhes das predições: (a) Temperatura da fase sólida na entrada, meio e saída do leito fermentativo em função do tempo; (b) Umidade da fase sólida em função do tempo, para várias posições longitudinais; (c) Umidade final da fase sólida em função da posição longitudinal; (d) Concentração de biomassa fúngica em função do tempo, para várias posições longitudinais.

Figura 11 – Efeito da vazão de ar de entrada nas variáveis da fase sólida: (a) T_s ($z/L = 0,995$); (b) X ($z/L = 0,005$).

Figura 12 – Efeito da umidade relativa do ar de entrada nas variáveis da fase sólida: (a) T_s ($z/L = 0,995$); (b) X ($z/L = 0,005$); X em função de z ($t = 96$ h).

Figura 13 – Perfis temporais de concentração de biomassa: (a) para ar de entrada com UR 50%; (b) para ar de entrada com UR 95%.

Figura 14 – Efeitos dos parâmetros microbianos nas previsões do modelo para perfis temporais de temperatura da fase sólida (T_s) em $z/L = 0,995$: (a) μ_{opt} ; (b) b_{max} ; (c) b_0 ; (d) R_Q . Todos os demais parâmetros com valores sob condições de referência de acordo com a Tabela 1.

Figura 15 – Efeito das propriedades físicas da matriz porosa nas previsões do modelo para perfis temporais de: (a) X em $z/L = 0,05$, variando D_s ; (b) T_s em $z/L = 0,995$, variando k_s ; (c) T_s em $z/L = 0,995$, variando ε_0 (d) X em $z/L = 0,05$, variando ε_0 . Todos os demais parâmetros com valores sob condições de referência de acordo com a Tabela 1.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Composição média do bagaço de cana

Tabela 2 – Definições de parâmetros e variáveis e valores das condições de referência para simulação do estudo de caso (*)

Tabela 3 – Resultado da análise da sensibilidade aos parâmetros.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	12
2.1	Etanol de segunda geração	12
2.2	Celulases	13
2.3	Fermentação em Estado Sólido (FES)	15
2.4	Biorreatores	16
2.5	Modelagem e simulação	18
3	OBJETIVOS	20
3.1	Objetivo Geral	20
3.2	Objetivos Específicos	20
4	METODOLOGIA	21
4.1	Estudo de Caso	21
4.1.1	Partículas	21
4.1.2	Biorreator de bandejas	22
4.1.3	Determinação e cálculo de propriedades	25
4.1.4	Adequação do modelo de transferência de calor e umidade	25
4.1.5	Simulação em rotinas de MatLab®	26
4.2	Definição dos parâmetros para simulação do estudo de caso	27
4.2.1	Condições iniciais e de contorno	30
4.3	Modelagem matemática	31
4.4	Modelagem da transferência de calor	32
4.4.1	Balanço de energia na fase gasosa	32
4.4.2	Balanço de energia para a fase sólida	33
4.5	Modelagem da transferência de água	34
4.5.1	Balanço de massa para vapor de água na fase gasosa	34
4.5.2	Balanço de massa para água na fase sólida	34
4.5.3	Crescimento fúngico e taxa de crescimento específica	35
4.5.4	Balanço de massa para sólidos secos totais	37
4.5.6	Teor de umidade da fase gasosa	37
4.5.7	Isoterma de sorção da fase sólida	38
4.5.8	Parâmetros de transporte de massa para o gás e para a fase sólida	38

4.5.2.	Coefficiente de transferência de massa na interface gás-sólido	39
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	41
5.1	Previsões no biorreator de bandeja para simulação do estudo de caso nas condições de referência	41
5.2	Previsões no biorreator de bandeja para simulação do estudo de caso sob outro conjunto de condições operacionais	46
5.3	Previsões no biorreator de badeira para simulação do estudo de caso para outros valores de substrato e parâmetros microbianos	50
5.4	Observações finais	55
6	CONCLUSÕES	57
	REFERÊNCIAS	58

1 INTRODUÇÃO

O etanol de segunda geração (2G) é uma alternativa sustentável quando se buscam meios para a obtenção de biocombustíveis. Sua produção consiste basicamente em quatro etapas: pré-tratamento, hidrólise enzimática, fermentação e purificação ou destilação. O pré-tratamento visa quebrar a camada externa de lignina, para expor as moléculas de celulose e hemicelulose existentes na biomassa lignocelulósica, permitindo assim a ocorrência das etapas seguintes (DE C. L. E PENALVA SANTOS et al., 2023; DOS SANTOS, 2012; HAMELINCK; VAN HOOIJDONK; FAAIJ, 2005). Na hidrólise enzimática, um processo de conversão seletiva utiliza condições operacionais específicas para cada organismo a fim de transformar os componentes em açúcares mais simples, permitindo a conversão em etanol e dióxido de carbono, através das leveduras, durante a etapa de fermentação (DE C. L. E PENALVA SANTOS et al., 2023). Por último, ocorre a destilação, onde o produto final é recuperado e separado, obtendo bioetanol e água (BALAT, 2011; CANILHA et al., 2012; DE C. L. E PENALVA SANTOS et al., 2023; LIMAYEM; RICKE, 2012).

A produção de etanol a partir de biomassa pela rota enzimática gera poucos resíduos químicos a serem tratados, tornando-a menos agressiva para o meio ambiente (MENDES; ATALA; THOMÉO, 2017). Porém, o alto custo para obtenção das enzimas celulolíticas (celulases) utilizadas nesse processo é um grande gargalo para tornar o etanol 2G uma realidade.

Atualmente, as enzimas estão sendo produzidas a partir do substrato celulósico comercial “avicel” e isso torna a sua produção aproximadamente 40% mais cara, impactando diretamente no custo de produção de biocombustíveis (AREESHI, 2022). Para a transformação econômica da biomassa lignocelulósica em biocombustíveis, é essencial a produção a menor custo das enzimas celulolíticas (CHAKRABORTY et al., 2016; JASANI et al., 2016). Para isto, as usinas poderiam produzir suas próprias enzimas, utilizando seus resíduos como substratos, favorecendo o crescimento de microrganismos por processos de fermentação em estado sólido (FES) (AREESHI, 2022; JULIA et al., 2016; MENDES; ATALA; THOMÉO, 2017).

Os resíduos usados nos processos FES fornecem um habitat similar ao natural para o crescimento de microrganismos, podendo crescer na superfície das partículas úmidas na ausência ou quase ausência de água livre (BEHERA; RAY, 2016), permitindo assim a obtenção de produtos com grande valor agregado (CASCIATORI, 2015).

Os equipamentos nos quais as reações acontecem são denominados biorreatores e são considerados o coração do bioprocessamento (RAGHAVARAO; RANGANATHAN; KARANTH, 2003). Eles têm como principais funções: sustentar a estrutura do substrato, prover uma barreira

contra dispersão de microrganismos, proteger o sistema contra possíveis contaminações, proporcionar condições adequadas de temperatura e atividade da água para o desenvolvimento microbiano e síntese do bioproduto de interesse (DALLASTRA et al., 2023; RODRIGUES; SÁ; CASCIATORI, 2020).

Apesar do potencial de aplicação acima mencionado, a produção de enzimas celulolíticas por FES ainda não está consolidada com sucesso como uma alternativa industrial e um dos fatores é a falta de biorreatores industriais para este tipo de processos (CASCIATORI et al., 2023). Dentre as configurações de biorreatores existentes, o biorreator de bandejas, vem sendo objeto de estudo do grupo de pesquisa de Engenharia de Biorreatores da Universidade Federal do Tocantins, campus de Palmas (DALLASTRA et al., 2023; DINIZ et al., 2022). Ele é um dos mais usados, devido aos resultados serem facilmente escaláveis, podendo ser reproduzido em tamanho industrial (LEITE et al., 2021). Graças à entrada de ar ao reator, é possível remover parte do calor metabólico gerado pelos microrganismos. O ar sai mais quente do que entra transportando maior quantidade de água da que continha na entrada (DINIZ et al., 2022; DUTRA, 2020). Então, há uma grande necessidade de controlar as variáveis operacionais, na tentativa de resolver o problema de transferência de massa e calor dentro dos biorreatores. Uma forma de prever e descrever este tipo de fenômenos, sem a necessidade de experimentação ou construção de protótipos, é modelar por meio de expressões matemáticas a transferência de calor e massa (DINIZ DA SILVA et al., 2024; DUTRA, 2020).

Desta forma, os modelos matemáticos podem ser utilizados para o dimensionamento dos biorreatores para FES em larga escala, e junto com simulações computacionais, como a simulação em rotinas de MatLab®, há uma grande perspectiva na superação dos desafios enfrentados nesse contexto. Além disso, é possível, mediante um conjunto de equações constituído por um número finito de variáveis e parâmetros, representar diferentes sistemas (DINIZ, 2023), propondo alternativas, no intuito de aumentar a produtividade e permitir assim a otimização dos processos (DINIZ, 2023; GARRO; RIVAS; GARRO, 2021; GRAJALES et al., 2012).

Dada a grande importância da simulação no projeto de biorreatores que permitam aumentar a escala de produção em processos FES, este trabalho propôs simular em rotinas de MatLab® a transferência de calor e massa na produção de celulasas por FES em um biorreator de bandejas a partir de bagaço de cana e farelo de trigo, visando sua utilização na produção de etanol 2G.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Etanol de segunda geração

Os biocombustíveis vêm ganhando grande destaque no cenário mundial, devido aos problemas ambientais e políticos relacionados à escassez dos combustíveis fósseis (BORGES et al., 2017). Os de primeira geração, obtidos pela fermentação de açúcares (sacarose, glicose e frutose) e cereais (CHERWOO et al., 2023), possuem vantagens na sua produção, como um menor impacto econômico, com menos emissões de carbono e menos bioprodutos para o meio ambiente (WU et al., 2018), grande adaptabilidade (VIESTURS; MELECE, 2014) e disponibilidade, pois sua produção utiliza fontes renováveis (DATTA; HOSSAIN; ROY, 2019), sendo então uma grande alternativa ecológica (PETROU; PAPPIS, 2009). Porém, mesmo em processos altamente eficientes, o seu rendimento não é suficiente para torná-los uma alternativa melhor aos combustíveis convencionais (CHERWOO et al., 2023). Em contrapartida, os biocombustíveis de segunda geração são produzidos a partir de açúcares provenientes da quebra de cadeias de celulose e hemicelulose (CASCIATORI, 2015), cujo substrato é ecologicamente correto e proporciona um uso sustentável dos resíduos sólidos (CHERWOO et al., 2023).

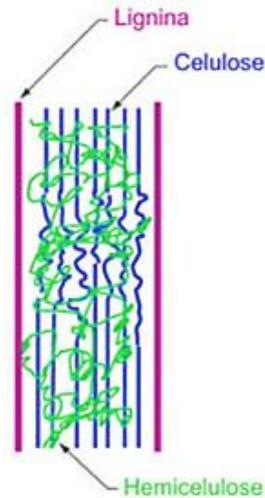
A produção de etanol 2G, oriundo de biomassa lignocelulósica, é uma alternativa sustentável, visto que não compete com a alimentação humana e não impõe impactos adicionais ao meio ambiente e sua biodiversidade, uma vez que a cana já é plantada no Brasil para produzir etanol de primeira geração (MENDES; IBRAIM PIRES ATALA; THOMÉO, 2017).

A biomassa lignocelulósica é composta de celulose, hemicelulose e lignina, conforme mostra a Figura 1. De modo geral, a produção de etanol, a partir dessa biomassa, se dá pelas seguintes etapas: pré-tratamento, primeira etapa do processo, onde ocorre a ruptura da estrutura da biomassa, ou deslignificação do material; hidrólise, processo em que ocorre a liberação dos açúcares fermentescíveis; fermentação, nessa etapa os açúcares serão convertidos em etanol e pôr fim a destilação, necessária para a remoção de resíduos do produto final e a sua especificação para uso comercial (GRAJALES, 2014; MISHIMA et al., 2006).

A etapa de hidrólise pode ocorrer de forma química ou enzimática, sendo a enzimática uma alternativa vantajosa quando comparada a rota química, pois resulta em menores custos de operação e maiores rendimentos de açúcares de baixo peso molecular (BERNHARDT et al., 2021). Na rota enzimática usam-se vários tipos de enzimas, como ligninases, celulasas e hemicelulasas, dentro destes grupos, as celulolíticas tem recebido atenção das comunidades

científicas e tecnológicas pela sua capacidade de despolimerizar a biomassa de resíduos agrícolas em açúcares fermentáveis por meio de uma rota ecologicamente correta (CASCIATORI et al., 2016).

Figura 1 – Estrutura da parede celular da cana de açúcar.



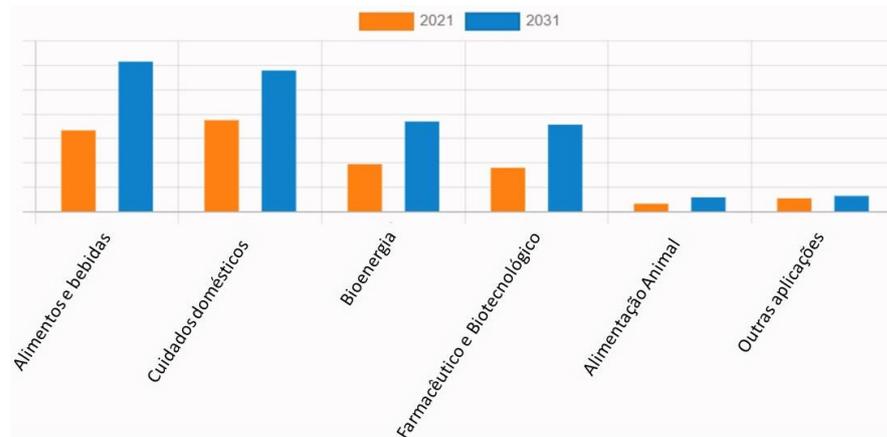
Fonte: adaptado de DOS SANTOS (2012).

2.2 Celulases

As celulases são uma classe de enzimas constituídas por endoglucanase, exoglucanase e β -glicosidases (CASCIATORI, 2015). Essa classe atua em conjunto na degradação da biomassa celulósica para a produção de açúcares através do processo de hidrólise enzimática (AREESHI, 2022; BHATTACHARYA; BHATTACHARYA; PLETSCHKE, 2015; KUHAD et al., 2016) e assim possibilitar sua conversão em biocombustíveis (SHARMA et al., 2016).

Atualmente, as celulases são enzimas industriais altamente demandadas no mercado comercial global devido à sua ampla utilidade em diferentes setores industriais (AREESHI, 2022; EJAZ; SOHAIL; GHANEMI, 2021), como mostra a Figura 2. Dentre as indústrias nas quais as enzimas celulases estão sendo utilizadas em larga escala, podemos citar a produção de biocombustíveis à base de biomassa, fabricação de detergentes, papel e celulose e na clarificação e intensificação de aromas de sucos de frutas (AREESHI, 2022).

Figura 2 – Mercado global enzimático por setor econômico em 2021 e perspectivas para 2031.



Fonte: adaptado de SURAJ S (2022).

Dentre todas as possíveis aplicações das celulases, a produção de biocombustíveis à base de biomassa de resíduos celulósicos vem ganhando atenção global devido a uma série de vantagens, dentre elas, podemos citar, a tecnologia de produção de combustível limpo e verde, bem como a gestão e valorização de resíduos. (AREESHI, 2022; GUERRIERO et al., 2016; MAHATO et al., 2021). No processo de produção de etanol, a celulase desempenha um papel vital na hidrólise, que é a etapa crucial na produção de açúcares e sua posterior conversão em biocombustíveis (SHARMA et al., 2016). Mas, em contrapartida, o baixo rendimento e o alto custo da enzima celulolítica ainda são fatores impeditivos para a geração econômica de biocombustíveis (CERDA et al., 2019; JASANI et al., 2016; SINGHANIA et al., 2021).

As celulases são produzidas a partir de microrganismos, como bactérias e fungos (BHARDWAJ et al., 2021). Outra forma de obter celulases é por processos de fermentação em estado sólido (FES), onde os substratos utilizados podem ser oriundos da agroindústria (DINIL; JACOB, 2022; SIQUEIRA et al., 2020; SRIVASTAVA et al., 2021). Os resíduos agroindustriais, como a palha e o bagaço da cana, palha de milho, farelo de trigo, dentre outros, possuem biomassa lignocelulósica, que são uma rica fonte de açúcares fermentativos, a partir da qual diferentes processos de transformação podem produzir biocombustíveis (AREESHI, 2022; ILI, 2023; RASTOGI; SHRIVASTAVA, 2017).

2.3 Fermentação em Estado Sólido (FES)

Por definição, a FES é uma biotecnologia comumente usada para o cultivo de microrganismos, fungos filamentosos em sua maioria, em substratos sólidos sem fluxo aquoso livre, ou seja, o substrato sólido contém umidade suficiente para suportar as atividades microbianas sem adição de água (MITCHELL; KRIEGER; BEROVIC, 2006). Os espaços entre partículas contêm uma fase gasosa contínua e a água está impregnada ou está na forma de um fino filme sobre as partículas (CASCIATORI, 2015; PESSOA, 2016). O substrato sólido pode ser a fonte de nutrientes dos microrganismos cultivados ou apenas uma matriz de suporte impregnada com nutrientes específicos para o desenvolvimento do microrganismo (DAS; BHAT; SELVARAJ, 2019; KUMAR et al., 2011; SINGHANIA et al., 2018).

A tecnologia FES oferece diversas e novas oportunidades de processo, pois permite a utilização de subprodutos agroindustriais como substratos sem que haja necessidade de um pré-tratamento extensivo, produzindo altas concentrações de produtos de grande interesse do mercado, como as enzimas (CASCIATORI et al., 2016).

A FES apresenta vantagens sobre a Fermentação Submersa (FSb). Dentre elas, o meio de cultura necessita de pequena adição de nutrientes, a baixa umidade do meio fermentativo leva a menores riscos de contaminação, a aeração facilitada pela porosidade do material, o inóculo servido pela microflora nativa do suporte, os materiais fermentados podem ser utilizados diretamente e a extração facilitada devido à alta concentração de produtos (PESSOA, 2016; UMSZA-GUEZ, 2009).

