



BIANCA PAULA DE ALMEIDA

**ANÁLISE TÉCNICO-ECONÔMICA DA ETAPA DE
RECUPERAÇÃO DE CÉLULAS EM PROCESSO DE
PRODUÇÃO DE ÓLEO MICROBIANO**

LAVRAS – MG

2020

BIANCA PAULA DE ALMEIDA

**ANÁLISE TÉCNICO-ECONÔMICO DA ETAPA DE RECUPERAÇÃO DE
CÉLULAS EM PROCESSO DE PRODUÇÃO DE ÓLEO MICROBIANO.**

Monografia apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do curso de Engenharia Química para a obtenção do título de Bacharel.

Prof. Dr. Gilson Campani Junior

Orientador

Profa. Dra. Lidja Dahiane Menezes Santos Borél

Coorientadora

LAVRAS – MG

2020

AGRADECIMENTOS

A Deus, por sempre estar do meu lado e especialmente nessa fase da minha vida, que foi a graduação. Ele sempre acalmou meu coração e me mostrou o caminho certo a seguir.

Aos meus pais, que proporcionaram a mim a chance de estar formando em uma faculdade federal, por sempre investirem em minha educação. Além de sempre estarem do meu lado, me apoiando e acalmando. Não existem palavras que dimensionem o tamanho da minha gratidão.

Aos meus irmãos, Everton e Felipe, porque me apoiam e estão sempre do meu lado, encorajando-me a seguir meus sonhos e a minha intuição.

A Igor, que sempre esteve comigo, me ajudou e foi meu porto seguro desde o primeiro período da graduação. Não existem palavras que demonstrem minha enorme gratidão.

A Helena, por todo o companheirismo, auxílio e amizade durante a graduação. Com certeza sem a sua amizade seria muito difícil chegar até aqui.

A Universidade Federal de Lavras, que fez com que o meu sonho de criança se tornasse realidade, especialmente ao Departamento de Engenharia.

A todo corpo docente de Engenharia Química, professores maravilhosos que sempre estiveram dispostos a me ajudar.

A Gilson e Lidja, meus orientadores. Obrigada por toda paciência e ajuda durante a realização desse trabalho. Sou muito grata em ter escolhido, professores tão competentes e maravilhosos, para estarem comigo nesse momento.

*“Porque para Deus todas as
coisas são possíveis”*

(Lucas 1:37)

RESUMO

Os principais biocombustíveis utilizados no Brasil são o biodiesel e o etanol. O etanol pode ser produzido a partir da cana-de-açúcar e o biodiesel a partir de óleos provenientes de frituras, gordura animal e vegetal. Porém, a produção desses biocombustíveis geram resíduos que causam grande impacto ambiental e muitas vezes o descarte deles não é regulamentado. Com isso, vários pesquisadores tem estudado como os resíduos provenientes dessa produção podem ser usados para aumentar a viabilidade econômica de plantas químicas de produção de etanol e biodiesel. O hidrolisado hemicelulósico e o glicerol são os principais resíduos decorrentes da produção de etanol de segunda geração e biodiesel, respectivamente. Uma alternativa de aproveitamento desses resíduos é utilizá-los como matéria-prima para a produção de óleo microbiano pela levedura *Rhodotorula Toruloides*, uma vez que o óleo é um produto de interesse em vários setores industriais. Na produção de óleo microbiano, é necessária uma etapa de recuperação das células do caldo de cultivo, juntamente com o óleo produzido e acumulado intracelularmente. Desse modo, visando contribuir para a competitividade dessa estratégia, o objetivo deste trabalho foi propor uma configuração ótima para a integração de duas operações unitárias que podem ser utilizadas nessa etapa, a centrifugação e a flotação. Para isso, o processo de recuperação celular foi implementado e simulado no *software* EMSO, através do qual executou-se a análise econômica dessa integração. Para isso utilizou-se a técnica de Custo Modular, em que se obteve o custo de capital (CAPEX, do inglês *Capital Expenditure*) de cada unidade e os custos operacionais (OPEX, do inglês *Operating Expense*) correspondentes. Posteriormente realizou-se a otimização para determinar quais as vazões ótimas das correntes de entrada para cada operação. Obteve-se como resultado a combinação sequencial das operações, com o caldo de cultivo, proveniente do biorreator, passando primeiro por uma coluna de flotação e em seguida por uma centrífuga, para maximizar a relação entre a produção de óleo microbiano e o custo do processo de recuperação celular. Este trabalho contribui para o aumento da viabilidade da planta de produção de biocombustíveis.

Palavras-chave: Simulação de processos. Análise de Custo Modular. *Rhodotorula Toruloides*. Flotação. Centrifugação.

ABSTRACT

The main biofuels used in Brazil are biodiesel and ethanol. Since ethanol can be produced from sugarcane and biodiesel from oils from fried foods, animal and vegetable fat. However, the production of these biofuels generates residues that cause great environmental impact and their disposal is often not regulated. For this reason, several researchers have studied how the residues from this production can be used to improve the economic viability of the chemical plant for the production of ethanol and biodiesel. Hemicellulosic hydrolysate and glycerol are the main residues resulting from the production of ethanol and biodiesel. An alternative is to use those residues as carbon and nitrogen sources to produce microbial oil by the yeast *Rhodotorula Toruloides*, as the oil is a product of interest in various industrial sectors. In the production of microbial oil, it is necessary to clarify the yeast culture, whose cells are recovered from the culture broth, together with the oil produced and accumulated intracellularly. Thus, in order to contribute to the competitiveness of this strategy, the objective of this work was to propose an optimal configuration for the integration of two unit operations that can be used in this stage, centrifugation and flotation. For this, the cell recovery process was simulated using the EMSO software and, then, an economic analysis of this integration was performed, using the Modular Cost technique, in which the fixed investment (CAPEX, from English Capital Expenditure) of each unit was obtained along with the corresponding operating costs (OPEX). Subsequently, optimization was carried out to determine the optimal flow rates of the inlet streams for each operation. The result was the sequential combination of operations, with the culture broth being processed first by the flotation column and then by the centrifuge, in order to maximize the ratio between the production of microbial oil and the process costs. This work contributes to the improvement of the biofuel production plant viability.

Keywords: Cell recovery. Process simulation. Modular Cost Analysis. OPEX. *Rhodotorula Toruloides*. Flotation. Centrifugation.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 1 – Fórmula estrutural de um triglicerídeo | 13 |
| Figura 2 - Fluxograma do processo de produção do biodiesel..... | 14 |
| Figura 3 - Reação de transesterificação..... | 15 |
| Figura 4 - Fluxograma do processo de produção do etanol de primeira geração..... | 16 |
| Figura 5 - Processo de destilação do etanol | 17 |
| Figura 6 - Fluxograma do processo de produção do etanol de segunda geração | 18 |
| Figura 7 - Estrutura química da Xilose | 20 |
| Figura 8 - Esquema da produção de óleo microbiano a partir da integração dos processos | 22 |
| Figura 9 - Fluxograma da produção de óleo microbiano | 23 |
| Figura 10 - Esquema do funcionamento de uma centrífuga de disco | 26 |
| Figura 11 - Esquema de um flotador em coluna | 27 |
| Figura 12 - Processo de extração do óleo intracelular..... | 28 |
| Figura 13 - Função objetivo descontínua | 35 |
| Figura 14 - Exemplo de um Model no EMSO | 37 |
| Figura 15 - Exemplo de Flowsheet no EMSO | 37 |
| Figura 16 - Exemplo de otimização | 38 |
| Figura 17 - Diagrama do processo de recuperação celular | 39 |
| Figura 18 - Gráfico da relação entre a vazão (m ³ /h) e potência da centrífuga (kW).. | 41 |
| Figura 19 - Declaração de variáveis no software EMSO | 46 |
| Figura 20 - Declaração de parâmetros no software EMSO..... | 47 |
| Figura 21 - Declaração de variáveis para a centrífuga no software EMSO | 47 |
| Figura 22 - Declaração de parâmetros para a centrífuga no software EMSO..... | 47 |
| Figura 23 - Declaração dos equipamentos e correntes de processo no flowsheet..... | 47 |
| Figura 24 - Conexões dos equipamentos e correntes no software EMSO | 48 |
| Figura 25 - Especificação da variável "frac" no EMSO..... | 49 |
| Figura 26 – Algoritmo de otimização do processo implementado no EMSO..... | 50 |
| Figura 27 – Fluxograma na condição ótima..... | 51 |
| Figura 28- Custo de capital e operação | 51 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|----|
| Tabela 1 - Tipos de estimativa, propósito e precisão. | 31 |
| Tabela 2 - Dados da biorrefinaria virtual para a etapa de recuperação celular | 46 |
| Tabela 3 - Dados da corrente de caldo de cultivo - STEMPhg | 48 |
| Tabela 4- Custo total do processo de recuperação celular | 52 |

SUMÁRIO

| | |
|---|----|
| 1.INTRODUÇÃO | 11 |
| 2.REFERENCIAL TEÓRICO | 13 |
| 2.1. Produção de biocombustíveis | 13 |
| 2.1.1. Subprodutos e o impacto ambiental | 19 |
| 2.1.2. Utilização da <i>R. Toruloides</i> na produção de óleo microbiano | 20 |
| 2.1.3. Recuperação celular | 24 |
| 2.2. Análise econômica | 28 |
| 2.2.1. Custo de capital (CAPEX) | 29 |
| 2.2.2. Custo de operação (OPEX) | 33 |
| 2.3. Simulação e otimização de processos | 34 |
| 2.3.1. Simulador de processos EMSO | 36 |
| 3. METODOLOGIA E DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO | 39 |
| 3.1. Fluxograma do processo de recuperação celular | 39 |
| 3.2. Custo de capital | 40 |
| 3.3. Custo de operação | 45 |
| 3.4. Simulação | 46 |
| 3.5. Otimização | 49 |
| 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO | 50 |
| 5. CONCLUSÃO | 52 |
| 6. BIBLIOGRAFIA | 54 |

1. INTRODUÇÃO

Os biocombustíveis são derivados de biomassa renovável e dentre tantos tipos, os principais são o etanol e biodiesel. A biomassa é um material de constituição orgânica que pode ser empregada para algum tipo de produção de energia e os biocombustíveis correspondem a uma das formas que ela pode ser empregada, além de ser uma alternativa econômica e ambientalmente viável, reduzindo a queima dos combustíveis fósseis. As vantagens dos biocombustíveis estão relacionadas ao menor índice de poluição com sua queima, e de serem produzidos a partir de biomassa cultivada, o que significa que são renováveis. Além disso, o uso de biocombustíveis diminui a dependência de combustíveis fósseis e aumenta os índices de exportação no país (PENA, 2020).

No Brasil, a produção de etanol supera um montante de 35,2 bilhões de litros e a de biodiesel um valor de 865,74 milhões de litros (ANP,2020). O etanol, ou álcool etílico, pode ser dividido em dois tipos: etanol de primeira geração e etanol de segunda geração. O etanol de primeira geração é obtido a partir do processamento e fermentação do açúcar proveniente de várias matérias-primas, sendo a cana-de-açúcar a mais utilizada. Enquanto que o etanol de segunda geração é obtido a partir do processamento e fermentação de resíduos lignocelulósicos. Já o biodiesel é um combustível derivado de gorduras animais, vegetais ou até mesmo resíduos domésticos (ANP, 2020).

Um dos desafios frente à produção desses biocombustíveis é a geração de resíduos do processo. O processo de fabricação do etanol de segunda geração gera como principal resíduo o hidrolisado hemicelulósico, que é proveniente da hemicelulose proveniente do bagaço da cana-de-açúcar e é rico em xilose, um carboidrato não fermentescível (DIAS, 2011). Já no processo de fabricação do biodiesel, o principal resíduo é o glicerol, que possui regulamentação quanto ao seu descarte, mas essa não é adequadamente fiscalizada (BIODIESEL BRASIL, 2018).

Em vista disso, nos últimos anos, alternativas de aproveitamento dos resíduos mencionados têm sido propostas, para aumentar a viabilidade econômica da planta química de produção dos biocombustíveis e diminuir seu impacto ambiental. Os trabalhos de Campani (2018), Koutinas et al. (2014) e Potasio et al (2011) são exemplos de estudos para o aproveitamento desses resíduos. Dentre essas propostas uma alternativa é utilizar o hidrolisado hemicelulósico e o glicerol como matérias-primas para a produção de óleo microbiano.

O óleo microbiano possui interesse comercial, pois pode ser utilizado como substituto de matéria-prima para a produção de biodiesel. Para a produção desse óleo, é necessário o cultivo de microrganismos oleaginosos, como a levedura *Rhodotorula Toruloides*.

O processo de produção de óleo microbiano se divide em três partes gerais, *upstream* (preparação das matérias-primas e do biorreator), o cultivo celular (multiplicação celular e produção do óleo) e *downstream* (recuperação e purificação do óleo).

Na etapa de *downstream*, ocorre primeiramente a operação de clarificação e dentro dessa ocorre a recuperação celular, que é o processo em que se aumenta a concentração de células (contendo óleo intracelular) na corrente, eliminando parte da água e outras impurezas através de operações unitárias de separação. Existem vários tipos de processo de recuperação celular, que apresentam diferentes custos de aquisição e instalação de equipamentos, bem como de operação dos mesmos. Assim, faz-se necessário avaliar técnica e economicamente as diferentes operações para a recuperação celular. Além disso, existe também a possibilidade de integrar dois ou mais tipos de operações de separação, aumentando assim a produtividade e reduzindo os custos de processo.

Portanto, esse trabalho teve como objetivo avaliar técnica e economicamente a integração de dois equipamentos – a centrífuga e a coluna de flotação, para a operação de recuperação celular, a fim de propor uma configuração ótima para o processo, empregando a Análise de Custo Modular, simulação e otimização no *software* EMSO.

O presente trabalho está dividido em cinco capítulos. O primeiro capítulo aborda as justificativas para a elaboração do trabalho; no segundo capítulo, são apresentados os temas mais relevantes abordados no presente trabalho. Esses temas são: a produção de biocombustíveis, utilização da *Rhodotorula Toruloides* na produção de óleo microbiano, recuperação celular, estimativa de custos, simulação e otimização de processos no simulador EMSO. Já no capítulo 3 são apresentadas a metodologia e modelagem matemática adotadas para a realização da simulação e otimização do processo de recuperação celular envolvendo duas operações unitárias (centrifugação e flotação). Nos capítulos 4 e 5 são expostos e discutidos os resultados obtidos, bem como as conclusões do trabalho.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

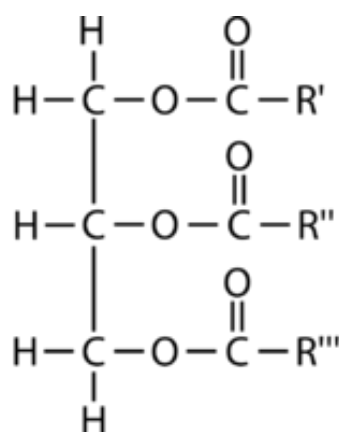
2.1. Produção de biocombustíveis

Em 2018, aproximadamente 45% da energia consumida do Brasil foi proveniente de fontes de energia renovável e dentre essas fontes destacam-se o biodiesel e o etanol (EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA, 2019).

No Brasil, cerca de 3,52 bilhões de litros de biodiesel foram consumidos em 2018 (EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA, 2019). Esse combustível pode ser produzido pela alcoólise de óleos vegetais e gorduras animais, ou ainda pela esterificação de ácidos graxos, sendo um substituto natural e renovável do diesel de petróleo. Atualmente, o Brasil é o quarto maior produtor de biodiesel do mundo e dentre as matérias-primas mais utilizadas se destacam o óleo de soja, sebo bovino, óleo de algodão e óleos residuais (ANP, 2020).

