



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
CENTRO DE TECNOLOGIA - CTEC  
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA**



**WANDERSON DOS SANTOS CARNEIRO**

**MODELAGEM CINÉTICA DO MODELO DE SILVA E CERQUEIRA (MÚLTIPLOS  
SUBSTRATOS) UTILIZANDO A TÉCNICA DE OTIMIZAÇÃO META-HEURÍSTICA  
*PARTICLE SWARM OPTIMIZATION* (PSO) EM LINGUAGEM PYTHON**

Maceió  
2022

WANDERSON DOS SANTOS CARNEIRO

**MODELAGEM CINÉTICA DO MODELO DE SILVA E CERQUEIRA (MÚLTIPLOS SUBSTRATOS) UTILIZANDO A TÉCNICA DE OTIMIZAÇÃO META-HEURÍSTICA PARTICLE SWARM OPTIMIZATION (PSO) EM LINGUAGEM PYTHON**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Eduardo de Farias Silva.

Maceió  
2022

**Catálogo na Fonte**  
**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**  
**Divisão de Tratamento Técnico**

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

C289m Carneiro, Wanderson dos Santos.

Modelagem cinética do modelo de Silva e Cerqueira (múltiplos substratos) utilizando a técnica de otimização meta-heurística *Particle Swarm Optimization* (PSO) em linguagem Python / Wanderson dos Santos Carneiro. – 2022.

53 f. il. : figs. ; tabs. color.

Orientador: Carlos Eduardo de Farias Silva.

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Química).  
Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió, 2022.

Bibliografia: f. 48-53.

1. *Particle Swarm Optimization*. 2. Modelo cinético de Silva e Cerqueira.  
3. Modelo cinético de Monod. I. Título.

CDU: 66.0



**WANDERSON DOS SANTOS CARNEIRO**

***MODELAGEM CINÉTICA DO MODELO DE SILVA E CERQUEIRA  
(MÚLTIPLOS SUBSTRATOS) UTILIZANDO A TÉCNICA DE OTIMIZAÇÃO  
META-HEURÍSTICA PARTICLE SWARM OPTIMIZATION (PSO) EM  
LINGUAGEM PYTHON***

**BANCA EXAMINADORA**

*Carlos Eduardo de Farias Silva*

---

Prof. Dr. Carlos Eduardo de Farias Silva

*Livia Maria de Oliveira Ribeiro*

---

Prof. Dr. Livia Maria de Oliveira Ribeiro

*Albanise Enide da Silva*

---

Prof. Dr. Albanise Enide da Silva

*"O valor das coisas não está no tempo que elas duram, mas na intensidade com que acontecem. Por isso, existem momentos inesquecíveis, coisas inexplicáveis e pessoas incomparáveis".*  
*(Fernando Pessoa)*

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço à minha família, em especial à minha mãe Anne Kelly e minha madrinha Ana Lúcia pela força e o incentivo de continuar na graduação.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Carlos Eduardo de Farias Silva, que com seriedade conduziu-me ao decorrer deste trabalho, dando todo o auxílio necessário e, sobretudo, por todo conhecimento compartilhado.

Aos professores do curso de Engenharia Química da UFAL, em especial, à professora Maritza Montoya Urbina que sempre esteve comigo durante a graduação, e pelos momentos de cuidado e atenção que esteve presente em âmbitos além dos acadêmicos.

Aos meus amigos de turma que tive a oportunidade de conhecer e compartilhar momentos bons e ruins que não caberiam ser listados aqui.

Enfim, um obrigado a todos que estiveram presentes nessa jornada.

## RESUMO

Diversos estudos para os processos biológicos propostos para o tratamento de efluentes vem surgindo com o intuito de fornecer estratégias de preservação de recursos existentes. Por exemplo, o uso das microalgas, que vem sendo estudadas como um novo potencial para tratamento de efluentes devido sua capacidade de eliminar uma variedade de nutrientes ou poluentes existentes e o uso de sua biomassa residual para produção de biocombustíveis. Sob essa ótica, o estudo cinético de um processo bioquímico se torna imprescindível para presumir e/ou controlar o sistema em estudo, uma vez que se pode investigar uma análise de evolução dos valores de concentração de um ou mais componentes do sistema de cultivo em função do tempo de processo. Dessa forma, o presente trabalho buscou avaliar o comportamento do Modelo cinético de Silva e Cerqueira (Múltiplos Substratos) em tratamento de águas residuais por microalgas, com o intuito de modelar e otimizar a sua operação com o uso de ferramentas computacionais, em especial, utilizando a técnica de otimização meta-heurística PSO em linguagem Python. Assim, em relação a modelagem e simulação cinética, para a remoção de contaminantes a equação de ordem  $n$  mostrou-se mais adequada com ordem intermediária entre  $1^a$  e  $2^a$  sendo utilizada (ou seja,  $1 < n < 2$ ) e com constante  $0 < k < 0,2$  obtendo-se MPE entre 15 - 28% semelhante a visto em literatura. Utilizando o Modelo de Monod o algoritmo foi capaz de determinar  $\mu_{m\acute{a}x}$  e  $K_s$  que se mostraram nos intervalos:  $0 < \mu_{m\acute{a}x} < 4 \text{ dia}^{-1}$  e  $0 < K_s < 50 \text{ mg/L}$  com MPE entre 15 - 28%. Aplicando essas constantes no Modelo de Silva e Cerqueira e ao se estudar a delimitação de  $m$  e  $p$ , que são específicas desse modelo, verificou-se de fato, que o modelo se mostrou muito sensível a essas constantes, conseguindo-se delimitar um intervalo para convergência:  $0 < p < 0,5$  e  $0 < m < 2$ , obtendo-se para os mesmos dados testados em Monod um MPE entre 4 - 15% para Silva e Cerqueira (significativamente menor). Por fim, os resultados mostraram que houve bom ajuste do crescimento microalgal e que é possível associar vários contaminantes ao crescimento celular de microalgas bem como as constantes do Modelo Silva e Cerqueira ( $m$  e  $p$ ) mostraram influência significativa na magnitude e curvatura da curva de crescimento microalgal.

**Palavras-chaves:** PSO; Modelagem; Silva e Cerqueira; Monod.

## ABSTRACT

Several studies for the biological processes proposed for the treatment of effluents have been emerging with the aim of providing strategies for the preservation of existing resources. For example, the use of microalgae, which has been studied as a new potential for effluent treatment due to its ability to eliminate a variety of nutrients or existing pollutants and the use of its residual biomass for the production of biofuels. From this perspective, the kinetic study of a biochemical process becomes essential to assume and/or control the system under study, since it is possible to investigate an analysis of the evolution of the concentration values of one or more components of the cultivation system as a function of the process time. Thus, the present work sought to evaluate the behavior of the kinetic model of Silva and Cerqueira (Multiple Substrates) in wastewater treatment by microalgae, in order to model and optimize its operation with the use of computational tools, in particular, using the PSO meta-heuristic optimization technique in Python language. Thus, in relation to kinetic modeling and simulation, for the removal of contaminants, the equation of order  $n$  proved to be more suitable with intermediate order between 1st and 2nd being used (ie,  $1 < n < 2$ ) and with constant  $0 < k < 0.2$ , obtaining MPE between 15 - 28% similar to that seen in the literature. Using the Monod Model, the algorithm was able to determine  $\mu_{m\acute{a}x}$  and  $K_s$  that were shown in the intervals:  $0 < \mu_{m\acute{a}x} < 4 \text{ day}^{-1}$  and  $0 < K_s < 50 \text{ mg/L}$  with MPE between 15 - 28%. Applying these constants in the Model by Silva and Cerqueira and studying the delimitation of  $m$  and  $p$ , which are specific to this model, it was in fact verified that the model proved to be very sensitive to these constants, managing to delimit an interval for convergence:  $0 < p < 0.5$  and  $0 < m < 2$ , obtaining for the same data tested in Monod an MPE between 4 - 15% for Silva and Cerqueira (significantly lower). Finally, the results showed that there was a good fit of the microalgal growth and that it is possible to associate several contaminants with the cellular growth of microalgae as well as the constants of the Silva and Cerqueira Model ( $m$  and  $p$ ) showed a significant influence on the magnitude and curvature of the microalgal growth curve.

**Keywords:** PSO; Modeling; Silva and Cerqueira; Monod.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1: Diagrama de fluxo de bioprocesso representativo simplificado.....	15
Figura 2: Diagrama de fluxo de bioprocesso representativo. ....	16
Figura 3: Regiões de equilíbrio para diferentes tipos de modelos cinéticos: Biomassa total de células (A); Partes de células (B); Partes de biomassa (C) e Biomassa e partes de células (D). ....	17
Figura 4: Curvas de ajuste dos resultados de uma experiência idealizada de fermentação. X, P e S são as concentrações do microrganismo, do produto e do substrato residual no meio, respectivamente. ....	20
Figura 5: Curva de crescimento do microrganismo em cultivo descontínuo, representada em ordenadas lineares (A) e semilogarítmica (B). ....	23
Figura 6: Taxa de crescimento específico versus concentração limitante do substrato de acordo com a Relação Monod.....	24
Figura 7: Tipos de Biorreatores. (a) STR; (b) Coluna de bolhas; (c) "air-lift"; (d) "plug-flow"; (e) Com células imobilizadas (leito fixo); (f) Com células imobilizadas (leito fluidizado); (g) Reator com membranas planas; (h) "hollow-fiber".....	28
Figura 8: Fluxograma da Otimização por Enxame de Partículas. ....	29
Figura 9: Fluxograma geral das etapas desenvolvidas no trabalho. ....	32
Figura 10: Fermentador em Batelada.....	33
Figura 11: Metodologia aplicada para estimar as constantes cinéticas do processo. ....	36
Figura 12: Modelagem da remoção dos contaminantes de CAD (A e B) e PS (C e D) por microalgas.....	38
Figura 13: Modelagem da remoção dos contaminantes de efluente urbano. DQO - Demanda Química de Oxigênio, NT - Nitrogênio Total e PS - Fósforo Total. ....	40
Figura 14: Modelagem da remoção dos contaminantes de efluente urbano. (A) NT - nitrogênio Total e PS - Fósforo Total e (B) DQO - Demanda química de oxigênio, NT - nitrogênio Total e PS - Fósforo Total. ....	44
Figura 15: Análise de sensibilidade dos parâmetros m e p na modelagem da curva. (A) variando p e (B) variando m. ....	45

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Bioprocessos versus Processos Químicos.....	14
Tabela 2: Resumo de alguns dos parâmetros, fenômenos e interações importantes que determinam a cinética da população microbiana. ....	18
Tabela 3: Principais bibliotecas da linguagem Python que são utilizadas na solução de diversos problemas pertinentes.....	31
Tabela 4: Constantes cinéticas associadas ao modelo de ordem n para o consumo de substrato dos dados de Cho et al. (2013). ....	39
Tabela 5: Constantes cinéticas associadas ao modelo de ordem n para o consumo de substrato dos dados de González-Fernández et al. (2016).....	40
Tabela 6: Constantes cinéticas associadas ao Modelo de Monod para os dados de Cho et al. (2013).....	42
Tabela 7: Constantes cinéticas associadas ao Modelo de Monod para os dados de González-Fernández et al. (2016).....	43
Tabela 8: Constantes cinéticas associadas ao Modelo de Silva e Cerqueira. ....	46

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	<b>10</b>
<b>2 OBJETIVOS</b> .....	<b>13</b>
2.1 Geral.....	13
2.2 Específicos .....	13
<b>3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	<b>14</b>
3.1 Bioprocessos.....	14
3.2 Descrevendo o processo fermentativo: Modelos cinéticos.....	17
3.2.1 Parâmetros de transformação cinética .....	19
3.2.2 Velocidades instantâneas de transformação.....	20
3.2.3 Velocidades específicas de transformação .....	21
3.2.4 Curva de crescimento do microrganismo .....	21
3.3 Modelo cinético de Monod (Modelo clássico de dependência com substrato) ....	23
3.4 Influência da concentração de múltiplos substratos (Modelo de Silva e Cerqueira) .....	25
3.5 Microalga no tratamento de efluente .....	26
3.6 Biorreator.....	26
3.6 Técnica de otimização por Enxame de Partículas (PSO).....	29
3.7 Linguagem de programação Python .....	30
<b>4 METODOLOGIA</b> .....	<b>32</b>
4.1 Extração dos dados experimentais .....	32
4.2 Modelagem fenomenológica do biorreator .....	33
4.3 Estimação de parâmetros e otimização .....	35
4.4 Recursos computacionais para solução do problema proposto em linguagem Python .....	35
4.5 Metodologia para estimar as constantes cinéticas do processo.....	35
<b>5 RESULTADOS E DISCUSSÕES</b> .....	<b>37</b>
5.1 Estimativa dos parâmetros para consumo de substrato.....	37
5.2 Estimativa das constantes do Modelo de Monod .....	41
5.3 Estimativa das constantes do Modelo Silva e Cerqueira (m e p) .....	43
<b>6 CONCLUSÃO</b> .....	<b>47</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>48</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Diante da grande demanda por água potável e fornecimento de energia, construções de estratégias de preservação desses recursos vêm se tornando um dos principais desafios globais do século. Essa preocupação ocorreu em diversos países e várias conferências internacionais já foram realizadas a fim de amenizar os problemas causados pela industrialização.

Dessa forma, diversos estudos para os processos biológicos propostos para o tratamento de efluentes vem surgindo, sendo as microalgas estudadas como um novo potencial para tratamento de efluentes devido sua capacidade de eliminar uma variedade de nutrientes ou poluentes existentes e o uso de sua biomassa residual para produção de biocombustíveis (SALAMA et al., 2017). Por exemplo, o gênero *Tetradismus* tem sido alvo de diversos estudos para o tratamento de águas residuais e produção de biocombustíveis, devido sua boa adaptação, remoção de nutrientes, e produtividade de biomassa microalgal rica em lipídios/carboidratos entre outros benefícios para o tratamento de efluentes agroindustriais (KIM et al., 2015; FONTOURA et al., 2017; FERREIRA et al., 2018; BENTAHAR et al., 2019).