O sucesso desta metodologia leva em consideração a seleção do microrganismo e do substrato, parâmetros de processos otimizados e ainda a purificação do produto final (SINGHANIA et al., 2009). Apesar das vantagens citadas, a FES ainda não é uma técnica consolidada quando se trata de um processo industrial. A transferência de calor e massa dentro dos leitos de partículas sólidas é um dos problemas enfrentados por essa técnica, pois estas são relativamente baixas e, com isso, a remoção do calor metabólico residual produzido pelo microrganismo torna-se um grande desafio (PESSOA et al., 2016; TARAFDAR et al., 2021; VON MEIEN et al., 2004).

Portanto, aumentar a escala de produção em FES tem sido um grande gargalo há muito tempo, as dificuldades de operação e otimização em escala industrial, especificamente pelo difícil controle de umidade e temperatura dentro desses, acabam tornando os processos muito limitados (AREESHI, 2022; DA CUNHA et al., 2009; GRAJALES AGUDELO, 2010; LIMA,

2009). Na tentativa de superar as dificuldades enfrentadas pelos processos FES, os equipamentos onde as reações de transformação ocorrem, chamados biorreatores, vêm sendo estudados e analisados (GRAJALES AGUDELO, 2010; RAMESH et al., 2019; TADA, 2020; VON MEIEN et al., 2004).

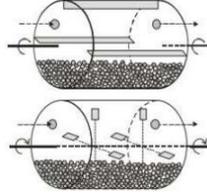
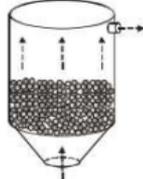
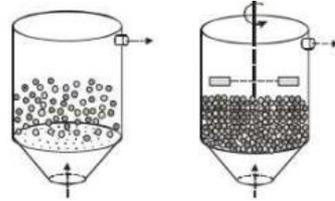
2.4 Biorreatores

O biorreator é considerado para a FES o coração do processo (Raghavarao et al., 2003), e tem como principais funções: sustentar a estrutura do substrato; fornecer uma barreira contra a dispersão dos microrganismos; evitar possíveis contaminações do sistema; proporcionar condições adequadas de temperatura e atividade da água para o desenvolvimento dos microrganismos e sintetizar o bioproduto de interesse (MITCHELL; KRIEGER; BEROVIĆ, 2006; RODRIGUES; SÁ; CASCIATORI, 2020).

O projeto de um biorreator de estado sólido deve se concentrar em cinco áreas principais: (1) controle do teor de umidade; (2) transferência de O₂; (3) CO₂ evoluído; (4) maximizar a remoção de calor e (5) monitorar a temperatura (MANAN e WEBB, 2020). A principal preocupação, é a difícil remoção do calor metabólico gerado dentro do biorreator durante a fermentação em estado sólido, que pode ser corrigida principalmente pelo processo de resfriamento evaporativo, porém em pequena escala (KUMAR ET AL., 2021; ASHOK ET AL., 2017).

Ao longo dos anos, os biorreatores FES estiveram em processo de rápidas modificações e avanços para maximizar a produtividade e aumentar a utilização comercial dos processos FES (ARORA; RANI; GHOSH, 2018). Apesar dos avanços, o principal obstáculo na industrialização do processo de FES continua sendo a falta de biorreatores simples, eficientes e facilmente escaláveis, que poderiam abordar com sucesso o acúmulo de calor, a heterogeneidade (calor e massa) do sistema e, ao mesmo tempo, operar com máxima esterilidade (PAPAGIANNI, 2014). Para controlar os parâmetros de temperatura, umidade, pH, entre outros, até que se tornem condições favoráveis para a FES, pesquisas tem sido realizadas com as diferentes configurações de biorreatores, como os de bandejas, leito empacotado, tambores rotativos e leito fluidizado, como pode ser visto na Figura 3, visando desempenhar um papel crucial na análise, projeto e desenvolvimento da aplicação da FES (SINGHANIA et al., 2018; KUMAR et al., 2021; CHILAKAMARRY et al., 2022).

Figura 3 – Diferentes configurações de biorreatores para FES.

Aeração ↓	Agitação →	Sem agitação (ou pouco frequente)	Agitação contínua ou frequente
Sem aeração forçada (o ar passa sobre o leito)		Biorreatores de bandeja ou similares 	Biorreatores de tambor rotativo e agitado 
Aeração forçada (o ar é forçado para passar por dentro do leito)		Biorreatores de leito empacotado 	Biorreatores de leito fluidizado ou agitado 

Fonte: adaptado de LIMA (2009).

O projeto do biorreator utilizado depende amplamente da matriz sólida utilizada, pois os substratos usados na FES diferem muito em composição, natureza química, propriedades mecânicas, tamanho de partícula (incluindo espaços inter e intrapartículas), capacidade de retenção de água, área de superfície, entre outros (KUMAR et al., 2021; SINGHANIA et al., 2018). Todos esses fatores podem afetar o projeto do biorreator e o controle estratégico dos parâmetros (DURAND, 2003), tornando os processos da FES altamente heterogêneos. Assim, mesmo que um processo eficaz seja projetado e desenvolvido para um substrato específico e um conjunto de condições, o mesmo processo pode ser difícil de aplicar quando o substrato ou o microrganismo for alterado (LÓPEZ-GÓMEZ; VENUS, 2021).

Portanto, a maioria dos poucos biorreatores em escala industrial são baseados nos tradicionais biorreatores de bandeja (LÓPEZ-GÓMEZ e VENUS 2021; CHILAKAMARRY et al., 2022). Entretanto, apenas camadas finas podem ser usadas em biorreatores de bandeja para evitar a ocorrência de superaquecimento e manter as condições aeróbicas, ou seja, esses sistemas são restritos a pequenos volumes de substratos sólidos (LÓPEZ-GÓMEZ; VENUS, 2021). Diante do exposto, visando fornecer informações sobre como os fenômenos que ocorrem dentro do sistema de fermentação se combinam resultando no desempenho geral do processo, orientando assim o projeto e a operação dos biorreatores (MITCHELL; VON MEIEN;

KRIEGER, 2003), faz-se uso da modelagem matemática, que é uma ferramenta poderosa para auxiliar na otimização de bioprocessos e fornecer diretrizes para o aumento de escala.

2.5 Modelagem e simulação

Modelos matemáticos são ferramentas importantes para otimizar o projeto e a operação de biorreatores de FES (VON MEIEN et al., 2004). A modelagem de biorreatores para FES pode desempenhar um papel crucial na análise, projeto e desenvolvimento de bioprocessos com uma variedade de aplicações, que vão desde a produção de enzimas (TARAFDAR et al., 2021) até o tratamento de resíduos agroindustriais (SINGHANIA et al., 2009). Para isso, é preciso um controle das variáveis operacionais, através da modelagem por meio de expressões matemáticas, na busca de manter o processo sob condições ideais de operação (DUTRA, 2020). Essas, tem como objetivo estabelecer relações ou funções entre duas variáveis distintas que caracterizam o sistema (SINGHANIA et al., 2009), e tem mostrado um papel crucial para resolver o problema de transferência de massa e calor dentro dos biorreatores (Hardin et al., 2002).

Um modelo matemático pode prever como a taxa de fluxo de ar de entrada, a umidade relativa e a temperatura afetarão a temperatura do substrato e o teor de água e também como essas variáveis ambientais afetarão o crescimento microbiano e a formação do produto desejado (CASCIATORI et al., 2016). Este, deve ainda, ser útil para a obtenção de uma melhor compreensão dos processos FES, projetar melhores substratos e fermentadores, e em alguns momentos manipular esses processos para efetuar resultados específicos (RAHARDJO; TRAMPER; RINZEMA, 2006). Os modelos são capazes ainda de prever manchas secas dentro do leito do substrato durante a FES e avaliar estratégias operacionais para evitar a secagem do substrato sem a necessidade de realizar experimentos (CASCIATORI et al., 2016; PEREZ; CASCIATORI; THOMÉO, 2019; YEO; YUNIARTO, 2019). Para isso, faz-se necessário que os balanços de matéria dos modelos dos biorreatores em estudo, sejam complementados por submodelos de biorreação cinética, bem como por relações constitutivas que descrevam a dependência das constantes da taxa de crescimento da temperatura e da atividade de água (AGARWAL et al., 2020; CASCIATORI et al., 2016; VICCINI et al., 2001).

Sendo assim, os modelos matemáticos são uma grande ferramenta a ser utilizada no dimensionamento de biorreatores de larga escala. Porém, os trabalhos encontrados na literatura, utilizaram modelos em escala de laboratório, e como se descreve no decorrer desse trabalho, é

sabido que o aumento de escala tem suas particularidades. Desta forma, a fim de diminuir os custos de experimentação em larga escala, podem-se utilizar os modelos matemáticos em simulações computacionais, como simulação baseada em rotinas de Matlab®, para projetar estratégias que superem os desafios e auxiliem no dimensionamento de biorreatores para FES em larga escala.

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo Geral

Modelar e simular a transferência de calor e umidade no processo de produção de celulases por Fermentação em Estado Sólido, a partir do fungo *Myceliophthora termophila* IID3b utilizando bagaço de cana e farelo de trigo como substratos em biorreator de bandejas em escala piloto.

3.2 Objetivos Específicos

- ✓ Adequar um modelo unidimensional para a fase sólida e a fase gasosa que descreva a transferência de calor na produção de celulases
- ✓ Adequar um modelo unidimensional para a fase sólida e a fase gasosa que descreva a transferência de umidade na produção de celulases;
- ✓ Estimar e calcular os parâmetros físicos e térmicos utilizados no modelo matemático para o sistema em estudo;
- ✓ Simular em rotinas de MatLab® os modelos propostos.

4 METODOLOGIA

4.1 Estudo de Caso

Embora o escopo desta pesquisa não envolva trabalho experimental, é de grande importância descrever o sistema utilizado na modelagem e simulação. O estudo de caso trata-se do processo de produção de celulases do fungo *Myceliophthora thermophila* IID3b por fermentação em estado sólido, utilizando bagaço de cana de açúcar e farelo de trigo, como substrato, em um biorreator de bandejas em escala piloto.

As etapas do processo fermentativo experimental iniciam-se com o descongelamento do substrato armazenado a -80 °C até a temperatura ambiente, posteriormente as 4 bandejas do biorreator são carregadas em camadas uniformes de 2 cm de espessura, e colocadas dentro da câmara do biorreator, e este é fechado hermeticamente (DALLASTRA et al., 2023; DINIZ et al., 2022; DUTRA, 2020).

Assim, o conjunto substrato-biorreator é esterilizado com vapor condensante a 120 °C por 40 minutos, em seguida, ocorre o resfriamento do meio poroso pela ação conjunta da camisa de resfriamento da câmara e do fluxo de ar subsaturado e posterior aspersão de suspensão de esporos de *Myceliophthora thermophila* e solução nutriente sobre o substrato. Então, finalmente, o ar estéril quase saturado começa a circular no sistema para controle de umidade, temperatura e fornecimento de oxigênio à cultura. Esse cultivo dura 4 dias à temperatura de 45°C. (TADA et al., 2017; TADA; AGUDELO; THOMÉO, 2019; ZANELATO et al., 2012)

Sendo assim, os assuntos mais relevantes para entender o modelo do caso analisado são as características do material particulado ou substrato, a geometria das bandejas e do biorreator e a cinética de crescimento do microrganismo e de produção de celulases.

4.1.1 Partículas

A proporção da mistura bagaço e farelo, utilizada em todos os experimentos realizados neste trabalho, foi definida em 70% bagaço de cana e 30% farelo de trigo (em massa), considerando os resultados obtidos por ZANELATO et al. (2012), ao empregar essa proporção, e alcançar uma maior produtividade enzimática de celulases.

As partículas utilizadas neste trabalho para modelagem e simulação podem ser vistas na Figura 4.

Figura 4 – Bagaço de cana de açúcar e farelo de trigo na proporção 7:3.



Fonte: AGUDELO (2014).

Na Tabela 1 é apresentada a análise de composição centesimal dos substratos.

Tabela 1 – Composição média do bagaço de cana.

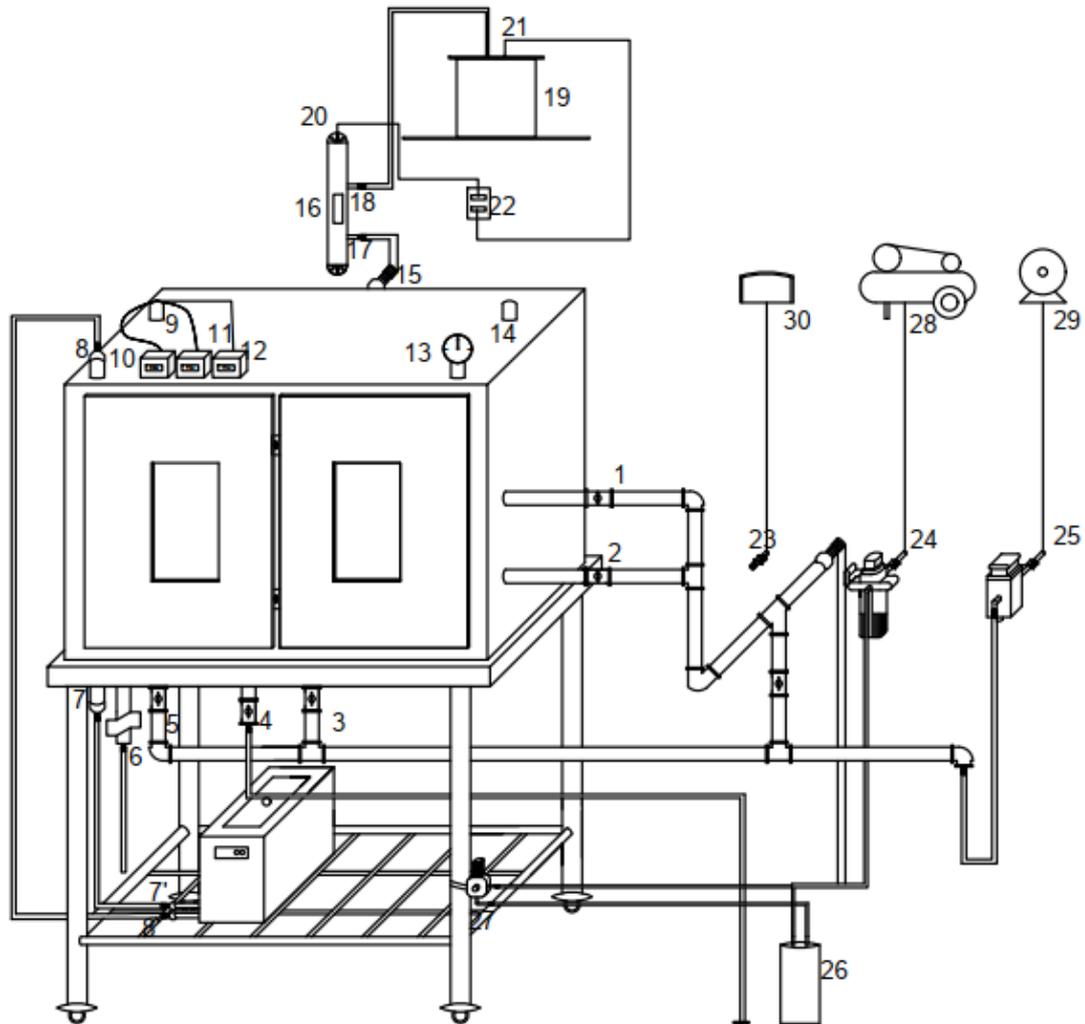
	Bagaço de cana	Farelo de trigo
Matéria seca	87,46	88,03
Proteína bruta	0,00	17,77
Lignina	8,99	7,04
Hemicelulose	33,39	43,03
Celulose	45,97	15,22

Fonte: ZANELATO (2011).

4.1.2 Biorreator de bandejas

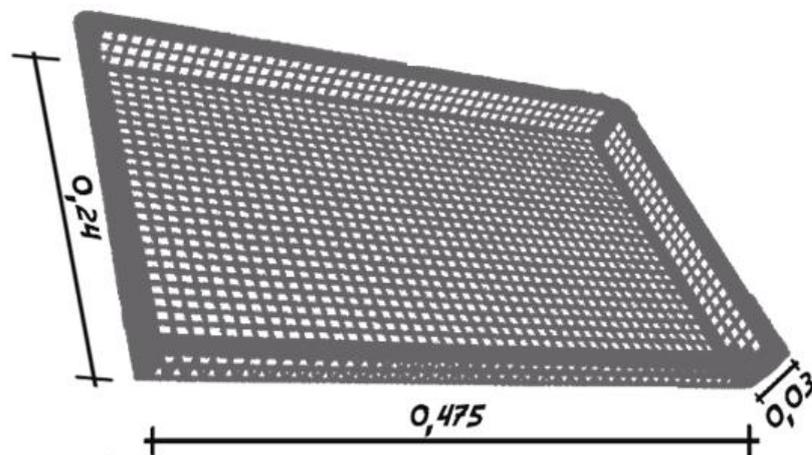
O esquema do biorreator de bandejas a ser utilizado está representado na Figura 5. Este foi construído em aço-inox e está suportado por uma base metálica. O seu interior contém quatro bandejas de aço-inox perfuradas, como pode ser visto na Figura 6.

Figura 5 – Diagrama esquemático em 3D do biorreator de bandejas.



Fonte: DALLASTRA et al. (2023).

Figura 6 – Esquema de uma das bandejas com fundo perfurado.