Óleos e gorduras, também denominados como triglicerídeos, possuem origem animal ou vegetal (FOGAÇA, 2020). Pertencentes ao grupo dos lipídeos são formados pela união de três moléculas de ácidos graxos e uma molécula de glicerina (glicerol), formando um triéster. É importante ressaltar que os ácidos graxos são moléculas de ácidos carboxílicos com cadeias longas (4 a 28 átomos de carbono) (RECOMENDAÇÕES DA IUPAC, 1995). A Figura 1 ilustra um triglicerídeo.

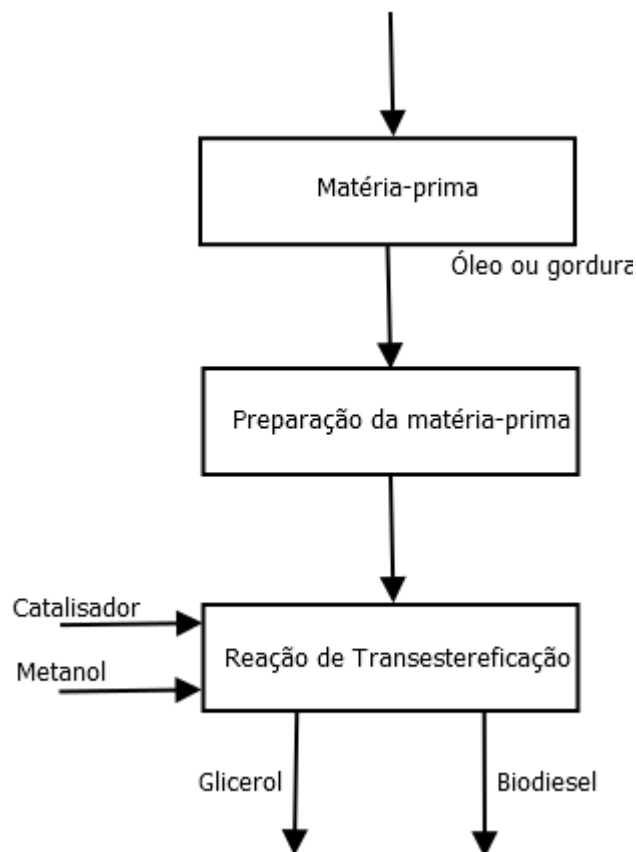
Figura 1 – Fórmula estrutural de um triglicerídeo



Fonte: Recomendações da IUPAC, 1995.

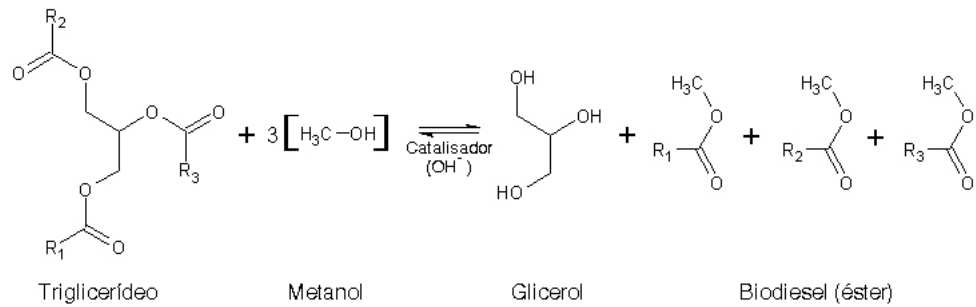
O processo mais utilizado na produção de biodiesel é através da reação de transesterificação. Essa reação química ocorre entre um éster (triglicéride) e um álcool para a obtenção de um novo éster. Para isso, são utilizados óleos ou gorduras como fonte de ésteres, já que os lipídeos apresentam esse radical em sua estrutura molecular, e predominantemente metanol como álcool. Além disso, adiciona-se um catalisador, que geralmente é uma base, como NaOH ou KOH, para aumentar a velocidade da reação. As etapas do processo de produção do biodiesel e a reação de transesterificação são apresentadas nas Figuras 2 e 3, respectivamente (BIODIESEL BRASIL, 2018). Nesse processo, há a formação de glicerol como subproduto que, por sua vez, possui várias destinações, sendo uma delas para a formulação de sabão líquido. Mais especificamente, 20% do óleo é convertido em glicerol, que é removido do biocombustível para que ele apresente aspecto fino e menos viscoso (BIODIESEL BRASIL, 2018).

Figura 2 - Fluxograma do processo de produção do biodiesel



Fonte: adaptado de Biodiesel Brasil, 2018.

Figura 3 - Reação de transesterificação



Fonte: Biodiesel Brasil, 2018.

Além da transesterificação, existem mais dois processos, menos utilizados, para a produção de biodiesel: o craqueamento térmico e a esterificação. O craqueamento térmico provoca a quebra de moléculas por aquecimento resultando em uma mistura de compostos químicos semelhantes ao diesel de petróleo. Já a esterificação consiste na síntese de ésteres em temperatura ambiente a partir de um catalisador. A diferença de esterificação em relação à transesterificação, é que a transesterificação é um processo que ocorre em apenas uma etapa (BIODIESEL BRASIL, 2018).

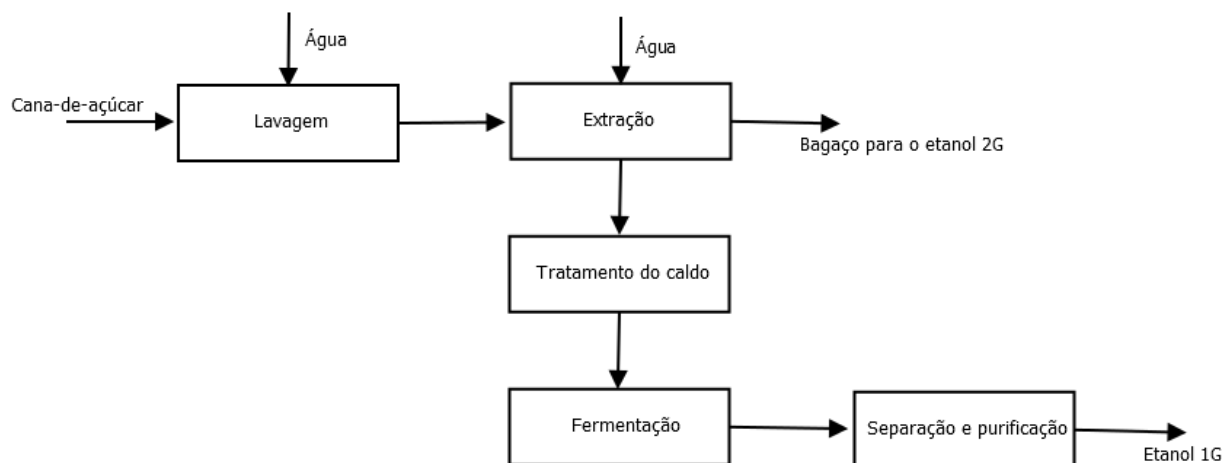
Além do biodiesel, o etanol é outro importante biocombustível. Segundo a Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Combustível, em 2019 cerca de 25 bilhões de litros de etanol hidratado e 10 bilhões de litros de etanol anidro foram produzidos no Brasil. O alto consumo do etanol começou em meados da década de 70, quando houve a crise do petróleo. Assim o etanol se tornou uma alternativa efetiva de combustível e hoje, além de um grande consumidor, o Brasil é o segundo maior produtor de etanol do mundo (ANP, 2020).

Existem três tipos de produção de etanol, o de primeira geração, de segunda geração e o de terceira geração. O etanol de primeira geração (1G), é produzido através da fermentação alcoólica pela levedura *Sacharomyces cerevisiae* do açúcar encontrado em produtos naturais, sendo que o mais utilizado é a cana-de-açúcar. Já o etanol de segunda geração (2G), pode ser produzido a partir dos resíduos lignocelulósicos, como por exemplo, o bagaço e a palha provenientes produção do etanol de primeira geração. Esses resíduos transformam-se em glicose, a partir de um processo de hidrólise, e posteriormente ocorre a fermentação alcoólica pela levedura *Sacharomyces cerevisiae*. Com isso aumenta-se a eficiência da planta de produção, já que é produzido mais

combustível a partir da matéria-prima (BASTOS, 2007). Enquanto que o etanol de terceira geração pode ser produzido a partir de microalgas (HARGREAVES, 2020).

As etapas principais do processo de produção do etanol de primeira geração são apresentadas na Figura 4.

Figura 4 - Fluxograma do processo de produção do etanol de primeira geração



Fonte: adaptado de Furlan, 2013

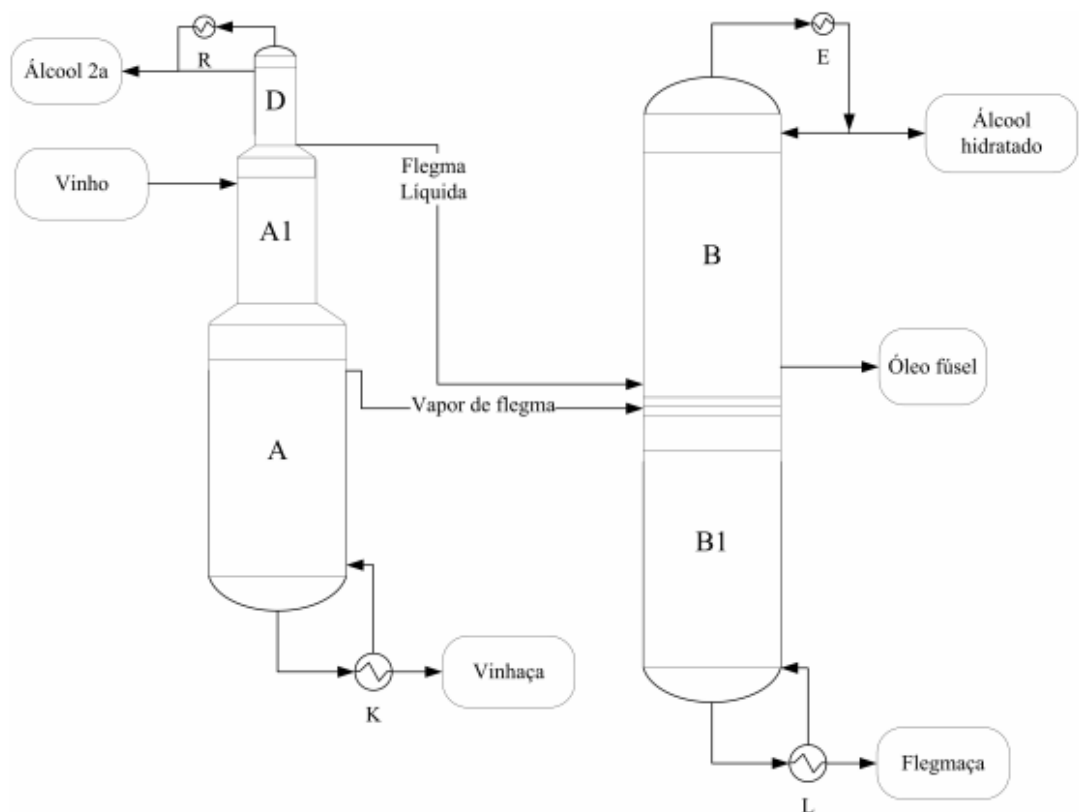
Através da Figura 4 é possível perceber que existem diversas etapas para a produção do etanol de primeira geração. A primeira é a lavagem onde as impurezas são removidas da cana-de-açúcar. A principal impureza dentre todos os minerais arrastados na matéria-prima é a terra, presente em teor médio de 0,6% em massa (DIAS, 2011). No processo de lavagem a cana é descarregada em um sistema de limpeza que utiliza a água como circuito fechado. Apesar de ser eficaz, a água retira partes consideráveis do açúcar proveniente da matéria-prima, indicando uma desvantagem desse método. Uma alternativa, que vem sendo estudada, é a lavagem a seco com auxílio de ventiladores industriais (PACHECO, 2011).

Após o processo de lavagem, ocorre a extração, que consiste no rompimento das células através da diminuição do tamanho das partículas. Para isso, utilizam-se moendas que esmagam a cana-de-açúcar e assim ocorre a extração do açúcar, obtendo-se o caldo e também o bagaço como resíduo, que pode ser utilizado para a obtenção de bioenergia (vapor e energia elétrica) ou para fabricação do etanol de segunda geração (DIAS, 2011).

O próximo processo é o tratamento do caldo cujas impurezas, que podem prejudicar o processo fermentativo, são retiradas. Dentre as impurezas encontradas no caldo, podem-se citar minerais, matéria orgânica e inorgânica, entre outras. Para realizar esse processo, o caldo é aquecido, para evitar perdas do açúcar e para destruir bactérias e microrganismos, além de degradar amidos e proteínas (PACHECO, 2011).

Em seguida, o caldo é fermentado para que as leveduras convertam os açúcares fermentescíveis em etanol e CO₂. No final da fermentação, forma-se um vinho com etanol e os subprodutos da reação. No entanto, é necessário que o etanol seja separado do restante do vinho e para isso realiza-se a destilação (DIAS, 2011). A destilação alcoólica é feita através de cinco colunas: A, A1, D, B e B1. A Figura 5 mostra essa configuração.

Figura 5 - Processo de destilação do etanol



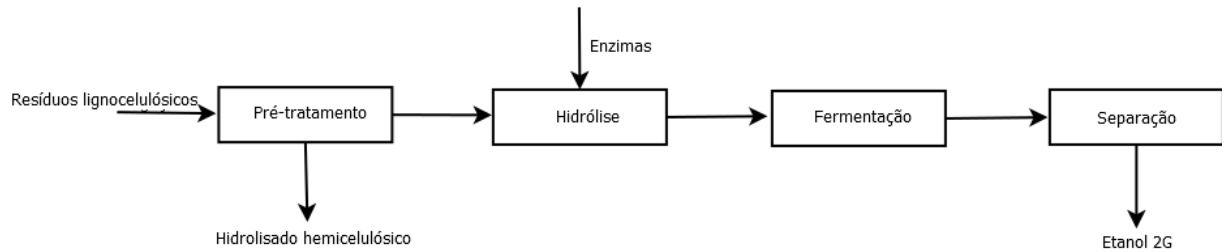
Fonte: Dias, 2011

De acordo com a Figura 5, a coluna A é conhecida como a coluna de esgotamento do vinho, enquanto que A1 é a de apuração do vinho e D é a de concentração do álcool e o conjunto dessas três é conhecido como coluna de destilação. A coluna B é a coluna de

retificação, B1 a de esgotamento e este conjunto é denominado conjunto de retificação, onde obtém-se o álcool etílico hidratado com teor de 92,3 e 96,8% m/m.

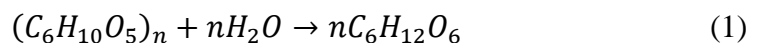
A produção do etanol 1G gera como principal resíduo o bagaço da cana-de-açúcar, que na maioria das vezes é queimado para gerar energia térmica e elétrica para a própria planta. Porém, através de processos pré-tratamento e hidrólise do bagaço, podem-se gerar monômeros de glicose, a partir da celulose, que são fermentescíveis. A glicose é então usada como matéria-prima para produção do etanol 2G. A Figura 6 apresenta o processo de produção do etanol 2G.

