



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS  
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE PALMAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO  
MESTRADO EM AGROENERGIA**

**MIRELLA PESSÔA DINIZ DA SILVA**

**Simulação da Transferência de Calor na Produção de Lipases por  
Fermentação em Estado Sólido em Biorreator de Bandejas**

**PALMAS – TO  
2023**

Mirella Pessôa Diniz da Silva

**Simulação da Transferência de Calor na Produção de Lipases por  
Fermentação em Estado Sólido em Biorreator de Bandejas**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em 2023. Foi avaliada para obtenção do título de Mestre em Agroenergia e aprovada em sua forma final pelo orientador e pela banca examinadora.

Orientadora: Doutora Lina María Grajales Agudelo

Coorientadora: Doutora Fernanda Perpétua Casciotori

**PALMAS – TO  
2023**

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

---

- D585s    Diniz, Mirella Pessoa.  
          Simulação da Transferência de Calor na Produção de Lipases por  
          Fermentação em Estado Sólido em Biorreator de Bandejas. / Mirella Pessoa  
          Diniz. – Palmas, TO, 2023.  
          94 f.  
  
          Dissertação (Mestrado Acadêmico) - Universidade Federal do Tocantins  
          – Câmpus Universitário de Palmas - Curso de Pós-Graduação (Mestrado) em  
          Agroenergia, 2023.  
          Orientadora : Lina Maria Grajales  
          Coorientadora : Fernanda Perpétua Casciatori  
  
          1. Lipases. 2. Fermentação em Estado Sólido. 3. Resíduos Agroindustriais.  
          4. Modelo Matemático. I. Título

**CDD 333.7**

---

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

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

Mirella Pessôa Diniz da Silva

**Simulação da Transferência de Calor na Produção de Lipases por  
Fermentação em Estado Sólido em Biorreator de Bandejas**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em 2023. Foi avaliada para obtenção do título de Mestre em Agroenergia e aprovada em sua forma final pelo orientador e pela banca examinadora.

Orientadora: Doutora Lina María Grajales Agudelo

Coorientadora: Doutora Fernanda Perpétua Casciotori

Data de aprovação: 11 / 07 / 2023

Banca Examinadora

---

Prof. Dr<sup>a</sup>. Lina María Grajales Agudelo, UFT

---

Prof. Dr<sup>a</sup>. Fernanda Perpétua Casciotori, UFSCAR

---

Prof. Dr<sup>o</sup> Guilherme Benko de Siqueira, UFT

---

Prof. Dr<sup>o</sup> Harvey Alexander Villa Velez, UFMA

**PALMAS – TO**

**2023**

*A Deus, aos familiares e amigos que estiveram comigo ao longo desta intensa e desafiadora caminhada, DEDICO.*

## AGRADECIMENTOS

Um dos papéis fundamentais da ciência é o de que todos devem ter acesso à informação científica e de qualidade. Os trabalhos científicos são capazes de oferecer respostas e propor soluções a uma ampla gama de problemas que afetam as mais diversas pessoas em nossa sociedade. O mestrado é uma longa viagem que inclui uma trajetória permeada por inúmeros desafios, tristezas, incertezas, alegrias e muitos percalços pelo caminho. Mas apesar do processo solitário a que qualquer pesquisador está destinado, reúne contributos de várias pessoas, indispensáveis para encontrar o melhor rumo em cada momento da caminhada. Trilhar este caminho só foi possível com o apoio, energia e força de algumas pessoas, a quem dedico especialmente este projeto de vida.

À professora Dr<sup>a</sup> Lina Maria Grajales, minha orientadora, pela disponibilidade, compreensão por algumas dilações, pelo aconselhamento sempre assertivo e pelo estímulo permanente, que foram fundamentais ao longo desta desafiadora e intensa caminhada. Foi um presente ser sua orientada, compartilhar e aprender tanto com a senhora ao longo desses três intensos anos, o meu mais sincero obrigado por tudo. Às professoras, Dr<sup>a</sup> Solange Ságio e Dr<sup>a</sup> Solange Carreiro, a quem nutro imenso carinho e gratidão, pelas tantas contribuições e que, principalmente, me inspiram muito como mulheres e pesquisadoras. Ao professor Dr<sup>o</sup> Harvey Alexander Villa Velez, coordenador do curso de Engenharia Química pela UFMA, e ao professor Dr<sup>o</sup> Guilherme Benko de Siqueira, pela disponibilidade e contribuições nesta dissertação.