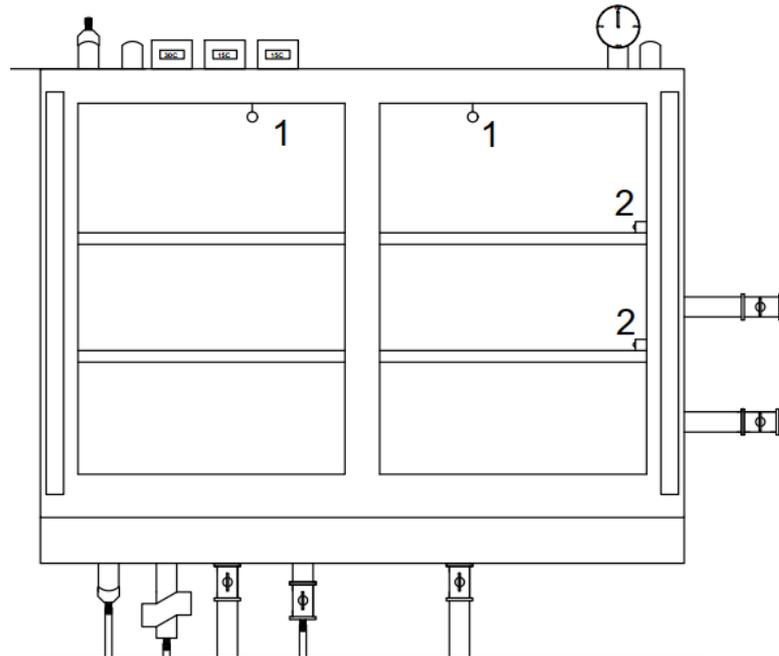


Fonte: DALLASTRA et al. (2023).

Analisando a Figura 4, os itens 1, 2, 3 e 5 representam as entradas de vapor de esterilização e de ar úmido ao sistema para controle de temperatura. Os itens 7 e 8 são a entrada e saída de água da camisa de refrigeração, sistema pelo qual também é feito o controle de temperatura no decorrer do processo fermentativo. A caldeira, o dreno e o purgador termodinâmico para a retirada do excesso de umidade gerada no decorrer do processo estão representados pelos itens 29, 4 e 6. A entrada dos sensores de temperatura no interior do equipamento é representada pelo item 9 e os itens 10, 11 e 12 esquematizam os *displays* para leitura de temperatura. Nos itens 13 e 14 são ilustrados, respectivamente, um manômetro para monitoramento da pressão e uma abertura para saída de gases. Os itens 30, 26, 27 e 28 representam, respectivamente, armazenamento de água, umidificador, rotâmetro e compressor, que juntos fazem o sistema de aeração do biorreator. O tanque de armazenamento de água ou inóculo, a bomba submersa para transporte da água do reservatório até os aspersores, a lâmpada UV que esteriliza água e os dois aspersores são ilustrados, respectivamente, pelos números 19, 21, 16 e 15, e juntos são utilizados para controle de temperatura e umidade, através da pulverização de água esterilizada. Os itens 17 e 18 esquematizam a entrada das lâmpadas UV e o item 20 a conexão elétrica das mesmas. Já o item 22 representa a conexão elétrica da bomba submersível. Os itens 23, 24 e 25, correspondem as entradas de água, ar e vapor.

A Figura 7 mostra o esquema do corte total da vista frontal do biorreator. Pode-se observar no item 1 os esquemas dos atomizadores que constituem o mecanismo de aspersão da suspensão fúngica para inoculação do substrato e para aspersão de água para controle de umidade e temperatura. Já no item 2 é observada a localização das entradas de ar no interior do equipamento.

Figura 7 – Corte total da vista frontal do biorreator de bandejas.



Fonte: DALLASTRA et al. (2023).

4.1.3 Determinação e cálculo de propriedades

As propriedades físicas e térmicas do leito, condições do processo fermentativo e parâmetros microbianos foram extraídos de trabalhos previamente realizados pelos grupos de pesquisa liderados ou integrados pela orientadora e pela co-orientadora desta dissertação, assim como de outras literaturas clássicas pertinentes (CASCIATORI et al., 2016; DINIZ et al., 2022).

Tendo em vista a disposição das bandejas no interior da câmara fermentativa, foi considerado o comprimento total do eixo longitudinal como sendo a soma do comprimento de duas bandejas.

4.1.4 Adequação do modelo de transferência de calor e umidade

O modelo utilizado para transferência de calor e umidade no biorreator de FES do tipo bandeja foi uma adaptação de equações matemáticas que representam os mecanismos de secagem e transporte de calor e água ocorrendo nas bandejas ao longo do tempo de cultivo e em função da posição longitudinal na bandeja. Desse modo, a cinética de crescimento de *Myceliophthora thermophila* ao longo do cultivo e o efeito da temperatura sobre a biossíntese de celulases foram empregados nos balanços de calor presentes nesse trabalho, já a migração de umidade foi modelada a partir de um balanço de massa para água presente no sistema

fermentativo. Os balanços de calor e umidade nas fases sólida e gasosa de CASCIATORI et al. (2016) em sua forma unidimensional foram utilizados como referência para o modelo empregado no presente trabalho.

Para adotar o modelo unidimensional, assumiu-se que a espessura do leito de substrato na bandeja fosse suficientemente baixa para que não fossem observados perfis de umidade na direção da profundidade da bandeja. Essa consideração foi feita pelo fato de as bandejas terem o fundo e as laterais perfuradas, permitindo o escoamento de ar entre as partículas do leito, de modo que o leito nas bandejas se assemelhasse a um leito empacotado, porém de camada fina.

4.1.5 Simulação em rotinas de MatLab®

A execução do projeto de pesquisa se deu por meio de simulações utilizando o software MatLab® R2023b (MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, Estados Unidos). Foram elaboradas rotinas para prever a distribuição da temperatura nas diferentes posições do leito em cada uma das fases, permitindo prever temperaturas e umidades da fase sólida e da fase gasosa durante todo o processo fermentativo (CASCIATORI et al., 2016) nas diferentes posições longitudinais, possibilitando então fazer a estimativa do rendimento do bioprocessamento.

Para resolver o sistema de equações diferenciais parciais (EDPs), as derivadas espaciais foram aproximadas por diferenças finitas, com tamanho de passo espacial uniforme, definido arbitrariamente em $N_x = 95$ divisões ao longo do comprimento. Este número de divisões foi confirmado como suficiente para gerar resultados independentes do tamanho do passo, fornecendo assim previsões confiáveis por meio de simulações com curto tempo de execução, evitando assim esforço computacional desnecessário (LEAP, 2012).

Esta aproximação por diferenças finitas resultou em um conjunto de equações diferenciais ordinárias (EDOs) para cada grade ou malha, as quais foram integradas simultaneamente e numericamente pelo método de diferenciação numérica com o passo da variável tempo definido pelo solucionador *ode15s* no MatLab®. As equações foram inseridas em um programa em MatLab® e resolvidas mediante valores apropriados dos parâmetros, além de sujeitas às devidas condições iniciais e de contorno, apresentadas no item a seguir.

4.2 Definição dos parâmetros para simulação do estudo de caso

Tabela 2 – Definições de parâmetros e variáveis e valores das condições de referência para simulação do estudo de caso (*).

Parâmetro ou variável	Descrição	Valor/ Unidade	Fonte e comentários
VARIÁVEIS INDEPENDENTES			
t	Tempo	Até 96 h (4 dias) ($t_0 = 0$)	Estabelecidos com base nas condições de referência deste trabalho
z	Posição longitudinal	Varia de 0 a 95 cm (2 x 47,5 cm)	
VARIÁVEIS DEPENDENTES			
Sub	Concentração de substrato	Kg-substrato-seco/m ³ (Sub ₀ =98)	CASCIATORI et al. (2014)
S	Concentração de sólidos secos totais	Kg-sólidos-secos-totais/m ³ (S ₀ =98,3)	Calculada (S ₀ = B ₀ + Sub ₀)
b	Fração de biomassa nos sólidos secos	Kg-biomassa/kg-sólidos-secos-totais (b ₀ = 0,00281)	b ₀ estimada com base em CUNHA (2016)
B	Concentração de biomassa	Kg-biomassa/m ³ (B ₀ = 0,03)	Calculada (B ₀ = b ₀ .S ₀)
T _g	Temperatura da fase gasosa	°C (T _{g0} = 45)	T _{g0} estabelecida como temperatura ótima de processo (ZANELATO et al., 2012)
T _s	Temperatura da fase sólida	°C (T _{s0} = 45)	T _{s0} assumida igual a T _{g0} em t = 0
Y	Umidade da fase gasosa	Kg-vapor-água/kg-ar-seco	Y ₀ definida a partir da umidade relativa (UR) de entrada do ar (referência: UR 50%)
X	Umidade da fase sólida	kg-água/kg-sólidos-secos-totais (X ₀ = 3)	X ₀ estabelecida no preparo do substrato
Y*	Umidade de saturação do ar a 28°C	kg-vapor-água/kg-ar-seco	Calculada pela equação 9a
a _{wg}	Atividade de água da fase gasosa	Adimensional	Calculada pela equação 9c
a _{ws}	Atividade de água da fase sólida	Adimensional	Calculada pela equação 10 a _{ws} = a _{wg} no equilíbrio
μ _w	Fração da taxa específica de crescimento com	Adimensional D ₁ = 131,60; D ₂ = 94,99;	Calculada pela equação 7a; coeficientes de

	base na atividade de água	$D_3 = 214,22;$ $D_4 = 177,67$	GLENN e ROGERS (1988) para <i>Rhizopus oligosporus</i>
μ_T	Fração da taxa específica de crescimento com base na temperatura da fase sólida	Adimensional $A = 7,483 \times 10^7 \text{ s}^{-1};$ $B = 1,300 \times 10^{47};$ $E_{A1} = 70225 \text{ J/mol};$ $E_{A2} = 283356 \text{ J/mol}$	Calculada pela eq. 7b; coeficientes de SAUCEDO-CASTAÑEDA et al.(1990)
μ	Taxa específica de crescimento	s^{-1}	Calculada pela equação 7c; SARGANTANIS et al. (1993)

PARÂMETROS OPERACIONAIS E DE PROJETO

a_{wge}	Atividade de água do ar na entrada	0,50	Condição de referência adotada
Y_e	Umidade do ar na entrada	kg-vapor-água/ kg-ar-seco	Determinada por a_{wge} adotada
Parâmetro ou variável	Descrição	Valor/ Unidade	Fonte e comentários
v_0	Velocidade superficial do ar	0,0146 m/s	Condição de referência adotada
T_{ge}	Temperatura do ar de entrada	45 °C	ZANELATO et al. (2012)
T_{wall}	Temperatura da parede do biorreator	45 °C	
L	Comprimento total das bandejas	95 cm (2 x 47,5 cm)	Condição de referência adotada neste trabalho
Esp	Espessura da bandeja	2 cm	
W	Largura da bandeja	24 cm	

PROPRIEDADES DA FASE GASOSA

C_{pa}	Calor específico do ar seco	1006 J/kg-ar-seco/ °C	GREEN; PERRY, (2008)
C_{pv}	Calor específico do vapor de água	1880 J/kg-vapor-água/ °C	
P	Pressão atmosférica	101325 Pa	Condição de referência adotada
P_w^*	Pressão de vapor de saturação de água no ar	Pa	Calculada pela equação REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, (1977)

ρ_a	Densidade do ar seco	1,16 kg-ar-seco/m ³	GREEN e PERRY (2008)
Pr	Número de Prandtl do ar seco	0,71	
ν_a	Viscosidade cinemática do ar	15,9 x 10 ⁻⁶ m ² /s	
PROPRIEDADE TERMODINÂMICA			
R_g	Constante universal dos gases	8,314 J/mol/°C	GREEN e PERRY (2008)
PROPRIEDADES DO LEITO, DO SUBSTRATO E DA ÁGUA			
C_{ps}	Calor específico dos sólidos secos	1760 J/kg-sólidos-secos/°C	SÁNCHEZ PRIETO (2003)
C_{pw}	Calor específico da água líquida	4184 J/kg-água/°C	GREEN e PERRY (2008)
ΔH_{vap}	Entalpia de evaporação da água	2414300 J/kg-água	
ϵ_0	Fração de vazios ou porosidade do leito	0,75 m ³ -vazios/m ³ -total	CASCIATORI et al. (2014)
d_{part}	Diâmetro de partícula do substrato	0,46 mm	CASCIATORI, (2015)
L_{part}	Comprimento de partícula do substrato	10,00 mm	
PARÂMETROS MICROBIANOS			
R_Q	Calor liberado pelo crescimento do fungo	8,366 x 10 ⁶ J/kg-biomassa	SAUCEDO-CASTAÑEDA et al. (1990)
R_w	Coefficiente estequiométrico relacionado a produção de água ao crescimento fúngico	0,3 kg-água/kg-biomassa	SARGANTANIS et al. (1993)
R_s	Varição nos sólidos secos totais (substrato + biomassa fúngica) por unidade de biomassa produzida	- 2 kg-sólidos-secos-totais/kg-biomassa	VON MEIEN, OSCAR F e MITCHELL (2002)
η	Coefficiente de rendimento de biomassa a partir do substrato	0,33 kg-biomassa/kg-substrato-seco	
b_{max}	Máxima fração possível de	0,0327 kg-biomassa/	Estimados com base em

	biomassa nos sólidos totais	kg-sólidos-secos-totais	CASCIATORI (2015)
μ_{opt}	Taxa específica de crescimento ótima	0,06 h ⁻¹	
COEFICIENTES DE TRANSPORTE E DE TRANSFERÊNCIA NA INTERFACE			
D_s	Coefficiente de dispersão por capilaridade	$1,5 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$	Ajustado a partir de dados experimentais (CASCIATORI et al. 2016)
k_s	Condutividade térmica efetiva da fase sólida na estagnação	0,065 W/m/°C	CASCIATORI et al. (2013)
$D_{g,m}$	Difusividade molecular do vapor d'água no ar	$2,5 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	GREEN e PERRY (2008)
$k_{g,m}$	Condutividade térmica molecular do ar	0,02745 W/m/°C	
$D_{g,z}$	Difusividade efetiva da fase gasosa	m^2/s	$D_{g,z}$ e $\lambda_{g,z}$ calculadas pela equação 11a, 11b e 11c
$k_{g,z}$	Condutividade térmica efetiva axial da fase gasosa	W/m/°C	TSOTSAS (2010a, 2010b)
β_a	Coefficiente volumétrico de transferência de massa na interface	s^{-1}	Calculados conforme CASCIATORI et al. (2016)
Há	Coefficiente volumétrico de transferência de calor na interface gás-sólido	W/m ³ /°C	
$\dot{v}'(X)$	Taxa normalizada de secagem	Assumida igual a 1	Primeiro período de secagem

(*) Subíndice 0: condição inicial

4.2.1. Condições iniciais e de contorno

As condições iniciais ($t = 0$) são as seguintes:

$$t = 0 \quad \left| \begin{array}{l} B = B_0 \\ b = b_0 \\ S = S_0 \end{array} \right.$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Sub} = \text{Sub}_0 \\ T_g = T_{g0} \\ T_s = T_{s0} \\ Y = Y_0 \\ X = X_0 \end{array} \right|$$

Todas essas condições iniciais deverão ser estabelecidas na preparação do substrato inoculado ou no início da operação do biorreator.

As condições de contorno serão assumidas como segue:

Em $z = 0$ (bordo de ataque da bandeja):

$$z = 0 \quad \left. \begin{array}{l} Y = Y_e = Y_0 \\ T_g = T_{g0} \\ \frac{\partial T_s}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial X}{\partial z} = 0 \end{array} \right|$$

Em $z = L$ (bordo de saída da bandeja):

$$z = L \quad \left. \begin{array}{l} \frac{\partial T_s}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial T_g}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial Y}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial X}{\partial z} = 0 \end{array} \right|$$

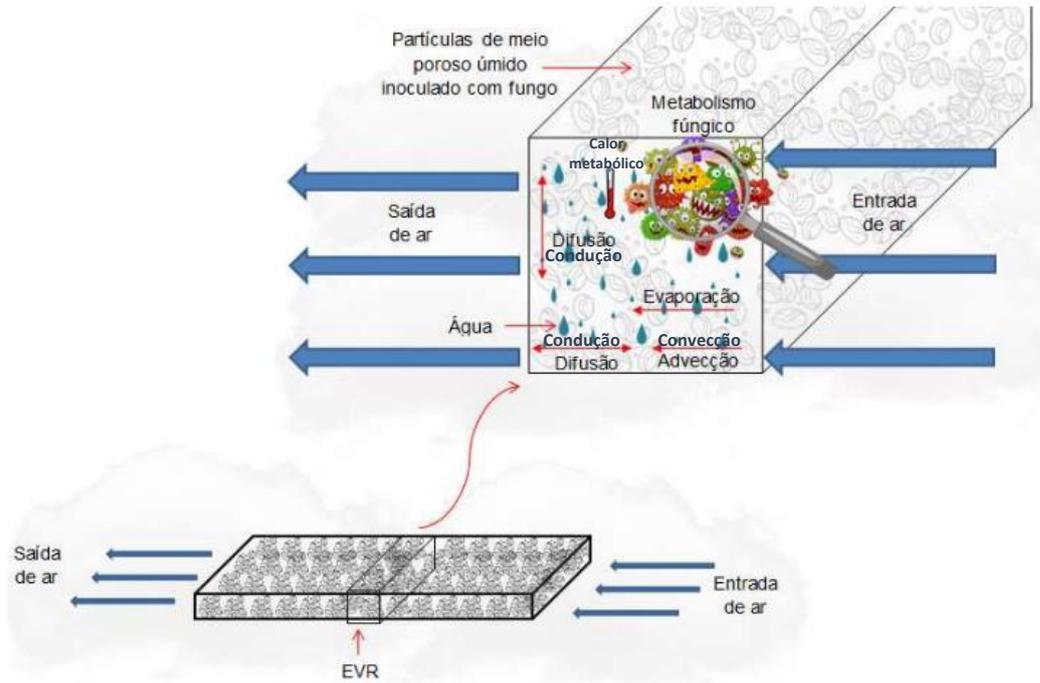
4.3 Modelagem matemática

O modelo proposto para a transferência de calor e água no biorreator de bandejas consistiu em equações matemáticas que representassem os mecanismos de secagem, de transporte de calor e de água e as taxas de reações que ocorrem ao longo do tempo nas bandejas (DINIZ et al., 2022; DINIZ, 2023).