Figura 6 - Fluxograma do processo de produção do etanol de segunda geração



Fonte: adaptado de Furlan, 2013

Como apresentado na Figura 6, a primeira etapa do processo é o pré-tratamento, que tem como objetivo remover parte da lignina e da hemicelulose da biomassa e tornar a celulose mais acessível à hidrólise. No caso de pré-tratamento hidrotérmico (com água quente pressurizada), tem-se como subproduto principal o hidrolisado hemicelulósico, que é rico em xilose, uma pentose não fermentescível pelas leveduras tradicionais (DIAS, 2011). Na etapa seguinte de hidrólise, o polissacarídeo denominado celulose é hidrolisado a glicose (Equação 1) pela ação de um grupo de enzimas (endoglucanases, exoglucanases e β -glicosidases) (DIAS, 2011). Em seguida, o mesmo processo de fermentação e separação empregado para o etanol 1G pode ser utilizado para o processo de segunda geração.



2.1.1. Subprodutos e o impacto ambiental

Com a produção do biodiesel são gerados subprodutos e o principal dentre eles é o glicerol, que é um composto orgânico líquido em temperatura ambiente pertencente ao grupo dos álcoois (tri-álcool). Ele é higroscópico, inodoro, viscoso, possui um sabor adocicado e é miscível em água e álcool. As características físicas do glicerol como subproduto dependem do tipo de matéria-prima e do processo utilizado na produção do biodiesel (PERRY & GREEN, 1997; PACHUARI & HE, 2006).

Na reação de transesterificação, que é o processo mais utilizado para obtenção do biodiesel, o glicerol obtido apresenta impurezas, como água, catalisador, álcool, bem como impurezas provenientes dos reagentes: ésteres, propanodióis, monoéteres, oligômeros de glicerina e polímeros. Essas impurezas variam de acordo com o tipo de óleo utilizado na produção do biodiesel (FERRARI et al, 2005). Para a purificação desse subproduto são necessários processos complexos e onerosos e por isso são usados por poucas empresas, mesmo que o glicerol purificado possua interesse econômico para a produção de cosméticos, produtos químicos, alimentícios e farmacêuticos (DINIZ, 2008).

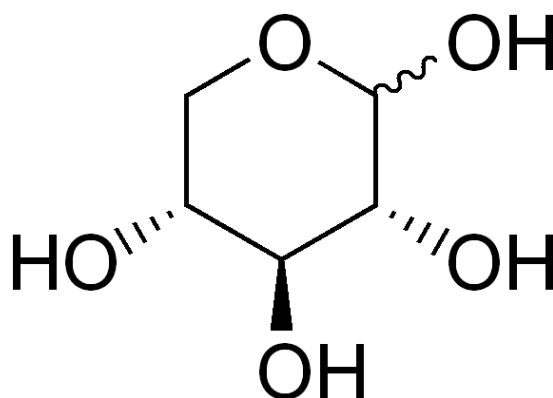
Por não possuir legislação específica do descarte correto na natureza, muitas vezes o glicerol fica armazenado em tanques sem possuir um destino certo. Ou então é descartado de maneira incorreta no ambiente, causando grande impacto ambiental (RODRIGUES, 2013).

A produção do etanol também gera resíduos, como a vinhaça, bagaço, torta de filtro, flegmaça e efluentes provenientes das lavagens, que podem causar impactos significativos ao meio ambiente. Mesmo com um conjunto grande de leis para a regulação das atividades das indústrias de açúcar e álcool, muitos resíduos não são totalmente reaproveitados. Muitas indústrias avaliam como impraticável o armazenamento da grande quantidade de resíduos e, por isso, boa parte deles é descartada no meio ambiente (REBELATO et al, 2013). A vinhaça, que é um resíduo ácido proveniente da destilação do caldo fermentado, é um exemplo de resíduo descartado no meio ambiente que causa grande impacto ambiental. Apesar de muitas vezes ser utilizada no setor agrícola como fertilizante, as quantidades utilizadas para esse fim devem ser pequenas e por isso grande parte é descartada (NOGUEIRA et al., 2013). Outro exemplo de resíduos descartados no meio ambiente são as cinzas e fuligens provenientes da queima do bagaço da cana-de-

açúcar e que são geradas em média, na proporção de 2,06 kg/tonelada de cana (NOGUEIRA et al., 2013).

Dentre todos os resíduos mencionados, o bagaço da cana-de-açúcar é o gerado em maior quantidade. Por isso, muitas indústrias já o utilizam, através da queima, como fonte de energia térmica (vapor) e elétrica para a própria planta ou ainda, de forma bastante incipiente, como matéria-prima para a produção do etanol de segunda geração. Porém, na produção de etanol 2G há a geração de um resíduo problemático: o hidrolisado hemicelulósico. O hidrolisado hemicelulósico é composto basicamente por vários carboidratos, dos quais se destaca a xilose (presente em maior concentração) – Figura 7. Esse componente não é fermentado por microrganismos convencionais. Com isso, as indústrias não agregam valor a esse subproduto, sendo descartado no ambiente, causando impacto ambiental (Apolinario, 2013).

Figura 7 - Estrutura química da Xilose



Fonte: Crivelari, 2012

2.1.2. Utilização da *R. Toruloides* na produção de óleo microbiano

Como alternativa de diminuição do impacto ambiental gerado pelos subprodutos provenientes da produção dos biocombustíveis, vários trabalhos tem estudado e proposto a produção de óleo microbiano a partir de microrganismos oleaginosas (KOUTINAS et. al, 2014; BONTURI, 2016). O óleo microbiano são triglicerídeos que podem ser substitutos de óleos vegetais e gorduras animais para a produção de biocombustível, e, de outros oleoquímicos como cosméticos, produtos farmacêuticos, tintas, lubrificantes e aditivos poliméricos (KOUTINAS et al., 2014).

De acordo com Bonturi (2016), estudos relativos ao óleo microbiano começaram em meados de 1870 para a produção de óleo de cozinha, mas depois de um tempo o interesse por esse óleo cessou por não conseguir competir economicamente com os óleos de soja e girassol. Mas durante os últimos anos, o preço do óleo convencional vem aumentando assim como o de biodiesel. Portanto o interesse pela produção do óleo aumentou novamente e para esse objetivo, os microrganismos oleaginosos são os mais estudados, devido à sua grande capacidade de produzir e acumular lipídeos (BONTURI, 2016).

Classificam-se como microrganismos oleaginosos aqueles em que pelo menos 20% do peso seco do material celular é representado por óleo. Essa condição é alcançada por várias leveduras, como *Rhodosporidium sp.*, *Rhodotorula*, *Lipomyces* e *Trichosporon* (MENG et al., 2009).

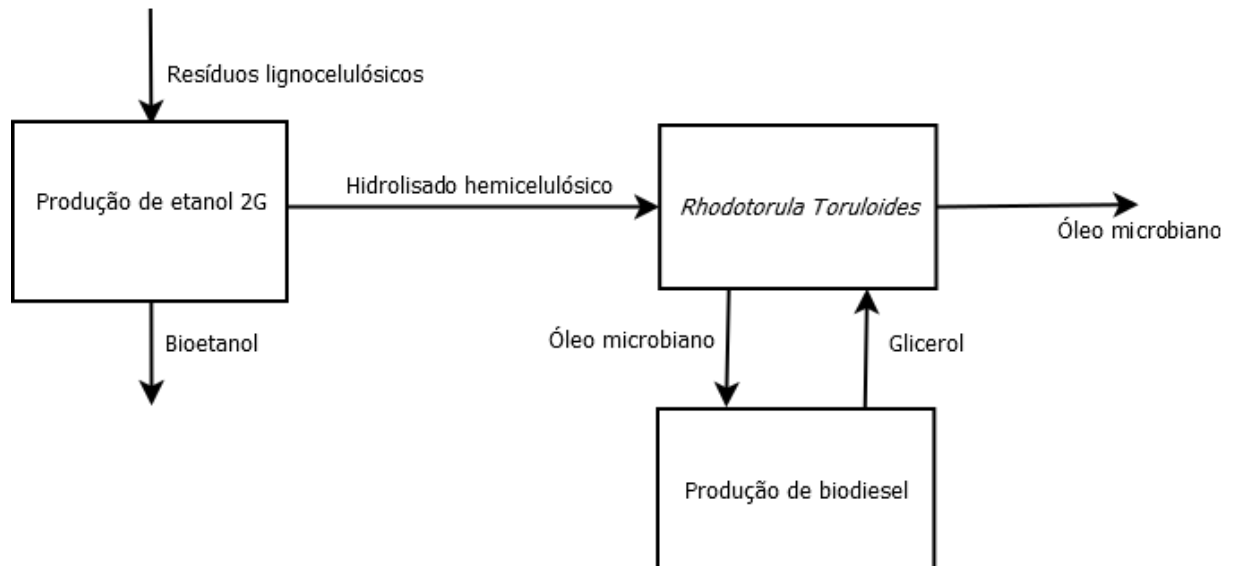
A levedura *Rhodotorula Toruloides* tem a capacidade de crescer em diferentes tipos de substratos e é a mais utilizada para a produção de óleo microbiano por acumular óleo em até 70% de sua massa celular. Além disso, é capaz de produzir carotenoides, que é um coproduto de alto valor agregado para indústria. Outra vantagem da *R. Toruloides* é que ela cresce em substratos de baixo custo, aumentando a viabilidade econômica de produção de óleo microbiano (BONTURI et al., 2017).

Para a produção do óleo microbiano cultiva-se o microrganismo para que ocorra a síntese e o acúmulo de lipídeos. Esse acúmulo é um processo que envolve duas etapas e requer excesso de carbono (que pode ser proveniente de glicerol) em relação a outros nutrientes, como o nitrogênio. A primeira etapa do processo é caracterizada por um rápido crescimento celular até a exaustão do nitrogênio, e a segunda etapa, onde o excesso de carbono é convertido em lipídeos (BONTURI, 2016).

Uma alternativa de aproveitamento dos subprodutos gerados pela produção de etanol 2G e biodiesel é a integração dos processos envolvidos. O hidrolisado hemicelulósico, rico em xilose, que pode ser utilizado para a produção de óleo microbiano a partir do cultivo da levedura *R. Toruloides*, com excesso de carbono proveniente do glicerol, que, por sua vez, é um resíduo da produção de biodiesel (BONTURI et al., 2017). De acordo com Bonturi et al. (2017), o aumento da razão carbono/nitrogênio no meio de cultivo, através da suplementação do hidrolisado hemicelulósico com glicerol, induz o acúmulo intracelular de lipídeos em até 42% (em massa), aumentando a produtividade do processo.

Portanto, os resultados mencionados indicam uma vantagem de integrar as rotas de produção do etanol 2G e biodiesel, através da destinação dos subprodutos glicerol e hidrolisado hemicelulósico para a produção de óleo microbiano. Esse por sua vez retorna ao processo como matéria-prima para a produção do biodiesel. A Figura 8 apresenta um esquema do processo integrado.

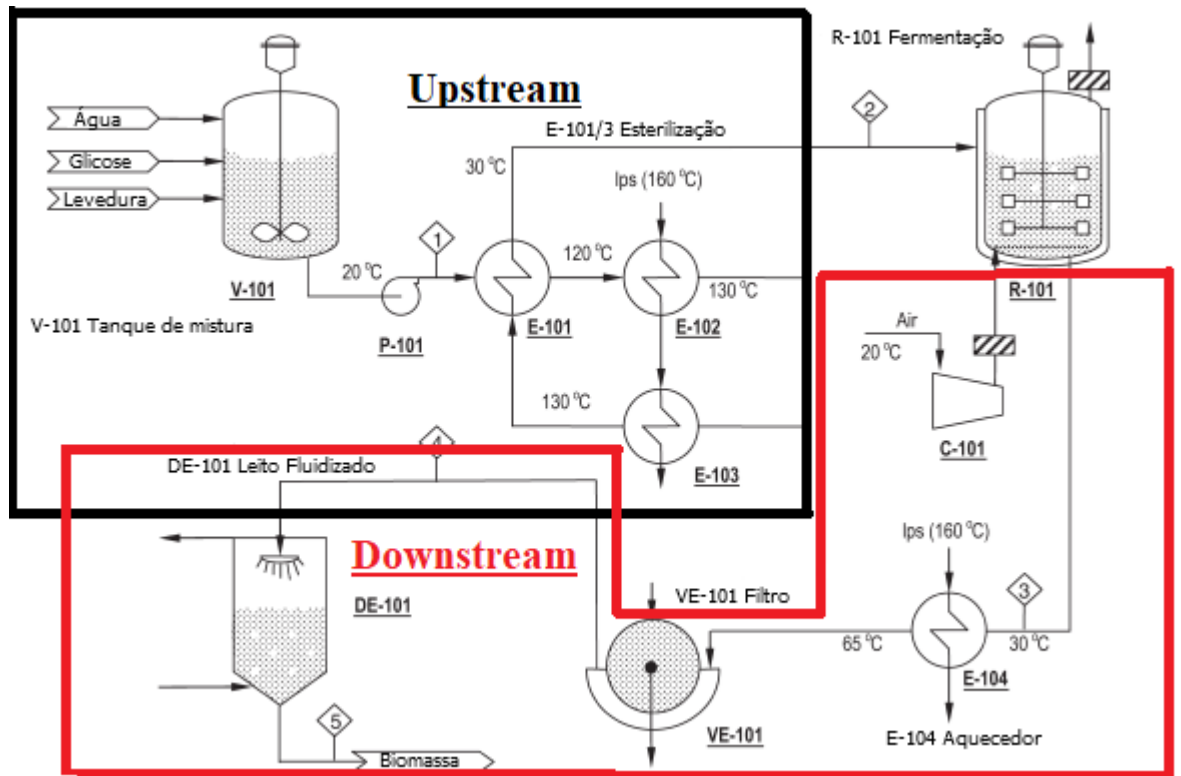
Figura 8 - Esquema da produção de óleo microbiano a partir da integração dos processos



Fonte: do autor

Koutinas et al. (2014) realizaram a análise técnica e econômica de um processo proposto para a produção de óleo microbiano a partir da levedura *Rhodotorula Toruloides*, conforme apresentado na Figura 9.

Figura 9 - Fluxograma da produção de óleo microbiano

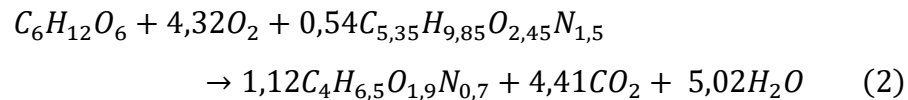


Fonte: adaptado de Koutinas et al., 2014.

A partir da Figura 9, observa-se que o processo pode ser dividido em *upstream* e *downstream*. Sabe-se que *upstream* é a etapa que antecede a transformação. Nesse caso é a preparação da matéria-prima para a produção do óleo microbiano – antes da fermentação. A etapa de *upstream* começa quando a água, glicose e extrato de levedura são fornecidos ao tanque de mistura (V-101) que opera em batelada. A saída do tanque V-101 alimenta a seção de esterilização, representada por três trocadores de calor (E-101, E-102 e E-103). O E-101 é responsável pelo pré-aquecimento do esterilizador, E-102 traz ao processo a temperatura exigida de 132°C através de vapor de baixa pressão e, por fim, o E-103 é utilizado para atingir o tempo de permanência exigido de 2 minutos. Em seguida começa a etapa de transformação ou montante da matéria prima, onde o efluente do esterilizador alimenta um tanque em batelada alimentada. O processo de cultivo celular e biossíntese do óleo microbiano, no processo proposto por Koutinas et al. (2014), ocorrem por 134 horas e, por se tratar de um bioprocesso aeróbio, necessita de fornecimento de oxigênio através da alimentação de ar no reator (KOUTINAS et al., 2014).

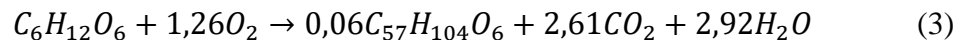
Para que durante o cultivo celular ocorra a produção de óleo microbiano, o processo deve apresentar dois estágios: crescimento microbiano e acúmulo intracelular do óleo. Cada estágio pode ser descrito por relações estequiométricas, onde os coeficientes estequiométricos são calculados com base nos balanços para cada elemento, sendo eles carbono, nitrogênio, oxigênio e hidrogênio.