Vale ressaltar que as microalgas caracterizam como uma grande fonte de alternativa renovável para produção de biocombustíveis de terceira geração em escala, por produzir volumes de biomassa por área muito maiores que as de biocombustíveis de primeira e segunda geração, pois possui uma taxa rápida de crescimento em comparação com plantas superiores, além de reduzir a emissão de CO<sub>2</sub> (MAITY et al., 2014). Salienta-se que explorar os microrganismos fotossintéticos para aplicações industriais se torna vantajoso desde que promova o ciclo de carbono.

Sob essa ótica, fica imprescindível a importância de se avaliar a cinética de um processo biológico, uma vez que se pode verificar/investigar uma análise de evolução dos valores de concentração de um ou mais componentes do sistema de cultivo em função do tempo de processo e sem esses conhecimentos fica-se evidente que é inviável a transposição de um experimento de laboratório para a escala industrial (BORZANI et al., 2001). Ainda de acordo com Alqahtani (2013) o estudo cinético de um processo bioquímico é imprescindível para presumir e/ou controlar o comportamento do sistema. Incluindo como parâmetros:

- Taxa de crescimento específico;
- Rendimento de crescimento;

- Quocientes metabólicos para utilização de substrato;
- Formação de produto e biomassa máxima.

Tradicionalmente, podemos conduzir um processo fermentativo em batelada (descontínuo), onde todos os nutrientes estão presentes em excesso desde o início, considerado simples, mas, em muitos casos, maximiza o crescimento celular e não a formação do produto desejado (NOORMAN et al., 2018) ou contínuo, na qual durante todo o tempo deste modo de operação ocorre entrada de uma corrente de alimentação e saída de produto (CARVALHO; SATO, 2001b).

Ademais, os modelos matemáticos apresentam um importante papel na otimização de projetos e de condições de operação de biorreatores, sendo obtidos a partir da equação do balanço de massa para cada componente de interesse no reator, como: concentração de células, concentração de substrato e formação de produto. O uso do balanço de massa é essencial para encontrar expressões simuláveis que ajudam a prever uma boa performance em larga escala dos processos fermentativos, sendo assim, é importante encontrar um modelo que se ajuste, mesmo que empiricamente, aos dados experimentais e que correlacione com a eficiência do processo.

Destarte, segundo Leandro (2018), as linguagens modernas que facilitam a estrutura de programação têm ganhado espaço entre os usuários e programadores, devido ter uma boa desenvoltura e uma maior integração pelos usuários. A exemplo disso pode-se citar a linguagem Python, que é uma das mais utilizadas atualmente. Vale ressaltar que já existem trabalhos na área de modelagem e simulação de processos fermentativos implementados em linguagem Python, podendo ser citado o trabalho de Pereira et al. (2016) intitulado: Avaliação de um modelo mecanístico para a busca de condições ótimas na produção de etanol a partir do suco do pedúnculo de caju, onde foi possível comparar a predição de dois modelos matemáticos para o processo de fermentação alcoólica do suco do pedúnculo de caju, possibilitando assim, verificar o comportamento dos perfis de concentração de célula, açúcar e etanol.

Dessa forma, o objetivo deste trabalho é avaliar o comportamento do modelo cinético de Silva e Cerqueira (Múltiplos Substratos) em tratamento de águas residuais por microalgas, com o intuito de simular, modelar e otimizar a sua operação com o

uso de ferramentas computacionais, em especial, utilizando a técnica de otimização meta-heurística *Particle Swarm Optimization* (PSO) em linguagem Python.

## 2 OBJETIVOS

### 2.1 Geral

Avaliar o comportamento do modelo cinético de Silva e Cerqueira (Múltiplos Substratos) em tratamento de águas residuais por microalgas, com o intuito de modelar e otimizar a sua operação com o uso de ferramentas computacionais, em especial, utilizando a técnica de otimização meta-heurística PSO em linguagem Python.

### 2.2 Específicos

- Realizar a simulação dos processos fermentativos pelo método de otimização por Enxame de Partículas (PSO) em linguagem Python;
- Realizar a modelagem cinética com dados experimentais da literatura acerca da utilização do Modelo de Monod;
- Realizar a modelagem cinética com dados experimentais da literatura acerca da utilização do Modelo de Silva e Cerqueira.

### 3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo tem como escopo apresentar um levantamento bibliográfico que serviram de base para o presente trabalho, sendo descritas algumas definições e considerações sobre a modelagem cinética.

#### 3.1 Bioprocessos

O bioprocesso é uma parte essencial de muitas indústrias químicas, alimentícias e farmacêuticas. Suas operações utilizam células microbianas, animais e vegetais e componentes de células como enzimas para se obter importantes produtos necessários à humanidade assim como tratar resíduos sólidos e líquidos (efluentes) provenientes de suas atividades.

A utilização de microrganismos para transformar materiais biológicos para a indústria alimentícia tem início desde a antiguidade, onde há registros que comprovam o uso de alimentos fermentados pelos sumérios, egípcios antigos, assírios e babilônios. Daí por diante, os bioprocessos foram desenvolvidos para uma extensa variedade de produtos comerciais, a partir de materiais relativamente baratos, como por exemplo solventes orgânicos e álcoois industriais, a produtos químicos relativamente mais caros, como antibióticos, proteínas terapêuticas e vacinas. Enzimas industrialmente úteis e células vivas, como levedura de panificação e cerveja, também são produtos comerciais de bioprocessos (DORAN, 1995).

A diferença entre bioprocessos e processos químicos está na natureza dos catalisadores usados em suas reações. Os bioprocessos são dirigidos mediante ação de agentes biológicos, sendo assim, as transformações catalisadas enzimaticamente. A Tabela 1 abaixo mostra as principais características de um bioprocessos comparando com os processos químicos (PEREIRA Jr. et al., 2008).

Tabela 1: Bioprocessos versus Processos Químicos.

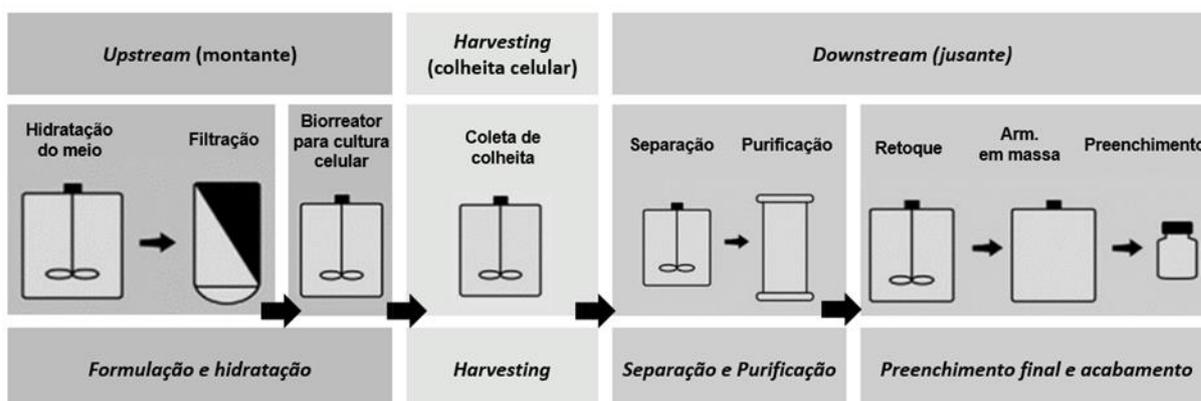
<b>Bioprocessos</b>	<b>Processos Químicos</b>
Decorrente de atividade biológica	Decorrente de reações químicas
Catalisadores de alta especificidade	Catalisadores não específicos
Condições brandas de T, P e pH	Condições drásticas de T, P e pH
Maiores volumes	Menores volumes
Podem requerer esterilidade	Não requerem esterilidade

Fonte: PEREIRA Jr. et al., 2008.

Os bioprocessos abrangem um amplo espectro de equipamentos para funções e aplicações específicas. Em geral podem ser divididos em três estágios como mostra a Figura 1. A etapa que antecede a transformação é denominada de à montante (*upstream*) na qual lida desde as etapas de preparação e esterilização do meio de cultivo, propagação do microrganismo e fermentação na obtenção de um produto (PEREIRA Jr. et al., 2008).

Os produtos podem ser os próprios microrganismos, podem estar presentes internamente às células microbianas ou excretados extracelularmente, no meio de crescimento. Posteriormente à etapa de transformação, há a separação de células, denominada de *harvesting* ou em português, colheita celular, propriamente dita e; finalmente, a etapa de à jusante (*downstream*) que compreende as etapas de separação e purificação do produto de interesse que geralmente envolvem, de modo geral, métodos de lise celular e operações unitárias. Vale ressaltar que alguns autores incluem a transformação na etapa de à montante (PEREIRA Jr. et al., 2008).

Figura 1: Diagrama de fluxo de bioprocesso representativo simplificado.



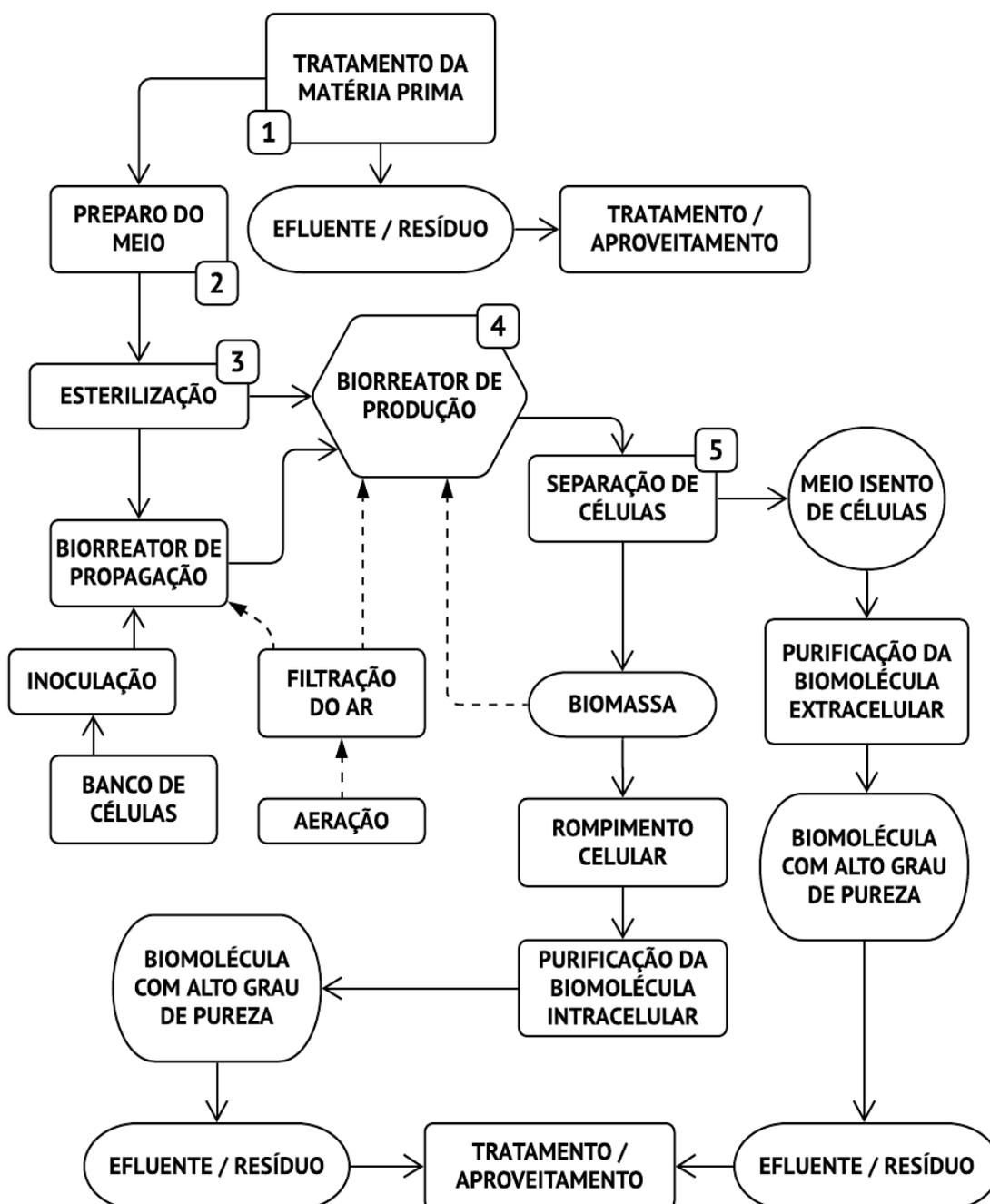
Fonte: Adaptado CLAPP, 2018.

De modo geral, os bioprocessos compreendem um conjunto de operações que incluem:

1. Tratamento da matéria prima;
2. Preparo dos meios de propagação e produção;
3. Esterilização e a transformação do substrato em produto (s);
4. Processos de produção;
5. Processos de separação e purificação de produto (s).

Vale ressaltar que a forma de condução do bioprocesso, bem como a definição das etapas de recuperação do produto também se constituem em aspectos importantes para se garantir sucesso na operação destes processos, a Figura 2 mostra um fluxo detalhado de um bioprocesso relatando essas 5 etapas (PEREIRA Jr. et al., 2008).

Figura 2: Diagrama de fluxo de bioprocesso representativo.