A Figura 8 apresenta esquematizado o diagrama de um elemento de volume representativo (EVR) em uma bandeja do biorreator. Foi aplicado um balanço de energia e umidade no EVR,

por meio de equações individuais para as fases sólida e gasosa. Nas equações, os termos foram expressos por metro cúbico do biorreator, sendo assim, suas unidades são W/m^3 e $kg\text{-}\acute{a}gua/m^3/s$.

Figura 8 – Elemento de volume representativo (EVR) do leito de partículas.



Fonte: adaptado de DUTRA (2020).

A fração de biomassa nos sólidos secos totais (b) e o teor de umidade da fase sólida (X) foram expressos com base na concentração de sólidos secos totais (S), que equivale à soma da concentração de biomassa seca (B) e substrato seco (Sub).

4.4 Modelagem da transferência de calor

4.4.1 Balanço de energia na fase gasosa

A transferência de calor na fase gasosa foi modelada com base no trabalho de CASCIATORI (2015), representada pela Equação 1:

$$\rho_a \cdot \varepsilon_0 (Cp_a + Y Cp_v) \frac{\partial T_g}{\partial t} + \rho_a u_0 (Cp_a + Y Cp_v) \frac{\partial T_g}{\partial z} = \Delta H_{vap} (T_s) v'(X) \beta_a \rho_a \varepsilon_0 (Y^* - Y) - h_a (T_g - T_s) + \varepsilon_0 k_{g,z} \frac{\partial^2 T_g}{\partial z^2} \quad (1)$$

A esquerda, o primeiro termo da equação representa o acúmulo de energia na fase gasosa ao longo da fermentação. O segundo, o escoamento de energia com a corrente de ar por advecção. A quantidade $(Cp_a + YCp_v)$, em ambos os termos, representa o calor específico do ar úmido.

O primeiro termo à direita da equação 1 representa a quantidade de energia associada à evaporação de água na interface sólido-gás, enquanto o segundo termo descreve a transferência de calor convectivo na interface. O último termo representa a condução de calor através do ar na direção do comprimento das bandejas.

4.4.2 Balanço de energia para a fase sólida

O balanço de energia para a fase sólida foi expresso pela equação 2, de acordo com o trabalho de CASCIATORI (2015).

$$(Cp_s + X Cp_w) \frac{\partial ST_s}{\partial t} = ha (T_g - T_s) - \Delta H_{vap} v'(X) \beta_a \rho_a \varepsilon_0 (Y^* - Y) + R_Q \left[\frac{\partial (sb)}{\partial t} \right] + (1 - \varepsilon_0) k_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \quad (2)$$

O termo à esquerda da equação 2, representa o acúmulo de energia na fase sólida. A regra do produto foi usada para derivação deste termo a fim de isolar a varável de interesse T_s , uma vez que a concentração de sólidos secos totais (S) e a temperatura da fase sólida (T_s) variam simultaneamente. A quantidade $Cp_s + X Cp_w$ representa o calor específico do sólido úmido. Foi assumido que o calor específico da biomassa formada é igual aquele do substrato.

O primeiro termo do lado direito (Eq. 2) descreve a transferência convectiva de calor na interface sólido-gás, enquanto o segundo representa a quantidade de energia associada à evaporação de água na interface. O terceiro termo mostra a produção de calor metabólico durante o crescimento do fungo, sendo este termo similar ao que representa a produção metabólica de água na equação 4.

Por fim, o último termo da equação 2 representa a condução de calor através da fase sólida na direção longitudinal.

4.5 Modelagem da transferência de água

4.5.1 Balanço de massa para vapor de água na fase gasosa

O balanço de água na fase gasosa foi expresso pela equação 3:

$$\rho_a \varepsilon_0 \frac{\partial Y}{\partial t} + \rho_a v_0 \frac{\partial Y}{\partial z} = \dot{v}'(X) \beta a \rho_a \varepsilon_0 (Y^* - Y) + \rho_a \varepsilon_0 D_{g,z} \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} \quad (3)$$

Na Eq. 3, o primeiro termo do lado esquerdo representa a mudança no teor de água da fase gasosa, este termo é transiente, e representa o acúmulo de vapor d'água na fase gasosa. O segundo termo representa o fluxo de vapor de água na corrente de ar por advecção, considerando que o vapor de água é levado pelo fluxo de gás. Do lado direito, o primeiro termo representa a transferência de água na interface sólido-gás, obtida pelo produto do coeficiente de transferência de massa (β) e a diferença entre o verdadeiro teor de umidade da fase gasosa (Y) e a umidade de saturação do ar (Y^*), multiplicado por $(\rho_a \varepsilon_0)$ para fazer ajuste nas unidades e pela área de transferência em um determinado elemento volumétrico (a) para obter a taxa volumétrica. Esse termo precisou ainda ser corrigido pela taxa de secagem normalizada modificada $\dot{v}'(X)$, que é um parâmetro de secagem empírico responsável pela resistência à transferência de massa no sólido. Considerando que o teor inicial de água da matriz sólida é grande o suficiente para garantir que o teor de umidade do sólido seria maior que o valor crítico (X_{crit}) no biorreator ao longo da fermentação, a secagem foi assumida como sendo realizada no primeiro período para todo o processo, portanto adotou-se $\dot{v}'(X) = 1$. Note-se que este termo não pressupõe que a fase gasosa esteja sempre saturada, de modo que também poderia ser usado para a secagem de uma camada fina. Por fim, o segundo termo do lado direito representa a difusão do vapor de água na fase gasosa na direção longitudinal.

4.5.2 Balanço de massa para água na fase sólida

O balanço hídrico na fase sólida foi expresso pela equação 4:

$$\frac{\partial(SX)}{\partial t} = -v'(X) \beta a \rho_a \varepsilon_0 (Y^* - Y) + R_w \left[\frac{\partial(Sb)}{\partial t} \right] + D_s S \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \quad (4)$$

Na Eq. 4, o termo à esquerda representa a mudança no teor de água da fase sólida, esse termo é transiente e representa o acúmulo de água na fase sólida. Sabendo que a concentração

de sólidos secos totais (S) varia no tempo simultaneamente com o teor de umidade nos sólidos secos totais (X), deve ser aplicada a regra do produto para isolar a variável de interesse X. O primeiro termo do lado direito, corresponde à quantidade de água que está sendo retirada da fase sólida por evaporação, que é a mesma quantidade de água que está sendo incorporada à fase gasosa, representando a transferência de água na interface sólido-gás. Já o segundo termo representa a água produzida durante a fermentação como consequência do crescimento microbiano. Sendo assim, da mesma forma que para o termo do lado esquerdo, a regra do produto foi utilizada para o termo de produção metabólica de água.

Finalmente, o último termo do lado direito da Eq. 4 representa a dispersão da água líquida na direção longitudinal. É importante ressaltar que, em um meio poroso, a difusão do líquido através da fase sólida é dominada pelo mecanismo de capilaridade. Todavia, o coeficiente de difusão não tem o mesmo significado que o coeficiente de difusão de sólidos moleculares; veja DATTA (2007) para mais esclarecimentos sobre essa suposição.

Após a utilização da regra do produto para derivar o termo do lado esquerdo e o segundo do lado direito da Eq. 4, obtêm-se:

$$S \frac{\partial X}{\partial t} + X \frac{\partial S}{\partial t} = -v'(X)\beta a \rho_a \varepsilon_0 (Y^* - Y) + R_W \left[S \frac{\partial b}{\partial t} + b \frac{\partial S}{\partial t} \right] + D_s S \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \quad (5)$$

4.5.3 Crescimento fúngico e taxa de crescimento específica

A cinética de crescimento de *Myceliophthora thermophila* em bagaço de cana de açúcar e farelo de trigo ainda não está plenamente consolidada na literatura. CASCIATORI (2015) reporta alguns parâmetros cinéticos de crescimento para este fungo, incluindo a taxa específica de crescimento ótima (μ_{opt}) e as frações inicial (b_0) e máxima ($b_{m\acute{a}x}$) de biomassa nos sólidos totais. Além disso, uma correlação descrevendo a dependência da taxa de crescimento específico (μ) com a atividade de água na fase sólida (a_{ws}) foi obtida na literatura (GLENN; ROGERS, 1988).

O aumento da biomassa fúngica (b) foi assumido para seguir a equação logística, comumente utilizada para expressar o crescimento microbiano na FES (VICCINI et al., 2001).

$$\frac{db}{dt} = \mu b \left(1 - \frac{b}{b_{max}} \right) \quad (6)$$

A condição inicial adotada para solução da equação logística é: em $t = 0$, $b = b_0$ (fração de biomassa inoculada no início do processo). Assim, a forma integrada do modelo logístico é dada por:

$$b = \frac{b_m}{1 + \left(\frac{b_m}{b_0} - 1\right) e^{-\mu t}} \quad (6.1)$$

Levando em consideração que não é possível separar a biomassa fúngica do substrato seco durante a fermentação, a equação 6.1 não representa uma taxa de reação típica, pois b agrupa a biomassa fúngica e a massa de substrato seco. Sendo assim, o consumo de substrato está diretamente relacionado ao crescimento fúngico (CASCIATORI et al., 2016).

As taxas específicas relativas de crescimento μ_T (taxa fracional de crescimento específico dependendo de T_s) e μ_W (dependendo de a_{ws}) foram definidas como frações da taxa específica de crescimento quando as condições são ótimas para o crescimento (μ_{opt}), conforme previamente assumido por VON MEIEN e MITCHELL (2002) e CASCIATORI et al. (2016).

Para a dependência da atividade de água (a_{ws}), μ_W foi dado por um ajuste empírico aos dados experimentais de GLENN e ROGERS (1988) para *Rhizopus oligosporus*, conforme mostra a equação 7a.

$$\mu_W = \exp(D_1 a_{ws} + D_2 a_{ws}^2 + D_3 a_{ws} + D_4) \quad (7a)$$

Um ajuste empírico foi dado baseado numa equação do tipo Arrhenius para a dependência da temperatura da fase sólida (T_s) para *Aspergillus niger*, de acordo com SAUCEDO-CASTAÑEDA et al. (1990).

$$\mu_T = \frac{1}{\mu_{opt}} \frac{A \exp\left(\frac{-E_{A1}}{R [T_s + 273]}\right)}{1 + B \exp\left(\frac{-E_{A2}}{R [T_s + 273]}\right)} \quad (7b)$$

A taxa de crescimento específica real (μ) foi então calculada a partir da média geométrica das duas taxas de crescimento relativas, como proposto por SARGANTANIS et al. (1993).

$$\mu = \mu_{opt} \sqrt{\mu_W \mu_T} \quad (7c)$$

4.5.4 Balanço de massa para sólidos secos totais

A concentração de sólidos secos (S), incluindo as concentrações de substrato (Sub) e biomassa (B = Sb), depende do tempo devido ao consumo de substrato para crescimento fúngico e produção de nova biomassa fúngica:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = R_s \frac{\partial B}{\partial t} = R_s \frac{\partial (S.b)}{\partial t} \quad (8a)$$

Veja que R_s vem da taxa de reação de conversão de substrato em biomassa, expressando a variação de sólidos secos totais (substrato seco mais biomassa seca) por unidade de biomassa fúngica produzida durante a fermentação (CASCIATORI et al., 2016). Quando se aplica a regra do produto a equação (8a,) obtem-se a equação (8b):

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{R_s}{1 - bR_s} S \frac{\partial b}{\partial t} \quad (8b)$$

4.5.5 Teor de umidade da fase gasosa

A saturação do vapor d'água da fase gasosa foi calculada com base na pressão de saturação do vapor d'água na temperatura real do ar:

$$Y^* = \frac{0.62413P_w^*}{P - P_w^*} \quad (9a)$$

Na equação acima, 0,62413 representa a razão entre a massa molar da água e uma média da massa molar do ar seco, Y^* é a umidade específica de saturação do ar, P é a pressão atmosférica do ar úmido e P_w^* é a pressão de saturação do vapor d'água, calculada pela equação de Antoine em função da temperatura real do ar T_g (REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, 1977).

$$P_w^* = 133,322 \exp \left(18,3036 - \frac{3816,44}{(T_g + 273,15) - 46,13} \right) \quad (9b)$$

A atividade de água da fase gasosa (a_{wg}) na corrente T_g , equivale à umidade relativa do ar (UR), foi calculada da seguinte forma:

$$a_{wg} = \frac{YP}{P_w^* (Y + 0.62413)} \quad (9c)$$

4.5.6 Isoterma de sorção da fase sólida

Assumiu-se que a isoterma de sorção do substrato seria bem representada pela isoterma de sorção do bagaço de cana. Segundo CASCIATORI et al. (2015), a equação de OSWIN (1946) pode ser usada para descrever a isoterma do bagaço de cana em função da atividade de água:

$$X^* = 0,052 \left(\frac{a_{wg}}{1 - a_{wg}} \right)^{0,409} \quad (10)$$

O uso dessa equação para calcular a atividade de água da fase sólida ao longo do processo de fermentação é uma forte simplificação. Implica que o material contido no biorreator mantém o comportamento higroscópico ao longo da fermentação, esse por sua vez é inicialmente constituído por um substrato úmido inoculado e que é gradualmente consumido e colonizado pela biomassa fúngica.

4.5.7 Parâmetros de transporte de massa para o gás e para a fase sólida

Os coeficientes efetivos de transferência de calor e massa para a fase gasosa foram assumidos como dependentes do fluxo de ar na direção longitudinal e das propriedades estruturais da camada sólida (constante ε_0). Os parâmetros estimados foram os coeficientes de dispersão efetiva axial para transferência de massa ($D_{g,z}$) e de calor ($\lambda_{g,z}$). A seguinte correlação simplificada foi usada para avaliar o coeficiente de dispersão (VORTMEYER; HAIDEGGER, 1991).

$$D_{g,z} = \left[1 - (1 - \varepsilon_0)^{1/2} \right] D_{g,m} + \frac{Re_p}{2} v \quad (11a)$$

$$k_{g,z} = [1 - (1 - \varepsilon_0)^{1/2}] k_{g,m} + \frac{Re_p}{2} v \quad (11b)$$

Onde:

$$Re_p = \frac{v_0 d_{part}}{v_a} \quad (11c)$$

O diâmetro da partícula foi assumido como o diâmetro das fibras, visto que as fibras de bagaço de cana são os componentes em maior proporção, e esse foi determinado pelo valor médio das medidas de 10 fibras com paquímetro (CASCIATORI, 2015).

Os coeficientes efetivos de transferência de calor e massa da fase sólida foi assumido como não dependente do fluxo de ar, devido a fase sólida ser estática. Sendo assim, as propriedades do meio poroso estagnado foram aplicadas, ou seja, o parâmetro de dispersão de água $D_{s,z}$ para a difusividade longitudinal da água foi fixado como $D_{s,z} = D_s$, sendo o valor de D_s retirado do trabalho de CASCIATORI et al. (2016) e o meio foi considerado isotrópico. Para o parâmetro de condução de calor, a matriz sólida também foi considerada isotrópica e a condutividade térmica da fase sólida (λ_s) foi fixada de acordo com dados experimentais de CASCIATORI et al. (2013), para a condutividade térmica efetiva na estagnação (λ_0) e assumida como constante e igual para a direção axial.

4.5.8 Coeficiente de transferência de massa na interface gás-sólido

O coeficiente de transferência de calor e de massa da interface gás-sólido foram calculados a partir de correlações clássicas da literatura para os números de Nusselt e de Sherwood (Sh), como descrito por CASCIATORI et al. (2016).

As partículas de bagaço de cana foram assumidas como cilindros infinitos ($d_{part} = 0,46$ mm e $L_{part} = 15$ mm). Para o estudo de caso supôs-se que 70% das partículas tinham ar em fluxo cruzado e 30% em fluxo paralelo. Sendo assim, o número de Sherwood foi calculado para cilindros em fluxo cruzado (Sh_{cf}) pela correlação de Churchill e Bernstein (CHURCHILL; BERNSTEIN, 1977) e para cilindros em fluxo paralelo (Sh_{pf}) por uma correlação para placa plana (JOHN; LIENHARD; LIENHARD, 2008). O coeficiente de transferência de água na interface gás-sólido (β) foi normalizado pela razão entre a área total de transferência (A_{TT}) na bandeja e o volume total da camada delgada (V_{TL}), $a = A_{TT}/V_{TL}$, para compor a interface de

transferência ao longo de toda bandeja. Como ε_0 é conhecido, o cálculo de $a = A_{TT}/V_{TL}$ foi feito para uma fatia retangular da camada fina na bandeja, que é valido para ela toda, pela seguinte relação:

$$a = (1 - \varepsilon_0) \frac{4}{d_{part}} \quad (12)$$

Todas as correlações utilizadas podem ser consultadas em CASCIATORI et al. (2016).

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O estudo de caso foi simulado usando o modelo adaptado. Os valores dos parâmetros e as condições operacionais de referência foram apresentados na Tabela 1. Simulações adicionais foram realizadas para diferentes cenários. Os efeitos da taxa de fluxo de ar e da umidade relativa sobre os perfis temporais longitudinais previstos de temperatura e teores de umidade foram investigados. Os efeitos de diferentes valores dos parâmetros relacionados ao substrato, por exemplo, suas propriedades físicas (fortemente relacionadas à sua composição), e ao microrganismo, por exemplo, sua cinética de crescimento, também foram analisados.

5.1 Previsões no biorreator de bandeja para simulação do estudo de caso nas condições de referência

A Figura 9 apresenta o tempo previsto e os perfis longitudinais para as temperaturas das fases sólida (T_s) e gasosa (T_g) e para os teores de umidade das fases sólida (X) e gasosa (Y) e as concentrações de biomassa (B) e substrato (Sub) ao simular o estudo de caso nas condições de referência, ou seja, com umidade relativa (UR) de 50% e vazão de ar de 12 L.min⁻¹.