A Equação (2) representa a relação obtida por Koutinas et al. (2014) para o primeiro estágio do cultivo, relativo ao crescimento celular.



Koutinas et al. (2014) supôs que na primeira etapa a glicose é utilizada apenas para a produção de massa microbiana. Na Equação 2, $C_6H_{12}O_6$ é a equação molecular para a glicose, que poderia ser substituída por outra fonte de carbono como o glicerol, e $C_{5,35}H_{9,85}O_{2,45}N_{1,5}$ é a equação molecular média para os aminoácidos, fontes de nitrogênio e, são essenciais para a síntese dos componentes celulares. Já o O_2 é proveniente da corrente de alimentação de ar e $C_4H_{6,5}O_{1,9}N_{0,7}$ é a equação molecular média para a levedura de acordo com Babel & Muller (1985).

Após o estágio de crescimento celular começa a fase de síntese e acúmulo de óleo microbiano. Nessa etapa ocorre o cultivo em batelada alimentada limitada pelo nitrogênio, de modo a induzir a produção de lipídeos pelas leveduras. Koutinas et al. (2014) consideraram a glicose como fonte de carbono durante essa fase. A Equação (3) representa a relação estequiométrica do estágio mencionado.



2.1.3. Recuperação celular

Na etapa de *downstream*, destacada na Figura 9, têm-se a purificação do produto de interesse. No caso da produção de óleo microbiano, o caldo de cultivo possui o produto desejado, que são as células (com óleo intracelular) em suspensão no caldo de cultivo contendo muitos outros componentes. A fase de *downstream* é essencial em um bioprocessamento, uma vez que o produto deve ser concentrado até a pureza exigida (DORAN, 2013).

Existem várias etapas que compõem o *downstream*. A etapa mais importante relacionada com a produção de óleo microbiano é a remoção das células do restante do caldo de cultivo, denominada recuperação celular. Ela acontece através de equipamentos de separação, como filtro, centrífuga, coluna de flotação, dentre outros.

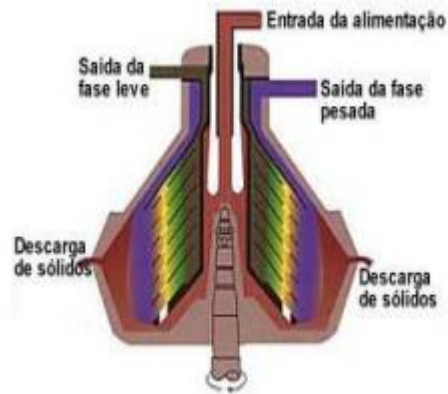
O processo de recuperação celular exige especial atenção, onde se deve considerar também fatores relacionados à instabilidade dos produtos de interesse frente a temperaturas extremas e à exposição a solventes, ácidos e bases fortes (DORAN, 2013). Além disso, o caldo de cultivo é suscetível à contaminação e, por isso, muitas vezes é necessário que se garanta condições assépticas ou que a recuperação celular ocorra rapidamente para que o produto não seja deteriorado (DORAN, 2013).

Antes do processo de separação pode ser necessário um pré-tratamento para melhorar a eficiência da separação celular. Muitas vezes o caldo de cultivo é aquecido para desnaturar proteínas e assim diminuir a viscosidade do mesmo. Além disso, podem ser adicionados eletrólitos ou flocculantes poliméricos para promover a agregação de células em partículas mais fáceis de serem separadas (DORAN, 2013).

No processo proposto por Koutinas et. al (2014), apresentado na Figura 9, o caldo de cultivo celular é aquecido através do trocador de calor E-104 para a desativação enzimática (pré-tratamento) e, posteriormente, a massa microbiana é separada através de uma filtração rotativa a vácuo - VE-101. Por fim, a umidade da massa microbiana é reduzida para 1% através da secagem em um leito fluidizado, DE-101. (KOUTINAS et al., 2014).

Como mencionado, outro processo de separação muito utilizado na recuperação celular é a centrifugação. A centrifugação é uma operação de separação (líquido-líquido ou sólido-líquido) baseada na sedimentação de componentes com densidades distintas, em que aquele mais denso é sedimentado. Aplicando esse processo na recuperação celular, as células (contendo óleo intracelular) se separam do meio de cultivo por apresentar densidade maior, assim, a biomassa é sedimentada (DORAN, 2013) – Figura 10. Forma-se então um creme concentrado de levedura que possui ainda água residual, inevitável na operação de centrifugação.

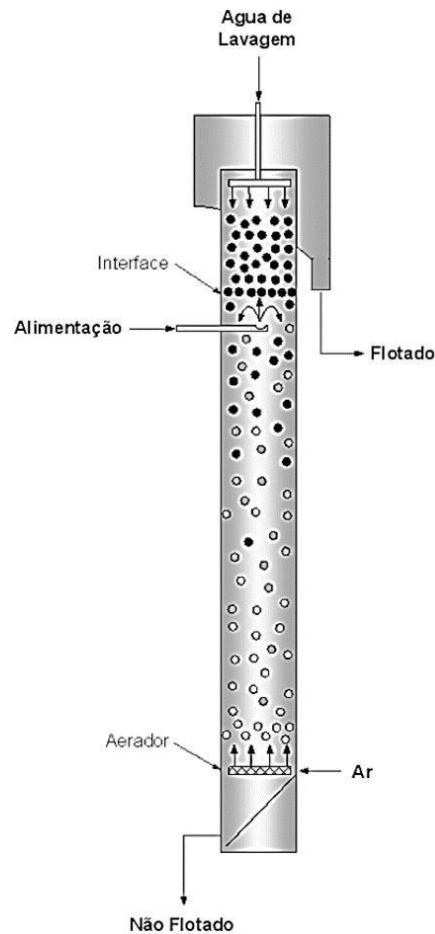
Figura 10 - Esquema do funcionamento de uma centrífuga de disco



Fonte: Abgtecalim, 2020

Assim como a centrifugação, a flotação em coluna é também um outro processo que pode ser empregado para a recuperação celular (PEREIRA et al., 2018; SOUSA, 2000). A coluna de flotação é composta basicamente por uma coluna, um compressor e um aspersor. O caldo de cultivo é alimentado pelo meio da coluna e, através do compressor, injeta-se ar por meio de aspersores no fundo da coluna. Através desse mecanismo e com adição de reagentes de flotação, as células interagem hidrofobiamente com as bolhas de ar sendo arrastadas para o topo da coluna, conforme representado na Figura 11. Desse modo, obtém-se uma suspensão (flotado) mais concentrada de células (SOUSA et al., 2000).

Figura 11 - Esquema de um flotador em coluna



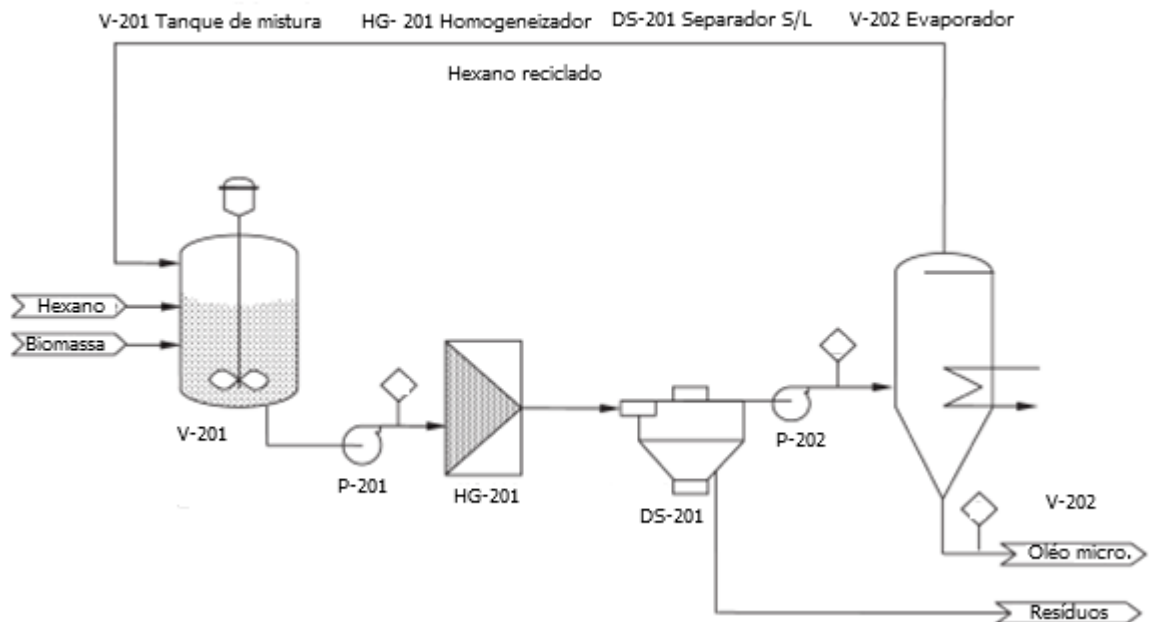
Fonte: Brainly, 2020

O processo de flotação em coluna apresenta algumas vantagens, como a maior simplicidade de fabricação do equipamento, baixo custo de manutenção e menor consumo energético (CALDARA, 2010). Porém, uma grande desvantagem desse equipamento é sua menor recuperação e concentração celular. Por outro lado, a centrifugação possui como vantagem a maior recuperação de células com menor umidade. No entanto, como desvantagens, as centrífugas apresentam alto consumo energético e de manutenção (MARTINEZ, 2020).

Uma alternativa para aumentar a eficiência de separação, minimizando os custos, seria a integração desses dois equipamentos, pois a coluna apresenta menor consumo de energia e a centrifugação maior capacidade de recuperação celular e de concentração de caldo de cultivo.

Após a concentração do caldo de cultivo, é necessário que o óleo intracelular seja extraído. Koutinas et al. (2014) realizaram um processo de extração conforme a Figura 12.

Figura 12 - Processo de extração do óleo intracelular



Fonte: adaptado de Koutinas et al., 2014

Na Figura 12 o processo começa quando o caldo de cultivo seco é misturado com hexano, 25% (m/m), em um tanque de mistura (V-201). Posteriormente as células são rompidas mecanicamente em um homogeneizador (HG-201) e os detritos celulares são separados do hexano em um separador (DS-201), que pode ser um decantador, por exemplo. Em seguida, o óleo microbiano é purificado através de um evaporador, onde o hexano evapora e é reciclado para a redução de custos operacionais (KOUTINAS et al., 2014).

2.2. Análise econômica

No desenvolvimento de um projeto industrial, a rentabilidade constitui um dos fatores mais relevantes para atrair investimentos à planta química. Um estudo de viabilidade técnico-econômica oferece informações para selecionar a configuração com melhor performance, isto é, a planta química que apresenta o menor custo de capital, menor custo de produção e maior taxa de retorno. Além disso, é necessário que os objetivos de negócio estejam claros para guiar o processo de análise econômica. Esses objetivos podem evoluir e mudar no decorrer do projeto (BROWN, 2016).

Para melhor desenvolvimento do projeto, é necessário que seja feito um fluxograma do processo. Esse fluxograma evolui durante o detalhamento do projeto e conduz a execução da análise econômica. A criação dele permite que haja uma lista de opções, que é importante para visualizar todas as funções técnicas do projeto (BROWN, 2016).

O primeiro passo é eliminar as opções de projeto que não são viáveis e que não atendem os objetivos de negócio. Para ter acesso à opção mais viável é necessário realizar as estimativas de custo para a implantação do processo (BROWN, 2016).

O custo de construir e operar uma planta inclui o investimento de capital (CAPEX, do inglês *Capital Expenditure*) da unidade e os custos operacionais (OPEX, do inglês *Operating Expense*) correspondentes.

2.2.1. Custo de capital (CAPEX)

O custo de capital ou custo de investimento (C_I) estima o capital gasto na construção de uma planta química. Para isso, inclui-se nessa estimativa o custo de *startup*, investimento fixo e o capital de giro.

O custo de *startup* está relacionado com o quanto será gasto para a partida da planta, enquanto que o investimento fixo são custos direto e indireto de construção e instalação da planta, e o capital de giro representa o gasto com as operações até que a receita suporte as despesas (PERLINGEIRO, 2005). A Equação (4) representa a relação matemática desses custos com o custo de investimento da planta.

$$C_I = I_f + I_{st} + I_g \quad (4)$$

em que C_I é o custo de investimento, I_f representa os investimentos fixos, I_{st} o custo de *startup* e I_g o capital de giro.

É importante ressaltar que o investimento fixo envolve a soma do investimento direto e o investimento indireto (PERLINGEIRO, 2005). A Equação (5) apresenta essa relação.

$$I_f = I_{direto} + I_{indireto} \quad (5)$$

em que I_{direto} são os investimentos diretos e $I_{indireto}$ os investimentos indiretos.

O investimento indireto está relacionado com o valor gasto com projeto, incluindo licenciamentos, *royalties*, contingências, entre outros. Já o investimento direto inclui o

custo de compra dos equipamentos da área de processamento (ISBL, do inglês *Inside Battery Limits*) e o custo de aquisição com os itens fora da área de processamento, como refeitório, administração, melhoria do terreno, entre outros (OSBL, do inglês *Outside Battery Limits*) (PERLINGEIRO, 2005).

De acordo com Perlingeiro (2005), o OSBL representa 45% do valor de ISBL, por isso o investimento direto pode ser escrito de acordo com a Equação (6).

$$I_{direto} = 1,45 \times ISBL \quad (6)$$

Perlingeiro (2005) também afirma que o investimento indireto representa 25% do valor do investimento direto. Assim o investimento fixo pode ser escrito de acordo com a Equação (7).

$$I_f = 1,81 \times ISBL \quad (7)$$

Além disso, o valor do capital de giro corresponde a 15% do custo total de investimento e o custo de startup representa 10% do valor do investimento fixo (PERLINGEIRO, 2005). O custo de capital C_I pode ser estimado diretamente a partir do custo de compra dos equipamentos, conforme a Equação (8).

$$C_I = 2,34 \times ISBL \quad (8)$$

Portanto, a estimativa do capital de investimento pode ser feita a partir do valor de investimento ISBL. Por sua vez, a determinação do investimento ISBL, portanto, requer o custo de compra de cada equipamento. A precisão da estimativa varia com a quantidade de informações que se tem do projeto, desde uma estimativa de ordem de grandeza, que tem como objetivo realizar o mapeamento ou viabilidade do projeto até a estimativa detalhada, que permite realizar a construção da planta. Existe também a estimativa de estudo, que faz o estudo conceitual do projeto, a estimativa preliminar que está relacionada com o orçamento e autorização do projeto e a estimativa definitiva, que através dela se realiza a licitação do projeto (TURTON et al., 2008). A Tabela 1 mostra a precisão de cada estimativa.

Tabela 1 - Tipos de estimativa, propósito e precisão.

| Estimativa | Propósito | Erro (%) |
|-----------------------|---------------------------|----------|
| Ordem de grandeza | Mapeamento ou viabilidade | 0 a 2 |
| Estimativa de estudo | Estudo conceitual | ± 30 |
| Estimativa preliminar | Orçamento/autorização | ± 20 |
| Estimativa definitiva | Licitação | ± 10 |
| Estimativa detalhada | Check ou licitação | ± 5 |

A imprecisão apresentada na Tabela 1 com relação às estimativas utilizadas na Análise Econômica está relacionada com a incerteza de todos os custos obtidos (TURTON et al., 2008).

