



MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE PRODUÇÃO DE ETANOL USANDO AS ROTAS METABÓLICAS

Carlos Eduardo Souza de Oliveira (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Matheus Yuri Gritzenco De Giovanni (Coautor), Renam Luiz Acorsi (Coautor), Cid Marcos Gonçalves Andrade (Orientador), José Eduardo Olivo (Coorientador), e-mail: eq.carloseduardo@hotmail.com

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Tecnologia / Maringá, PR.

Engenharias II, Engenharia Química, Processos Bioquímicos

Palavras-chave: Dynetica, Fermentação, Etanol.

Resumo

As energias fósseis necessitam de alternativas em relação aos interesses socioeconômicos. A questão a ser investigada é a biomassa para a produção do Etanol. O novo cenário tecnológico incita a curiosidade pela modelagem matemática a partir das rotas metabólicas. Dentro disso, o intuito principal desse projeto se direcionou a modelar e simular o processo de produção do etanol via glicólise, utilizando o software livre Dynetica.

Introdução

Requisitos ambientais e econômicos têm obrigado o incremento de alternativas energéticas em substituição às fontes fósseis. O Brasil é um grande produtor de etanol. No Brasil, o etanol é produzido, majoritariamente, a partir da cana-de-açúcar, elemento básico para a obtenção do açúcar e de vários tipos de álcoois. Na fermentação alcoólica ocorre a transformação dos açúcares em etanol e dióxido de carbono.

Uma das formas de se aumentar a produção do etanol é aumentar a eficiência do processo de fermentação. Para tal, faz-se necessário ter-se o modelo do processo. A modelagem pode ser empírica (caixa preta) ou fenomenológica. Em processos bioquímicos, normalmente temos a mistura das duas abordagens, a chamada modelagem mista. Uma vez que geralmente temos a forma das equações, derivadas de conhecimentos





teóricos, e constantes a determinar, que podem ser obtidas a partir de dados experimentais. Pode-se chamar de “macro” a forma de se modelar os processos bioquímicos com equações diferenciais que envolvem o produto (P), o substrato (S) e o microrganismo (X), estes modelos servem e serviram para muitos avanços nestes estudos. Hoje, com o avanço do conhecimento das rotas metabólicas e no processamento dos computadores um tipo de modelagem “micro” tem sido largamente investigado, aquele que usa o equacionamento das rotas metabólicas. Neste trabalho estabeleceu-se a condição de modelar o processo de produção do etanol usando rotas metabólicas e para auxiliar esse controle fez-se o uso do software Dynetica, que é um software livre.

Materiais e métodos

O primeiro passo realizado foi a pesquisa e manuseio a respeito do software Dynetica, o qual seria utilizado para o desenvolvimento do tema. Tendo o software em mãos, foi realizada uma rotina de aprendizagem para o correto manuseio deste, de modo a se tornar familiar com o ambiente de trabalho.

Em seguida, realizou-se uma busca das eventuais rotas metabólicas que levavam a produção do etanol. Para o presente trabalho, selecionou-se uma simplificação da glicólise, onde esta seria considerada uma reação única, seguida da rota de fermentação alcoólica. Com auxílio de dados experimentais disponíveis na bibliografia, fez-se uma simulação da produção de etanol tendo a glicose como substrato, utilizando o software Dynetica em um computador com processador Intel Core i5, 4GB de memória RAM e sistema operacional Windows 10.

Resultados e Discussão

Fez-se então a inserção das substâncias que participam do processo de fermentação no Dynetica, gerando um nodo para cada substância. Por conveniência, os nodos foram nomeados da seguinte forma: glicose = S; ácido pirúvico = Pir; acetaldeído = A; etanol = EtOH. Para os valores iniciais de tais substâncias, tem-se que apenas o valor inicial da glicose difere de 0, pois apenas ela se encontra presente inicialmente no meio. Para fins deste trabalho, considerou-se uma fermentação cuja concentração inicial de substrato é 30 g/L de glicose, ou 0,1665 mol/L de glicose.