As Fig. 9a e 9b exibem um perfil de temperatura tempo-espacial semelhante e valores de temperatura bastante próximos para T_s e T_g , respectivamente, indicando que ambas as fases podem estar em equilíbrio térmico durante toda a fermentação. A provável razão para isso foi o alto valor do coeficiente de transferência de calor da interface volumétrica (ha), uma vez que a área total de transferência em um elemento volumétrico foi muito grande (2500 m⁻¹). O presente resultado confirma que a aproximação pseudo-homogênea usualmente aplicada na literatura pode ser considerada razoável também para o processo aqui simulado. Como já apontado por CASCIATORI et al. (2016) ao simular a fermentação em estado sólido em um biorreator de leito empacotado, embora o modelo deva ser heterogêneo para representar a transferência de água da fase sólida para a fase gasosa, permitindo previsões de perfis de teor de umidade, pode ser suficiente medir apenas T_g para representar a temperatura do sistema de fermentação como um todo, superando o problema de medir T_s para validar o modelo. As temperaturas mais altas foram previstas para serem atingidas na saída da bandeja por volta de 65h, devido à advecção na direção longitudinal.

Os perfis tempo-espaciais de X e Y (Fig. 9c e 9d) mostram um aumento na direção do comprimento da bandeja, devido à mudança no teor de umidade de saturação do ar em função da direção longitudinal. Para a fase gasosa (Fig. 9d), Y quase não varia ao longo do tempo, mas

apresenta gradiente longitudinal perceptível, o que está de acordo com as suposições experimentais estabelecidas. Para a fase sólida (Fig. 9c), X varia significativamente ao longo do tempo em posições longitudinais próximas à borda da bandeja. Perto da borda de ataque da bandeja, os valores de X caíram e foram obtidos valores bastante baixos ao longo do tempo de cultivo, uma vez que a fase sólida passou por rápida remoção de água por aeração não saturada de ponta a ponta (UR 50%), que deve ser minimizada caso o ar saturado seja fornecido ao biorreator. Conforme mostrado na Fig. 9c, dos 3 kg iniciais de água por kg de sólidos secos, X caiu para cerca de 0,005 kg de água por kg de sólidos secos no final do cultivo, próximo à borda de ataque da bandeja.

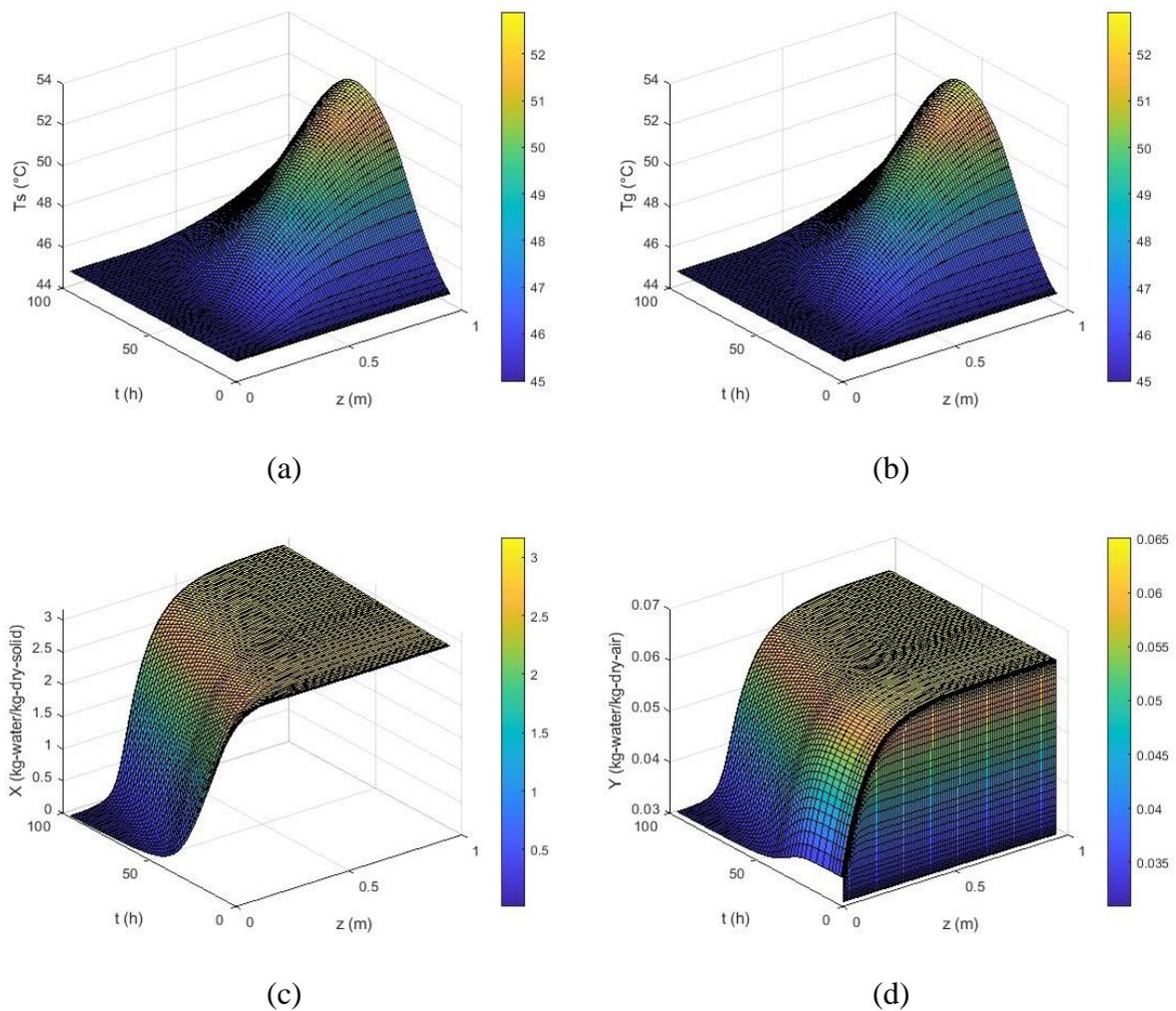
Portanto, a redução severa do teor de umidade da matriz sólida nos primeiros centímetros das bandejas (Fig. 9c) pareceu ser grave neste caso nominal. No entanto, UR 50% é incomum para o suprimento de ar em biorreatores FES. Este valor foi escolhido para o caso nominal para deixar claro o efeito de secagem indesejado que ocorre na câmara da bandeja para FES com aeração não saturada de ponta a ponta (DINIZ et al., 2022). O efeito da UR do ar de entrada sobre X durante toda a fermentação e os consequentes efeitos no crescimento fúngico foram explorados neste trabalho.

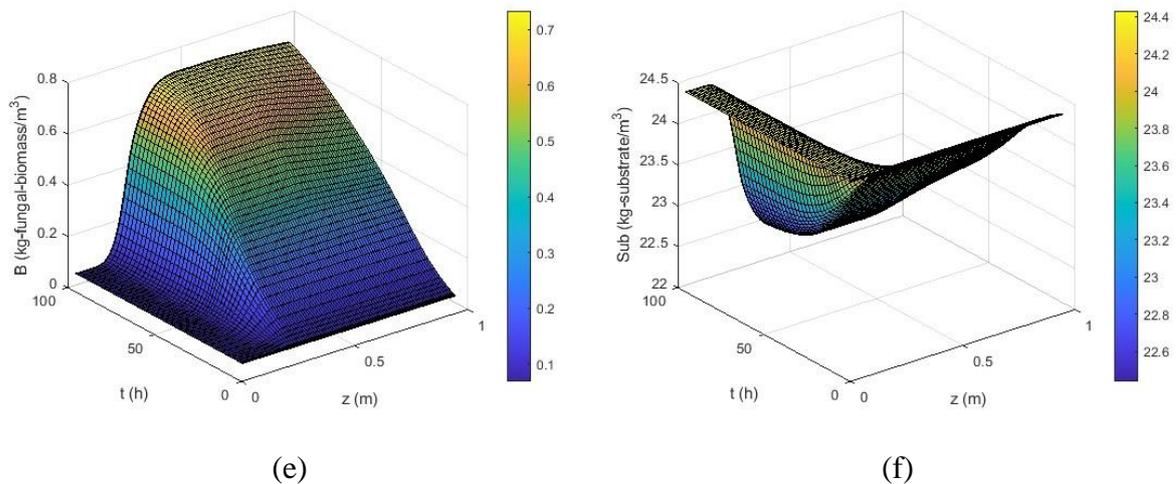
Essa redução severa do teor de umidade da matriz sólida próxima à borda de ataque da bandeja (Fig. 9c) pareceu ser muito mais séria do que o superaquecimento neste caso nominal. Devido à secagem severa na fase sólida próximo a borda de ataque da bandeja, os perfis tempo-espaciais de B e Sub também foram previstos (Fig. 9e e 9f, respectivamente), mostrando gradientes acentuados nas direções axiais. O crescimento da biomassa e o consumo de substrato foram prejudicados principalmente na região próxima à entrada de ar no leito. Após cerca de 30 cm da borda de ataque, o ar e o sólido entram em equilíbrio e a secagem cessa (Fig. 9c e 9d), preservando o teor de umidade ideal do material sólido. Como a temperatura próxima à entrada do leito foi mantida no valor ótimo para o crescimento microbiano, a única explicação para o crescimento da biomassa ser prejudicada foi a intensa redução do teor de umidade do substrato e, consequentemente, as menores atividades de água (a_{ws}) ali atingidas. Isso reflete em baixos valores de μ_w (Eq. 7a) para a_{ws} inferior a 0,90. Do ponto de vista biológico, pode-se supor que provavelmente alguma atividade metabólica fúngica que requer uma película de água para ser realizada pode ser afetada por um a_{ws} tão baixo.

GRAJEK (1988) estudou as condições de crescimento de um fungo mesófilo (*Trichoderma viride*) e de dois fungos termofílicos em FES (*Thermoascus aurantiacus* e *Sporotrichum thermophile*). O autor reportou que uma sutil variação em torno do valor ideal de

a_{ws} para o desenvolvimento dos fungos causou grande perturbação no crescimento e no metabolismo fúngico. Os estudos mostraram que a variação admissível de a_{ws} que garante um desenvolvimento normal da cultura varia apenas de 0,005 a 0,01 em torno do valor ótimo de a_{ws} (GRAJEK, 1988). Além disso, o mesmo autor observou que ambas as linhagens termofílicas se apresentaram mais sensíveis às variações de a_{ws} do que o fungo mesófilo, uma vez que uma taxa de crescimento apreciável para os organismos termofílicos só foi observada em valores de a_{ws} muito elevados, próximos a 1,0.

Figura 9 – Perfis previstos em função do tempo e da posição longitudinal nas bandejas, para entrada de ar com 50% de UR a 12 L/min: (a) Temperaturas da fase sólida; (b) Temperatura da fase gasosa; (c) Conteúdo de umidade da fase gasosa; (d) conteúdo de umidade da fase sólida; (e) concentração da biomassa fúngica; (f) Concentração de substrato.





Fonte: o autor (2024)

Portanto, para o caso nominal, uma vez que a produção de celulase está diretamente acoplada ao metabolismo de crescimento de *Myceliophthora termophila*, a produção de enzimas na borda da bandeja próxima à entrada de ar tende a ser menor do que na borda próxima à saída de ar, um problema já relatado na literatura experimental, mesmo quando o ar saturado for fornecido ao biorreator (AHLAWAT et al., 2007; DINIZ et al., 2022; GOWTHAMAN et al., 1993; KHANAHMADI et al., 2006; UMSZA-GUEZ, 2009; ZANELATO et al., 2012). Observe que, de acordo com as Fig. 9e e 9f, B e Sub atingirão valores máximos acima de 30 cm, o que significa que cerca de dois terços da primeira bandeja disposta longitudinalmente foram subutilizados. Por outro lado, a segunda bandeja (47,5 a 95 cm) deve fornecer maiores rendimentos enzimáticos, mantendo o teor de umidade na fase sólida ideal para o crescimento do fungo, o que é demonstrado pelo perfil de crescimento da biomassa fúngica fora das proximidades da borda de ataque das bandejas (Fig. 9e). Por conseguinte, a umidade relativa do ar de entrada deve ser cuidadosamente escolhida para processos de FES em biorreatores de bandejas.

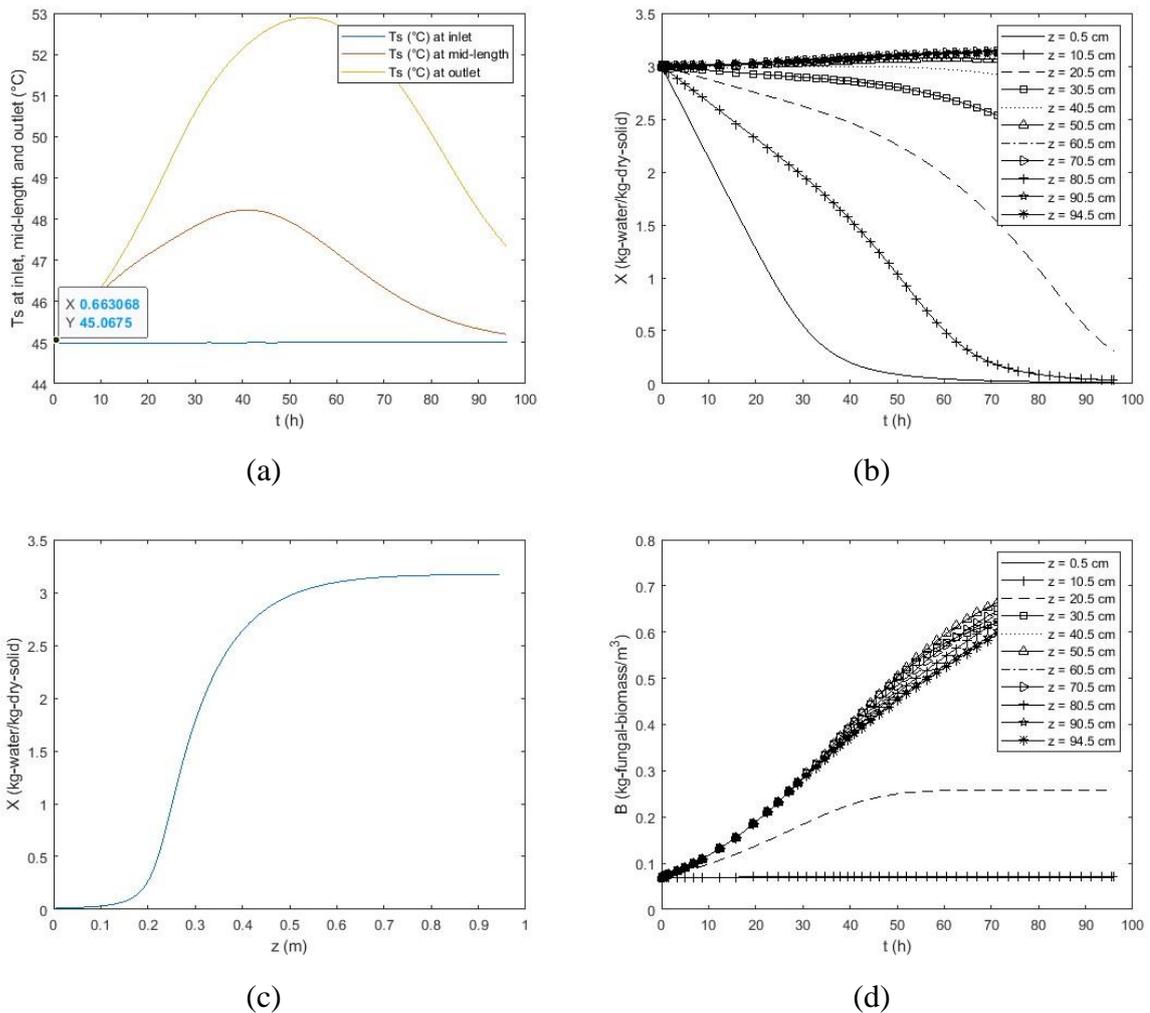
No entanto, não se pode negligenciar um aumento de temperatura previsto de cerca de 10 °C (Fig. 9a e 9b) devido à advecção na direção longitudinal. Conseqüentemente, uma ligeira queda na concentração de biomassa foi prevista nas proximidades da saída da bandeja (Fig. 9e), devido ao efeito negativo de temperaturas mais altas no crescimento do fungo. Tal percepção é uma importante contribuição do presente artigo, em comparação com o trabalho de DINIZ et al. (2022). Em que os autores, embora modelaram apenas a transferência de água, assumiram que as temperaturas não aumentariam nas bandejas ao longo do processo fermentativo. Esta é uma forte suposição, uma vez que a respiração microbiana é conhecida como biorreação

exotérmica. No presente trabalho, modelando a transferência de calor e água simultaneamente, é possível considerar os efeitos simultâneos da temperatura e do teor de umidade da fase sólida sobre o desenvolvimento microbiano.

A *Myceliophthora termophila*, como um fungo termofílico, cresce de forma ideal a 45 – 50 °C (ZANELATO et al., 2012). Portanto, o aumento da temperatura para 55 °C próximo a saída da bandeja não foi tão prejudicial quanto a secagem próxima à entrada da bandeja, como evidenciado na Fig. 9e. Portanto, se o resfriamento evaporativo for necessário para evitar o superaquecimento, borrifar água sobre o substrato colocado próximo à borda de ataque da bandeja é uma alternativa interessante, facilmente de ser realizada no biorreator aqui simulado (DALLASTRA et al., 2023).

As Figuras 10a e 10b apresentam detalhes da temperatura prevista e do teor de umidade da fase sólida em função do tempo para várias posições longitudinais ao longo das bandejas, enquanto a Figura 10c apresenta o teor de umidade final ($t = 96$ h) em função da posição longitudinal. A Figura 10d fornece previsões de biomassa fúngica em função do tempo para várias posições longitudinais nas bandejas. Em todos os casos, a UR 50% e a vazão de ar $12 \text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$ foram assumidas como condição de referência. Os perfis previstos corroboram que a secagem significativa do substrato ocorre ao longo do tempo para posições longitudinais de até 30 cm (Fig. 10b e 10c), após o qual o teor de umidade da fase sólida permanece quase constante. Consequentemente, o crescimento da biomassa fúngica é significativamente reduzido nos primeiros 10 cm da bandeja (Fig. 10d), enquanto diminui ligeiramente nos últimos 30 cm, aproximadamente, devido ao leve aumento da temperatura nessa região.