Cada estimativa possui um método de cálculo, por exemplo, a Estimativa de Estudo utiliza o método Fatorial de Lang que multiplica o custo de aquisição dos equipamentos por um fator que depende do tipo de processo e da planta. A Análise de Custo Modular, usada neste trabalho, é o método mais empregado para executar uma estimativa preliminar e pode ser usada para uma estimativa definitiva (TURTON et al., 2008).

A Análise de Custo Modular foi proposta por Guthrie (1969) e divide a planta química em módulos e o custo de cada módulo (C_{BM}) abrange os custos diretos e indiretos envolvidos na instalação do equipamento na planta, conforme a Equação (9).

$$C_{BM} = F_{BM}Cp^0 \quad (9)$$

em que C_{BM} é o custo do capital definitivo pela estimativa preliminar, F_{BM} é o fator multiplicador chamado fator de custo do módulo e Cp^0 é o custo de compra do equipamento FOB (do inglês *Free On Board*) na sua condição base (pressão atmosférica e material de construção mais comum).

O fator multiplicador F_{BM} adiciona ao custo do equipamento, os demais custos diretos e os custos indiretos correspondentes. Os custos diretos além do custo de compra do equipamento são materiais auxiliares e a mão de obra para a instalação dos equipamentos. Já as despesas indiretas estão relacionadas com os custos de frete, seguro dos equipamentos e da planta, impostos, despesas de construção e despesas com engenharia. A Equação (10) representa a fórmula matemática desse fator.

$$F_{BM} = (1 + \alpha_{M0} + \alpha_{FIT} + \alpha_{M0}\alpha_0 + \alpha_E)(1 + \alpha_M) \quad (10)$$

em que α_{M0} é o multiplicador do custo de mão de obra, α_{FIT} representa os custos indiretos, α_0 os custos gerais de construção, α_E representa as despesas com engenharia e α_M os materiais auxiliares utilizados na instalação.

Os custos de compra de uma série de equipamentos foram compilados por Turton et al. (2008). A partir disso, os autores definiram uma relação entre os custos dos equipamentos e uma variável denominada “A” que representa a capacidade do equipamento sendo específica para cada tipo de equipamento. A Equação (11) representa a relação proposta por Turton et al. (2008).

$$\log_{10}Cp^0 = K_1 + K_2\log_{10}(A) + K_3[\log_{10}(A)]^2 \quad (11)$$

em que Cp^0 representa o custo de compra do equipamento na condição base em 2001, K_1 , K_2 e K_3 são parâmetros de acordo com o equipamento propostos por Turton et al. (2008) e A é a variável de dimensão, de acordo com o equipamento. Esses parâmetros são obtidos através do Apêndice A do livro de Turton et al. (2008).

O custo de compra do equipamento na condição base significa que a pressão é igual a pressão atmosférica e o material é composto pelo material mais comum para a classe. Na maior parte das vezes, aço carbono. Os custos adicionais por operar fora da condição base devem ser incorporados ao fator do custo do módulo conforme o tipo de equipamento. No caso de trocadores de calor, vasos e bombas, por exemplo, F_{BM} pode ser calculado de acordo com a Equação (12).

$$F_{BM} = B_1 + F_p F_M B_2 \quad (12)$$

em que B_1 e B_2 são parâmetros tabelados, F_p é o fator de pressão e F_M é o fator de material. Logo, na condição base, o fator de pressão e o fator de material são considerados iguais a um.

Cabe ressaltar que o custo de compra do equipamento usado nas estimativas deve estar atualizado. Para corrigir um dado valor de custo de compra em relação ao tempo e à capacidade do equipamento pode-se utilizar a Equação (13) apresentada por Peters et al. (2002).

$$Cp_{atual} = Cp^0 \left(\frac{i_{atual}}{i^0} \right) \left(\frac{A_{atual}}{A^0} \right)^j \quad (13)$$

em que Cp_{atual} é o custo de capital no ano desejado, i_{atual} e i^0 são os índices de preços no ano desejado e no ano base, utilizados para corrigir o valor no tempo, respectivamente, A_{atual} e A^0 são as funções de tamanho variável em cada ano e j é um parâmetro tabelado variável de acordo com o equipamento. Para obter os índices de preços se utilizam dados da Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) do ano desejado e do ano base.

Outra forma de atualizar os custos dos equipamentos no tempo foi proposta por Turton et al. (2008). A Equação (14) representa essa relação.

$$Cp_{atual} = Cp^0 \left(\frac{i_{atual}}{i^0} \right) \quad (14)$$

Além do custo de aquisição de equipamentos, para realizar a Análise Econômica, é necessário estimar o custo de operação (OPEX, do inglês *Operating Expense*).

2.2.2. Custo de operação (OPEX)

Os custos de operação ou produção representam a soma de custos fixos e custos variáveis, que não são relacionados com a aquisição de bens para a planta química (PERLINGEIRO, 2005).

Os custos variáveis são diretamente proporcionais à produção, como por exemplo, o custo de matéria prima, custos das utilidades, custos de manutenção, custos dos suprimentos operacionais, custos dos colaboradores que trabalham na supervisão e administração, custos relacionados à utilização de laboratórios, entre outros (PERLINGEIRO, 2005). Os custos com matéria prima e utilidades são calculados de acordo com a Equação (15).

$$C_{matprim} + C_{util} = (\sum p_i q_i) \quad (15)$$

em que $C_{matprim}$ é o custo de matéria-prima, C_{util} é o custo de utilidade, p_i é o preço unitário do item i , q_i é a taxa de consumo horário do item i .

Os custos fixos são aqueles que mesmo com a interrupção da produção, permanecem. São exemplos desse tipo de custo: os impostos, seguros, aluguéis, juros, entre outros (PERLINGEIRO, 2005).

2.3. Simulação e otimização de processos

A simulação é muito utilizada no projeto, desenvolvimento e análise de processos químicos. Mais especificamente, a simulação pode ser utilizada para dimensionar equipamentos, determinar a quantidade de energia necessária, rendimento global e magnitude dos fluxos e resíduos. Para isso, são utilizados modelos matemáticos, geralmente baseados em equações de balanço (massa, energia e quantidade de movimento) que representam as operações unitárias e que são resolvidos empregando *softwares* de simulação de processos (SEIDER, 2013).

Inicialmente, a simulação de processos foi desenvolvida para resolver problemas no estado estacionário, em que os balanços de massa e energia não dependem do tempo. Depois, com o avanço da computação numérica foi possível realizar também a simulação dinâmica dos processos, em que os modelos dependem do tempo por meio de termos derivados, que representam o acúmulo de massa e energia. A simulação dinâmica é a mais próxima da realidade (SEIDER, 2013).

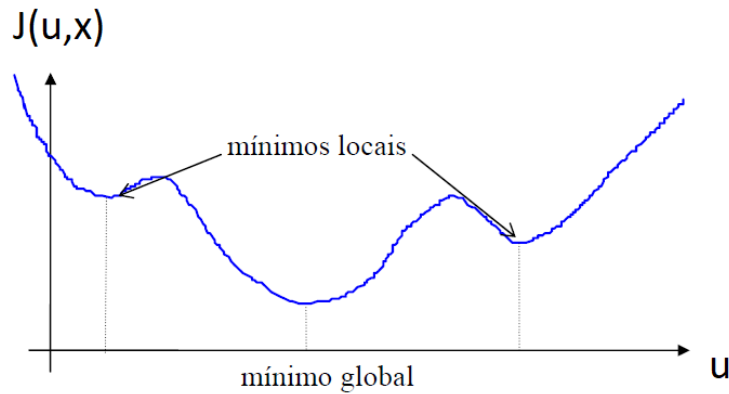
Como complemento da simulação de processos, a otimização se refere a um conjunto de técnicas matemáticas que visam determinar a condição ótima de um determinado processo. Essa condição pode ser representada por um índice de desempenho do sistema, como por exemplo, a minimização de custos ou maximização da eficiência, entre outros. (BRITO, 2020). Matematicamente, a otimização significa procurar os extremos de uma função de uma ou mais variáveis através de métodos eficientes (PERLINGEIRO, 2005).

Problemas de otimização possuem variáveis de decisão, critério de otimalidade, função objetivo e, em muitos casos, restrições (região viável). As variáveis de decisão, também denominadas como variáveis manipuladas, nada mais são que as variáveis independentes do problema. Já o critério de otimalidade (ou otimização) é o que define se o sistema atingiu a solução ótima (PERLINGEIRO, 2005).

A função objetivo, por sua vez, é a expressão matemática do critério a ser maximizado ou minimizado em termos das variáveis do sistema. A função objetivo pode ser unimodal, quando possui apenas um extremo – máximo ou mínimo, ou multimodal, que apresenta mais de um extremo, ou seja, possuem múltiplos máximos e mínimos locais (PERLINGEIRO, 2005). É importante ressaltar que a multimodalidade de uma função representa uma dificuldade na otimização, pois muitas vezes o problema pode convergir

para um extremo local e não para o extremo global desejado. A Figura 13 representa uma ilustração de uma função com mínimos locais e um global.

Figura 13 - Função objetivo descontínua



Fonte: do autor

Outro elemento da otimização são as restrições, que são os limites estabelecidos para governar o sistema. Elas podem ser de dois tipos: de igualdade ou desigualdade. Em otimização de processos as restrições de igualdade podem ser os próprios modelos matemáticos do sistema enquanto as de desigualdade representam os limites físicos para as variáveis de projeto (PERLINGEIRO, 2005). Assim, de acordo com as restrições, o problema de otimização pode ser formalizado de acordo com as Equações (16), (17) e (18).

$$\min_u J(u, x) \quad (16)$$

$$h(u, x) = 0 \quad (17)$$

$$g(u) \geq 0 \quad (18)$$

em que $J(u, x)$ é a função objetivo a ser minimizada (ou maximizada em alguns casos), $h(u, x)$ são as restrições de igualdade referentes aos modelos matemáticos do sistema, que relacionam as variáveis de processo x entre si, e $g(u)$ são as restrições de desigualdade impostas pelas restrições operacionais relacionadas às variáveis de otimização u (FURLAN, 2012).

Os métodos de otimização podem ser de natureza analítica ou numérica e ter uma estratégia direta ou indireta. Na estratégia direta, as decisões são tomadas a partir dos

valores da função objetivo, calculando-se a função objetivo para diferentes valores em busca dos seus extremos. Já nos métodos indiretos são empregados também os valores das derivadas da função objetivo. O método analítico fornece a solução exata, mas é restrito a problemas simples. Assim, para sistemas mais complexos usam-se métodos numéricos que fornecem como solução um intervalo de valores aceitáveis, ao invés de um único valor como no método analítico (PERLINGEIRO, 2005).

Para realizar a simulação e otimização de processos químicos, pode-se utilizar diferentes *softwares* como, por exemplo, o EMSO - *Environment for Modelling Simulation and Optimization*, iiSE Simulator (*Industrial Integrated Simulation Environment*) ou até mesmo o Excel.

2.3.1. Simulador de processos EMSO

O software EMSO surgiu através de parcerias entre universidades e empresas petroquímicas e foi desenvolvido por Rafael de Pelegrini Soares em 2003, como parte de seu projeto de mestrado (SOARES et al., 2003). Essa ferramenta computacional permite a simulação matemática de processos complexos em regime transiente ou estacionário, através da seleção e conexão de modelos referentes às operações do processo. Podem-se adicionar novos modelos ou utilizar modelos já existentes na biblioteca do EMSO para a realização da simulação ou otimização (SOARES et al., 2003), explorando o fato do EMSO empregar linguagem orientada a objeto.

A linguagem de programação no software possui três entidades principais: *Model*, *Device* e *Flowsheet* (MANUAL DO EMSO, 2007).

O *Model* é o modelo (ou representação matemática) de algum equipamento, podendo possuir parâmetros, variáveis, equações, condições iniciais, limites e submodelos. Cada parâmetro e variável são predefinidos com um conjunto de propriedades, limite superior e inferior, unidade de medida, entre outros (SOARES et al., 2003). Um exemplo de *Model* é apresentado na Figura 14.

Figura 14 - Exemplo de um *Model* no EMSO

```
1 Model name [as base]
2   PARAMETERS
3     [outer] name [as base[( (attribute = value)+ )]
4       ];
5
6   VARIABLES
7     [in | out] name [as base[( (attribute = value)+ )
8       ] ];
9
10  EQUATIONS
11    ["equation name"] expression = expression;
12
13  INITIAL
14    ["equation name"] expression = expression;
15
16  SET
17    name = expression;
18
19  end
```

Fonte: Manual do EMSO

Já o *Device* na linguagem do EMSO é a instância de um modelo e representa um dispositivo em análise. Portanto, um modelo (ou classe) pode ser usado para representar vários dispositivos diferentes com a mesma estrutura, mas que podem ter condições diferentes. Os dispositivos podem ser conectados uns aos outros e a conexão desses dispositivos forma o *Flowsheet* (SOARES, 2003). A Figura 15 apresenta um exemplo de *Flowsheet* e *Devices* no EMSO.

Figura 15 - Exemplo de Flowsheet no EMSO

```
DEVICES
sep_101 as Flash;
str_101 as MassStream;
PID_101, PID_102 as PID;
valve_101 as ControlValve;
valve_102 as ControlValve;

CONNECTIONS
str_101.Stream to sep_101.Feed
sep_101.V to valve_101.Stream
sep_101.L.P to PID_101.y;
sep_101.level to PID_102.y;
PID_101.u to valve_101.u;
```

Fonte adaptada: Soares, 2003

É importante destacar que no *Flowsheet* além de *Devices* e conexões também podem ser acrescentados equações, parâmetros, variáveis, condições iniciais, limites e modelos (MANUAL DO EMSO, 2003). Na Figura 15 é possível observar que os *Devices* (objetos) são instanciados a um *Model*, como na expressão “sep_101 as Flash” que significa que o dispositivo “sep_101” pertence o modelo “Flash”.

Para a simulação do processo, o EMSO deve resolver o conjunto de equações decorrentes da construção do *Flowsheet*. Para isso, o primeiro passo necessário é a realização da Análise de Consistência. Essa análise nada mais é que a análise de graus de liberdade para a resolução de um sistema de equações e, com isso, ser possível apontar falhas na programação (variáveis não especificadas ou equações linearmente dependentes, por exemplo). Quando a Análise de Consistência apresentar número de graus de liberdade nulo é possível resolver o sistema matemático e, portanto, prever o comportamento das variáveis de interesse.

O EMSO possui também a ferramenta de otimização, onde um *Flowsheet* com graus de liberdade maior que zero é resolvido, de modo que as variáveis de decisão assumam o valor que minimize ou maximize uma função objetivo especificada, conforme o exemplo da Figura 16. O EMSO possui uma biblioteca com diferentes algoritmos de resolução (*solvers*) adequados a sistemas compostos por equações diferenciais e/ou algébricas, lineares ou não lineares, com ou sem restrições.