À minha família, por todo o suporte necessário ao longo desses anos. Aos meus pais, pelo incentivo, investimento e por terem me mostrado desde pequena, a importância da educação em nossas vidas. Aos meus tios e pais de coração, Elaine, Ivo, Luiza e Wilson que me abraçaram nos momentos mais difíceis, e fizeram o Tocantins ter um gostinho de lar, nunca esquecerei tudo o que fizeram por mim. Aos meus primos e amigos do estado caçula do país, obrigada por terem feito mais leve essa caminhada tão desafiadora, compreenderem meus momentos de falta, e me apoiarem incondicionalmente, mesmo quando nem eu acreditaria ser possível conseguir.

Aos meus amigos, que mesmo à distância sempre se fizeram presentes e seguraram minha mão quando eu mais precisei. Em especial, Amanda, Anna Beatriz e Ana Flávia, sem vocês eu não teria suportado passar por tantos desafios. Vocês são meu coração fora do peito, fazem o percurso mais suave e bonito, e me trazem a certeza, de que tudo aquilo que verdadeiramente importa são as pessoas e os momentos que compartilhamos, nessa breve passagem que chamamos de vida. Que sorte a minha, poder compartilhá-la com vocês. E à em breve doutora, Ana Flávia, obrigada por além da parceria de vida, também compartilhar comigo todas as incertezas, frustrações e vitórias que essa laboriosa trajetória acadêmica nos proporciona, sua dedicação também me inspira.

À UFT que foi minha segunda casa, e que junto à UFRRJ me moldaram como ser humano e profissional. Por ratificarem a importância e a grandeza da universidade pública, desempenhando papel fundamental no desenvolvimento da sociedade. Prometo sempre lutar pela educação pública e de qualidade no nosso país. À CAPES, fomentadora desta pesquisa científica, e órgão do Governo Federal que atua na expansão e consolidação da pós-graduação stricto sensu nos estados do Brasil. Espero que em breve, os docentes, cientistas e pesquisadores do nosso país possam ter o reconhecimento que tanto merecem. A jornada acadêmica é desafiadora, mas nos recompensa diariamente a cada nova descoberta, na possibilidade da divulgação do nosso trabalho por cada pedacinho desse planeta, e na certeza e esperança de poder tornar esse mundo um lugar melhor.

A Deus e Nossa Senhora Aparecida, por terem me sustentado até aqui. Obrigada por me permitirem errar, aprender, crescer, e principalmente, por darem-me a força necessária a não desistir dos meus maiores sonhos.

## RESUMO

O crescimento econômico e a crescente demanda energética mundial evidenciam a importância da utilização de recursos energéticos renováveis, logo, os resíduos agroindustriais surgem como alternativas promissoras de matérias-primas para diversos bioprodutos. Dentre as várias enzimas aplicadas na biocatálise, as lipases ganharam grande destaque na biotecnologia e no mercado industrial para a produção de biodiesel. Devido à relevância temática, a presente dissertação tem como objetivo desenvolver um modelo matemático unidimensional, capaz de simular a transferência de calor no processo de produção de lipases, por fermentação em estado sólido, em um biorreator de bandejas. Para isto, equações de equilíbrio individuais foram escritas para as fases sólida e gasosa e as relações constitutivas que explicam o efeito das condições ambientais no desempenho do bioprocessamento foram simuladas utilizando o Matlab R2022b (MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, Estados Unidos). Os parâmetros utilizados na simulação foram obtidos através de pesquisas anteriores, realizadas por discentes e pós-graduandos em laboratório. Na simulação, a umidade e a vazão de entrada de ar foram consideradas constantes durante todo o processo fermentativo. O modelo proposto foi capaz de prever os perfis de temperatura e a cinética de produção da lipase, obtida com base na liberação de moléculas de CO<sub>2</sub> pelo metabolismo respiratório do microrganismo, ao longo do processo de cultivo e em qualquer posição do leito. Os dados das simulações demonstraram a influência negativa no aumento da espessura da carga de substrato, inibindo a biossíntese das lipases com a ampliação da variação dos perfis de temperatura ao longo da fermentação. Esta condição foi causada pelo acúmulo de calor metabólico gerado no meio de cultivo das bandejas no biorreator. Nos resultados da simulação foi observado que, o tempo empregado de 7 dias e cargas de 1 cm de substrato, mostraram-se como a combinação mais eficiente para a biossíntese enzimática.

**Palavras-chaves:** Lipases. Fermentação em Estado Sólido. Modelo Matemático. Biodiesel Enzimático. Resíduos Agroindustriais.