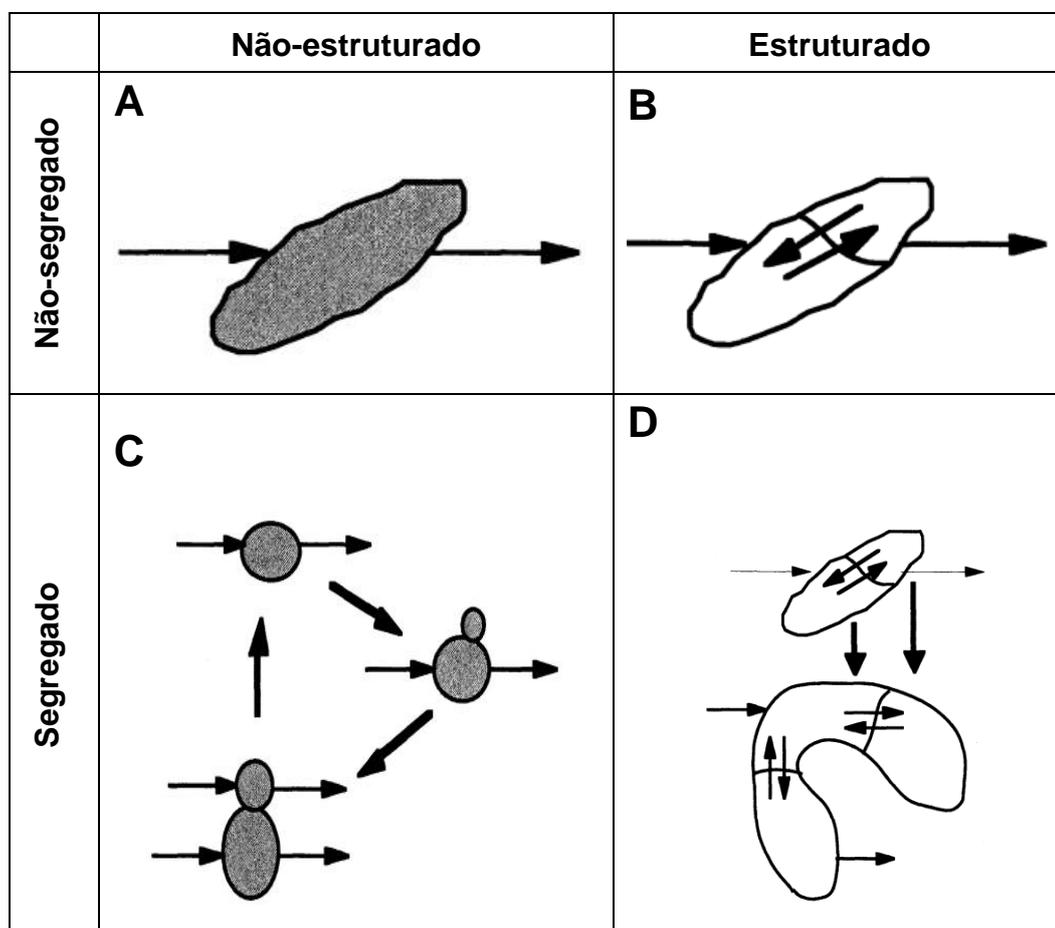
Fonte: PEREIRA Jr. et al., 2008.

### 3.2 Descrevendo o processo fermentativo: Modelos cinéticos

Diversos pesquisadores (CATELAN, et al., 2021; POCCIA, et al., 2014) procuraram apresentar modelos matemáticos (empíricos, fenomenológicos ou mistos) que descrevem reações de consumo de substrato, produção de células e formação de produto que acompanham as considerações de diversos fatores (nutricionais e/ou ambientais) envolvidos durante os processos através de possíveis equações matemáticas e servem para ser um método muito eficaz de ferramenta para testar, promover e otimizar algum processo inerente. Esses modelos podem ser fracionados em quatro grupos: modelos cinéticos estruturados, não-estruturados, segregados e não-segregados.

As distinções entre esses modelos podem ser mais bem descritas de maneira sublime por suas diferentes regiões de equilíbrio, como mostra a Figura 3.

Figura 3: Regiões de equilíbrio para diferentes tipos de modelos cinéticos: Biomassa total de células (A); Partes de células (B); Partes de biomassa (C) e Biomassa e partes de células (D).

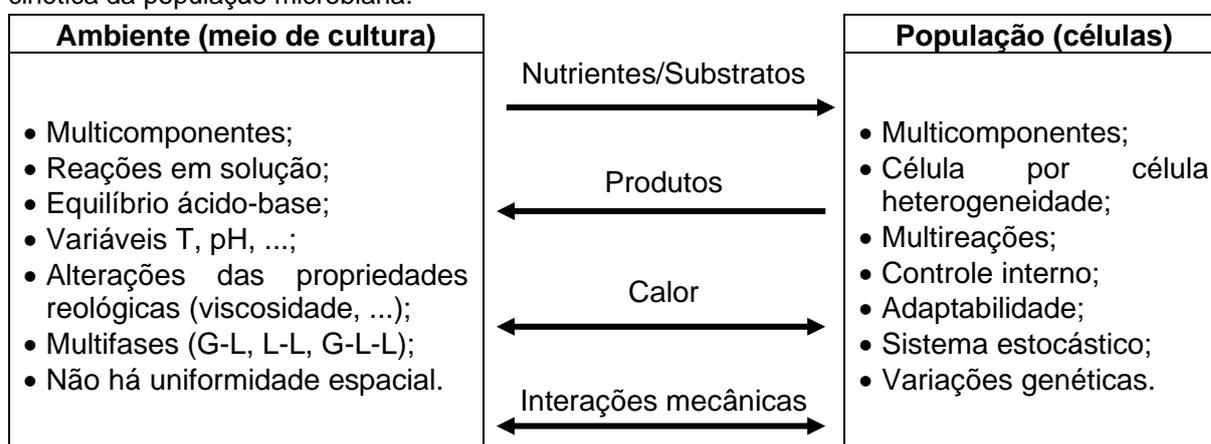


No modelo não-estruturado e não-segregado, a região de balanço é o volume total de biomassa, ou melhor dizendo, é representado por uma única variável sem considerar variações de componentes intracelulares, ou usar tais variações na previsão do comportamento cinético do processo. O modelo estruturado é ao contrário, nele considera como regiões de equilíbrio diferentes compartimentos dentro da célula, podendo ser necessário procurar em alguns detalhes nos processos e reações celulares individuais a fim de se obter uma descrição realista; por fim, no modelo segregado, as regiões de balanço são diferentes partes da biomassa, assim, considera diferentes estágios das células e, portanto, uma distribuição dos estágios celulares em uma cultura sem estruturar a sua composição celular (DUNN et al., 2003).

Os modelos segregados e estruturados apresentam uma descrição mais detalhada do comportamento cinético do processo fermentativo que os não-segregados e os não-estruturados, entretanto, à custa de maior complexidade e maior esforço computacional que é requerido em diversos casos a qualidade e a reprodutibilidade dos resultados obtidos não justificam a complexidade e a perda de generalidade introduzida (BORZANI et al., 2001).

Para construir-se um modelo cinético inteligível, diferentes aproximações e representações da população celular são levadas em consideração. Determinados parâmetros cinéticos da população celular são característicos do meio de cultura, nutrientes e substratos que são utilizados para o crescimento e produção metabólica, entre outros, como mostra a Tabela 2. Tais fatores dificultam a formulação de um modelo cinético simples para atividades (BAILLEY e OLLIS, 1986).

Tabela 2: Resumo de alguns dos parâmetros, fenômenos e interações importantes que determinam a cinética da população microbiana.



Fonte: BAILLEY e OLLIS, 1986.

As células consomem nutrientes e convertem substratos do ambiente em produtos, geram calor onde é dissipado para o meio (temperatura do meio define a temperatura das células) e as interações mecânicas ocorrem através de pressão hidrostática, de efeitos do fluxo do meio para as células, de choque entre partículas (células ancoradas em suportes) e de mudanças na viscosidade do meio em função do acúmulo de células e de produtos metabólicos (BORZANI et al., 2001).

É importante considerar também as características de operação do processo fermentativo empregado, como:

- Batelada, contínuo, batelada alimentada, etc.;
- Submerso e semi-sólido;
- Alta densidade celular (reciclo, imobilização de células, etc.);

entre outras, permitem interferir na relação população microbiana - ambiente, no sentido de controlar e, se possível, aumentar as velocidades e os rendimentos desta interação (BORZANI et al., 2001).

Segundo Alqahtani (2013), para averiguar o estudo cinético de um sistema desse tipo, é vultoso entender como as concentrações dos componentes são representativas no sistema, ou seja, como células, substratos, produtos e subprodutos, mudam ao passar do tempo. Tal estudo é importante para diversas finalidades e é imprescindível para presumir e/ou controlar o comportamento do sistema. Incluindo como parâmetros:

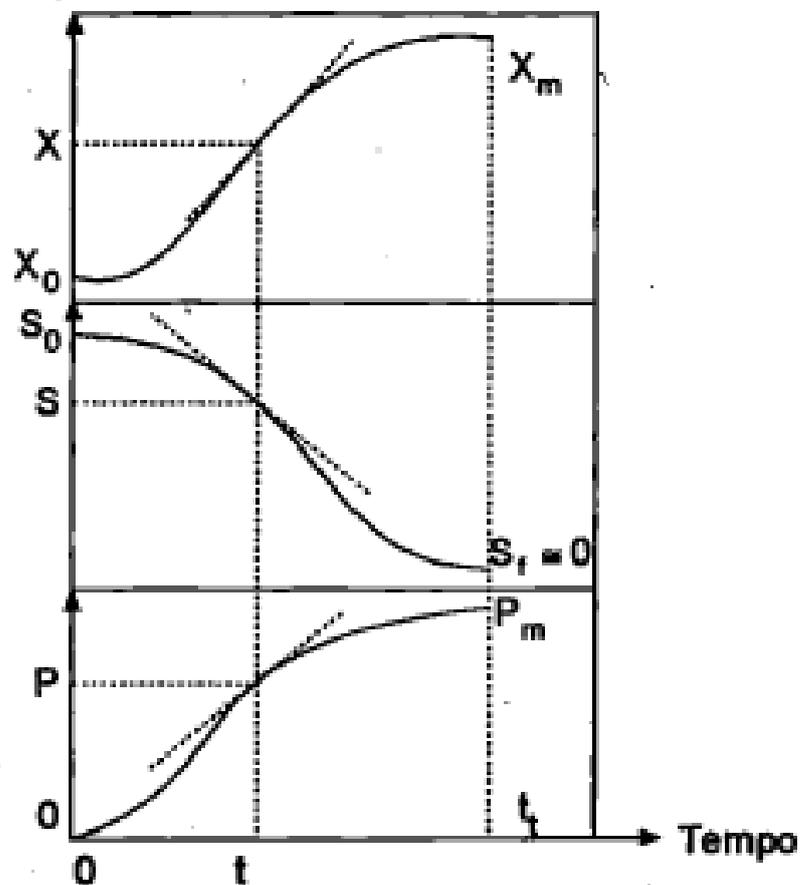
- Taxa de crescimento específico;
- Rendimento de crescimento;
- Quocientes metabólicos para utilização de substrato;
- Formação de produto e biomassa máxima.

### 3.2.1 Parâmetros de transformação cinética

O estudo cinético de um processo fermentativo consiste inicialmente na análise da evolução dos valores de concentração de um ou mais componentes do sistema de cultivo, em função do tempo de fermentação. Entende-se como componentes, os microrganismos (ou a biomassa), os produtos do metabolismo (ou metabólitos) e os nutrientes ou substratos que compõem o meio de cultura (BORZANI et al., 2001).

Tais valores experimentais de concentração (X, P e S respectivamente), quando representados em função do tempo, permitirão os traçados das curvas de ajuste, conforme Figura 4 e indicados por  $X=X(t)$ ,  $P=P(t)$  e  $S=S(t)$ , nesse caso, quando o produto de fermentação é simples (um substrato limitante) (BORZANI et al., 2001) e associado ao crescimento (sua formação está diretamente ligada ao crescimento microbiano) (GADEN, 1969).

Figura 4: Curvas de ajuste dos resultados de uma experiência idealizada de fermentação. X, P e S são as concentrações do microrganismo, do produto e do substrato residual no meio, respectivamente.



Fonte: BORZANI et al., 2001.

### 3.2.2 Velocidades instantâneas de transformação

A Figura 4 elucidada as definições das velocidades instantâneas ou taxas de crescimento ou reprodução do microrganismo, consumo de substrato e formação de produto, traduzidas respectivamente pelas seguintes expressões, para um tempo  $t$ :

$$r_X = \frac{dX}{dt} \quad (1)$$

$$r_S = -\frac{dS}{dt} \quad (2)$$

$$r_P = \frac{dP}{dt} \quad (3)$$

### 3.2.3 Velocidades específicas de transformação

Analisando o fato que a concentração do microrganismo X aumenta durante um cultivo descontínuo, aumentando conseqüentemente a concentração do complexo enzimático responsável pela transformação do substrato S no produto P, é mais lógico analisar os valores das velocidades instantâneas com relação a referida concentração microbiana, ou seja, normalizando-as ao valor de X:

$$\mu_X \text{ ou } \mu = \frac{1}{X} \cdot \frac{dX}{dt} \quad (4)$$

$$\mu_S \text{ ou } q_S = \frac{1}{X} \cdot \left( -\frac{dS}{dt} \right) \quad (5)$$

$$\mu_P \text{ ou } q_P = \frac{1}{X} \cdot \frac{dP}{dt} \quad (6)$$

### 3.2.4 Curva de crescimento do microrganismo

A Figura 5 indica um comportamento nos valores da concentração celular, dado após a inoculação microbiana em um meio de cultura favorável ao desenvolvimento do microrganismo em estudo.

Segundo Borzani et al. (2001), são observadas as seguintes fases no crescimento:

- **Fase 1:** Conhecida como fase "lag" ou de latência, que se segue imediatamente após a inoculação do meio com o microrganismo em questão. Trata-se de um período de adaptação durante o qual a célula sintetiza as enzimas necessárias ao metabolismo dos componentes presentes no meio.
- **Fase 2:** Essa é a fase de transição em que se observa o início da reprodução microbiana propriamente dita.