Figura 16 - Exemplo de otimização

```
Optimization AmmoniaOptimization as Ammonia
MINIMIZE
productLoose;

FREE
Splitter102.fraction;

OPTIONS
Dynamic = false;

end
```

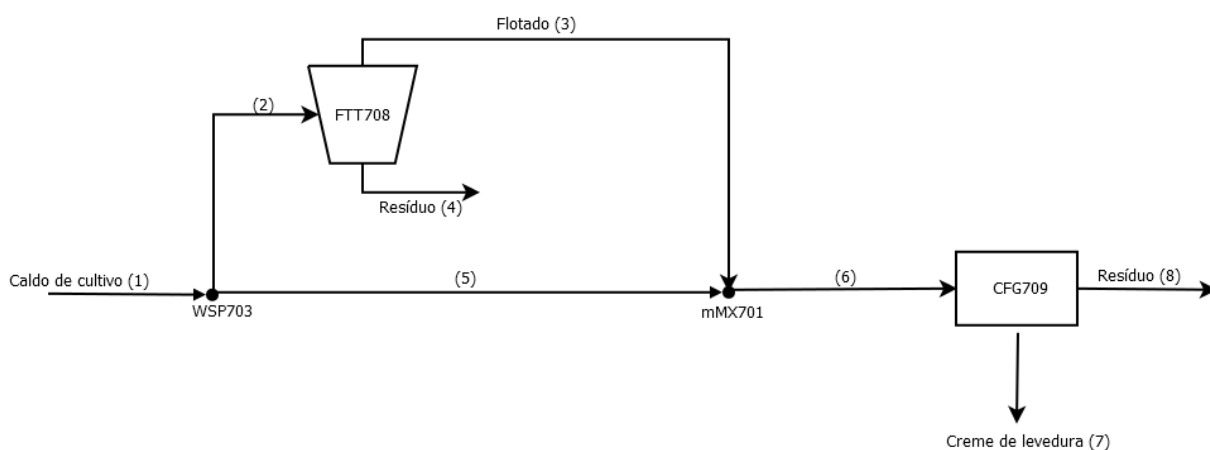
Fonte: Manual do EMSO

3. METODOLOGIA E DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO

3.1. Fluxograma do processo de recuperação celular

Neste trabalho, considerou-se um processo de recuperação celular de levedura *Rhodotorula Toruloides* em caldo de cultivo. O caldo é proveniente de um biorreator onde ocorre o cultivo celular para a síntese e acúmulo intracelular de óleo microbiano. Para a separação das células de levedura do restante dos componentes presentes no caldo de cultivo, foi proposta a integração de duas operações de separação, a centrifugação (CFG709) e a flotação em coluna (FTT708), conforme o fluxograma apresentado na Figura 17.

Figura 17 - Diagrama do processo de recuperação celular



No processo simulado (Figura 17), a corrente de caldo de cultivo (1), que contém levedura *Rhodotorula Toruloides* com óleo intracelular se divide no ponto de separação WSP703 de modo que uma parte (corrente 2) é enviada à coluna de flotação (FTT708) e a outra (corrente 5) para um misturador, mMX701.

Na coluna de flotação, ocorre a concentração das células na corrente (3) de flotado, rica em levedura com o óleo microbiano intracelular. Esta corrente é enviada para o misturador mMX701. Na base do equipamento sai a corrente (4) de resíduo, contendo células não recuperadas (~ 12%).

A corrente (6) de mistura efluente de mMX701 segue para a centrífuga. Desta segunda etapa de separação, resulta o creme de levedura (corrente 7), que contém o produto de interesse.

3.2.Custo de capital

Para determinar a performance econômica da integração das duas operações unitárias, flotação e centrifugação, foi necessário, primeiro, calcular o custo de aquisição de cada equipamento para realizar a Estimativa Preliminar do CAPEX através da Análise Modular.

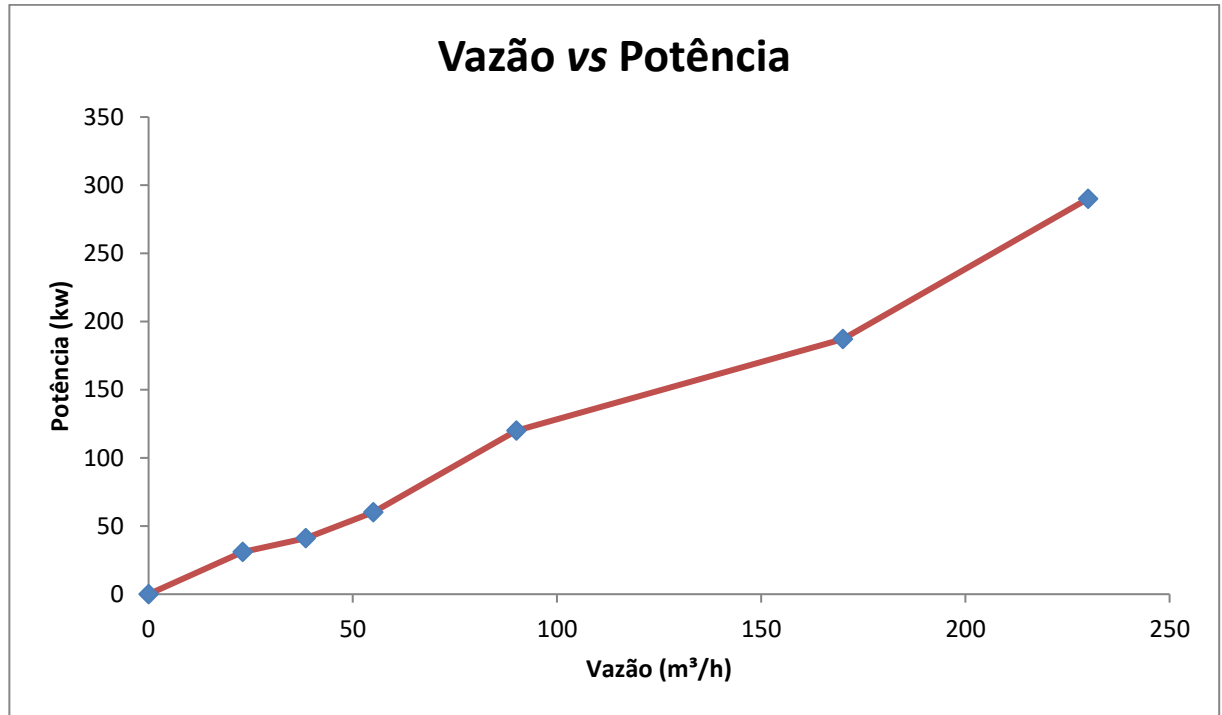
Para estimar o custo de compra da centrífuga foi construída uma equação com base nos dados apresentados por Vieira & Miranda (2016) em um estudo de Análise Econômica para a produção de óleo microbiano. Nesse trabalho, a centrífuga utilizada para a recuperação celular possuía uma potência de 65,05 kW e um preço de US\$ 344.000,00.

Através da Equação (13), o custo foi corrigido em relação ao tempo utilizando os índices CEPCI de 2016 (541,7) e 2018 (603) (Chemical Engineering Plant Cost Index, 2020). Índices mais recentes ainda não estavam disponíveis no período de realização deste trabalho. Para a correção com relação à capacidade utilizou-se um fator de escala para a potência da centrífuga de 0,67, conforme recomendado por Peters et al. (2002). Com isso, obteve-se a Equação (19) para determinar o custo da centrífuga (Cp^0 - US\$) como função da potência (P_{atual} - kW).

$$Cp^0 = 344000 \left[\left(\frac{603}{541,7} \right) \left(\frac{P_{atual}}{65,05} \right) \right]^{0,67} \quad (19)$$

A potência P_{atual} foi correlacionada com a capacidade da centrífuga com base nos dados do fabricante (CentriTech, 2018). Com isso, obteve-se uma relação entre a vazão de operação da centrífuga e sua potência requerida em kW, conforme apresentado na Figura 18.

Figura 18 - Gráfico da relação entre a vazão (m³/h) e potência da centrífuga (kW)



Executou-se a regressão linear dos dados obtidos para obter a relação entre a potência e a vazão. A relação algébrica da regressão linear proposta pela Figura 18 é apresentada pela Equação (20).

$$P_{atual} = 1,22F_0 \quad (R^2=0,9866) \quad (20)$$

Com a relação algébrica apresentada na Equação (20), a Equação (19) pode ser reescrita e representada pela Equação (21), sendo esta a Equação do custo de compra da centrífuga em função de sua capacidade F_0 (m³/h).

$$Cp^0 = 344000 \left[\left(\frac{603}{541,7} \right) \left(\frac{1,4100F_0 + 4,2254}{65,05} \right) \right]^{0,67} \quad (21)$$

Para a coluna de flotação, considerou-se que a mesma é composta por um vaso vertical e um compressor, de modo que o custo do equipamento foi aproximado pela soma dos custos desses subcomponentes. Essa aproximação foi necessária uma vez que não foram encontrados dados de custo de compra para a coluna de flotação.

Para o cálculo do custo de compra do vaso, utilizou-se a relação proposta por Turton et al. (2008) (Equação 11) em conjunto com os valores de K_1 , K_2 e K_3 disponibilizados pelo autor: 3,4974, 0,4485 e 0,1074, respectivamente, de modo a obter a Equação (22).

$$\log_{10} Cp^0 = 3,4974 + 0,4485 \log_{10}(A) + 0,1074 [\log_{10}(A)] \quad (22)$$

A capacidade do vaso (A) é representada pelo seu volume em m³. O volume do vaso foi determinado com base no tempo de residência obtido por Pereira & Miranda (2018) de 900 segundos, para a recuperação da *Rhodotorula Toruloides* em uma coluna de flotação em escala de bancada. O volume pode ser relacionado com o tempo de residência de acordo com a Equação (23).

$$V = \tau F_0 \quad (23)$$

em que V (m³) é o volume, τ (s) é o tempo de residência e F₀ (m³/s) é a vazão volumétrica. Portanto, a Equação (23) pode ser reescrita utilizando o tempo de residência de 900 segundos. Assim, obtém-se a Equação (24).

$$V = 900F_0 \quad (24)$$

Desse modo obteve-se a Equação (25).

$$\log_{10}(Cp^0) = 3,4974 + 0,4485 [\log_{10}(900F_0)] + 0,1074 [\log_{10}(900F_0)]^2 \quad (25)$$

Através da Análise de Custo Modular, o valor de aquisição dos equipamentos é empregado para calcular o custo do módulo utilizando o fator do módulo F_{BM} . Para isso, utilizou-se a Equação (12), em que Guthrie (1969) propôs os valores de 2,25 e 1,82 para B_1 e B_2 respectivamente, para vasos. Além disso, considerou-se que a pressão é a atmosférica e o material do equipamento é aço carbono. Assim, os valores de F_P e F_M são iguais a um. Portanto, obteve-se um valor de F_{BM} igual a 4,07.

Através da Equação (9), o custo do módulo pode ser escrito de acordo com a Equação (26).

$$C_{BM} = 4,07(10^{3,4974+0,4485[\log_{10}(900F_0)]+0,1074[\log_{10}(900F_0)]^2}) \quad (26)$$

Os dados usados para obter a Equação 26 são de 2001, por isso é necessário corrigir essa equação para o ano de 2018 utilizando os valores do CEPCI de 2001, que é 397, e de 2018, que é 603. Utilizando a Equação (9), pode-se reescrever a Equação (26), obtendo a Equação (27), que representa a equação final do CAPEX do vaso (C_{BM} - US\$).

$$C_{BM} = 6,1819(10^{3,4974+0,4485[\log_{10}(900F_0)]+0,1074[\log_{10}(900F_0)]^2}) \quad (27)$$

Para determinar o custo de compra do compressor, utilizou-se a Equação (11) em que K_1 , K_2 e K_3 são iguais a 5,0355, -1,8002 e 0,8253, respectivamente, com a potência como variável de capacidade do compressor (TURTON et al., 2008). Portanto, a partir da Equação (11) chega-se à Equação (28).

$$\log(Cp^0) = 5,0355 - 1,8002\log_{10}(P) + 0,8253[\log_{10}(P)]^2 \quad (28)$$

De acordo com Knoll et al. (2005), a potência de um compressor pode ser escrita pela Equação (29), considerando o ar como gás perfeito, comprimido isentropicamente, em um único estágio e com eficiência (μ) de 70% .

$$P = \frac{1}{\mu} Q_{ar} \frac{\gamma}{\gamma-1} p_1 \left[\left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] \quad (29)$$

em que Q_{ar} é a vazão volumétrica de ar, γ é o coeficiente de expansão adiabática do ar e p_1 e p_2 são as pressões de entrada e saída do compressor, respectivamente. Além disso, como o ar é considerado ideal e diatômico (oxigênio e nitrogênio, predominantemente) tem-se que γ é igual 1,4. Por fim, considerou-se como p_1 o valor da pressão atmosférica.

Para determinar o valor da vazão de ar necessária para a operação da coluna de flotação, foi considerada a velocidade superficial de gás na da coluna como parâmetro de escalonamento, considerou-se essa variável como crítica por se tratar de uma simulação interfacial. Para isso utilizaram-se dados como volume ($V=55$ mL), vazão de ar ($Q_{ar}=2,2 \times 10^{-4}$ m³/h), tempo de residência ($\tau=0,25$ h), diâmetro ($d=2$ cm) e altura ($h=20$ cm) da coluna empregados por Pereira & Miranda (2018)

A partir dos dados de altura e diâmetro, pode-se considerar uma razão constante entre os dois igual a 10, de acordo com a Equação (30).

$$d = \frac{h}{10} \quad (30)$$

O volume da coluna de flotação foi escrito de acordo com a Equação (31).

$$V = \frac{\pi h d^2}{4} \quad (31)$$

Substituindo a Equação (30) na Equação (31), obteve-se a Equação (32).

$$V = \frac{\pi h^3}{400} \quad (32)$$

Substituindo a Equação (32) na Equação (24), obteve-se a Equação (33).

$$\frac{\pi h^3}{400} = F_0 \tau \quad (33)$$

Explicitando a altura, obtém-se a Equação (34).

$$h = \sqrt[3]{\frac{400F_0\tau}{\pi}} \quad (34)$$

A Equação (34) foi necessária para o cálculo de p_2 , da Equação (29), assumindo que a pressão do ar comprimido na saída do compressor é aquela necessária para vencer a pressão hidrostática do fundo da coluna onde o ar é injetado, conforme é representado pela Equação (35).

$$p_2 = p_1 + \rho gh \quad (35)$$

em que p_2 e p_1 são as pressões na base e no topo da coluna de flotação, respectivamente, ρ é a densidade do líquido presente no interior da coluna, g é a aceleração da gravidade e h a altura da coluna.

Considerou-se a pressão p_1 igual à pressão atmosférica (101,3 kPa) e a aceleração da gravidade igual a 9,81 m/s². O material no interior da coluna de flotação é o caldo de cultivo, composto majoritariamente por água. Por isso utilizou-se o valor de 1000 kg/m³ para ρ . Assim, a Equação (35) foi reescrita e pode ser representada pela Equação (36).

$$p_2 = 101352 + 10000 \sqrt[3]{\frac{400F_0\tau}{\pi}} \quad (36)$$

Para o cálculo da última variável da Equação (29), Q_{ar} , utilizou-se a Equação (37).

$$Q_{ar} = v_{sup} \times A_t = v_{sup} \times \frac{\pi}{400} \left(\sqrt[3]{\frac{400F_0\tau}{\pi}} \right)^2 \quad (37)$$

em que Q_{ar} é a vazão de ar, v_{sup} é a velocidade superficial do ar e A_t a área de seção transversal da coluna. Como já mencionado, adotou-se v_{sup} como uma constante no escalonamento, no caso igual a 19,09 m/h, conforme empregado por Pereira & Miranda (2018).

Substituindo todas as relações, obtidas através das Equações (36), (37) e (38), além dos valores dos parâmetros mencionados, na Equação (29), obteve-se a Equação (39).

$$P = \frac{1}{\mu} v_{sup} \times \left[\left(\frac{\pi}{400} \left(\sqrt[3]{\frac{400F_0\tau}{\pi}} \right)^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} p_1 \left[\left(\frac{101352+10000 \sqrt[3]{\frac{400F_0\tau}{\pi}}}{p_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] \right] \quad (39)$$

Para obter o custo do módulo do compressor, as Equações (39) e (27) foram incorporadas na Equação (9) e efetuou-se a correção temporal através dos índices CEPCI, de acordo com a Equação (14), sendo que a razão entre os índices de 2018 e 2001 é igual 1,5189. Além disso, é importante lembrar que o fator multiplicador da análise de custo modular (F_{BM}) para compressores é igual a 1,18 e os fatores de pressão (F_p) e fator de material (F_M) são iguais a 1, considerando que a pressão é atmosférica e o material aço carbono.