## ABSTRACT

Economic growth and the growing world energy demand highlight the importance of using renewable energy resources, therefore, agro-industrial residues emerge as promising alternatives for raw materials for various bioproducts. Among the various enzymes applied in biocatalysis, lipases gained great prominence in biotechnology and in the industrial market for the production of biodiesel. Due to the thematic relevance, the present dissertation aims to develop a one-dimensional mathematical model, capable of simulating the heat transfer in the lipase production process, by solid-state fermentation, in a tray bioreactor. For this, individual equilibrium equations were written for the solid and gaseous phases and the constitutive relationships that explain the effect of environmental conditions on the performance of the bioprocess were simulated using Matlab R2022b (MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, United States). The parameters used in the simulation were obtained through previous research, conducted by students and graduate students in the laboratory. In the simulation, the humidity and air inflow were considered constant throughout the fermentation process. The proposed model was able to predict the temperature profiles and the kinetics of lipase production, obtained based on the release of CO<sub>2</sub> molecules by the respiratory metabolism of the microorganism, throughout the cultivation process and in any position of the bed. The simulation data showed a negative influence on the increase in the thickness of the substrate load, inhibiting the growth of lipases with the expansion of the variation of the temperature profiles throughout the fermentation. This condition was caused by the accumulation of metabolic heat generated in the culture medium of the trays in the bioreactor. In the simulation results, it was observed that the time employed of 7 days and loads of 1 cm of substrate, proved to be the most efficient combination for enzymatic biosynthesis.

**Keywords:** Lipases. Solid State Fermentation. Mathematical Model. Enzymatic Biodiesel. Agroindustrial waste.

## RESUMEN

El crecimiento económico y la creciente demanda mundial de energía resaltan la importancia del uso de recursos energéticos renovables, por lo que los residuos agroindustriales emergen como alternativas promisorias de materias primas para diversos bioproductos. Entre las diversas enzimas aplicadas en biocatálisis, las lipasas adquirieron gran protagonismo en la biotecnología y en el mercado industrial para la producción de biodiesel. Debido a la relevancia temática, la presente tesis tiene como objetivo desarrollar un modelo matemático unidimensional, capaz de simular la transferencia de calor en el proceso de producción de lipasa, por fermentación en estado sólido, en un biorreactor de bandeja. Para ello se escribieron ecuaciones de equilibrio individuales para las fases sólida y gaseosa y se simuló las relaciones constitutivas que explican el efecto de las condiciones ambientales sobre el desempeño del bioproceso utilizando Matlab R2022b (MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, Estados Unidos). Los parámetros utilizados en la simulación se obtuvieron a través de investigaciones previas, realizadas por estudiantes de posgrado en el laboratorio. En la simulación, la humedad y el flujo de aire se consideran constantes durante todo el proceso de fermentación. El modelo propuesto fue capaz de predecir los perfiles de temperatura y la cinética de producción de lipasa, obtenidos a partir de la liberación de moléculas de  $\text{CO}_2$  por el metabolismo respiratorio del microorganismo, a lo largo del proceso de cultivo y en cualquier posición de la cama. Los datos de simulación mostraron una influencia negativa en el aumento del espesor de la carga de sustrato, inhibiendo el crecimiento de lipasas con la expansión de la variación de los perfiles de temperatura a lo largo de la fermentación. Esta condición fue ocasionada por la acumulación de calor metabólico generado en el medio de cultivo de las charolas en el biorreactor. En los resultados de la simulación se observó que el tiempo empleado de 7 días y cargas de 1 cm de sustrato, resultó ser la combinación más eficiente para la biosíntesis enzimática.

**Palabras Clave:** Lipasas. Fermentación en estado sólido. Modelo matemático. Biodiésel enzimático. Residuos agroindustriales.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1.** Diferentes tecnologias termoquímicas e biológicas para conversão de biomassa em biocombustíveis.
- Figura 2.** O espectro de alguns biocombustíveis e bioquímicos notáveis produzidos a partir de biomassa lignocelulósica.
- Figura 3.** Fundamentos da produção de biodiesel por transesterificação enzimática.
- Figura 4.** Transesterificação enzimática para produção de biodiesel.
- Figura 5.** Classificação das lipases.
- Figura 6.** Previsão do valor do Mercado Global de Lipases Microbianas em milhões de dólares.
- Figura 7.** Diferentes tipos de resíduos agroindustriais e materiais residuais.
- Figura 8.** Fatores que afetam a fermentação em estado sólido.
- Figura 9.** Planta e fruto babaçu (*Attalea speciosa*).
- Figura 10.** Bagaço do coco babaçu.
- Figura 11.** Classificação geral dos biorreatores para FES.
- Figura 12.** Diagrama de blocos representando a metodologia seguida desde a modelagem matemática até a simulação.
- Figura 13.** Esquema 3D do biorreator de bandeja e seus periféricos.
- Figura 14.** Esquema da vista frontal interna do biorreator de bandeja.
- Figura 15.** Esquema de bandeja perfurada de fundo e laterais com dimensões em metros.
- Figura 16.** Elemento de volume representativo (EVR) do leito de partículas.
- Figura 17.** Distribuição do tamanho das partículas do substrato.
- Figura 18.** Fotografia do fungo: *Metarhizium anisopliae* cultivado em meio de cultura Ágar Batata Dextrose (BDA).
- Figura 19.** Perfis do gradiente de temperatura no biorreator, em função do tempo de 7 dias de fermentação.
- Figura 20.** Cinética da atividade metabólica da lipase através da liberação de CO<sub>2</sub> para 7 dias de fermentação.
- Figura 21.** Perfis do gradiente de temperatura no biorreator, em função do tempo de 10 dias de fermentação.
- Figura 22.** Cinética da atividade metabólica da lipase através da liberação de CO<sub>2</sub> para 10 dias de fermentação.
- Figura 23.** Perfis do gradiente de temperatura no biorreator, em função do tempo de 13 dias de fermentação,
- Figura 24.** Cinética da atividade metabólica da lipase através da liberação de CO<sub>2</sub> para 10 dias de fermentação.
- Figura 25.** Perfil da distribuição da temperatura e cinética da atividade metabólica do microrganismo no biorreator, em função do tempo de 7 dias de fermentação, para a altura de 6 cm da camada de substrato.