- Fase 3: É denominada fase logarítmica ou exponencial onde a velocidade específica de crescimento é constante e máxima. Nessas circunstâncias, permite-se concluir que a velocidade de crescimento é diretamente proporcional à concentração  $X$ , e rearranjando a Equação 4, obtém-se:

$$\frac{dX}{dt} = X \cdot \mu \quad (7)$$

Realizando uma integração da equação dada acima, entre o início dessa fase (de coordenadas  $(t_i, X_i)$ , Figura 5) e um instante arbitrário  $t$ , compreendido entre  $t_i$  e  $t_c$  resulta em:

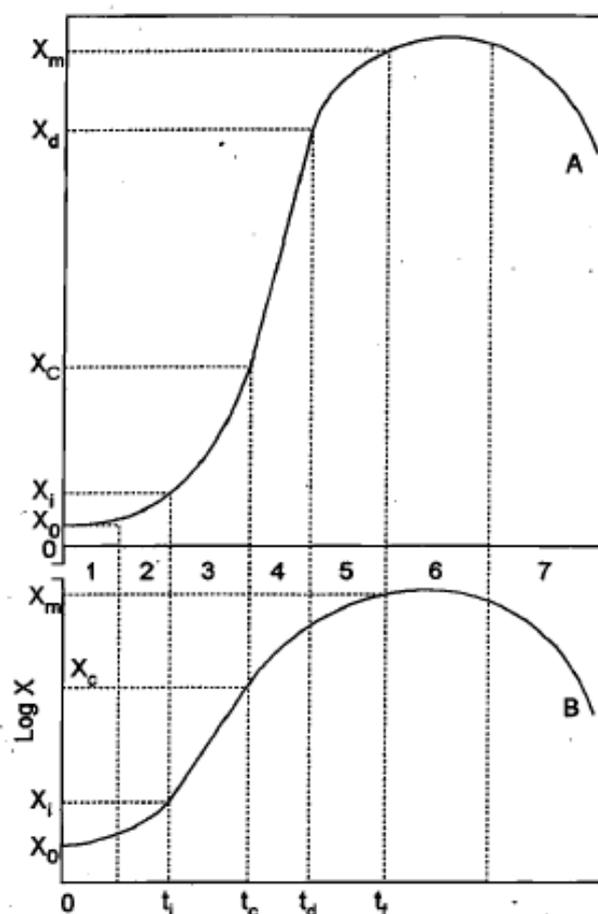
$$\ln \frac{X}{X_i} = \mu \cdot (t - t_i) \quad (8)$$

Rearranjando,

$$X = X_i \cdot e^{\mu \cdot (t - t_i)} \quad (9)$$

- Fase 4: Conhecida como fase linear de crescimento, por apresentar a velocidade de reprodução constante ( $X = X_m$ ). Essa fase pode ocorrer sem a prévia existência da fase logarítmica, como é o caso de microrganismos filamentosos, onde há limitação no transporte de nutrientes do meio para o interior da célula.
- Fase 5: Desaceleração. Devido ao esgotamento de um ou mais componentes do meio de cultura, necessários ao crescimento e, também, devido ao acúmulo de metabólitos inibidores, ambas as velocidades (de crescimento e específica) diminuem até se anularem, no tempo  $t_f$ .
- Fase 6: Estacionária. Nessa fase,  $X$  atinge o valor máximo e constante  $X_m$ , onde há um balanço entre a velocidade de crescimento e a velocidade de morte do microrganismo, ocorrendo também modificações na estrutura bioquímica da célula.
- Fase 7: Declínio ou lise. O valor da concentração celular diminui a uma velocidade que excede a velocidade de produção de células novas.

Figura 5: Curva de crescimento do microrganismo em cultivo descontínuo, representada em ordenadas lineares (A) e semilogarítmica (B).



Fonte: BORZANI et al., 2001.

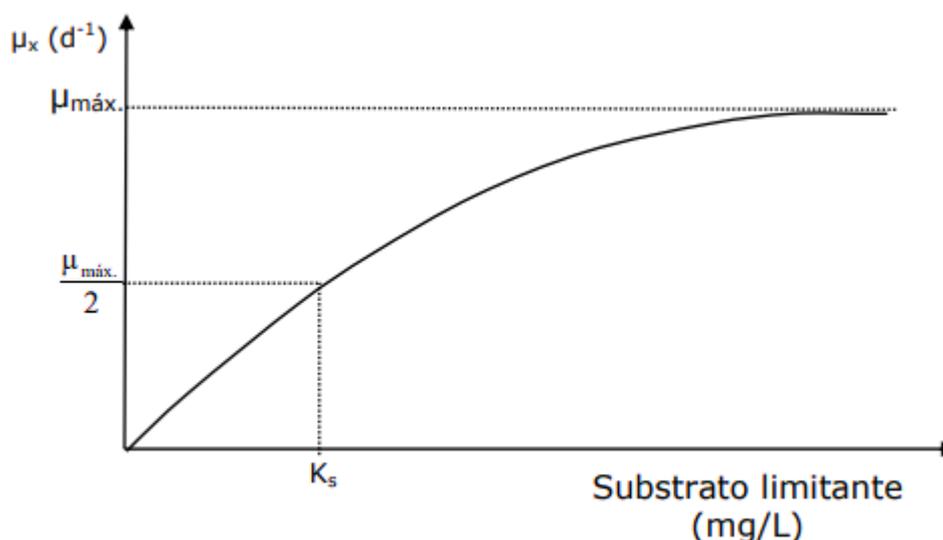
### 3.3 Modelo cinético de Monod (Modelo clássico de dependência com substrato)

Em 1942, Jacques Lucien Monod apresentou um modelo que relaciona a taxa de crescimento de microrganismos e as concentrações essenciais de compostos necessários para a reação bioquímica. Este modelo é análogo ao proposto por Henri em 1902 e Michaelis-Menten em 1913 para reações catalisadas por enzimas e ao proposto por Langmuir em 1918 para isoterma de adsorção 1, visto que essas reações bioquímicas são catalisadas por microrganismos (MONOD, 1949).

$$\mu = \mu_m \cdot \frac{S}{K_S + S} \quad (10)$$

A forma dessa relação é mostrada na Figura 6 abaixo:

Figura 6: Taxa de crescimento específico versus concentração limitante do substrato de acordo com a Relação Monod.



Fonte: DUNN et al., 2003.

Vale ressaltar que as propriedades importantes dessa relação são as seguintes:

$$S \rightarrow 0, \quad \mu \rightarrow \mu_m \cdot \frac{S}{K_S} \quad (11)$$

$$S \rightarrow \infty, \quad \mu \rightarrow \mu_m \quad (12)$$

$$S = K_S, \quad \mu \rightarrow \frac{\mu_m}{2} \quad (13)$$

É importante salientar que o valor de  $K_S$  no Modelo Monod não representa a saturação constante para captação de substrato, mas apenas uma constante de saturação geral para todo processo de crescimento. Entretanto, como a captação do substrato está frequentemente envolvida no controle de seu próprio metabolismo, o valor de  $K_S$  está frequentemente na faixa dos valores de  $K_m$  das células (NIELSEN et al., 2011).

No que se refere a essas constantes de Monod,  $\mu_m$  seria a taxa máxima de crescimento que se pode alcançar  $K_S$  quando  $S \gg K_S$  e as concentrações de todos os componentes são inalteradas. Já o  $K_S$  ele representa o valor da concentração do nutriente limitante para a qual a velocidade específica do crescimento é metade do seu valor, onde se tiver uma baixa constante de saturação implicará numa maior duração da fase exponencial. Segundo Borzani et al. (2001), valores de  $\mu_{máx}$  varia

com o tipo de microrganismo e os valores de  $K_s$  depende da natureza do substrato. No que se refere a equação de Monod na literatura da fermentação etanólica, Veloso et al. (2018) fez uma otimização da fermentação em etanol para se obter vinhos alcoólicos com altas concentrações, onde foi utilizado a *Saccharomices cerevisiae*, com 8,0 g/L inicial de inóculo, 180,0 g/L inicial de sacarose 30°C, onde obteve-se 80,2 g/L de etanol, uma taxa máxima de crescimento ( $\mu_{m\acute{a}x}$ ) de 0,177 h<sup>-1</sup> e constante de semi-saturação ( $K_s$ ) de 21,72 g/L.

### 3.4 Influência da concentração de múltiplos substratos (Modelo de Silva e Cerqueira)

Os modelos que consideram diversos fatores, em teoria, são as mais confiáveis formas para se modelar o efeito de substratos no crescimento de microalgas, especialmente quando se considera substratos limitantes simultaneamente, como por exemplo, em tratamento de águas residuais (LEE E., JALALIZADEH M., ZHANG Q., 2015). Além disso, assim como o Modelo de Andrews, outros modelos para representar a cinética do crescimento microbiano foram desenvolvidos a partir da cinética de Monod. Por exemplo, a equação de Silva e Cerqueira, que é descrita pela relação:

$$\mu = \mu_m \cdot \frac{S^m}{(K_{S,app}^m + S^m)} \quad (14)$$

onde:

$\mu_m$  representa a taxa máxima de crescimento do microrganismo;

$m$  representa a ordem do modelo; e

$K_{S,app}$  representa a constante de semi-saturação aparente, correlacionado com a constante de meia saturação de Monod, onde  $K_{S,app} = K_s^p$ , com  $p$  representando uma constante de ajuste.

Considerando múltiplos substratos, teremos que a Equação 14 assume a seguinte forma:

$$\mu = \mu_m \cdot \frac{S_1^m}{(K_{S,1}^p)^m + S_1^m} \cdot \frac{S_2^m}{(K_{S,2}^p)^m + S_2^m} \cdot \dots \cdot \frac{S_i^m}{(K_{S,app}^p)^m + S_i^m} \quad (15)$$

Silva et al. (2020) empregou esta equação no estudo das microalgas tratando efluentes agroindústrias, o mesmo utilizou-se como substratos DQO, fósforo e nitrogênio.

### 3.5 Microalga no tratamento de efluente

As microalgas vêm ganhando espaço devido a necessidade de se adotar alternativas que não impactam negativamente o meio ambiente e devido à adoção de tecnologias e processos limpos. A sua utilização é especialmente auspiciosa no que se refere ao tratamento de efluentes, na qual existem as disponibilidades de componentes necessários para seu crescimento, como por exemplo, CO<sub>2</sub> e nutrientes como fósforo e nitrogênio. Além disso, sua diversidade e características fisiológicas múltiplas, se tornam um grupo potencial rico que pode ser utilizado em vários setores industriais (GALARZA et al., 2016).

Dentre as espécies de microalgas utilizadas para a remoção de poluentes destaca-se em diversos estudos a microalga de água doce *Tetradismus obliquus*, devido sua boa adaptação, remoção de nutrientes, e produtividade de biomassa microalgal rica em lipídios/carboidratos entre outros benefícios para o tratamento de efluentes agroindustriais (KIM et al., 2015; FONTOURA et al., 2017; FERREIRA et al., 2018; BENTAHAR et al., 2019).

### 3.6 Biorreator

Biorreatores são todos os equipamentos utilizados para converter matérias-primas em produtos, utilizando-se biocatalisadores como microrganismos ou enzimas. A manutenção de condições ideais para a formação de produtos no ambiente complexo em um biorreator requer o controle e a medição de pelo menos alguns parâmetros, como temperatura, pH, substrato, sais nutricionais, vitaminas e oxigênio (para microrganismos aeróbios), possibilitando que as células cresçam e produzam os metabólitos (SHULER; KARGI, 2001).

Segundo Borzani et al. (2001), diante de várias classificações encontradas nos livros-textos que abordam tema biorreatores, uma das mais abrangentes é a de Kleinstreuer (1987), que apresenta uma classificação mista, com base no tipo de biocatalisador empregado (enzima, microrganismo aeróbico ou anaeróbico) e na

configuração deste (livre, imobilizado ou confinado entre membranas), conforme esquematizado a seguir:

## **(I) Reatores em fase aquosa (fermentação submersa)**

### **(I.1) Células/enzimas livres**

- Reatores agitados mecanicamente (STR: "Stirred Tank Reactor");
- Reatores agitados pneumaticamente;
  - Coluna de bolhas ("bubble column");
  - Reatores "air-lift";
- Reatores de fluxo pistonado ("plug-flow").

### **(I.2) Células/enzimas imobilizadas em suportes**

- Reatores com leito fixo;
- Reatores com leito fluidizado;
- Outras concepções.

### **(I.3) Células/enzimas confinadas entre membranas**

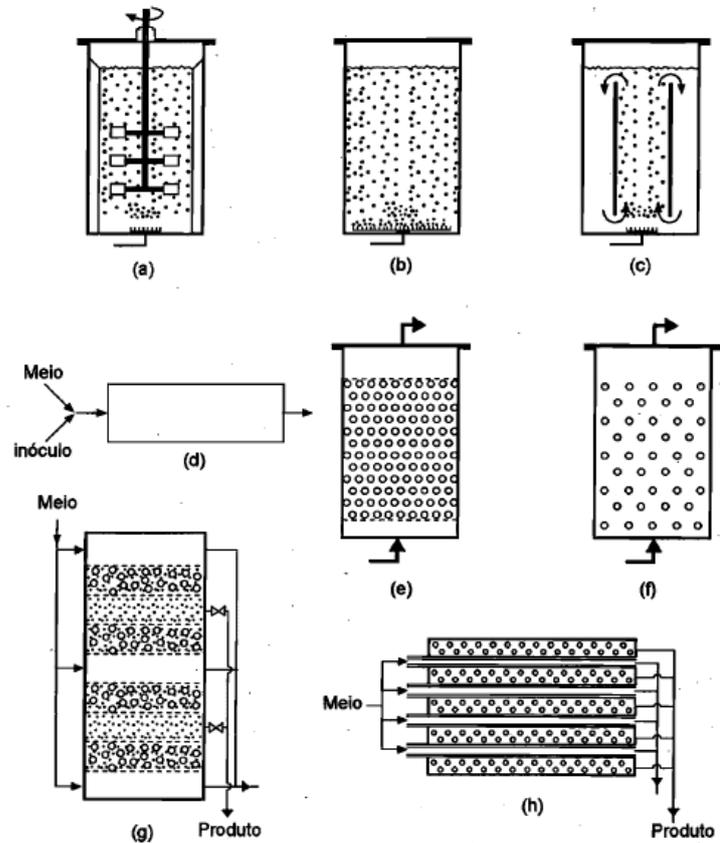
- Reatores com membranas planas;
- Reatores de fibra oca ("hollow-fiber").

## **(II) Reatores em fase não-aquosa (fermentação semi-sólida)**

- Reatores estáticos (reatores com bandejas);
- Reatores com agitação (tambor rotativo);
- Reatores com leito fixo;
- Reatores com leito fluidizado gás-sólido.

Analisando a partir da classificação proposta, ainda de acordo com Borzani et al. (2001), a configuração para os biorreatores mais amplamente empregados são os reatores agitados mecanicamente (STR), conhecidos também como reatores de mistura, constituindo cerca de 90% do total de reatores utilizados industrialmente. A Figura 7 mostra alguns tipos de biorreatores existentes.

Figura 7: Tipos de Biorreatores. (a) STR; (b) Coluna de bolhas; (c) "air-lift"; (d) "plug-flow"; (e) Com células imobilizadas (leito fixo); (f) Com células imobilizadas (leito fluidizado); (g) Reator com membranas planas; (h) "hollow-fiber".