Tendo as substâncias em mãos, adicionaram-se as reações. Todas as reações serão consideradas como progressivas. No caso de reações metabólicas, tal como no caso da cinética enzimática, consideraremos que as reações são de primeira ordem. Assim, para a primeira reação, R1, que transforma um mol de glicose em dois mols de ácido pirúvico, para uma cinética tipo $k_1 * [S]$, consideremos uma constante cinética baixa, visto que uma elevada constante dessa reação, causaria uma conversão imediata de toda glicose no meio, o que não se verifica experimentalmente. Partindo dos dados de Acorsi (2012), temos que essa quantidade de glicose deve ser consumida em aproximadamente 75 minutos. Isso levou ao uso de $k_1 = 0.07$. A reação do ácido pirúvico em acetaldeído e a reação do acetaldeído em etanol não devem ser lentas, pois, nesse caso haveria acúmulo dessas substâncias no interior da célula. Para as reações R2 e R3 então, propôs-se $k_2 = k_3 = 1.0$.

Entende-se por resultados a informação pertinente aos dados coletados e analisados, abrangendo estudos de caso.



Figura 1 - Nodos reacionais.

O resultado para esta simulação é mostrado na Figura 2.

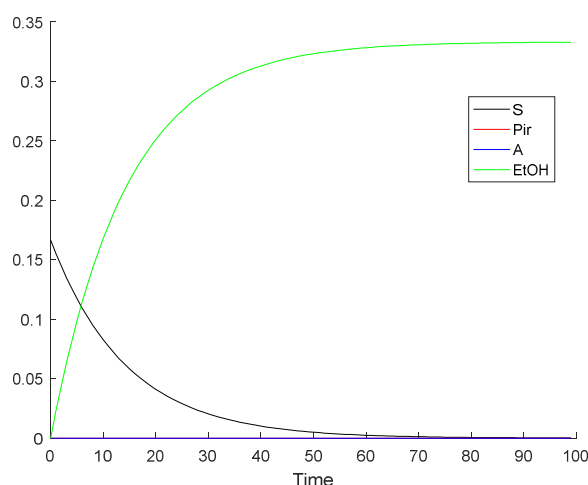


Figura 2 - Produção de etanol por via metabólica (opção de plot no Matlab, fornecida pelo Dynetica).





Conclusões

O processo pôde ser modelado e simulado com o uso do software Dynetica. Dentro da proposta de auxiliar na modelagem de uma rota metabólica para o processo de fermentação, o programa correspondeu às expectativas e o rendimento atingido foi o esperado para casos de fermentação sem inibição.

Agradecimentos

Agradecemos pela oportunidade de participar de um projeto de iniciação científica e agregar conhecimento. Agradecemos também ao CNPq pelo apoio financeiro e pelo suporte no trabalho desenvolvido.

Referências

BNDES E CGEE. Bioetanol de Cana de Açúcar: **Energia para o desenvolvimento sustentável**. 1ª ed., Rio de Janeiro, 2008.

SEBORG, et al. **Process Dynamics and Control**. John Wiley & Sons, Inc. 3ª ed., 2011.

STEPHANOPOULOS, G. **Metabolic Engineering: Principles and Methodologies**, Academic Press, 1998.

YOU, L. et al. **Modeling biological systems using Dynetica- a simulator of dynamics network**. Bioinformatics, 19, 435-6.

EIDUM, D. et al. **Construction, visualization and analysis of biological network model in Dynetica**. Qualitative Biology, p. 142-150, 2014.

MENTEN, Michaelis, L. M. **Die kinetik der invertinwirkung**, Biochemistry Zeitung 49, p. 333-369, 1913.

Acorsi, R.L.; Moraes, F.F.; Olivo, J.E. **Estudo da Fermentação Alcoólica Descontínua de Mel Invertido**. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Maringá, Paraná, Brasil, 2012.