Figura 10 – Detalhes das previsões: (a) Temperatura da fase sólida na entrada, meio e saída do leito fermentativo em função do tempo; (b) Umidade da fase sólida em função do tempo, para várias posições longitudinais; (c) Umidade final da fase sólida em função da posição longitudinal; (d) Concentração de biomassa fúngica em função do tempo, para várias posições longitudinais.



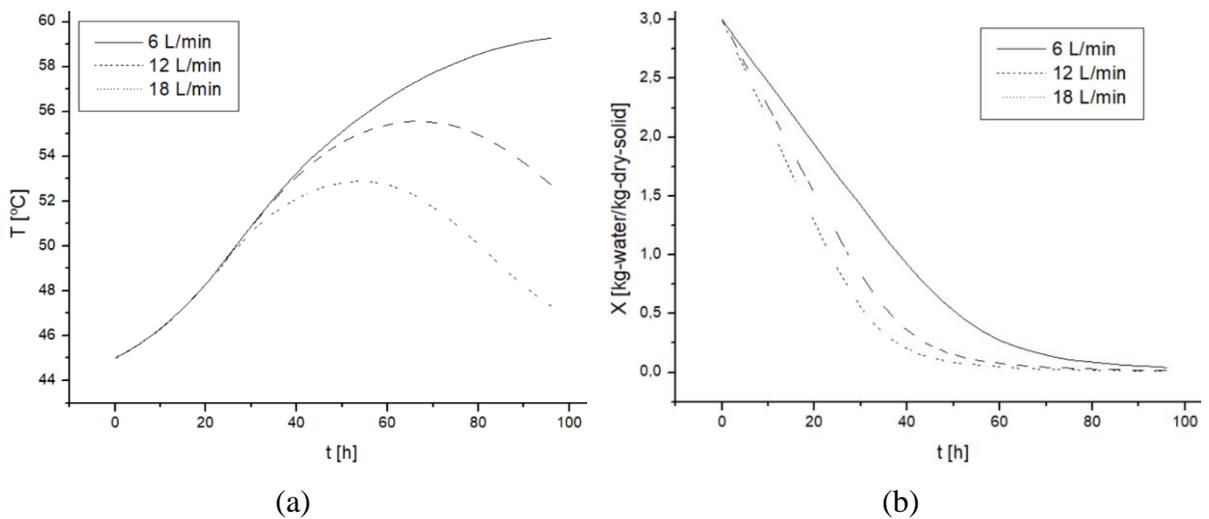
Fonte: o autor (2024)

5.2 Previsões no biorreator de bandeja para simulação do estudo de caso sob outro conjunto de condições operacionais

Foram avaliados os efeitos da vazão de ar de entrada e do teor de umidade (Y_o) nas previsões do modelo T_s e X . A Fig. 11a exibe perfis de tempo para T_s próximos à borda de saída da bandeja ($z/L = 0,995$), enquanto a Fig. 11b exibe perfis de tempo para X próximos à borda de ataque da bandeja ($z/L = 0,005$), ambos previstos para três níveis de taxas de fluxo de ar

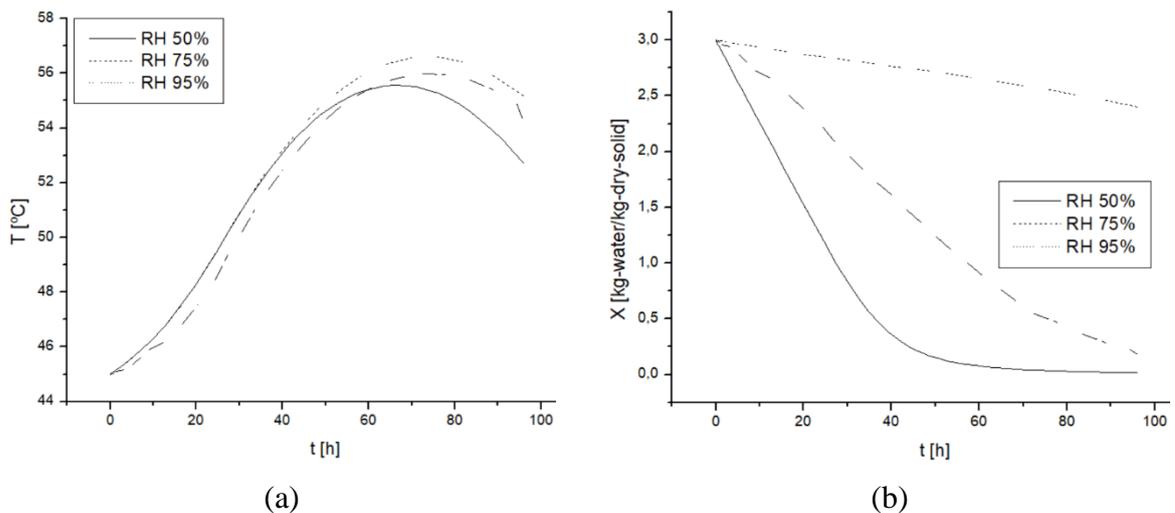
(6, 12 e 18 L.min⁻¹). As Figs. 12a e 12b apresentam os mesmos perfis previstos para três níveis de Y_0 (UR 50, 75 e 95% a 45 °C). A Fig. 12c apresenta perfis longitudinais no final do cultivo para os três níveis de UR. O valor de referência experimental para a vazão de ar é de 12 L.min⁻¹ (DALLASTRA et al., 2023), enquanto para a UR é de 50%, como no estudo de caso base.

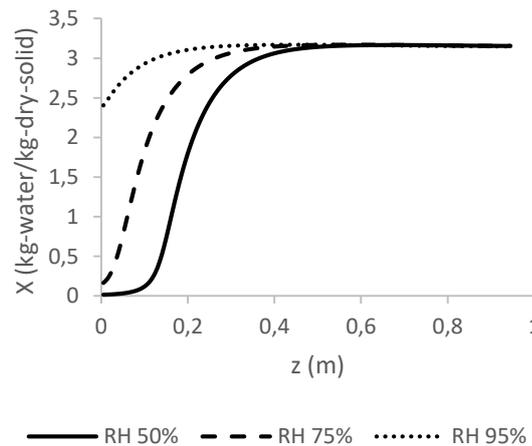
Figura 11 – Efeito da vazão de ar de entrada nas variáveis da fase sólida: (a) T_s ($z/L = 0,995$); (b) X ($z/L = 0,005$).



Fonte: o autor (2024)

Figura 12 – Efeito da umidade relativa do ar de entrada nas variáveis da fase sólida: (a) T_s ($z/L = 0,995$); (b) X ($z/L = 0,005$); X em função de z ($t = 96$ h).





(c)

Fonte: o autor (2024)

A influência da taxa de fluxo de ar nas previsões de T_s não é desprezível, devido ao importante efeito do transporte convectivo dentro das bandejas com bordas perfuradas. Portanto, se por um lado a taxa de fluxo de ar mais baixa minimiza a secagem do substrato próximo à borda de ataque da bandeja (Fig. 11b), isso aumenta o superaquecimento na direção da saída da bandeja (Fig. 11a). Por esse motivo, é necessário avaliar a transferência de calor e umidade simultaneamente.

Segundo GRAJEK (1988), do ponto de vista tecnológico, a variação máxima de temperatura considerada admissível é tal que o crescimento fúngico diminui até 20%. Para esse autor, uma variação de temperatura estimada em 4 °C foi definida como o máximo aceito para uma cultura fúngica termofílica. Para o caso nominal atual, o modelo previu que T_s na borda de saída da bandeja poderia atingir um máximo de cerca de 55 °C, o que ainda não seria muito deletério para o crescimento da *Myceliophthora termophila* e formação de celulases. Portanto, em termos de remoção de calor nenhuma taxa alta de fluxo de ar é necessária, uma vez que consumiria mais energia para o fornecimento de ar e secaria mais rapidamente o substrato próximo à borda de ataque da bandeja, ocasionando níveis de umidade desfavoráveis. Conseqüentemente, a matriz sólida seria submetida mais cedo a baixos valores de a_{ws} , o que afetaria negativamente o crescimento fúngico e prejudicaria a produção de enzimas.

Com relação ao efeito da taxa de fluxo de ar de na variável X na borda de ataque da bandeja (11b), ocorreu uma secagem severa do substrato para qualquer condição, com taxa de secagem aumentando à medida que a taxa de fluxo de ar aumenta. Valores de X inferiores a 2 kg-água/kg-sólido-seco levam a valores de a_{ws} abaixo de 0,90, prejudicando o crescimento

fúngico. Para $6 \text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$, a fase sólida demorou mais para atingir valores críticos de a_{ws} , mas essa taxa de fluxo de ar baixa pode representar uma restrição de oxigênio às necessidades microbianas, bem como pode levar T_s a cerca de $60 \text{ }^\circ\text{C}$ (Fig. 11a). Por isso, um equilíbrio entre esses vários fenômenos deve ser feito para encontrar a taxa de fluxo de ar mais adequada. Portanto, além de considerar simultaneamente a transferência de calor e umidade, o modelo pode ser aprimorado para incluir trocas gasosas respiratórias (consumo de oxigênio e liberação de dióxido de carbono).

A influência das umidades relativas nas previsões de T_s próximo a borda de saída da bandeja é insignificante (Fig. 12a), uma vez que a remoção de calor evaporativo desempenha uma contribuição significativa no lado oposto da bandeja. Portanto, pode-se propor que o ar saturado seja fornecido ao biorreator, para minimizar a secagem do substrato nas proximidades da borda de ataque da bandeja, como pode ser visto na Fig. 12b.

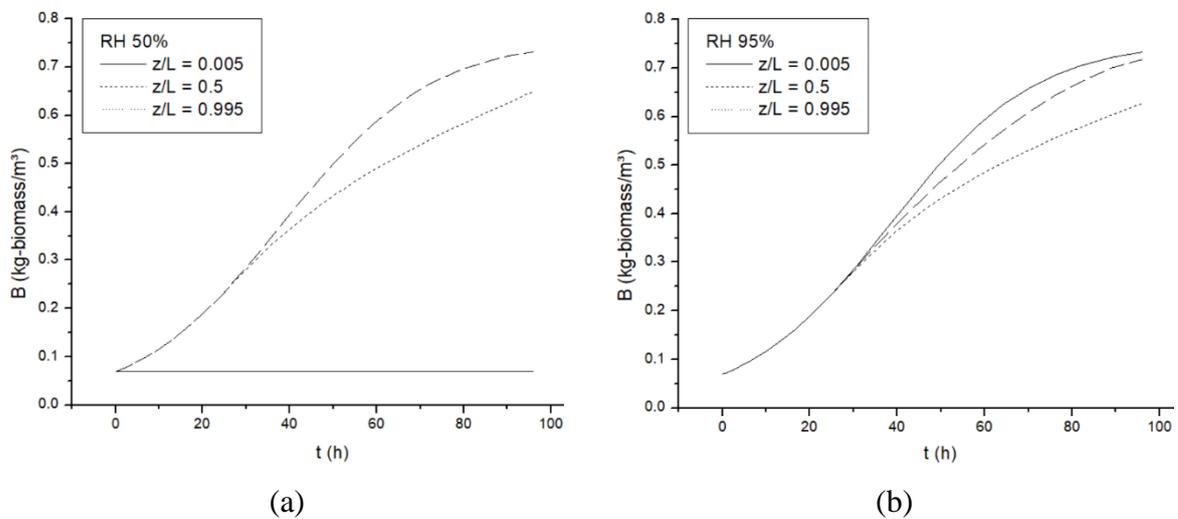
Com relação ao efeito de Y_0 em X (Fig. 12b), a remoção de água por evaporação próxima à borda de ataque da bandeja é fortemente reduzida quando o ar entra quase saturado (UR 95%). Além disso, Y_0 pode modificar a forma do X no perfil longitudinal de tempo. Quando o ar não saturado é soprado (URs 50 e 75%), o substrato colocado na borda de ataque da bandeja seca rapidamente, seguindo um perfil de decaimento exponencial ao longo do tempo. Para a aeração saturada, o substrato na mesma região seca mais lentamente, quase linearmente ao longo do tempo (Fig. 12b).

Olhando para os perfis longitudinais no final do cultivo ($t = 96 \text{ h}$, Fig. 12c), pode-se ver uma forma sigmoide da curva de X em função de z para ambas as UR distintas de saturação (50 e 75%), enquanto uma forma hiperbólica é observada para UR 95%, próxima à saturação. Além disso, X não cai abaixo de $2 \text{ kg}\cdot\text{água}/\text{kg}\cdot\text{sólido-seco}$, portanto, a cultura microbiana não sofre com um a_{ws} crítico.

As Figs. 13a e 13b mostram B previsto em $z/L = 0,005, 0,5, 0,995$ para aeração com UR 50 e 95%, respectivamente. Uma vez que próximo a entrada do leito ($z/L = 0,005$) T_s permaneceu próxima da temperatura ideal do processo, pode-se concluir que o crescimento do fungo foi fortemente limitado (Fig. 13a) por um baixo a_{ws} , atingido naquela região para aeração com UR 50%. Por outro lado, para aeração com UR 95%, o crescimento fúngico foi quase homogêneo (Fig. 13b) ao longo do comprimento da bandeja, exceto pelo leve efeito do superaquecimento na direção do comprimento da bandeja, concordando com os resultados experimentais relatados por DALLASTRA et al. (2023) para o cultivo de outro fungo, *Metharizium anisopliae*. Diante do exposto, ficou claro que, para o sistema de fermentação

utilizado neste estudo de caso, a secagem em meio poroso é mais deletéria ao crescimento microbiano do que o superaquecimento. No entanto, o superaquecimento pode ser tornar uma situação crítica quando o biorreator é ampliado, aumentando o comprimento da bandeja ou a carga do substrato em cada bandeja, o que significa aumentar a espessura do substrato colocado em uma bandeja. Simular o efeito de tal variável está fora do escopo do presente trabalho, uma vez que assumimos uma camada delgada para a modelagem aqui abordada.

Figura 13 – Perfis temporais de concentração de biomassa: (a) para ar de entrada com UR 50%; (b) para ar de entrada com UR 95%.



Fonte: o autor (2024)

5.3 Previsões no biorreator de badeja para simulação do estudo de caso para outros valores de substrato e parâmetros microbianos

Algumas simulações adicionais foram executadas para verificar a influência de parâmetros microbianos (μ_{opt} , b_{max} , b_0 , R_w e R_q) e das propriedades físicas da fase sólida (D_s , k_s e ϵ_0) nas previsões do modelo para X e T_s . Com essas simulações, a intenção foi identificar parâmetros cujas variações influenciem significativamente as previsões do modelo. Nesse sentido, os pesquisadores experimentais devem despender esforços para determinar especificamente os valores de tais parâmetros, que são específicos para cada combinação de microrganismo, substrato e bioproduto. O X foi previsto próximo à borda de ataque da bandeja ($z/L = 0,005$) e o T_s próximo à borda de saída ($z/L = 0,995$), com taxa de aeração de $12 \text{ L}\cdot\text{min}^{-1}$ e UR 50%.

A taxa de crescimento específica ideal (μ_{opt}) é um parâmetro-chave do crescimento fúngico, pois está incluída nos termos de reação para geração metabólica de calor e água nas Equações (2) e (4). Em FES, é possível obter uma ampla gama de valores de μ_{opt} , dependendo do microrganismo, substrato e condições experimentais (VICCINI et al., 2001)vi. Os valores testados foram $0,06 \text{ h}^{-1}$, equivalente ao valor de referência deste trabalho, e valores abaixo e superestimados em 10 vezes.

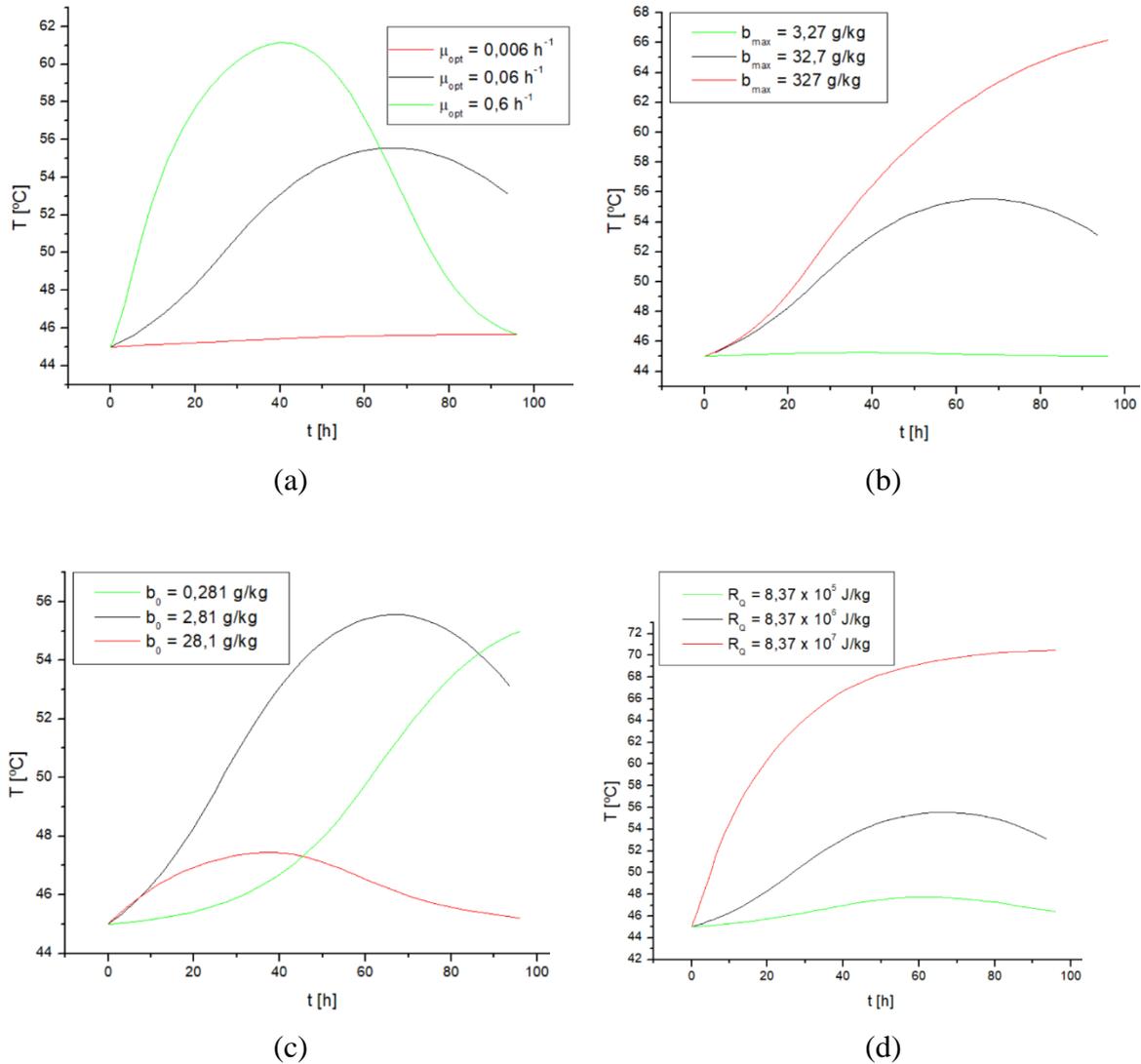
A fração máxima possível de biomassa em sólidos secos totais (b_{max}) também pode variar amplamente em sistemas de FES (VICCINI et al., 2001). Foram realizadas simulações para valores de b_{max} iguais a $32,7 \text{ g-biomassa/kg-total-sólidos-secos}$, equivalentes ao valor de referência deste trabalho, e valores sub e superestimados em 10 vezes.