Fonte: BORZANI et al., 2001.

Ainda assim, pode-se dizer que, de uma forma geral, um reator biológico pode ser operado das seguintes formas (condução do processo), com ou sem reciclo de células:

- I. **Descontínuo**
- II. **Semi-contínuo**
- III. **Descontínuo alimentado**
- IV. **Contínuo**

- Executado em um reator (com ou sem recirculação de células);
- Executado em vários reatores (com ou sem recirculação de células).

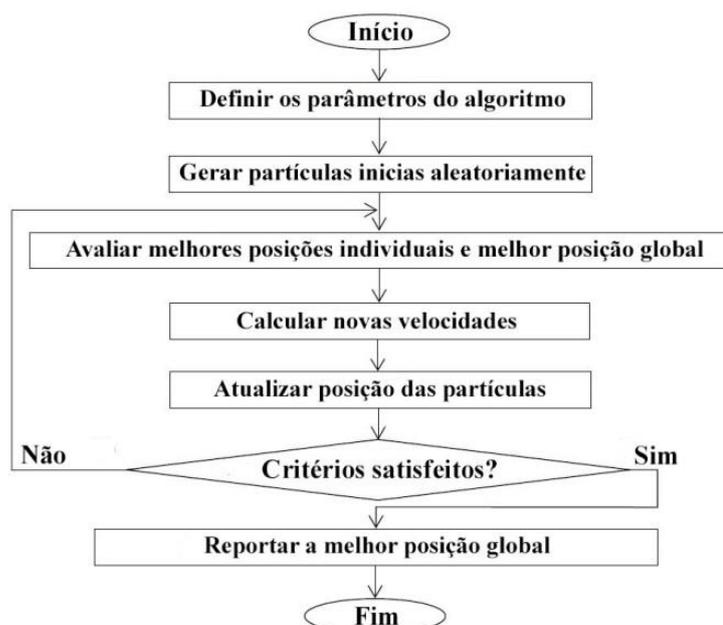
### 3.6 Técnica de otimização por Enxame de Partículas (PSO)

O método de Enxame de Partículas (PSO - *Particle Swarm Optimization*) é um método de inteligência por enxames, baseado no comportamento de uma população de indivíduos onde na qual corresponde a técnicas de busca inspiradas pelo comportamento da natureza. É uma otimização que consiste em um método de busca populacional estocástica baseado no comportamento de bando de pássaros, onde procura reproduzir o deslocamento do bando (KENNEDY e EBERHART, 1995). Cada partícula representa uma determinada solução, em que busca no espaço de projeto uma região mais auspiciosa, atualizando sua velocidade de forma dinâmica de acordo consigo mesma e com o comportamento de seu grupo (SILVA, 2019).

O PSO tem como objetivo encontrar o ponto de ótimo global de uma função objetivo, com isso, são geradas de forma aleatória um conjunto de possíveis soluções para o problema de otimização (chamados de partículas). Essas partículas irão se mover simultaneamente pelo espaço de buscas em direção a áreas que retornem melhores valores para a função objetivo, de forma a convergir para um ponto de ótimo global (MORAES, 2011).

De forma geral, o mecanismo do PSO pode ser resumido pela Figura 8.

Figura 8: Fluxograma da Otimização por Enxame de Partículas.



Fonte: Adaptado de BOZORG-HADDAD et al., 2017.

Vale ressaltar que o PSO possui alguns parâmetros que influenciam no resultado da otimização, como o fator de inércia ( $w$ ), o coeficiente cognitivo ( $c_1$ ), o coeficiente social ( $c_2$ ) e o número de partículas do enxame (salienta-se que não existe uma configuração ótima geral para estes parâmetros, sendo relativo ao problema abordado).

- **Fator de Inércia ( $w$ ):** Está associado à velocidade da partícula e controla o efeito da velocidade atual na nova velocidade da partícula. Segundo Shi e Eberhart (1999), um grande valor para este fator facilita a exploração global do espaço de busca, enquanto um valor pequeno facilita a exploração local.
- **Coeficiente Cognitivo ( $c_1$ ) e o Coeficiente Social ( $c_2$ ):** Controlam a influência da melhor posição individual e melhor posição global na movimentação da partícula, respectivamente.
- **Número de partículas:** Representa o tamanho do enxame e está associado à eficiência do algoritmo. Grandes quantidades de partículas resultam em uma maior cobertura do espaço de buscas, reduzindo assim, o número de iterações que são necessárias para a convergência.

### 3.7 Linguagem de programação Python

O Python é uma linguagem de programação interpretada e de alto nível (possui sintaxe mais próxima às notações matemáticas e à linguagem humana, ao passo que linguagens de baixo nível são mais próximas à linguagem de máquina) na qual foi criada por Guido van Rossum em 1990. É interessante seu leque de possibilidades sendo uma das principais linguagens utilizadas hoje em dia para computação científica e cálculos de engenharia química, principalmente devido ser de código aberto e gratuito.

O Python pode ser baixado de várias fontes diferentes, onde são chamadas de distribuições, como exemplo, a distribuição Anaconda IDE que é *open source* (ou código aberto) da linguagem Python e é bastante vantajosa, pois possui no seu repositório uma vasta gama de pacotes, módulos e bibliotecas importantes para os

projetos (ANACONDA, 2021). A Tabela 3 lista algumas das principais bibliotecas que são utilizadas.

Tabela 3: Principais bibliotecas da linguagem Python que são utilizadas na solução de diversos problemas pertinentes.

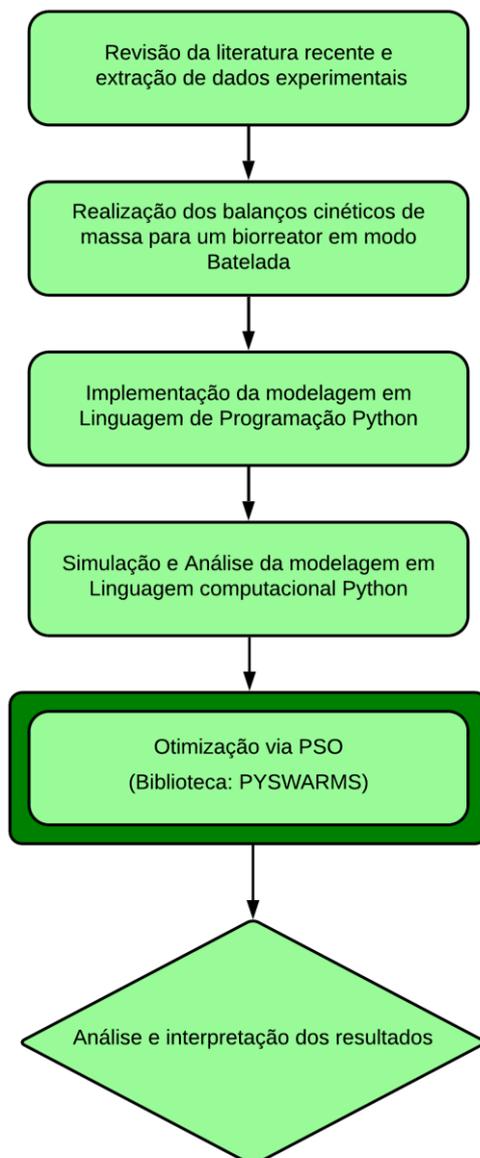
<b>Biblioteca</b>	<b>Descrição</b>
Astropy	Coleção de pacotes para Astronomia
Biopython	Coleção de pacotes para biologia e bioinformática
Matplotlib	Construção de gráficos 2D, 3D e outros.
NumPy	Cálculos com vetores, matrizes e suas operações
Pandas	Manipulação de dados
Pyomo	Implementação de modelos matemáticos para otimização
Pyswarms	Implementação da Otimização por Enxame de Partículas
Sympy	Resolução simbólica de expressões

Fonte: StxNEXT. Disponível em: <https://stxnext.com/blog/2018/09/20/most-popular-python-scientific-libraries/>. Acesso em: 02 de dezembro de 2021.

## 4 METODOLOGIA

A metodologia empregada para o desenvolvimento e obtenção dos resultados do presente trabalho seguiu-se com as seguintes etapas apresentadas em forma de fluxograma na Figura 9.

Figura 9: Fluxograma geral das etapas desenvolvidas no trabalho.



Fonte: Autor, 2021.

### 4.1 Extração dos dados experimentais

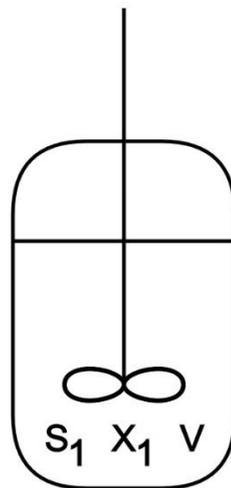
Para realização deste trabalho, foram utilizados dados extraídos do artigo de Silva et al. (2020), na qual realizou-se o estudo do modelo cinético para avaliar o

tratamento de efluentes agroindústrias por microalgas, onde o mesmo utilizou-se como substratos DQO, fósforo e nitrogênio.

#### 4.2 Modelagem fenomenológica do biorreator

Para se realizar uma simulação de algum processo inerente, é necessário um modelo matemático que possa reproduzir o seu comportamento o mais próximo possível das diversas condições operacionais. A modelagem fenomenológica do processo se baseia na suposição em que o fermentador se comporta como reator de mistura perfeita. Um fermentador em batelada é mostrado esquematicamente na Figura 10.

Figura 10: Fermentador em Batelada.



Fonte: Autor, 2021.

Partindo de um inóculo ( $X$  em  $t = 0$ ) e uma quantidade inicial de limitação substrato ( $S$  em  $t = 0$ ), a biomassa crescerá, talvez após uma curta fase de atraso, e consumir substrato. À medida que o substrato se esgota, a taxa de crescimento aumenta, diminui e tornar-se zero quando o substrato estiver completamente vazio. Vale ressaltar que a modelagem cinética de  $n$ -ésima ordem foi realizada.

- Balanço geral

$$\{\text{ENTRA}\} - \{\text{SAI}\} + \{\text{GERAÇÃO}\} = \{\text{ACÚMULO}\}$$

Balanço de massa total:

$$\frac{d(V \cdot \rho)}{dt} = 0 \quad (16)$$

Balanço de substrato:

- **Fósforo**

$$\frac{dS_{fósforo}}{dt} = k_{fósforo} \cdot S_{fósforo}^{n_{fósforo}} \quad (17)$$

- **Nitrogênio**

$$\frac{dS_{nitrogênio}}{dt} = k_{nitrogênio} \cdot S_{nitrogênio}^{n_{nitrogênio}} \quad (18)$$

- **DQO**

$$\frac{dS_{DQO}}{dt} = k_{DQO} \cdot S_{DQO}^{n_{DQO}} \quad (19)$$

Onde a taxa de crescimento celular pode ser obtida assumindo, por exemplo:

i. Usando a taxa de crescimento específica baseado no Modelo de Monod:

Balanço de biomassa:

- **Fósforo**

$$\frac{dX}{dt} = \mu_m \cdot X \cdot \frac{S_{fósforo}}{K_{S,fósforo} + S_{fósforo}} \quad (20)$$

- **Nitrogênio**

$$\frac{dX}{dt} = \mu_m \cdot X \cdot \frac{S_{nitrogênio}}{K_{S,nitrogênio} + S_{nitrogênio}} \quad (21)$$

- **DQO**

$$\frac{dX}{dt} = \mu_m \cdot X \cdot \frac{S_{DQO}}{K_{S,DQO} + S_{DQO}} \quad (22)$$

ii. Taxa de crescimento específica baseado no Modelo de Silva e Cerqueira:  
Balanço de biomassa para:

- **Múltiplos substratos**

$$\frac{dX}{dt} = \mu_m \cdot X \cdot \frac{S_{fósforo}^m}{(K_{S_{fósforo,app}}^m + S_{fósforo}^m)} \cdot \frac{S_{nitrogênio}^m}{(K_{S_{nitrogênio,app}}^m + S_{nitrogênio}^m)} \cdot \frac{S_{DQO}^m}{(K_{S_{DQO,app}}^m + S_{DQO}^m)} \quad (23)$$

#### 4.3 Estimação de parâmetros e otimização

Os parâmetros do modelo foram estimados minimizando a soma dos erros quadrados calculados entre o medido e o modelo previsão de substrato e biomassa. Definido assim a função objetivo (FO), como:

$$FO = \sum (y_{exp} - y_{mod})^2 \quad (24)$$

onde  $y_{exp}$  representa os dados experimentais e  $y_{mod}$  representa os dados obtidos pela simulação do modelo.