Portanto, a partir das equações descritas acima, é possível então estimar os custos de investimento para a centrífuga (Equação 21) e para a coluna de flotação (Equações 27 e 28) em função da vazão da corrente de processo (F_0). Essas relações são utilizadas para a otimização do processo, como descrito na Seção 3.5. É importante ressaltar que para a centrífuga não se realizou uma Estimativa Preliminar utilizando a Análise Modular, pois a equação proposta por Peters et al. (2002) apresenta uma aproximação do custo de aquisição da centrífuga de forma consistente. Além disso, não se utilizou a Equação (11) para o cálculo do custo de aquisição da centrífuga, pois a capacidade necessária para esse cálculo (variável A , da Equação 11) era representada pelo volume da centrífuga, sendo esse um parâmetro de difícil mensuração por não haver dados suficientes para o seu cálculo.

3.3. Custo de operação

O cálculo dos custos de operação das unidades de separação (centrífuga e coluna de flotação) foi feito em termos da potência requerida por cada equipamento. Portanto, para determinar o seu custo, de acordo com a Equação (15), utilizou-se a tarifa de 0,36 R\$/kWh no estado de Minas Gerais (CEMIG, 2020). Assim, multiplicou-se esse valor pelo valor de potência requerida de cada equipamento (função da vazão da corrente de processo), conforme a Equação (40).

$$C_{prod} = P_{atual} \times 0,36 \quad (40)$$

3.4. Simulação

A etapa de recuperação celular, estudada no presente trabalho, faz parte de um processo de produção de óleo microbiano estudado por Campani (2018). Esse processo, por sua vez, visa à integração dos processos de produção de etanol 2G e de biodiesel, através da utilização de seus subprodutos (hidrolisado hemicelulósico e glicerol) para a produção de óleo microbiano, no contexto do projeto temático “Da fábrica celular à biorrefinaria integrada Biodiesel-Bioetanol: uma abordagem sistêmica aplicada a problemas complexos em micro e macroescalas” (FAPESP, processo nº 16/10636-8). Portanto, os dados utilizados na simulação da etapa de recuperação celular são baseados na operação da biorrefinaria virtual e apresentados na Tabela 2. A fração de separação das correntes no separador WSP703 e as vazões das correntes são apresentadas na Seção 4, uma vez que são resultados da otimização do processo.

Tabela 2 - Dados da biorrefinaria virtual para a etapa de recuperação celular

| Equipamento | Variável/Parâmetro | Valores | Referência |
|-------------|--|---------|--------------------------|
| Flotação | Tempo de residência | 15 min | Pereira e Miranda (2018) |
| | Enriquecimento no flotado | 31,10% | Pereira e Miranda (2018) |
| | Recuperação no flotado | 88,33% | Comunicação pessoal |
| Centrífuga | Fração de células no creme de levedura (base seca) | 22% | Dias (2011) |
| | Eficiência de retenção de sólidos | 99% | Dias (2011) |

Todas as variáveis foram declaradas no *software*, assim como os parâmetros das equações. A título de ilustração, as Figuras 19-22 mostram essa declaração no *software* EMSO.

Figura 19 - Declaração de variáveis no software EMSO

```

VARIABLES
Pc          as positive  (Brief = "Potencia", Unit = 'kw');
Qar         as Real      (Brief = "Vazao de ar", Unit = 'm^3/h', Upper = 1e8, Lower = -1e-6);
h           as Real      (Brief = "Relacao de volume com vazao", Unit = 'm', Upper = 1e8, Lower = -1e-6);
Cp0_vaso    as Real      (Brief = "Custo do vaso", Unit = 'US$');
Cp0_comp    as Real      (Brief = "Custo do compressor", Unit = 'US$');
Cp0_total   as Real      (Brief = "Capex do flotorador", Unit = 'R$/h');
Opex        as Real      (Brief = "Opex do flotorador", Unit = 'R$/h');
Cp0_Opex    as Real      (Brief = "Variavel para otimizacao", Unit = 'R$/h');

```

Figura 20 - Declaração de parâmetros no software EMSO

```

PARAMETERS
vsup        as Real      (Brief = "Velocidade superficial", Unit = 'm/h', Default = 19.09);
p1          as positive  (Brief = "Pressao atmosferica", Unit = 'Pa', Default= 101325);
lambda      as Real      (Brief = "Lambda da formula do Pc", Default = 1.4);
g           as Real      (Brief = "Gravidade", Unit = 'm/s^2', Default = 10);
ni_c        as Real      (Brief = "Eficiencia", Default = 0.7);
k1_comp     as Real      (Brief = "k1 compressor", Default = 5.03355);
k2_comp     as Real      (Brief = "k2 compressor", Default = -1.8002);
k3_comp     as Real      (Brief = "k3 compressor", Default = 0.8253);
cepci       as Real      (Brief = "Razao de cepci", Default = 1.5189);
fbm         as Real      (Brief = "Fator de correcao para vasos", Default = 4.07);
k1_vaso     as Real      (Brief = "k1 vaso", Default = 3.4974);
k2_vaso     as Real      (Brief = "k2 vaso", Default = 0.4485);
k3_vaso     as Real      (Brief = "k3 vaso", Default = 0.1074);
tarifa_cemig as Real      (Brief = "Tarifa de energia", Default = 0.08610608, Unit = 'US$/(kw*h)');
vida_util   as Real      (Brief = "Vida util do flotorador", Default = 87600, Unit = 'h');
dolar_real  as Real      (Brief = "Valor do dolar em reais em 2018", Default = 4.1421, Unit = 'R$');

```

Figura 21 - Declaração de variáveis para a centrífuga no software EMSO

```

VARIABLES
Pc_cent     as potency   (Brief = "Pressao da centrifuga obtida a partir da regressao");
Cp0_cent    as Real      (Brief = "Capex da centrifuga", Unit = 'R$/h');
Opex        as Real      (Brief = "Opex da centrifuga", Unit = 'R$/h');
Cp0_Opex    as Real      (Brief = "Variavel da otimizacao", Unit = 'R$/h');

```

Figura 22 - Declaração de parâmetros para a centrífuga no software EMSO

```

PARAMETERS
preco_cent  as Real      (Brief = "Preco da centrifuga de acordo com Vieira, 2016", Default = 83049.6608, Unit = 'US$');
pressao_cent as potency  (Brief = "Pressao da centrifuga de acordo com Vieira, 2016", Default = 65.05);
cepci       as Real      (Brief = "Razao de cepci", Default = 1.113162267);
tarifa_cemig as Real      (Brief = "Custo da energia", Default = 0.08610608, Unit = 'US$/(kw*h)');
vida_util   as Real      (Brief = "Vida util da centrifuga", Default = 87600, Unit = 'h');
dolar_real  as Real      (Brief = "Valor do dolar em reais em 2018", Default = 4.1421, Unit = 'R$');

```

Para a montagem do *Flowsheet* do processo, foi necessário primeiramente declarar (ou instanciar) todos os equipamentos e correntes de processo (apresentados na Figura 17) na seção *Devices* do algoritmo, conforme a Figura 23.

Figura 23 - Declaração dos equipamentos e correntes de processo no flowsheet

```

DEVICES
STEMPhg as main_sourceR; #caldo de cultivo

FTT708 as flotation; #coluna de flotacao

CFG709 as centrifuge; #centrifuga para a recuperacao de biomassa
PSS709 as power_sourceR; #potencia para a centrifuga

mMX701 as mixer2_mR; #misturador das correntes que entrarao na centrifuga
wP703 as splitter_mR; #separador das correntes que entrarao na coluna e centrifuga

```

A corrente de entrada do processo, “STEMPhg”, representa o caldo de cultivo proveniente do biorreator, cujas propriedades são apresentadas na Tabela 3. O modelo (classe) “main_sourceR” representa as correntes de processo da biorrefinaria virtual, sendo composto por modelos internos que representam as frações líquida e sólida da corrente. Os modelos dos equipamentos, assim como os modelos de suas potências requeridas, também foram incorporados da biblioteca da biorrefinaria virtual (CAMPANI, 2018).

Tabela 3 - Dados da corrente de caldo de cultivo - STEMPhg

| Variável/Parâmetro | Valores |
|---------------------------|---------|
| Vazão mássica (kg/h) | 391466 |
| Temperatura (K) | 301,15 |
| Pressão (atm) | 1,20 |
| Fração mássica de células | 0,04 |

Em seguida, foi necessário fazer as conexões dos elementos do processo de acordo com o fluxograma da Figura 17. A Figura 24 representa como esse processo foi realizado no *software* EMSO, dentro da seção “Connections” do algoritmo.

Figura 24 - Conexões dos equipamentos e correntes no software EMSO

```

CONNECTIONS

STEMPhg.Outlet to wSP703.Inlet; #corrente de entrada para o separador

wSP703.Outlet1 to FTT708.Inlet; #separador para o flotador
wSP703.Outlet2 to mMX701.Inlet1; #separador para o misturador
FTT708.Foam to mMX701.Inlet2; #saida do flotador para o misturador
mMX701.Outlet to CFG709.Inlet; #saida do misturador para a centrifuga
PSS709.Outlet_p to CFG709.Inlet_p; #Potencia para a centrifuga

```

Esse *Flowsheet* do processo apresentado e desenvolvido no EMSO apresenta um grau de liberdade, referente à fração (wSP703.frac) da corrente de entrada (wSP703.Inlet) do

separador WSP703 que é dividida entre as suas correntes de saída (wSP703.Outlet1 e wSP703.Outlet2). Essa variável é utilizada como variável de decisão na otimização, como descrito na Seção 3.5. Como chute inicial para essa variável, adotou-se o valor de 0,5 (Figura 25), que representa a condição onde 50% da corrente de processo “STEMPhg” vai para a coluna de flotação e o restante para o misturador mMX701.

Figura 25 - Especificação da variável "frac" no EMSO

```
SPECIFY
#separador
wSP703.frac=0.5;
```

3.5. Otimização

A partir do *Flowsheet* do processo implementado no simulador EMSO, pode-se utilizar a ferramenta de otimização do *software*, de modo a prever o valor ótimo para a variável “frac”, ou seja, determinar a quantidade de caldo de cultivo que deve ser direcionada para cada equipamento. Com isso, a melhor sequência do processo é determinada. Para esse problema de otimização, buscou-se maximizar a recuperação celular com relação ao custo de investimento (CAPEX) e de operação (OPEX) dos equipamentos. Essa relação é representada pela Equação (41).

$$j = \frac{z_{biomassa} \times F_{0,centrifuga}}{(CAPEX + OPEX)_{centrifuga} + (CAPEX + OPEX)_{coluna\ de\ flotação}} \quad (41)$$

em que j é a função objetivo a ser maximizada, $z_{biomassa}$ é a fração mássica de células na corrente de saída de produto da centrífuga ($F_{0,centrifuga}$), $(CAPEX + OPEX)_{centrifugação}$ e $(CAPEX + OPEX)_{flotação}$ são os custos de investimento e de operação da centrífuga e da coluna de flotação, respectivamente.

A razão “ j ” varia de acordo com a variável independente denominada “frac”. Assim, pode-se denominar “ j ” como sendo a função objetivo e “frac” como a variável de decisão. A Figura 26 mostra como o algoritmo de otimização foi implementado no EMSO. Nesse algoritmo, definiu-se que o objetivo é maximizar a variável j , manipulando a variável “frac” (wSP703.frac). Além disso, foi necessário restringir o valor de j para ser maior que zero e “frac” para variar entre 0 e 1.

Figura 26 – Algoritmo de otimização do processo implementado no EMSO

```
using "SCO_xylose_recovery.mso";
Optimization Otimizacao_Sco_xylose_recovery as SCO_xylose_recovery

MAXIMIZE
j;

FREE
wSP703.frac;

EQUATIONS
wSP703.frac >= 0;
wSP703.frac <= 1;
j >= 0 *'kg/R$';

OPTIONS
Dynamic = false;
NLPsolveNLA = false;
FeasiblePath = true;
NLPsolver(File = "complex", MaxIterations = 100,
           File = "direct", MinimumRectangle=1e-4, MaxEvals=5000, Epsilon=1e-1,
           File = "PSO", number_of_particles = 30, MaxIterations = 30,
           AbsoluteAccuracy = 1e-3,
           RelativeAccuracy = 1e-6);

GuessFile = "SCO_xylose_inc.rlt";

end
```

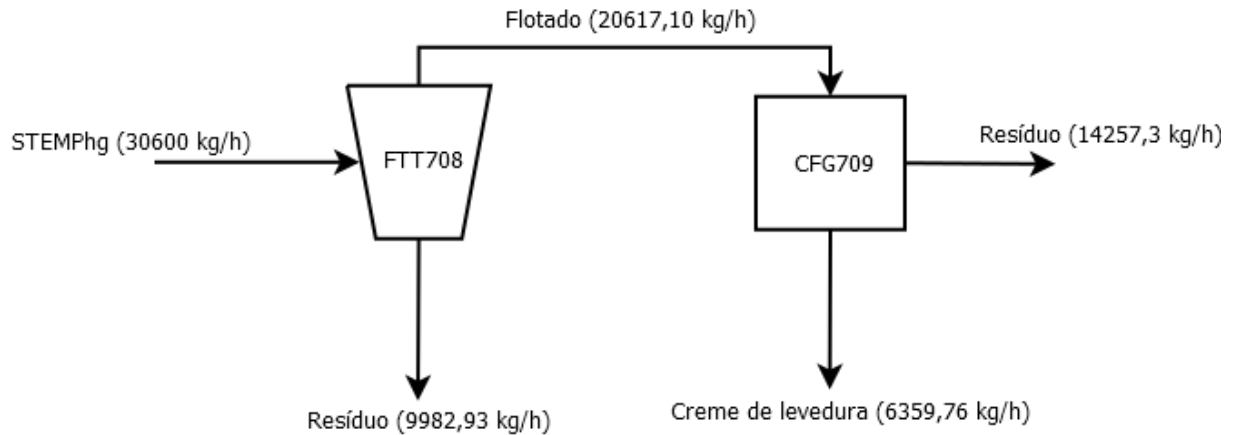
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O objetivo deste trabalho foi maximizar a razão entre a recuperação celular e o custo total dessa etapa, definido como índice “j”

A condição de máximo para “j”, resultante da otimização, foi com frac = 1, sendo o valor de “j” igual a 14,77 kg/R\$. Já na condição subótima, com apenas 50% da corrente de entrada sendo direcionada para a flotação (“frac” = 0,5), a eficiência econômica do processo é aproximadamente 4 vezes menor, com “j” igual a 3,61 kg/R\$. Esses dados mostram a elevada sensibilidade de “j” frente a variações em “frac”.

Na condição ótima, com frac = 1, o caldo de cultivo que entra no separador vai completamente para a entrada da coluna de flotação, como mostra o fluxograma ótimo para a recuperação celular apresentado na Figura 27. Ou seja, a combinação em série das operações é a melhor opção para maximizar a recuperação celular com relação ao custo total do processo.