A fração inicial de biomassa em sólidos secos totais (b_0) depende da etapa de inoculação e geralmente é definida com base em testes preliminares em escala de frasco. As simulações foram realizadas com valores de b_0 iguais a $2,81 \text{ g-biomassa/kg-total-sólidos-secos}$, também equivalentes ao valor de referência deste trabalho, e valores sub e superestimados em 10 vezes.

Para os coeficientes estequiométricos relacionando a produção de água ao crescimento fúngico (R_w) e ao calor liberado por biomassa produzida (R_Q), os respectivos valores de referência adotados da literatura (SARGANTANIS et al., 1993) e valores sub e superestimados em 10 vezes foram tomados para simulações adicionais.

As previsões de X foram insensíveis a μ_{opt} , b_{max} , b_0 , R_w e R_Q , uma vez que os perfis temporais permaneceram inalterados para qualquer um dos valores testados (dados não mostrados). Para os valores testados de R_w , T_s também foi insensível. No entanto, todos os demais parâmetros apresentaram influência nos perfis temporais de T_s , como mostram as Figuras 14a a 14d, e conseqüentemente na biomassa prevista (dados não mostrados), próximo a borda de saída das bandejas. Por exemplo, a Fig.14d aborda que temperaturas muito deletérias seriam rapidamente alcançadas em $z/L = 0,995$ se R_Q fosse 10 vezes maior que o valor adotado na literatura.

Figura 14 – Efeitos dos parâmetros microbianos nas previsões do modelo para perfis temporais de temperatura da fase sólida (T_s) em $z/L = 0,995$: (a) μ_{opt} ; (b) b_{max} ; (c) b_0 ; (d) R_Q . Todos os demais parâmetros com valores sob condições de referência de acordo com a Tabela 1.



Fonte: o autor (2024).

A difusividade da água na fase sólida (D_s) é outro importante parâmetro de transporte que representa a dispersão da água por capilaridade. Existe uma ampla gama de valores D_s na literatura de FES, dependendo do substrato escolhido e de suas propriedades, como tamanho de partícula, porosidade e tortuosidade do leito e temperatura do sistema (CASCIATORI et al., 2016). Portanto, o valor de referência de D_s $1,5 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, foi testado em conjunto com valores sub e superestimados em 100 vezes. A Figura 15a mostra que os valores de D_s tiveram

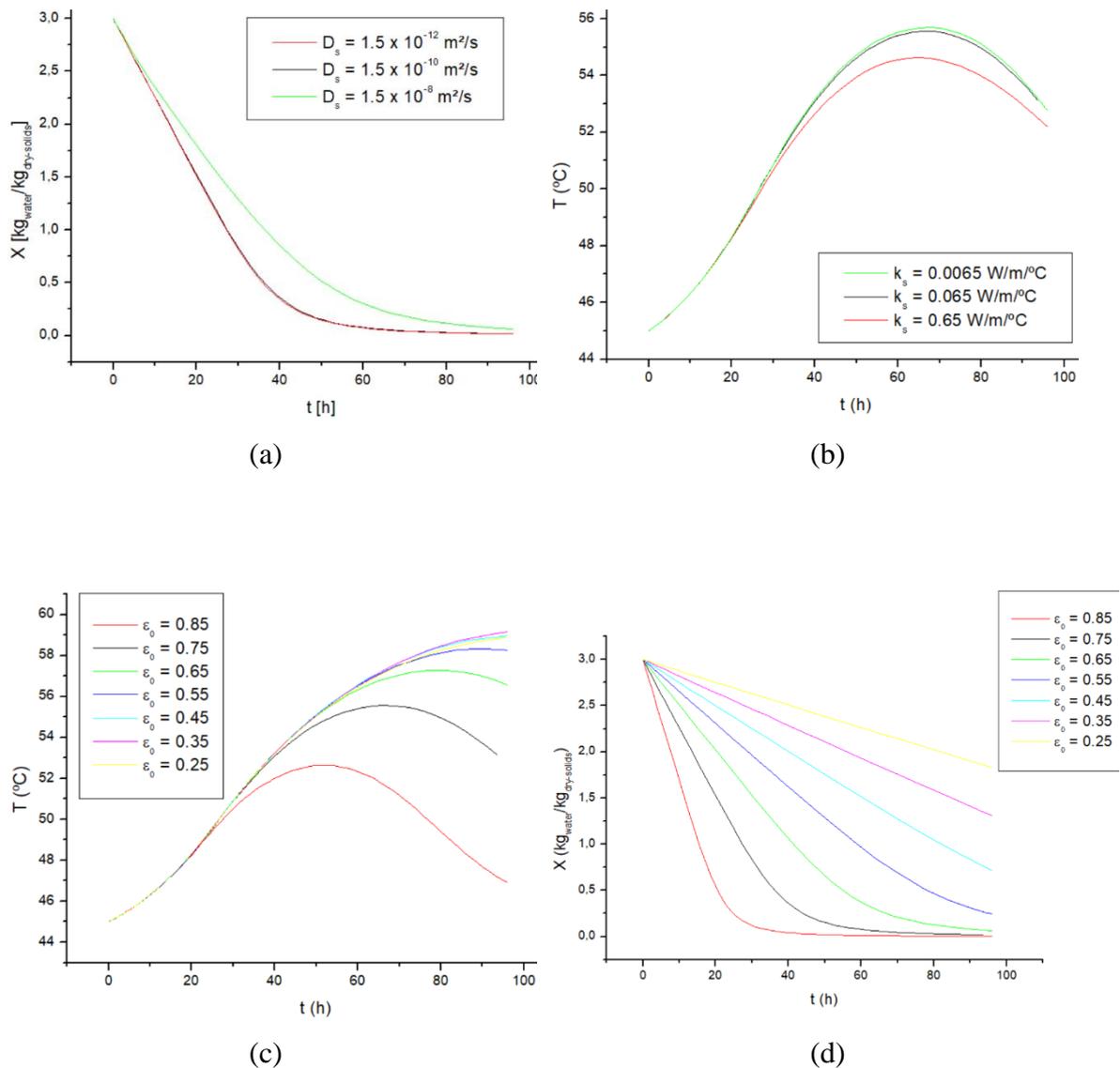
pouca influência sobre X , pois a secagem por convecção é o fenômeno mais importante que afeta essa variável. No entanto, o efeito dos maiores D_s não foi desprezível ao longo do cultivo, uma vez que permitiu que a água se dispersasse melhor por capilaridade na fase sólida, antes de ser removida pela fase gasosa. Isso indica que o substrato permaneceria um pouco mais úmido se tivesse alta capacidade de transporte de água por capilaridade, que é um fenômeno difusivo. As previsões de T_s foram insensíveis a D_s .

A condutividade térmica da fase sólida (k_s) reflete sua capacidade de transferir calor por condução, portanto, relaciona-se com a facilidade ou dificuldade de dispersar o calor metabólico gerado pelas direções espaciais da bandeja. Existem alguns métodos para obter essa propriedade térmica de uma matriz porosa (CASCIATORI et al., 2013), e cada um pode levar a um valor diferente. Portanto, o valor de referência de k_s , 0,065 W/m/K, foi testado em conjunto com valores abaixo e superestimados em 10 vezes. A Figura 15b mostra que T_s sofre baixa influência dos valores de k_s subestimados em relação ao valor de referência (CASCIATORI et al., 2013), enquanto a influência mais significativa ocorre quando o valor superestimado foi testado. Isso significa que o valor de referência é um fator limitante para a remoção de calor por condução, enquanto uma melhor contribuição desse mecanismo poderia ser esperada se esse parâmetro fosse aumentado. É possível observar que valores de k_s mais altos implicam em menor pico de T_s , uma vez que a dispersão através do sólido é favorecida, o que está de acordo com a lei clássica de Fourier de transferência de calor por condução. X , por sua vez, foi insensível a k_s .

A porosidade do leito (ϵ_0) é uma das propriedades estruturais mais importantes que afeta os processos de FES, pois o crescimento microbiano e as atividades metabólicas ocorrem nos espaços interpartículas. Quanto menor ϵ_0 , maior a quantidade de substrato por unidade de volume do biorreator, portanto, ϵ_0 afeta a transferência de água nas fases sólida e gasosa. Basicamente, valores de ϵ_0 dependerão do tipo de substrato (forma e tamanho das partículas), seu teor de umidade e técnica de empacotamento (CASCIATORI et al., 2014, 2016). Os valores testados foram de 0,25 a 0,85, passando pelo valor experimental de 0,75. Os resultados mostraram que tanto T_s , quanto X são muito sensíveis a ϵ_0 (Figura 15c e 15d, respectivamente). À medida que ϵ_0 aumenta, X diminui mais rapidamente devido ao aumento da área de transferência de água na interface do sólido para a fase gasosa por unidade de volume (Fig. 15d). O oposto é verdadeiro para T_s : quanto maior ϵ_0 , menor a temperatura máxima prevista. Portanto, a escolha da composição do substrato deve considerar não apenas os aspectos nutricionais do microrganismo, mas também a estrutura do leito. Se por um lado os leitos mais

porosos são interessantes por permitirem melhor troca térmica e melhor difusão dos gases respiratórios, por outro lado também estão mais expostos à secagem (CASCIATORI et al., 2014).

Figura 15 – Efeito das propriedades físicas da matriz porosa nas previsões do modelo para perfis temporais de: (a) X em $z/L = 0,05$, variando D_s ; (b) T_s em $z/L = 0,995$, variando k_s ; (c) T_s em $z/L = 0,995$, variando ε_0 (d) X em $z/L = 0,05$, variando ε_0 . Todos os demais parâmetros com valores sob condições de referência de acordo com a Tabela 1.



Fonte: o autor (2024).

A Tabela 3 sintetiza o resultado da análise da sensibilidade aos parâmetros. Vale lembrar que o objetivo dessas análises não foi encontrar um melhor valor de parâmetro para o processo, visto que nem todos são passíveis de alteração na prática. O intuito dessas

simulações foi analisar como um erro na determinação experimental dos parâmetros avaliados pode impactar nas variáveis ambientais da fase sólida. As variáveis que se mostraram sensíveis aos parâmetros estão representadas na Tabela 3 pelo número da Figura correspondente ao gráfico de seu perfil temporal. Para os casos de parâmetros aos quais as variáveis se apresentaram insensíveis, isso se deve ao fato de estes estarem presentes em termos que não são referentes aos mecanismos dominantes de transferência de calor, para o efeito sobre T_s , e/ou de massa, para efeito sobre X .

Tabela 3 – Resultado da análise da sensibilidade aos parâmetros.

		X (z/L = 0,005)	T_s (z/L = 0,995)
Parâmetros Microbianos	μ_{opt}	Insensível	14a
	b_{max}		14b
	b_0		14c
	R_w		Insensível
	R_Q		14d
Propriedades físicas da Fase Sólida	D_s	15a	Insensível
	k_s	Insensível	15b
	ε_0	15c	15d

Fonte: o autor (2024)

5.4 Observações finais

Em geral, as simulações baseadas em modelos permitiram prever e discutir como as variações nas condições operacionais e nos parâmetros do estudo de caso poderiam influenciar a temperatura e o teor de umidade da fase sólida ao longo do cultivo em estado sólido de *Myceliophthora thermophila* no biorreator de bandeja, e conseqüentemente, como poderiam afetar a produção de celulases extracelulares para aplicação na rota do etanol de segunda geração.

Essas previsões são informações importantes para o campo da pesquisa da produção de enzimas por fermentação em estado sólido, em combinação estrita com algumas informações empíricas cruciais de cada combinação de substrato, microrganismo, bioproduto de interesse e condições operacionais. De qualquer forma, os balanços de massa para água nas fases sólida e gasosa e também os balanços de energia bifásicos provaram ser adequados ao projeto e

operação deste biorreator, portanto, as previsões baseadas em modelos podem ser uma ferramenta útil para a realização de estudos de aumento de escala de processos de fermentação em estado sólido em biorreatores de bandeja no futuro, permitindo evitar condições ambientais desfavoráveis em termos de teor de umidade e temperatura em fase sólida ao longo dos cultivos.

6. CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou um modelo bifásico e unidimensional descrevendo a transferência de calor e água em um biorreator de bandeja para fermentação em estado sólido, incluindo a maioria dos mecanismos de transporte de calor e massa possíveis de ocorrer. As simulações foram realizadas usando propriedades físicas, microbianas e de transporte realistas. O modelo foi aplicado para simular o cultivo de *Myceliophthora thermophila* em bagaço de cana-de-açúcar e farelo de trigo para produção de celulase visando aplicações na rota do etanol de segunda geração. De acordo com as previsões, a taxa de fluxo de ar de entrada e o teor de umidade influenciam a temperatura e o teor de umidade do substrato. Para o caso nominal, a secagem mostrou ser prejudicial para o crescimento de fungos perto da entrada do ar subsaturado na bandeja do biorreator. Portanto, o modelo proposto pode ser aplicado para maior escalonamento e intensificação do bioprocessos aqui estudado.

REFERÊNCIAS

- AGARWAL, V. et al. Water activity and biomass estimation using digital image processing in solid-state fermentation. **Bioresource Technology**, v. 308, p. 123277, 2020.
- AHLAWAT, S. et al. Production of thermostable pectinase and xylanase for their potential application in bleaching of kraft pulp. **Journal of industrial microbiology & biotechnology**, v. 34, n. 12, p. 763–770, dez. 2007.
- AREESHI, M. Y. Microbial cellulase production using fruit wastes and its applications in biofuels production. **International Journal of Food Microbiology**, v. 378, p. 109814, 2022.
- ARORA, S.; RANI, R.; GHOSH, S. Bioreactors in solid state fermentation technology: design, applications and engineering aspects. **Journal of biotechnology**, v. 269, p. 16–34, 2018.
- ASHOK, A. et al. Design of solid state bioreactor for industrial applications: an overview to conventional bioreactors. **Biocatalysis and Agricultural Biotechnology**, v. 9, p. 11–18, 2017.
- BALAT, M. Production of bioethanol from lignocellulosic materials via the biochemical pathway: a review. **Energy conversion and management**, v. 52, n. 2, p. 858–875, 2011.
- BEHERA, S. S.; RAY, R. C. Solid state fermentation for production of microbial cellulases: Recent advances and improvement strategies. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 86, p. 656–669, 2016.
- BERNHARDT, H. et al. **Challenges for Agriculture through Industry 4.0** *Agronomy*, 2021.
- BHARDWAJ, N. et al. Current perspective on production and applications of microbial cellulases: a review. **Bioresources and Bioprocessing**, v. 8, n. 1, p. 95, 2021.
- BHATTACHARYA, A. S.; BHATTACHARYA, A.; PLETSCHKE, B. I. Synergism of fungal and bacterial cellulases and hemicellulases: a novel perspective for enhanced bio-ethanol production. **Biotechnology letters**, v. 37, n. 6, p. 1117–1129, 2015.
- BORGES, A. C. P. et al. Energias renováveis: uma contextualização da biomassa como fonte de energia. **REDE - Revista Eletrônica do PRODEMA**; v. 10 n. 2 (2016), 2 mar. 2017.
- CANILHA, L. et al. Bioconversion of sugarcane biomass into ethanol: an overview about composition, pretreatment methods, detoxification of hydrolysates, enzymatic saccharification, and ethanol fermentation. **Journal of Biomedicine and Biotechnology**, v. 2012, 2012.
- CASCIATORI, F. et al. Stagnant Effective Thermal Conductivity of Agro-Industrial Residues for Solid-State Fermentation. **International Journal of Food Properties**, v. 16, 2013.
- CASCIATORI, F. P. et al. Structural properties of beds packed with agro-industrial solid by-products applicable for solid-state fermentation: Experimental data and effects on process performance. **Chemical Engineering Journal**, v. 255, p. 214–224, 2014.
- CASCIATORI, F. P. Produção de celulases fúngicas por fermentação em estado sólido: ampliação de escala de biorreatores de leito fixo. 2015.

CASCIATORI, F. P. et al. Hygroscopic properties of solid agro-industrial by-products used in solid-state fermentation. **Industrial Crops and Products**, v. 64, p. 114–123, 2015.