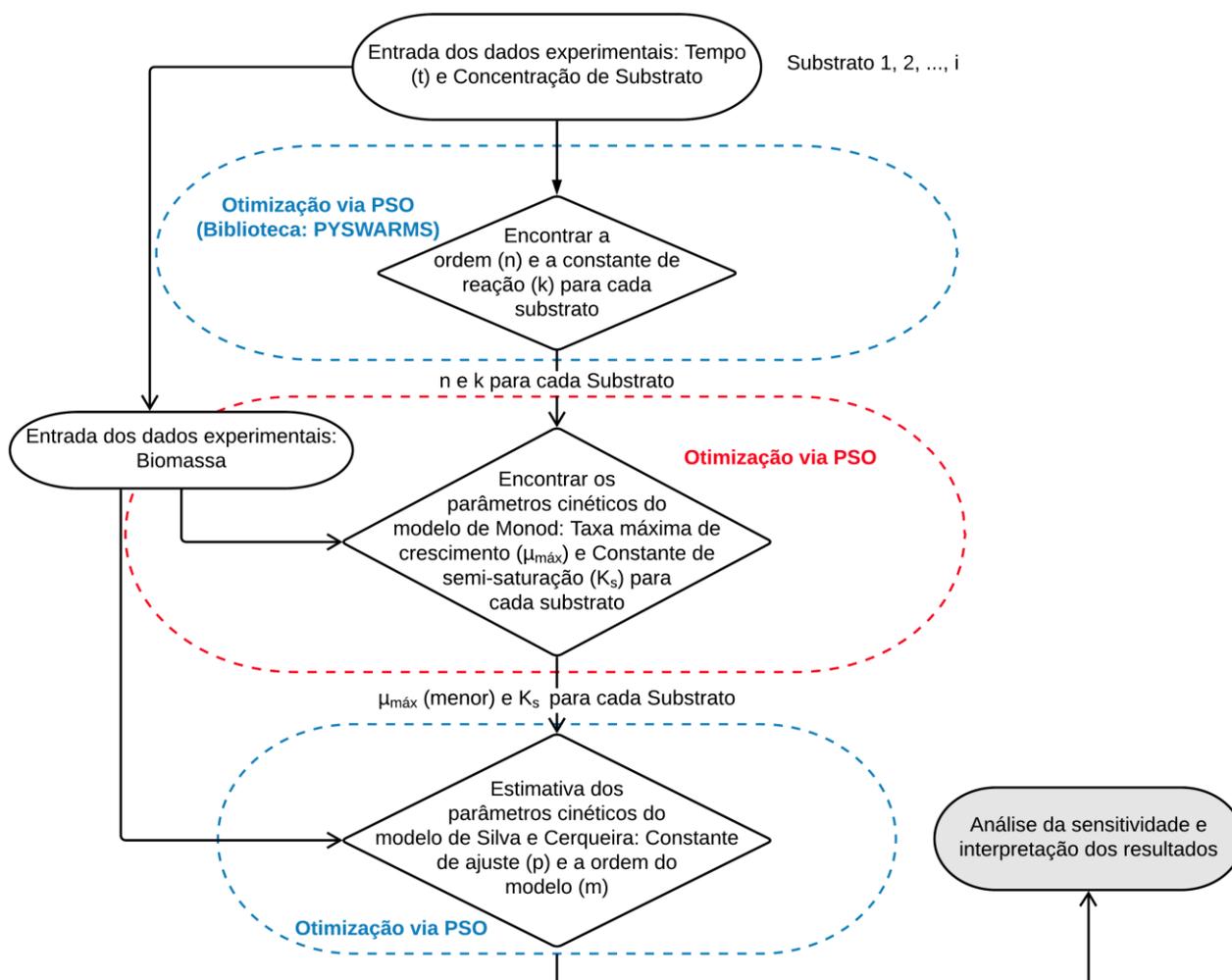
#### 4.4 Recursos computacionais para solução do problema proposto em linguagem Python

O algoritmo PSO foi implementado no software Spyder, que é um ambiente de desenvolvimento integrado (IDE, *Integrated Development Environment*) de código aberto para programação em Python. Além disso, foi utilizado o kit de ferramentas de pesquisa (ou biblioteca) PYSWARMS para a otimização.

#### 4.5 Metodologia para estimar as constantes cinéticas do processo

A metodologia aplicada para a obtenção dos parâmetros cinéticos de Monod e de Silva e Cerqueira do presente trabalho seguiu-se com as seguintes etapas apresentadas em forma de fluxograma na Figura 11.

Figura 11: Metodologia aplicada para estimar as constantes cinéticas do processo.



Fonte: Autor, 2022.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A seguir, serão apresentados os resultados numéricos obtidos neste trabalho, bem como discussões referentes aos modelos cinéticos em questão. Para tal, utilizou-se a sequência apresentada na Figura 11 e vale ressaltar que este trabalho tem como finalidade encontrar um intervalo de ajuste que encontre validade física e que possa ser reproduzível em sistemas de tratamento de efluentes por microalgas, sobretudo, ao considerar os parâmetros DQO, nitrogênio e fósforo, contaminantes que servem como macronutrientes para o crescimento microalgal (WANG et al., 2014; CHO et al., 2013; GONZÁLEZ-FERNÁNDEZ et al., 2016, TERCERO et al., 2014) utilizando a linguagem Python e a otimização via PSO.

### 5.1 Estimativa dos parâmetros para consumo de substrato

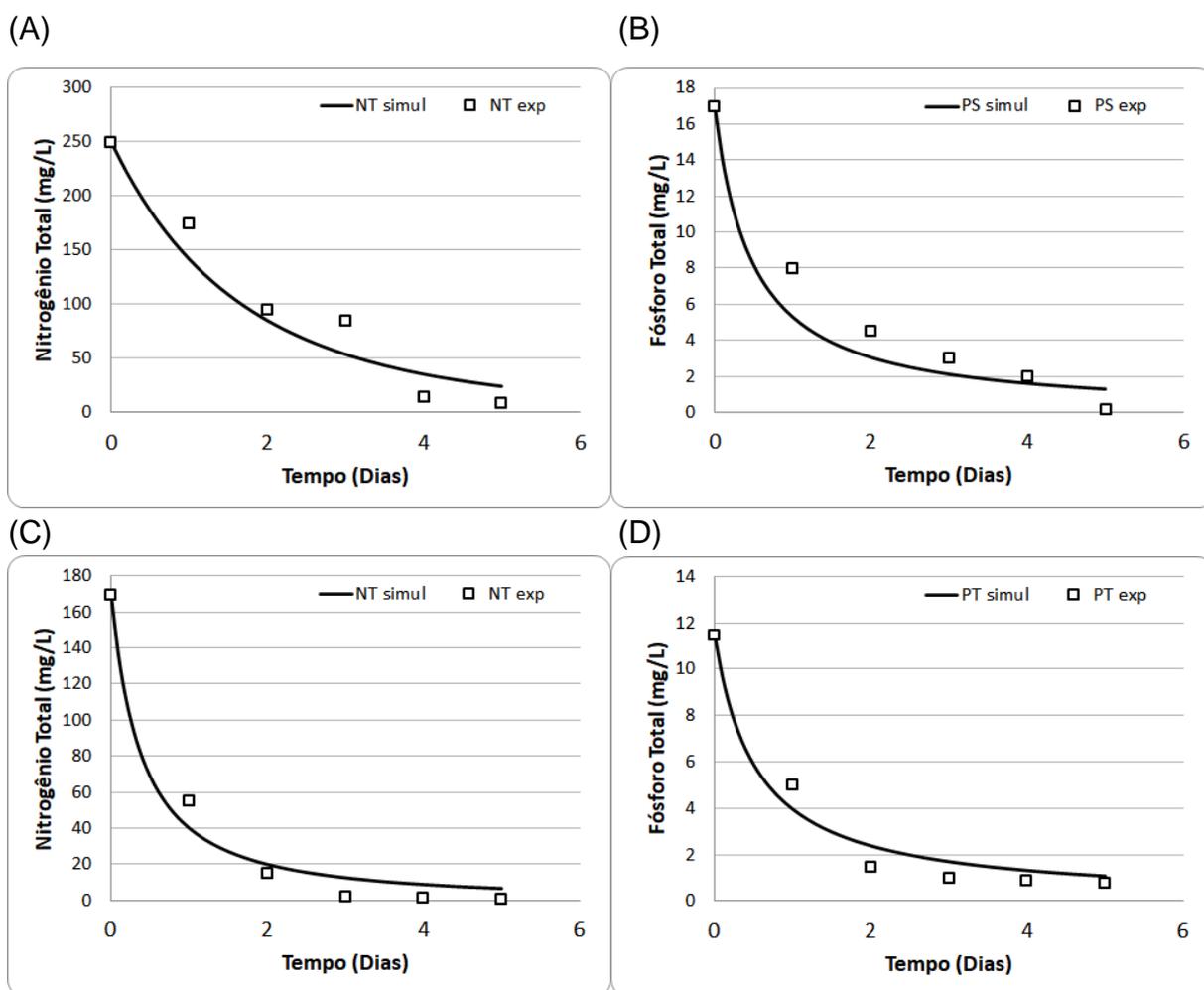
A estimativa de cinética de consumo de contaminantes é algo que ainda se tenta na literatura, devido, principalmente, às tipologias de efluentes, a diversidade biológica das microalgas, os tipos de sistemas e capacidade mixotrófica (isto é, de realizar autotrofia e heterotrofia) que influenciam, de maneira expressiva, na escolha do modelo. Wang et al. (2014) utilizou o modelo de primeira ordem, que é mais fácil de ser aplicado, mas um modelo associado ao modelo logístico Verhulst (RUIZ et al., 2012; RUIZ et al., 2013; MENNAA et al., 2015) e com fatores multiplicativos para temperatura, nitrogênio e fósforo (HAARIO et al., 2009) foram também tentados. Silva et al. (2020) aplicou os modelos de primeira e segunda ordem em três conjuntos de dados experimentais e eles não mostraram resultados satisfatórios e posteriormente, ao aplicar um modelo de ordem  $n$ , percebeu que a ordem de remoção dos contaminantes era intermediária entre primeira e segunda ordem, e por essa razão, neste trabalho, a implementação em linguagem Python foi realizada com um modelo de ordem  $n$  que pode ser aplicado para quaisquer efluentes.

Uma característica do processo de otimização por PSO (*Particle Swarm Optimization*) é a possibilidade de se fazer um truncamento do intervalo no qual as constantes podem se encontrar facilitando encontrá-las com valores fisicamente plausíveis. Uma das características principais desse trabalho é justamente delimitar esses intervalos de forma a facilitar a aplicação do Modelo de Silva e Cerqueira para

tratamento de efluentes por microalgas, mostrando sua validade física para o processo.

Inicialmente utilizou-se um conjunto de dados experimentais que foram coletados do trabalho de Cho et al. (2013) na qual estudou o tratamento de efluente de digestão anaeróbica (CAD) e efluente de digestão anaeróbica do tanque de sedimentação primário (PS) com respeito a dois contaminantes, nitrogênio e fósforo total por *Chlorella vulgaris*. Na Figura 12, é possível perceber o gráfico da modelagem da simulação da remoção dos contaminantes de CAD (A e B) e PS (C e D) onde o modelo foi ordem n na qual foi implementado em linguagem Python e obteve-se bons ajustes.

Figura 12: Modelagem da remoção dos contaminantes de CAD (A e B) e PS (C e D) por microalgas. NT - Nitrogênio Total e PS - Fósforo Total



Fonte: Autor, 2022.

As constantes cinéticas encontradas estão apresentadas na Tabela 4. Como encontrado por Silva et al. (2020) a ordem intermediária entre primeira e segunda foram as mais adequadas para descrever a remoção desses contaminantes dos efluentes. Além disso, Wang et al. (2014) encontrou valores entre 0,05 - 0,16 dia<sup>-1</sup> para k para a remoção de nitrogênio total a partir de efluente, sendo próximos aos encontrados neste trabalho. O erro preditivo do modelo variou entre 15 - 30%, mas Silva et al. (2020) já havia encontrado valores similares e menciona que isso é inerente à complexidade do processo biológico e quantidade de contaminantes.

Tabela 4: Constantes cinéticas associadas ao modelo de ordem n para o consumo de substrato dos dados de Cho et al. (2013).

<b>Efluente</b>	<b>CAD</b>		<b>PS</b>	
Contaminante	Constantes Cinéticas do Modelo de Ordem n			
	n	k	n	k
NT	1,19	0,19	1,73	0,06
MPE (%)	15,69		24,50	
PT	1,93	0,15	2,0	0,165
MPE (%)	22,59		27,51	

Fonte: Autor, 2022.

Foi possível perceber uma maior facilidade na convergência do modelo quando as seguintes relações foram utilizadas:

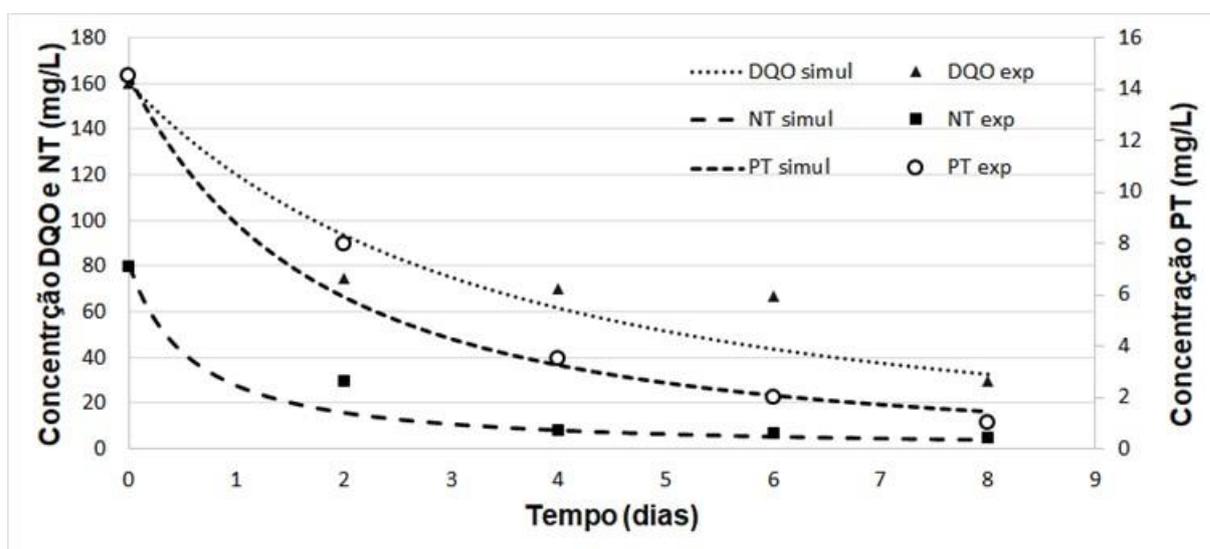
$$0 < k < 0,2 \quad , \text{ com intervalos de truncamento de } 0,05$$

$$1 < n < 2 \quad , \text{ com intervalos de truncamento de } 0,3$$

Isso significa que dentro do intervalo verificado, se fixa subintervalos de 0,05 e 0,3 para k e n, respectivamente até a convergência ser otimizada.

De forma a validar essa observação fez-se o mesmo procedimento com os dados experimentais de González-Fernández et al. (2016) que aplicaram um mix de microalgas (*Chlorella vulgaris*, *Scenedesmus obliquus* e *Chlamydomonas reinhardtii*) para tratamento de efluente urbano. Os resultados podem ser observados na Figura 13.

Figura 13: Modelagem da remoção dos contaminantes de efluente urbano. DQO - Demanda Química de Oxigênio, NT - Nitrogênio Total e PS - Fósforo Total.



Fonte: Autor, 2022.

Como resultado, é possível perceber que as observações acima mencionadas em relação a  $k$  e  $n$  puderam também serem comprovadas nesse conjunto de dados enfatizando a aplicabilidade do algoritmo desenvolvido. Na Tabela 5 estão apresentadas as constantes cinéticas associadas.