## LISTA DE TABELAS

**Tabela 1.** Comparação entre fermentação em estado sólido e fermentação submersa.

**Tabela 2.** Composição do bagaço do coco babaçu.

**Tabela 3.1** Definições dos parâmetros das condições de referência do leite para simulação.

**Tabela 3.2** Definições dos parâmetros das condições de referência das partículas.

**Tabela 4.** Cinética da produção de lipases ao longo dos dias de fermentação e do efeito da temperatura sobre o seu crescimento.

## ABREVIATURAS E SIGLAS

AGL	Ácidos Graxos Livres
$A_w$	Atividade de Água
BDA	Meio Ágar Batata Dextrose
CARS	Taxa de Crescimento Anual Composto
EDOs	Equações diferenciais ordinárias
EDPs	Equações diferenciais parciais
EVR	Elemento de volume representativo
FES	Fermentação em Estado Sólido
GEE	Gases de Efeito Estufa
LPS	Lipase Pancreática Suína
MatLab	Math Works Inc., Natick, USA
TGA	Análise Termogravimétrica
UFT	Universidade Federal do Tocantins
UR	Umidade relativa

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO</b>	<b>15</b>
<b>2. OBJETIVOS</b>	<b>17</b>
<b>2.1 Objetivo Geral</b>	<b>17</b>
<b>2.2 Objetivos Específicos</b>	<b>17</b>
<b>3. REFERENCIAL TEÓRICO</b>	<b>18</b>
<b>3.1 Biocombustíveis</b>	<b>18</b>
<b>3.2 Transesterificação Enzimática</b>	<b>22</b>
<b>3.3 Lipases</b>	<b>23</b>
<b>3.4 Fermentação em Estado Sólido (FES)</b>	<b>27</b>
<b>3.5 Biorreatores</b>	<b>35</b>
<b>3.6 Modelagem e Simulação Matemática Aplicadas à FES</b>	<b>37</b>
<b>4. MATERIAIS E MÉTODOS</b>	<b>41</b>
<b>4.1 Equipamento: Biorreator de Bandejas</b>	<b>42</b>
<b>4.2 Materiais</b>	<b>45</b>
<b>4.2.1 Substrato: bagaço do coco babaçu</b>	<b>45</b>
4.2.1.1 Caracterização do substrato pelo tamanho das partículas	45
4.2.1.2 Características físico-químicas	47
<b>4.2.2 Fungo <i>Metarhizium anisopliae</i>.</b>	<b>49</b>
<b>4.2.3 Preparo da Suspensão Inoculante e Solução Nutriente</b>	<b>49</b>
<b>4.3 Modelagem Matemática</b>	<b>50</b>
<b>4.3.1 Modelagem da transferência de calor</b>	<b>50</b>
<b>4.3.2 Cinética do crescimento fúngico na FES</b>	<b>52</b>
<b>4.3.2 Simulação</b>	<b>55</b>
<b>4.3.3 Definição de parâmetros</b>	<b>55</b>
4.3.3.1 Parâmetros relacionados às propriedades térmicas do substrato	55
4.3.3.2 Parâmetros das condições de referência do leito para simulação	57

4.3.3.3 Condições iniciais e de contorno	59
<b>5. RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>60</b>
<b>5.1 Resultados de modelagem e simulação.</b>	<b>60</b>
<b>5.2 Provável inferência na variação dos parâmetros utilizados</b>	<b>68</b>
<b>5.3 Cinética metabólica simulada e o efeito da temperatura</b>	<b>70</b>
<b>6. CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>71</b>
<b>7. REFERÊNCIAS</b>	<b>73</b>