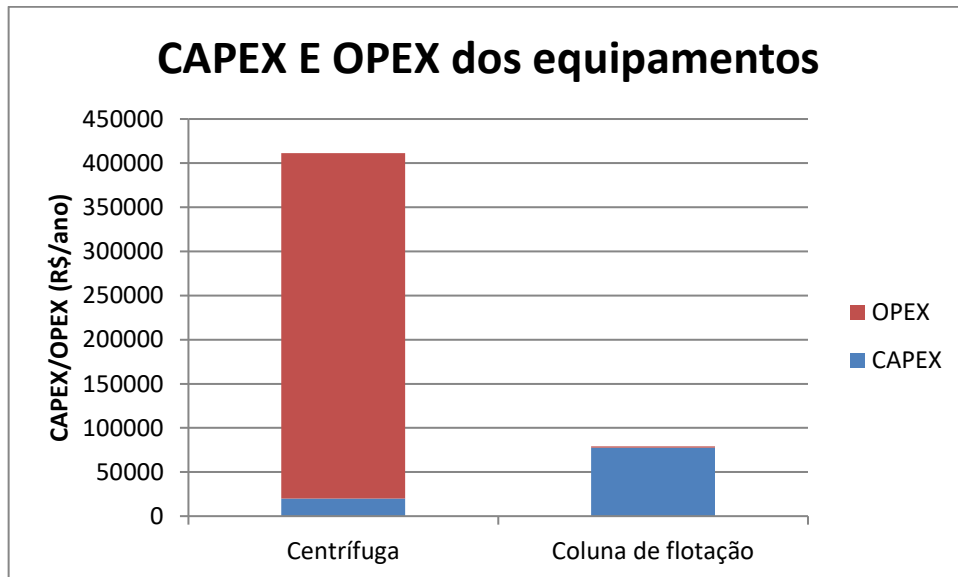
Figura 27 – Fluxograma na condição ótima



O fluxograma otimizado da Figura 28 difere daquele apresentado na Figura 17, visto que a condição ótima do sistema é a integração em série dos processos. Assim, não é necessário um ponto de separação da corrente STEMPhg (wSP703) e nem um misturador (mMX701).

Com a configuração ótima do processo, obtiveram-se os valores de CAPEX e OPEX para a centrifugação e a flotação conforme apresentados na Figura 29.

Figura 28- Custo de capital e operação



De acordo com a Figura 28, nota-se que o custo de capital da coluna de flotação é relativamente maior que o da centrífuga. Por outro lado, o custo de operação da centrífuga, relativo ao consumo de energia elétrica, é bastante superior ao da flotação.

Considerando uma vida útil de 10 anos, a centrífuga possui um custo acumulado de operação de R\$ 776.232,40 e a coluna de flotação de R\$ 13.941,27. Portanto, é possível perceber que apesar de a centrífuga ser um equipamento com menor custo de investimento, o seu custo de operação é alto, enquanto a coluna de flotação apresenta um comportamento contrário. Mais especificamente, analisando a Figura 29, é possível perceber que a contribuição do CAPEX no custo total da coluna de flotação é maior que a contribuição do OPEX, enquanto que a centrífuga apresenta comportamento oposto.

O custo total do processo de recuperação celular, integrando as duas operações unitárias, foi obtido somando os custos de capital e custos de operação de ambos os equipamentos. A Tabela 4 apresenta os custos totais do processo de recuperação celular (considerando uma vida útil de 10 anos para cada um dos equipamentos) separadamente para a centrífuga e para a coluna de flotação. Como pode-se verificar, a centrifugação apresenta um custo total 5 vezes superior ao da flotação. No entanto, a centrifugação continua sendo indispensável para atingir o teor reduzido de água no creme de levedura, já que a flotação não seria capaz concentrar suficientemente a suspensão celular para as etapas subsequentes de purificação do óleo.

Tabela 4- Custo total do processo de recuperação celular

| Equipamento | Custo total (R\$/ano) |
|--------------------|------------------------------|
| Centrífuga | 4.113.138,90 |
| Coluna de flotação | 790.173,70 |

5. CONCLUSÃO

A partir da necessidade do aumento do retorno econômico e maior sustentabilidade de plantas químicas para a produção de etanol 2G e de biodiesel, apresenta-se como alternativa a produção de óleo microbiano a partir de subprodutos do processo, como o hidrolisado hemicelulósico e o glicerol. O óleo microbiano, por sua vez, pode ser utilizado como matéria-prima para a produção de biodiesel, ou até mesmo na produção de cosméticos, medicamentos, produtos alimentícios, entre outros. Diante da importante contribuição econômica que o óleo microbiano pode apresentar para a indústria, esse trabalho teve como objetivo analisar técnica e economicamente uma nova estratégia de recuperação celular dentro do processo de produção do óleo.

Através dos resultados de otimização, verificou-se que uma configuração ótima para a etapa de recuperação celular é a integração em série das duas operações de separação, de modo que o caldo de cultivo passe por duas etapas de concentração em sequência: flotação seguida de centrifugação. Nessa configuração ótima do processo, a eficiência econômica atingiu um valor máximo de 14,77 R\$/kg. Com os resultados obtidos pela otimização do processo de recuperação de óleo microbiano, é possível concluir que apesar de ser um processo com investimento alto, ainda assim representa uma alternativa viável para aumento da viabilidade econômica da planta química de produção de biocombustíveis. Além de apresentar uma alternativa sustentável para as empresas, aumentando a visibilidade da mesma frente às concorrentes, evitando a contaminação do meio ambiente com os resíduos oriundos da produção de biocombustíveis, há uma grande contribuição econômica para a planta química, já que o valor de venda do óleo microbiano é de R\$ 5.509/tonelada de levedura. Além disso, a produção desse óleo pode obter carotenoides, que é muito utilizado na indústria química como corantes de alimentos, medicamentos e na fabricação de rações.

Além disso, verificou-se que a centrífuga apresenta um custo de investimento inferior ao da flotação. No entanto, o custo operacional da flotação é bem menor que o da centrífuga, uma vez que a primeira apresenta reduzido consumo de energia. Logo, as operações de centrifugação e flotação se mostraram complementares para o processo de recuperação celular.

Os resultados obtidos contribuem para a viabilidade de processos integrados de produção de biocombustíveis em plantas denominadas de biorrefinarias. O presente trabalho, entretanto, limitou-se a uma análise econômica inicial do processo, sem considerar os demais custos (mão-de-obra, impostos, administração, terreno, etc.) e o preço de venda do óleo. Portanto, como sugestão para trabalhos futuros, estudos mais aprofundados poderiam ser realizados utilizando métodos de análise de investimento com medidas tais como valor presente líquido, taxa interna de retorno, entre outros.

6. BIBLIOGRAFIA

ABGTCALIM. Centrifugação no processamento de alimentos. Disponível em: <http://abgtecalim.yolasite.com/resources/Opera%C3%A7%C3%A3o%20de%20Centrifuga%C3%A7%C3%A3o.pdf>. Acesso em 05 de julho de 2020.

ALMEIDA, Regis Rodrigues de. "Biocombustíveis no Brasil"; *Brasil Escola*. Disponível em: <https://brasilecola.uol.com.br/geografia/biocombustiveis-no-brasil.htm>. Acesso em 02 de junho de 2020.

ANÁLISE ECONÔMICA, O que é e como fazer análise econômica. Disponível em: <http://www.analiseeconomica.com.br/index/analise-economica-tudo-sobre/>. Acesso em 13 de maio de 2020.

APOLINARIO, Mayara da Fonseca. Avaliação do cultivo em hidrolisado hemicelulósico de bagaço de cana-de-açúcar de leveduras xilanolíticas isoladas da Antártica. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

BABEL, W., MULLER, RH. Correlation between cell composition and carbon conversion efficiency in microbial growth: a theoretical study. *Appl Microbiol Biotechnol* 1985;22:201–7.

BASTOS, Valéria Delgado. Etanol, álcoolquímica e biorrefinaria. *BNDES Setorial*, Rio de Janeiro, n. 25, p. 5-38, mar. 2007.

BETAEQ, EMSO- Um software para modelagem, simulação e otimização. Disponível em: <https://betaeq.com.br/index.php/2015/10/26/i-sseq-emso-um-software-para-modelagem-simulacao-e-otimizacao-de-processos/>. Acesso em 19 de Maio de 2020.

BIODIESEL BRASIL. Produção de biodiesel: conheça as etapas do processo. Disponível em: <https://biodieselbrasil.com.br/producao-do-biodiesel/> . Acesso em 04 de Maio de 2020.

BONTURI, N. et al. Microbial oil production in sugarcane bagasse hemicellulosic hydrolysate without nutrient supplementation by a *Rhodosporidium toruloides* adapted strain. *Process Biochemistry*, v. 57, p. 16–25, jun. 2017.

BONTURI, Nemailla et al. Produção de óleo microbiano por cepas adaptadas de leveduras oleaginosas a partir de materiais hemicelulósicos visando a sua aplicação em biorrefinarias. 2016.

BRAINLY. Nos últimos anos, a concentração de minérios registrou um significativo avanço pela introdução da coluna no processo de flotação. Disponível em: <https://brainly.com.br/tarefa/21198551>. Acesso em: 05 de julho de 2020.

BRITO, Otimização na engenharia. Disponível em: <http://www.unimep.br/~edgbrito/DISCIP/IE/Aulas/aula07.pdf>. Acesso em 14 de maio de 2020.

BROWN, Thane. *Engineering economics and economic design for process engineers*. CRC Press, 2016.

CALDARA, Júlio Athanazio. Abordagem sobre a aplicação da flotação em coluna em beneficiamento mineral. 2010.

CAMPANI, G. Análise tecno-econômico-ambiental reversa da produção de carotenóides e óleo microbiano pela levedura oleaginosa *Rhodotorula toruloides* a partir da fração hemicelulósica de bagaço de cana integrada à biorrefinaria biodiesel-bioetanol (1G-2G): relatório técnico FAPESP (18/09692-6). Campinas, 2018

CEMIG. Bandeiras Tarifárias. Disponível em: https://www.cemig.com.br/pt-br/atendimento/Paginas/Bandeiras_tarif%C3%A1rias.aspx. Acesso em 07 de julho de 2020.

CENTRITECH. CT- Decanter centrifuge, 2018.

CRIVELARI, Augusto César. Caracterização estrutural das hemiceluloses de paredes celulares de cana-de-açúcar, 2012.

DAVIES, RJ. Yeast oil from cheese whey-process development. In: Moreton RS, editor. Single cell oil. London: Longman; 1988. p. 99–145

DINIZ, G. 2010. De coadjuvante a protagonista: Glicerina bruta obtida na produção de biodiesel pode ter muitas aplicações. Ciência Hoje Online, 19/10/05.

DORAN, Pauline M. Princípios de engenharia de bioprocessos . Elsevier 2 ed., 2013.

EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA. Balanço energético nacional 2019: ano base 2018. Rio de Janeiro, 2010. 276 p. Disponível em: <http://www.epe.gov.br/pt/imprensa/noticias/relatorio-sintese-do-balanco-energetico-nacional-2019-ano-base-2018> . Acesso em: 04 maio 2020.

FERRARI, R. A; OLIVEIRA, V. S; SCABIO, A. 2005. Biodiesel de soja – Taxa de conversão em ésteres etílicos, caracterização físicoquímica e consumo em gerador de energia. *Química Nova*,28(1):19-23.

FOGAÇA, J. Óleos e gorduras. Disponível em: <https://alunosonline.uol.com.br/quimica/oleos-gorduras.html>. Acesso em 09 de junho de 2020;

GUTHRIE, K. M. Data and techniques for preliminary capital cost estimating, *Chem.* 1969.

HARGREAVES, Paulo Iiboshi. Produção de etanol a partir de *Kappaphycus alvarezii*- Biocombustível de terceira geração.

INTRODUÇÃO A ENGENHARIA, Simulação. Disponível em: http://paginapessoal.utfpr.edu.br/kathya/Disciplinas/introducao_engenharia/introducao-a-engenharia/Simulacao.pdf. Acesso em: 14 de maio de 2020.

KNOLL, B. MAIER, H. TSCHERRING, J. Büchs, The oxygen mass transfer, carbon dioxide inhibition, heat removal, and the energy and cost efficiencies of high pressure fermentation, *Adv. Biochem. Eng. Biotechnol.* 92 (2005) 77–99, doi: <http://dx.doi.org/10.1007/b98918>.

KOUTINAS, AA, PAPANIKOLOU S. Biodiesel production from microbial oil. In: Luque R, Campelo J, Clark JH, editors. Handbook of biofuels production – processes and technologies. Cambridge, UK: Woodhead Publishing; 2011. p. 177–98.

MARTINEZ, Camila Ortiz. Operações Unitárias: Bombeamento.

MENG X, YANG J, XU X, ZHANG L, NIE Q, XIAN M. Biodiesel production from oleaginous microorganisms. *Ren En* 2009;34:1–5

NOGUEIRA S. F. A. M., GARCIA, S M. Gestão dos resíduos do setor industrial sucroenergético: estudo de caso de uma usina no município de Rio Brilhante, Mato Grosso do Sul, 2013.

MEU POSITIVO, Capex e Opex o que são e quais as diferenças que vocês precisam saber. Disponível em: <https://www.meupositivo.com.br/panoramapositivo/capex-e-opex/>. Acesso em 13 de Maio de 2020.

NOVA CANA. Processos de fabricação do etanol. Disponível em: <https://www.novacana.com/etanol/fabricacao>. Acesso em 05 de Maio de 2020.

PACHECO, Thályta Fraga. Produção de etanol: primeira ou segunda geração. Embrapa Agroenergia-Circular Técnica (INFOTECA-E), 2011.

PEREIRA, R.M. MIRANDA, E.A. Estudo da influência do tempo de fermentação de *Rhodotorula Toruloides* na eficiência da recuperação celular por flotação, 2018.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. 1997. Perry's Chemical Engineers' Handbook. P. 2-39. McGraw-Hill: New York.

PERLINGEIRO, G.A.C. Engenharia de Processos, 4ª edição, 2015.

PENA, A. R. Biocombustíveis. Disponível em: <https://brasilecola.uol.com.br/geografia/biocombustiveis.htm>. Acesso em 19 de junho de 2020.

PETERS, M.; TIMMERHAUS, K. Plant Design and Economics for Chemical Engineers, 2002.

REBELATO, Marcelo Giroto; MADALENO, Leonardo Lucas; RODRIGUES, Andréia Marize. Ponderação do impacto ambiental dos resíduos e subprodutos da produção industrial sucroenergética. **Revista Gestão Industrial**, v. 9, n. 2, 2013.

RODRIGUES, F. V.; Acta Veterinaria Basilea v.7, 2013. Alternativas do uso de subproduto da cadeia de biodiesel na alimentação de ruminantes : glicerina bruta.

SEIDER, Warren D.; SEADER, Junior D.; LEWIN, Daniel R. PRODUCT & PROCESS DESIGN PRINCIPLES: SYNTHESIS, ANALYSIS AND EVALUATION, (With CD). John Wiley & Sons, 2009.

SGS GROUP, Flotação de coluna e célula de contato. Disponível em: <https://www.sgsgroup.com.br/pt-br/mining/metallurgy-and-process-design/unit->

operations-and-metallurgical-services/flotation/column-and-contact-cell-flotation. Acesso em 13 de Maio de 2020.

ANP, Sítio da Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. Disponível em . Acesso em: 05 Maio 2020.

SOARES, R. de P. et al. EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimisation. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 14, n. C, p. 947-952, 2003.

SOUSA, Sandro Rogério; LALUCE, Cecília; Flotation for cell recovery from small volumes of yeast cultures, 2000.

TODA MATÉRIA, Centrifugação. Disponível em: <https://www.todamateria.com.br/centrifugacao/> . Acesso em 13 de Maio de 2020.

TURTON, R.; BAILIE, RICHARD C.; WHITING, WALLACE B.; SHAEIWITZ, JOSEPH A.; Analysis Syntesis and Design of Chemical Process – Second Edition, 2018.

VAZZOLER, Alex. Introdução ao estudo das viabilidades técnica e econômica de processos químicos: Estimativas de custos para projetos conceituais e anteprojetos, 2017.