Tabela 5: Constantes cinéticas associadas ao modelo de ordem  $n$  para o consumo de substrato dos dados de González-Fernández et al. (2016).

Efluente	CAD	
	Constantes Cinéticas do Modelo de Ordem $n$	
Contaminante	$n$	$k$
DQO	1,52	0,022
MPE (%)		18,94
NT	1,81	0,049
MPE (%)		27,26
PT	1,56	0,13
MPE (%)		15,72

Fonte: Autor, 2022.

## 5.2 Estimativa das constantes do Modelo de Monod

Como demonstrado por vários autores durante o tratamento de efluentes por microalgas, é possível correlacionar um substrato limitante ao crescimento (SILVA et al., 2020; RUIZ et al., 2013; WANG et al., 2014; TERCERO et al., 2014; LEE et al., 2015). De acordo com o algoritmo deste trabalho, como o Modelo de Silva e Cerqueira traz todas as contribuições dos substratos limitantes para modelar o crescimento microalgal, e é um modelo derivado do de Monod, seria muito robusta a convergência se todas as constantes fossem encontradas de uma vez, e talvez não fosse possível. Por essa razão, o algoritmo desenvolvido encontra um  $\mu_{m\acute{a}x}$  e  $K_s$  para cada substrato limitante, o que ajuda grandemente na implementação do Modelo de Silva e Cerqueira, mas em etapa subsequente, serão encontradas apenas as constantes  $m$  e  $p$  associadas diretamente ao modelo.

Foi verificado que é possível modelar uma curva seguindo a cinética de Monod para cada substrato limitante e os resultados para  $\mu_{m\acute{a}x}$  e  $K_s$  podem ser visualizados nas Tabelas 6 e 7. Verificam-se que os erros preditivos do modelo se situam entre 4 - 25% e estão dentro do esperado como visto por Silva et al. (2020).

Em relação as constantes cinéticas, são encontrados na literatura  $\mu_{m\acute{a}x}$  entre 0,1 - 0,35 dia<sup>-1</sup> para microalgas (HAARIO et al., 2009; HODAIFA et al., 2012; RUIZ et al., 2013; TERCERO et al., 2014; LEE et al., 2015; MENNAA et al., 2015; SILVA et al., 2016; MASSA et al., 2017; SILVA et al., 2017), e todos os valores encontrados para os diversos contaminantes nos dois conjuntos de dados se situam entre eles, com exceção para fósforo total de 5,62 dia<sup>-1</sup>. Por outro lado, para  $K_s$ , Lee et al. (2015) em sua compilação de dados da literatura sobre essa constante em cultivo de microalgas mencionam que ela pode variar de  $\mu\text{gL}^{-1}$  a  $\text{gL}^{-1}$ . No entanto, para o tratamento de efluentes por essa classe microbiana, ele é geralmente dado em  $\text{mgL}^{-1}$ .

Wang et al. (2014) encontrou valores de  $K_s$ , PT entre 3,01 - 4,20  $\text{mgL}^{-1}$  de PT (*Chlorella* e *Microctinium*). Tercero et al. (2014) e Sforza et al. (2014) encontraram valores de  $K_s$ , NT e PT de 23,4 e 28,2 mg N ou P/L, respectivamente, tratando efluente urbano. Haario et al. (2009) encontraram  $K_s$ , NT de 7,9 mg/L. Esses valores encontrados estão próximos aos verificados pelo algoritmo desenvolvido, favorecendo que constantes com real significado físico sejam encontrados durante o processo de convergência. É importante mencionar que os contaminantes, nitrogênio e fósforo são

altamente assimiláveis pelas microalgas e por esse sentido podem ser cultivadas em valores relativamente altos desses contaminantes como 500 mgL<sup>-1</sup> de NT e 200 mgL<sup>-1</sup> de PT (SILVA; SFORZA, 2016). No entanto, para DQO, devido a concentração de carbono orgânico, valores maiores que 5000 mgL<sup>-1</sup> não são recomendados por poder exibir toxicidade ao cultivo (SILVA et al., 2019).

Com os resultados obtidos pôde-se inferir para o tratamento de efluentes (agro-urbano) industriais:

$$0 < \mu_{m\acute{a}x} < 4 \text{ dia}^{-1} \quad , \text{ com intervalo de truncamento de } 0,5$$

$$0 < K_s < 50 \text{ mg L}^{-1} \quad , \text{ com intervalo de truncamento de } 5$$

Tabela 6: Constantes cinéticas associadas ao Modelo de Monod para os dados de Cho et al. (2013).

<b>Efluente</b>	<b>CAD</b>		<b>PS</b>	
Contaminante	Constantes Cinéticas associadas ao Modelo de Monod			
	$\mu_{m\acute{a}x}$	$K_s$	$\mu_{m\acute{a}x}$	$K_s$
NT	2,16	46,38	2,44	24,5
MPE (%)		23,32		17,11
PT	5,62	7,83	3,54	5,95
MPE (%)		22,62		19,59

Fonte: Autor, 2022.

Tabela 7: Constantes cinéticas associadas ao Modelo de Monod para os dados de González-Fernández et al. (2016).

Contaminante	Constantes Cinéticas associadas ao Modelo de Monod	
	$\mu_{m\acute{a}x}$	$K_s$
DQO	0,15	16,32
MPE (%)		4,06
NT	0,51	18,28
MPE (%)		11,58
PT	0,7	12,55
MPE (%)		14,41

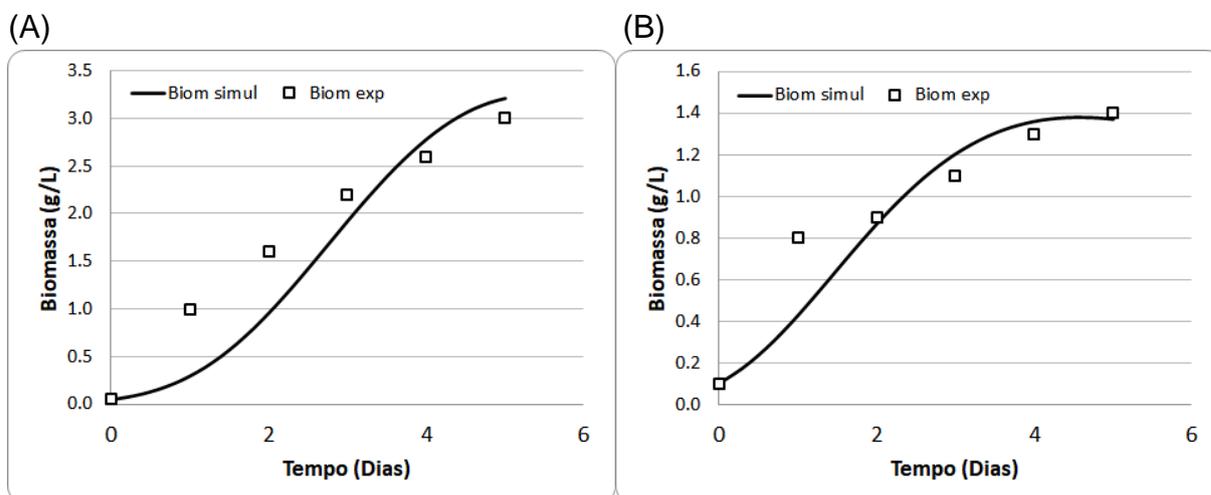
Fonte: Autor, 2022.

### 5.3 Estimativa das constantes do Modelo Silva e Cerqueira (m e p)

A constante  $m$  é da ordem exibida para o crescimento celular em respeito aos contaminantes. Enquanto que a constante de ajuste  $p$  são da ordem aparente das constantes de semi-saturação ( $K_{s,app} = K_s^p$ ) em respeito ao crescimento celular pelos contaminantes considerados. Apesar de parecerem de pouco influência, como são expoentes da equação, uma mínima variação pode alterar significativamente os resultados e/ou dificultar a convergência dos modelos. Por essa razão, fixa-se às constantes anteriormente encontradas. Um detalhe diz respeito ao  $\mu_{m\acute{a}x}$ , como cada contaminante no Modelo de Monod está relacionado a uma específica, padronizou-se incluir para o Modelo de Silva e Cerqueira a menor encontrada no conjunto de contaminantes avaliados individualmente (Seção 5.2).

Na Figura 14, percebe-se que houve bom ajuste do crescimento microalgal a partir da junção das contribuições de dois contaminantes (NT e PT - A) e de três contaminantes (DQO, NT e PT - B).

Figura 14: Modelagem da remoção dos contaminantes de efluente urbano. (A) NT - nitrogênio Total e PS - Fósforo Total e (B) DQO - Demanda química de oxigênio, NT - nitrogênio Total e PS - Fósforo Total.



Fonte: Autor, 2022.

Pelos resultados dos valores das constantes encontradas como mostra a Tabela 8, pôde-se inferir para esses parâmetros do Modelo de Silva e Cerqueira que:

$$0 < p < 0,5 \quad , \quad \text{com intervalos de truncamento de } 0,1$$

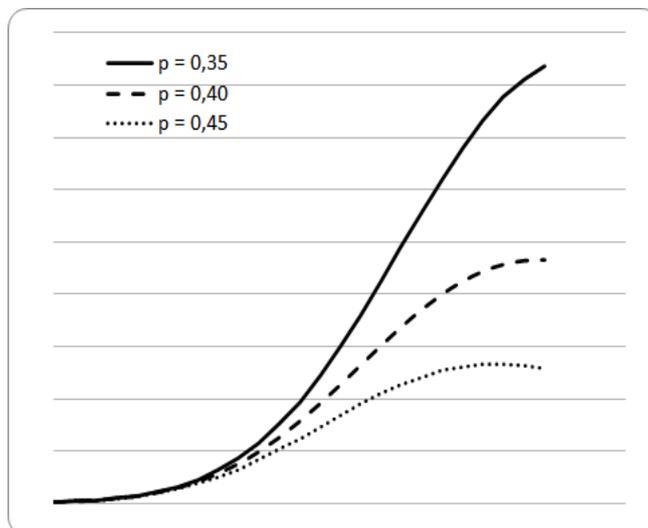
$$0 < m < 2 \quad , \quad \text{com intervalos de truncamento de } 0,5$$

Percebeu-se também pela Tabela 8 que os erros preditivos de modelo diminuíram em relação ao Modelo de Monod, mostrando que é possível associar vários contaminantes para modelar o crescimento celular de microalgas obtendo uma melhor correlação do que a obtida com o clássico Modelo de Monod.

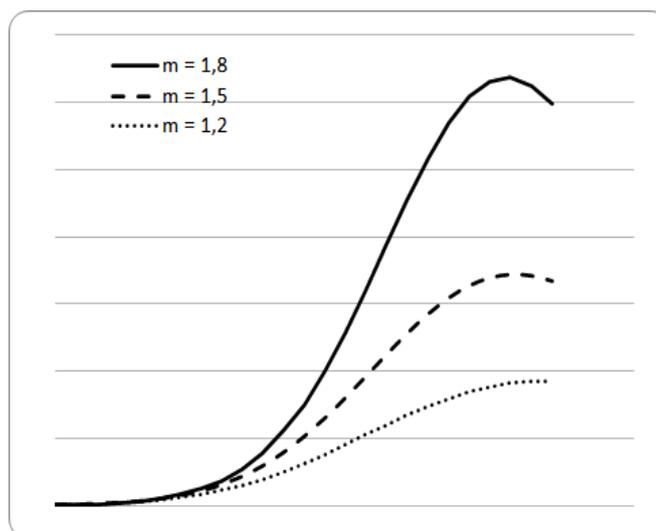
Para verificar a sensibilidade da simulação aos valores de  $p$  e  $m$ , realizou-se uma simulação simbólica com valores de constantes dentro dos intervalos obtidos. Na Figura 15 mostram os resultados da simulação.

Figura 15: Análise de sensibilidade dos parâmetros  $m$  e  $p$  na modelagem da curva. (A) variando  $p$  e (B) variando  $m$ .

(A)



(B)



Parâmetros utilizados na simulação: foram considerados dois substratos limitantes,  $k_1 = 0,1$ ,  $k_2 = 0,05$ ,  $n_1 = 1,5$ ,  $n_2 = 1,2$ ,  $S_{0,1} = 100$  mg/L,  $S_{0,2} = 30$  mg/L,  $K_{S,1} = 25$  mg/L,  $K_{S,2} = 10$  mg/L. Em A)  $m = 1,2$  e em B)  $p = 0,4$ .  $X_0 = 50$  mg/L. Fonte: Autor, 2022.

Tabela 8: Constantes cinéticas associadas ao Modelo de Silva e Cerqueira.

Efluente	Constantes Cinéticas associadas ao Modelo de Silva e Cerqueira	
	$m$	$p$
CAD		
Dados de Cho et al. (2013)	1,4	0,27
MPE (%)		15,87
PS		
Dados de Cho et al. (2013)	1,01	0,43
MPE (%)		17,92
Contaminante	Constantes Cinéticas associadas ao Modelo de Silva e Cerqueira	
	$m$	$p$
Dados de González-Fernández et al. (2016)	1,81	0,03
MPE (%)		7,31

Fonte: Autor, 2022.

É possível perceber a sensibilidade do Modelo de Silva e Cerqueira para as constantes  $p$  e  $m$ , pois uma pequena variação pode gerar desvios significativos durante a modelagem cinética e o PSO fornece a opção de truncamento que delimita uma melhor região de otimização, alcançando uma melhor convergência

A constante  $p$  é inversamente proporcional a magnitude da curva, pois quanto maior for, maior será o  $K_{app}$ , reduzindo o valor de  $\mu$ . Por outro lado,  $m$  é diretamente proporcional a magnitude da curva e também influencia na curvatura de crescimento microbiano.

## 6 CONCLUSÃO

Foi possível implementar e avaliar em linguagem Python o comportamento cinético para o tratamento de efluente de digestão anaeróbica (CAD) e efluente de digestão anaeróbica do tanque de sedimentação primário (PS) e obteve-se bons ajustes. Nota-se que, a ordem da cinética intermediária entre primeira e segunda foram as mais adequadas para descrever a remoção desses contaminantes presentes nos efluentes e tais valores encontrados para a remoção de nitrogênio total a partir desse efluente, foram próximos aos encontrados em literatura, bem como o modelo também apresentou aplicabilidade no tratamento de efluente urbano por um mix de algas (*Chlorella vulgaris*, *Scenedesmus obliquus* e *Chlamydomonas reinhardtii*).