CASCIATORI, F. P. et al. Two-phase and two-dimensional model describing heat and water transfer during solid-state fermentation within a packed-bed bioreactor. **Chemical Engineering Journal**, v. 287, p. 103–116, 2016.

CASCIATORI, F. P. et al. Flow configuration and Packing Density of Sugarcane Bagasse and Wheat Bran Affecting Enzymes Production by Solid-State Fermentation. **Bioenergy research**, 2023.

CERDA, A. et al. Innovative Production of Bioproducts From Organic Waste Through Solid-State Fermentation. **Frontiers in Sustainable Food Systems**, v. 3, 2019.

CHAKRABORTY, S. et al. Cost-effective production of cellulose hydrolysing enzymes from *Trichoderma* sp. RCK65 under SSF and its evaluation in saccharification of cellulosic substrates. **Bioprocess and biosystems engineering**, v. 39, n. 11, p. 1659–1670, 2016.

CHERWOO, L. et al. Biofuels an alternative to traditional fossil fuels: A comprehensive review. **Sustainable Energy Technologies and Assessments**, v. 60, p. 103503, 2023.

CHILAKAMARRY, C. R. et al. Advances in solid-state fermentation for bioconversion of agricultural wastes to value-added products: Opportunities and challenges. **Bioresource Technology**, v. 343, n. September 2021, p. 126065, 2022.

CHURCHILL, S. W.; BERNSTEIN, M. A correlating equation for forced convection from gases and liquids to a circular cylinder in crossflow. 1977.

CUNHA, L. . Aspectos de engenharia da produção do fungo entomopatogênico *Metarhizium anisopliae* em biorreator de bandeja. 2016.

DA CUNHA, D. C. et al. Hexahedral modular bioreactor for solid state bioprocesses. **World Journal of Microbiology and Biotechnology**, v. 25, n. 12, p. 2173–2178, 2009.

DALLASTRA, E. D. G. et al. Development of a novel pilot-scale tray bioreactor for solid-state fermentation aiming at process intensification. **Chemical Engineering and Processing - Process Intensification**, v. 193, n. May, p. 19–21, 2023.

DAS, D.; BHAT, R.; SELVARAJ, R. Review of inulinase production using solid-state fermentation. **Annals of Microbiology**, v. 69, n. 3, p. 201–209, 2019.

DATTA, A.; HOSSAIN, A.; ROY, S. An overview on biofuels and their advantages and disadvantages. 2019.

DATTA, A. K. Porous media approaches to studying simultaneous heat and mass transfer in food processes. I: Problem formulations. **Journal of food engineering**, v. 80, n. 1, p. 80–95, 2007.

DE C. L. E PENALVA SANTOS, D. et al. Brazil and the world market in the development of technologies for the production of second-generation ethanol. **Alexandria Engineering**

Journal, v. 67, p. 153–170, 2023.

DINIL, A.; JACOB, A. Valorization of Agro-industrial Discards in Fermentation for the Production of Cellulase Enzyme. v. 16, n. March, p. 347–354, 2022.

DINIZ DA SILVA, M. P. et al. Heat analysis of a sugarcane bagasse and wheat bran system in rotating drum bioreactor for cellulase production. In: GRAJALES AGUDELO, L. M.; SERRA, J. C. V.; COLLICCHIO, E. (Eds.). . **Agroenergy: Renewable and Sustainable Energy**. First ed. [s.l.] Elsevier Ltd, 2024.

DINIZ, M. P. et al. A two-phase model for simulation of water transfer during lipase production by solid-state cultivation in a tray bioreactor using babassu residues. **Chemical Engineering and Processing - Process Intensification**, p. 108981, 2022.

DINIZ, M. P. **Simulação da Transferência de Calor na Produção de Lipases por Fermentação em Estado Sólido em Biorreator de Bandejas**. [s.l.] Universidade Federal do Tocantins, Palmas -TO, 2023.

DOS SANTOS, D. D. A. S. Produção de etanol de segunda geração por *Zymomonas mobilis* naturalmente ocorrente e recombinante, empregando biomassa lignocelulósica. **Universidade Federal do Rio de Janeiro Escola de Química Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos PRODUÇÃO**, 2012.

DURAND, A. Bioreactor designs for solid state fermentation. **Biochemical Engineering Journal**, v. 13, n. 2–3, p. 113–125, 2003.

DUTRA, R. S. **Modelagem e simulação da transferência de umidade no processo de produção de lipases por fermentação em estado sólido em biorreator de bandejas**. [s.l.] Universidade Federal do Tocantins, Campus Palmas, 2020.

EJAZ, U.; SOHAIL, M.; GHANEMI, A. Cellulases: From Bioactivity to a Variety of Industrial Applications. **Biomimetics**, v. 6, n. 3, 2021.

GARRO, M. S.; RIVAS, F. P.; GARRO, O. A. 3.10 - Solid State Fermentation in Food Processing: Advances in Reactor Design and Novel Applications. In: KNOERZER, K.; MUTHUKUMARAPPAN, K. (Eds.). . **Innovative Food Processing Technologies**. Oxford: Elsevier, 2021. p. 165–182.

GLENN, D. R.; ROGERS, P. A solid substrate fermentation process for an animal feed product: Studies on fungal strain improvement. **Australian Journal of Biotechnology**, v. 2, n. 1, p. 50–54, 1988.

GOWTHAMAN, M. K. et al. Gas concentration and temperature gradients in a packed bed solid-state fermentor. **Biotechnology Advances**, v. 11, n. 3, p. 611–620, 1993.

GRAJALES AGUDELO, L. M. Avaliação de um biorreator rotativo para fermentação em estado sólido. 2010.

GRAJALES, L. M. et al. Mixing and motion of rice particles in a rotating drum. **Powder**

Technology, v. 222, p. 167–175, 2012.

GRAJALES, L. M. **Desenvolvimento de um Biorreator Rotativo para Produção de Enzimas Celulolíticas por Fermentação em Estado Sólido**. [s.l.] Universidade Estadual Paulista, Campus São José do Rio Preto, 2014.

GRAJEK, W. Cooling aspects of solid-state cultures of mesophilic and thermophilic fungi. **Journal of Fermentation Technology**, v. 66, n. 6, p. 675–679, 1988.

GREEN, D. W.; PERRY, R. H. **Perry's Chemical Engineers' Handbook, Eighth Edition**. 8th ed. / ed. New York: McGraw-Hill Education, 2008.

GUERRIERO, G. et al. Lignocellulosic biomass: Biosynthesis, degradation, and industrial utilization. **Engineering in Life Sciences**, v. 16, n. 1, p. 1–16, 2016.

HAMELINCK, C. N.; VAN HOOIJDONK, G.; FAAIJ, A. P. C. Ethanol from lignocellulosic biomass: techno-economic performance in short-, middle-and long-term. **Biomass and bioenergy**, v. 28, n. 4, p. 384–410, 2005.

HARDIN, M. T.; HOWES, T.; MITCHELL, D. A. Mass transfer correlations for rotating drum bioreactors. **Journal of Biotechnology**, v. 97, n. 1, p. 89–101, 2002.

ILI, N. Cellulases : From Lignocellulosic Biomass to Improved Production. p. 1–21, 2023.

JASANI, H. et al. Isolation, optimization and production of cellulase by *Aspergillus niger* from agricultural waste. **Journal of pure and applied microbiology**, v. 10, n. 2, p. 1159–1167, 2016.

JOHN, H.; LIENHARD, I. V.; LIENHARD, V. A heat transfer textbook. **Phlogiston Press, Cambridge**, 2008.

JULIA, B. M. et al. Potential use of soybean hulls and waste paper as supports in SSF for cellulase production by *Aspergillus niger*. **Biocatalysis and Agricultural Biotechnology**, v. 6, p. 1–8, 2016.

KHANAHMADI, M. et al. Bed moisture estimation by monitoring of air stream temperature rise in packed-bed solid-state fermentation. **Chemical Engineering Science**, v. 61, p. 5654–5663, 2006.

KUHAD, R. C. et al. Revisiting cellulase production and redefining current strategies based on major challenges. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 55, p. 249–272, 2016.

KUMAR, S. et al. Use of evolutionary operation (EVOP) factorial design technique to develop a bioprocess using grease waste as a substrate for lipase production. **Bioresource technology**, v. 102, n. 7, p. 4909–4912, 2011.

KUMAR, V. et al. Recent developments on solid-state fermentation for production of microbial secondary metabolites: Challenges and solutions. **Bioresource Technology**, v. 323, p. 124566, 2021.

LEAP. **Tips & Tricks: Convergence and Mesh Independence Study**. Disponível em: <www.computationalfluidynamics.com.au>. Acesso em: 8 nov. 2023.

LEITE, P. et al. Recent advances in production of lignocellulolytic enzymes by solid-state fermentation of agro-industrial wastes. **Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry**, v. 27, p. 100407, 2021.

LIMA, T. **Modelo de inferência para a estimação da umidade do leito de um biorreator de fermentação no estado sólido**. [s.l.] Universidade Federal do Paraná, 2009.

LIMAYEM, A.; RICKE, S. C. Lignocellulosic biomass for bioethanol production: current perspectives, potential issues and future prospects. **Progress in energy and combustion science**, v. 38, n. 4, p. 449–467, 2012.

LÓPEZ-GÓMEZ, J. P.; VENUS, J. Potential role of sequential solid-state and submerged-liquid fermentations in a circular bioeconomy. **Fermentation**, v. 7, n. 2, 2021.

MAHATO, N. et al. Biotransformation of citrus waste-I: Production of biofuel and valuable compounds by fermentation. **Processes**, v. 9, n. 2, p. 220, 2021.

MANAN, M. A.; WEBB, C. Newly designed multi-stacked circular tray solid-state bioreactor: analysis of a distributed parameter gas balance during solid-state fermentation with influence of variable initial moisture content arrangements. **Bioresources and Bioprocessing**, v. 7, n. 1, p. 1–18, 2020.

MENDES, F. B.; IBRAIM PIRES ATALA, D.; THOMÉO, J. C. Is cellulase production by solid-state fermentation economically attractive for the second generation ethanol production? **Renewable Energy**, v. 114, p. 525–533, 2017.

MISHIMA, D. et al. Comparative study on chemical pretreatments to accelerate enzymatic hydrolysis of aquatic macrophyte biomass used in water purification processes. **Bioresource technology**, v. 97, n. 16, p. 2166–2172, 2006.

MITCHELL, D. A.; KRIEGER, N.; BEROVIĆ, M. **Solid-state fermentation bioreactors**. [s.l.] Springer, 2006. v. 19

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**, v. 13, n. 2–3, p. 137–147, 2003.

OSWIN, C. R. The kinetics of package life. III. The isotherm. **Journal of the Society of Chemical Industry**, v. 65, n. 12, p. 419–421, 1946.

PAPAGIANNI, M. Recent advances in solid-state fermentation applications for the food industry. **Current Biochemical Engineering**, v. 1, n. 1, p. 2–8, 2014.

PEREZ, C. L.; CASCIATORI, F. P.; THOMÉO, J. C. Strategies for scaling-up packed-bed bioreactors for solid-state fermentation: The case of cellulolytic enzymes production by a thermophilic fungus. **Chemical Engineering Journal**, v. 361, p. 1142–1151, 2019.

PESSOA, D. et al. Fluid dynamics simulation of a pilot-scale solid-state fermentation bioreactor. **Chemical Engineering Transactions**, v. 49, p. 49–54, 2016.

PESSOA, D. R. **Simulação da dinâmica do biorreator de fermentação em estado sólido em CFD**. [s.l.] Universidade Federal do Paraná, Curitiba - Paraná, 2016.

PETROU, E. C.; PAPPIS, C. P. Biofuels: a survey on pros and cons. **Energy & Fuels**, v. 23, n. 2, p. 1055–1066, 2009.

RAGHAVARAO, K. S. M. S.; RANGANATHAN, T. V; KARANTH, N. G. Some engineering aspects of solid-state fermentation. v. 13, p. 127–135, 2003.

RAHARDJO, Y. S. P.; TRAMPER, J.; RINZEMA, A. Modeling conversion and transport phenomena in solid-state fermentation: A review and perspectives. **Biotechnology Advances**, v. 24, n. 2, p. 161–179, 2006.

RAMESH, D. et al. Chapter 11 - Knowledge Update on Bioreactor Technology for Cellulase Production. In: SRIVASTAVA, N. et al. (Eds.). . [s.l.] Elsevier, 2019. p. 181–193.

RASTOGI, M.; SHRIVASTAVA, S. Recent advances in second generation bioethanol production: An insight to pretreatment, saccharification and fermentation processes. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 80, p. 330–340, 2017.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, T. K. **Properties of Gases and Liquids**. 3ed. ed. New York: McGraw-Hill: [s.n.].

RODRIGUES, N. A.; SÁ, D. O. M. DE; CASCIATORI, F. P. Biorreatores de leito empacotado para fermentação em estado sólido: um panorama atual do estado da arte. In: **Geração de conhecimento e tecnologia voltados à aplicação em processos químicos e bioquímicos**. [s.l.: s.n.]. v. 1p. 52–64.

SÁNCHEZ PRIETO, M. G. Alternativas de Cogeração na Indústria Sucro- Alternativas de Cogeração na Indústria Sucro- Alcooleira , Estudo de Caso . p. 255, 2003.

SARGANTANIS, J. et al. Effect of operating conditions on solid substrate fermentation. **Biotechnology and bioengineering**, v. 42, n. 2, p. 149–158, 1993.

SAUCEDO-CASTAÑEDA, G. et al. Heat transfer simulation in solid substrate fermentation. **Biotechnology and bioengineering**, v. 35, n. 8, p. 802–808, abr. 1990.

SHARMA, A. et al. Cellulases: classification, methods of determination and industrial applications. **Applied Biochemistry and Biotechnology**, v. 179, n. 8, p. 1346–1380, 2016.

SINGHANIA, R. R. et al. Recent advances in solid-state fermentation. **Biochemical Engineering Journal**, v. 44, n. 1, p. 13–18, 2009.

SINGHANIA, R. R. et al. Solid-State Fermentation: Current Trends and Future Prospects. In: **Fermentation Microbiology and Biotechnology, Fourth Edition**. [s.l.] CRC Press, 2018. p. 243–254.

SINGHANIA, R. R. et al. Challenges in cellulase bioprocess for biofuel applications. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 151, p. 111622, 2021.

SIQUEIRA, J. G. W. et al. Current advances in on-site cellulase production and application on lignocellulosic biomass conversion to biofuels: A review. **Biomass and Bioenergy**, v. 132, p. 105419, 2020.

SRIVASTAVA, N. et al. Technological advances for improving fungal cellulase production from fruit wastes for bioenergy application: A review. **ENVIRONMENTAL POLLUTION**, v. 287, 2021.

SURAJ S, O. S. **Enzymes Market Research, 2031**. Disponível em: <<https://www.alliedmarketresearch.com/enzymes-market>>. Acesso em: 18 jan. 2023.

TADA, É. F. R. et al. Mixture and motion of sugar cane bagasse in a rotating drum. **Powder Technology**, v. 317, p. 301–309, 2017.

TADA, É. F. R. Cultivo em estado sólido em biorreator de tambor horizontal: modelagem, simulação e experimentação. 2020.

TADA, É. F. R.; AGUDELO, L. M. G.; THOMÉO, J. C. Water holding capacity and heat transfer aspects of a mixture of sugar cane bagasse and wheat bran in a partially filled rotating drum. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 36, n. 3, p. 1131–1141, 2019.

TARAFDAR, A. et al. Engineering interventions in enzyme production: Lab to industrial scale. **Bioresource Technology**, v. 326, n. January, p. 124771, 2021.

TSOTSAS, E. Heat and Mass Transfer in Packed Beds with Fluid Flow. In: **VDI Heat Atlas**. [s.l: s.n.]. p. 1327–1342.

TSOTSAS, E. **Thermal conductivity of packed beds**. VDI Heat A ed. Berlin: VDI Heat Atlas, 2010b.

UMSZA-GUEZ, M. A. Produção de poligalacturonase em fermentação em estado sólido pelo fungo *Thermomucor indicae-seudaticae* N31 em escala de frascos e biorreator de leito fixo. 2009.

VICCINI, G. et al. Analysis of growth kinetic profiles in solid-state fermentation. **Food Technology and Biotechnology**, v. 39, n. 4, p. 271–294, 2001.

VIESTURS, D.; MELECE, L. Advantages and disadvantages of biofuels: observations in Latvia. **Latvia University of Agriculture**, 2014.

VON MEIEN, OSCAR F ; MITCHELL, D. A. A two-phase model for water and heat transfer within an intermittently-mixed solid-state fermentation bioreactor with forced aeration. **Biotechnology and bioengineering**, v. 79, n. 4, p. 416–428, 2002.

VON MEIEN, O. F. et al. Control strategies for intermittently mixed, forcefully aerated solid-state fermentation bioreactors based on the analysis of a distributed parameter model. **Chemical Engineering Science**, v. 59, n. 21, p. 4493–4504, 2004.

VORTMEYER, D.; HAIDEGGER, E. Discrimination of three approaches to evaluate heat fluxes for wall-cooled fixed bed chemical reactors. **Chemical engineering science**, v. 46, n. 10, p. 2651–2660, 1991.

WU, Y. et al. Bioenergy production and environmental impacts. **Geoscience Letters**, v. 5, n. 1, p. 1–9, 2018.

YEO, W. S.; YUNIARTO, A. The external mass transfer model for the hydrolysis of palm olein using immobilized lipase in a scaled-up recirculated packed-bed reactor. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 7, n. 4, p. 103185, 2019.

ZANELATO, A. I. ESTADO SÓLIDO EM BIOREATOR DE LEITO FIXO São José do Rio Preto São José do Rio Preto. 2011.

ZANELATO, A. I. et al. Endoglucanase production with the newly isolated *Myceliophthora* sp. i-1d3b in a packed bed solid state fermentor. **Brazilian Journal of Microbiology**, v. 43, p. 1536–1544, 2012.