O algoritmo desenvolvido encontrou um  $\mu_{m\acute{a}x}$  e  $K_s$  para cada substrato limitante, sendo possível modelar uma curva para cada um dos substratos limitantes. Salienta-se que o algoritmo foi eficiente na determinação dos parâmetros  $k$ ,  $n$ ,  $\mu_{m\acute{a}x}$  e  $K_s$ , nas quais são importantes para a aplicação do Modelo de Silva e Cerqueira.

De maneira geral, houve bom ajuste do crescimento microalgal a partir da junção das contribuições de dois contaminantes (NT e PT) e de três contaminantes (DQO, NT e PT), observando que os erros preditivos de Modelo Silva e Cerqueira diminuíram em relação ao Modelo de Monod, mostrando que é possível associar vários contaminantes para modelar o crescimento celular de microalgas. Além disso, o Modelo de Silva e Cerqueira apresentou uma sensibilidade para as constantes  $p$  e  $m$ , pois ao realizar uma pequena variação é capaz de gerar desvios significativos durante a modelagem cinética e o PSO forneceu a opção de truncamento que delimita uma melhor região de otimização, alcançando uma melhor convergência.

Por fim, diante dos resultados obtidos, constatou-se que o procedimento adotado para a modelagem e simulação foi adequado e um algoritmo para estimar as constantes cinéticas do processo foi gerado.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALQAHTANI, R. T., Modelling of Biological Wastewater Treatment. School of Mathematics and Applied Statistic. University of Wollongong, 2013.
- ANACONDA. Disponível em: <https://www.anaconda.com/products/individual>. Acesso em: 02 de dezembro de 2021.
- BAILEY, J. E. and OLLIS D.F., Biochemical Engineering Fundamentals, 2nd edition. McGraw-Hill, New York, 1986.
- BENTAHAR, J.; DOYEN, A.; BEAULIEU, L.; DESCHÊNES, J. Acid whey permeate: An alternative growth medium for microalgae *Tetrademus obliquus* and production of  $\beta$ -galactosidase. *Algal Research*, Volume 41, 101559, 2019.
- BORZANI, W.; SCHMIDELL NETTO, W.; LIMA, U. A.; AQUARONE, E. *Biotecnologia Industrial: Engenharia Bioquímica*, v.2 [S.l: s.n.], 2001.
- BOZORG-HADDAD, O; SALGI, M.; LOÁICIGA, H. A. *Meta-heuristic and Evolutionary Algorithms for Engineering Optimization*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2017.
- CARVALHO, J. C. M.; SATO, S. Fermentação Descontínua Alimentada. In: Schmidell, Willibaldo *et al.* (coord). *Biotecnologia Industrial: Engenharia Bioquímica*. São Paulo: Edgar Blucher, p. 205-2018. (*Biotecnologia Industrial*; v. 2), 2001b.
- CHANG, R. *Química*. 5 ed. Lisboa: McGraw-Hill 1994.
- CATELAN, T. C.; PINOTTI, L. M.; SOARES, V. B. Use of Non-linear Empirical Models to Predict the Substrate Degradation, Enzymatic Activity and Cell Growth in a Bioreactor with *Aspergillus niger* and Sugarcane Bagasse. *Waste and Biomass Valorization*. DOI:10.1007/s12649-020-01337-2, 2021.
- CHO, S., LEE, N., PARK, S., YU, J., LUONG, T. T., OH, Y.-K., LEE, T. Microalgae cultivation for bioenergy production using wastewaters from a municipal WWTP as nutritional sources. *Bioresource Technology*, v. 131, p.515-520, 2013. doi:10.1016/j.biortech.2012.12.176.

CLAPP, K. P. *et al.* Biopharmaceutical Processing: Development, Design, and Implementation of Manufacturing Processes. Elsevier Science, 1st. editon, p.457-476, ISBN: 978-0-08-100623-8, 2018.

DORAN, P. M. *Bioprocess Engineering Principles*. London: Academic Press, 1995.

DUNN I. J., HEINZLE E., INGHAM J., PRENOSIL J.E., "Biological reaction engineering", Wiley-VCH Verlag, 2nd edition, 2003.

EBERHART, R.; KENNEDY, J. Particle Swarm Optimization. International Conference of Neural Network. Perth, Australia. 1995.

FONTOURA, J. T.; ROLIM, G. S.; FARENZENA, M.; GUTTERRES, M. Influence of light intensity and tannery wastewater concentration on biomass production and nutrient removal by microalgae *Scenedesmus* sp. *Process Safety and Environmental Protection*, Volume 111, Pages 355-362, 2017.

GADEN, E. L. Jr. Fermentation kinetics and productivity. *Chemistry and Industry*, February 12, 1955.

GALARZA, J. I.; DELGADO, N.; HENRÍQUEZ, V. Cisgenesis and intragenesis in microalgae: promising advancements towards sustainable metabolites production. *Applied Microbiology and Biotechnology*, v.100, p. 10225–10235, 2016.

GONZÁLEZ-FERNÁNDEZ, C., MAHDY, A., BALLESTEROS, I., BALLESTEROS, M. Impact of temperature and photoperiod on anaerobic biodegradability of microalgae grown in urban wastewater. *International Biodeterioration & Biodegradation*, v.106, p.16–23, 2016. doi:10.1016/j.ibiod.2015.09.016.

HAARIO, H., KALACHEV, L., LAINE, M. Reduced Models of Algae Growth. *Bulletin of Mathematical Biology*, v.71(7), p.1626–1648, 2009. doi:10.1007/s11538-009-9417-7.

HODAIFA G., MARTINEZ, M.E., ORPEZ, R., SANCHEZ, S. Inhibitory effects of industrial olive-oil mill wastewater on biomass production of *Scenedesmus obliquus*. *Ecological Engineering*. v.42, p.30–34, 2012.

KIM, G.; YUN, Y.; SHIN, H.; KIM, H., HAN, J. Scenedesmus-based treatment of nitrogen and phosphorus from effluent of anaerobic digester and bio-oil production. *Bioresource Technology*, Volume 196, Pages 235-240, 2015.

LEANDRO, G. C., Desenvolvimento de Software acadêmico para Engenharia Química, utilizando linguagem Fortran e Python - Cálculo de Reatores. 2018. Tese de Bacharel em Engenharia Química. Universidade Tecnológica Federal do Paraná - UTFPR. 2018.

LEE, E., JALALIZADEH, M., ZHANG, Q. Growth kinetic models for microalgae cultivation: A review. *Algal Research*, v.12, p.497–512, 2015.  
doi:10.1016/j.algal.2015.10.004.

LEE, J. M. *Biochemical Engineering*. Washington State University: Prentice-Hall Inc.

MAITY, J. P.; HOU, C.; MAJUMDER, D.; BUNDSCHUH, J.; KULP, T. R.; CHEN, C.; CHUANG, L.; CHEN, C. N.; JEAN, J.; YANG, T.; CHEN, C. The production of biofuel and bioelectricity associated with wastewater treatment by green algae. *Energy*, Volume 78, Pages 94-103, 2014.

MASSA, M., BUONO, S., LANGELLOTTI, A.L., CASTALDO, L., MARTELLO, A., PADUANO, A., SACCHI, R., FOGLIANO, V. Evaluation of anaerobic digestates from different feedstocks as growth media for *Tetradesmus obliquus*, *Botryococcus braunii*, *Phaeodactylum tricornutum* and *Arthrospira maxima*. *New Biotechnol.* v.36, p.8–16, 2017.

MENNAA, F. Z., ARBIB, Z., PERALES, J. A. Urban wastewater treatment by seven species of microalgae and an algal bloom: Biomass production, N and P removal kinetics and harvestability. *Water Research*, v.83, p.42–51, 2015.  
doi:10.1016/j.watres.2015.06.007.

MONOD, J. The growth of bacterial cultures. *Ann. Review of Microbiol.* vol.3, 1949.

MORAES, A. O. S. Desenvolvimento e implementação de versões paralelas do algoritmo do exame de partículas em clusters utilizando MPI. Dissertação de Mestrado, COPPE-UFRJ, Rio de Janeiro, RJ. 2011.

NIELSEN, J. H.; VILLADSEN, J.; LIDÉN, G. *Bioreaction Engineering Principles*. 3rd edition, 2011.

NOORMAN, H. J.; WINDEN, W.; HEIJNEN, J. J.; LANS, R. G. J M. Chapter 1: Intensified Fermentation Processes and Equipment, in *Intensification of Biobased Processes*, 2018, pp. 1-41 DOI: 10.1039/9781788010320-00001.

PEREIRA, A.; PINHEIRO, A. D. T.; CARTAXO, S.; GONÇALVES, L. R. B. *et al.* AVALIAÇÃO DE UM MODELO MECANÍSTICO PARA A BUSCA DE CONDIÇÕES ÓTIMAS NA PRODUÇÃO DE ETANOL A PARTIR DO SUCO DO PEDÚNCULO DE CAJU. In: ANAIS DO CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 2016. Anais eletrônicos. Campinas, Galoá, 2016. Disponível em: <https://proceedings.science/cobeq/cobeq-2016/papers/avaliacao-de-um-modelo-mecanistico-para-a-busca-de-condicoes-otimas-na-producao-de-etanol-a-partir-do-suco-do-pedunculo->. Acesso em: 10 de novembro de 2021.

PEREIRA Jr., N.; BOM, E. P. S.; FERRARA, M. A. Séries em Biotecnologia: Tecnologia de Bioprocessos. Rio de Janeiro: Escola de Química/UFRJ, v.1, 436 p., ISBN 978-85-903967-2-7, 2008.

POCCIA, M. E.; BECCARIA, A. J.; DONDO, R. G. Modeling the microbial growth of two *Escherichia coli* strains in a multi-substrate environment. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 31(2), 347–354. DOI:10.1590/0104-6632.20140312s00002587, 2014.

RUIZ, J., ARBIB, Z., ÁLVAREZ-DÍAZ, P. D., GARRIDO-PÉREZ, C., BARRAGÁN, J., PERALES, J. A. Photobiotreatment model (PhBT): a kinetic model for microalgae biomass growth and nutrient removal in wastewater. *Environmental Technology*, v.34(8), p.979–991, 2012. doi:10.1080/09593330.2012.724451.

RUIZ, J., ÁLVAREZ-DÍAZ, P. D., ARBIB, Z., GARRIDO-PÉREZ, C., BARRAGÁN, J., PERALES, J. A. Performance of a flat panel reactor in the continuous culture of microalgae in urban wastewater: Prediction from a batch experiment. *Bioresource Technology*, v.127, p.456–463, 2013. doi:10.1016/j.biortech.2012.09.10.

SALAMA, E.; KURADE, M. B.; ABOU-SHANAB, R. A. I.; EL-DALATONY, M. M.; YANG I.; MIN, B., JEON, B. Recent progress in microalgal biomass production

coupled with wastewater treatment for biofuel generation. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 79, p.1189-1211, 2017.

SHI, Y.; EBERHART, R. C. Empirical study of particle swarm optimization. *Evolutionary Computation. CEC 99. Proceedings of the 1999 Congress on*, v. 3, p. 1–1950 Vol. 3, 1999.

SILVA, C. E. F.; CERQUEIRA, R. B.O.. NETO, C. F. L.. ANDRADE, F. P.; CARVALHO, F.O.; TONHOLO, J., Developing a kinetic model to describe wastewater treatment by microalgae based on simultaneous carbon, nitrogen and phosphorous removal. *Journal of Environmental Chemical Engineering*. Volume 8, Issue 3, 2020, 103792, ISSN 2213-3437, <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.103792>.

SILVA, C.E.F.; SFORZA, E. Carbohydrate productivity in continuous reactor under nitrogen limitation: Effect of light and residence time on nutrient uptake in *Chlorella vulgaris*. *Process Biochemistry*, Volume 51, Issue 12, Pages 2112-2118, 2016.

SILVA, C.E.F., GRIS, B., SFORZA, E., LA ROCCA, N., BERTUCCO, A. Effects of sodium bicarbonate on biomass and carbohydrate production in *Synechococcus* PCC 7002, *Chemical Engineering Transactions*. v.49, p. 241–246, 2016.

SILVA, C.E.F., SFORZA, E., BERTUCCO, A. Effects of pH and carbon source on *Synechococcus* PCC 7002 cultivation: biomass and carbohydrate production with different strategies for pH control, *Appl. Biochem. Biotechnol.* v.181, p. 682–698, 2017.

SILVA, H. V. C. Método cooperativo assistido do enxame de partículas aplicado à otimização do controle das vazões dos poços em reservatórios de petróleo. *Dissertação (Mestrado - Engenharia Civil) - Universidade Federal de Pernambuco*, 2019. Disponível em: <https://repositorio.ufpe.br/handle/123456789/33204>.

SFORZA E., TERCERO, E.A.R., GRIS, B., BETTIN, F., MILANI, A., BERTUCCO, A. Integration of *Chlorella protothecoides* production in wastewater treatment plant: from lab measurements to process design. *Algal Research*. v.6B, p.223–233, 2014. doi:10.1016/j.algal.2014.06.002.

TERCERO, E. A. R., SFORZA, E., MORANDINI, M., BERTUCCO, A. Cultivation of *Chlorella protothecoides* with Urban Wastewater in Continuous Photobioreactor: Biomass Productivity and Nutrient Removal. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, v.172(3), p.1470–1485, 2014. doi:10.1007/s12010-013-0629-9.

VELOSO, I. I. K.; RODRIGUES, K. C. S.; SONEGO, J. C. S.; CRUZ, A. J. G.; BADINO, A. C. Fed-batch ethanol fermentation at low temperature as a way to obtain highly concentrated alcoholic wines: Modeling and Optimization. *Biochemical Engineering Journal*, n. 141, p. 60-70, 2018.

WANG, M., KUO-DAHAB, W. C., DOLAN, S., PARK, C. Kinetics of nutrient removal and expression of extracellular polymeric substances of the microalgae, *Chlorella* sp. and *Micractinium* sp., in wastewater treatment. *Bioresource Technology*, v.154, p.131–137, 2014. doi:10.1016/j.biortech.2013.12.04.