

**VALIDAÇÃO DE METODOLOGIA PARA PRODUÇÃO DE ETANOL A PARTIR DE
RESÍDUOS ORGÂNICOS COM INTEGRAÇÃO DE SIMULAÇÃO NO MATLAB**

LIDIANE FERREIRA DOS SANTOS

Foz do Iguaçu - PR
2026

**VALIDAÇÃO DE METODOLOGIA PARA PRODUÇÃO DE ETANOL A PARTIR DE
RESÍDUOS ORGÂNICOS COM INTEGRAÇÃO DE SIMULAÇÃO NO MATLAB**

LIDIANE FERREIRA DOS SANTOS

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Instituto Latino-Americano
de Tecnologia, Infraestrutura e Território da
Universidade Federal da Integração
Latino-Americana, como requisito parcial à
obtenção do título de Bacharel em
Engenharia Química.

Orientadora: Prof. Dr^a Andréia Cristina
Furtado

Coorientador: Prof. Dr Cesar Adolfo
Rodriguez Sotomonte

Foz do Iguaçu - PR
2026

LIDIANE FERREIRA DOS SANTOS

VALIDAÇÃO DE METODOLOGIA PARA PRODUÇÃO DE ETANOL A PARTIR DE RESÍDUOS ORGÂNICOS COM INTEGRAÇÃO DE SIMULAÇÃO NO MATLAB

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Instituto Latino-Americano
de Tecnologia, Infraestrutura e Território da
Universidade Federal da Integração
Latino-Americana, como requisito parcial à
obtenção do título de Bacharel em
Engenharia Química.

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
 **ANDREIA CRISTINA FURTADO**
Data: 19/10/2026 15:56:58-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Orientador: Prof.^a Dr^a Andréia Cristina Furtado
UNILA

Documento assinado digitalmente
 **CESAR ADOLFO RODRIGUEZ SOTOMONTE**
Data: 19/10/2026 11:14:35-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Coorientador: Prof. Dr Cesar Adolfo
Rodriguez Sotomonte
UNILA

Documento assinado digitalmente
 **FABIO BAUM**
Data: 16/10/2026 17:49:18-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr Fábio Baum
UNILA



Documento assinado digitalmente

LAIS GIMENES VERNASQUI

Data: 19/10/2026 09:29:20-0300

Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Prof.^a Dr.^a Laís Gimenes Vernasqui
UNILA

Foz do Iguaçu, 22 de setembro de 2026.

TERMO DE SUBMISSÃO DE TRABALHOS ACADÊMICOS

Nome completo do autor/a: Lidiane Ferreira dos Santos

Curso: Engenharia Química

Documento de identificação (RG, CPF, Passaporte, etc.): _____

E – mail: _____ Fone: _____

	Tipo de Documento
(.X.) graduação	(.....) artigo
(.....) especialização	(X) trabalho de conclusão de curso
(.....) mestrado	(.....) monografia
(.....) doutorado	(.....) dissertação
	(.....) tese
	(.....) CD/DVD – obras audiovisuais
	(.....)

Título do trabalho acadêmico: Validação De Metodologia Para Produção De Etanol A Partir De Resíduos Orgânicos Com Integração De Simulação No Matlab.

Nome do orientador: Andréia Cristina Furtado

Data da Defesa: 22/09/2026

Licença não-exclusiva de Distribuição

O referido autor:

a) Declara que o documento entregue é seu trabalho original, e que o detém o direito de conceder os direitos contidos nesta licença. Declara também que a entrega do documento não infringe, tanto quanto lhe é possível saber, os direitos de qualquer outra pessoa ou entidade.

b) Se o documento entregue contém material do qual não detém os direitos de autor, declara que obteve autorização do detentor dos direitos de autor para conceder à UNILA – Universidade Federal da Integração Latino-Americana os direitos requeridos por esta licença, e que esse material cujos direitos são de terceiros está claramente identificado e reconhecido no texto ou conteúdo do documento entregue.

Se o documento entregue é baseado em trabalho financiado ou apoiado por outra instituição que não a Universidade Federal da Integração Latino-Americana, declara que cumpriu quaisquer obrigações exigidas pelo respectivo contrato ou acordo.

Na qualidade de titular dos direitos do conteúdo supracitado, o autor autoriza a Biblioteca Latino-Americana – BIUNILA a disponibilizar a obra, gratuitamente e de acordo com a licença pública *Creative Commons Licença 3.0 Unported*.

Foz do Iguaçu, _____ de _____ de _____.

Assinatura do Responsável

Recebido por: _____ em: ____/____/____

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço a Deus por ter me concedido saúde, força e perseverança para enfrentar e superar cada desafio ao longo desta caminhada. Sem Sua presença, nada disso seria possível.

À minha família, em especial ao meu pai, expresso minha mais profunda gratidão por todas as oportunidades de estudo, pelos ensinamentos e pelo apoio incondicional. A ele dedico esta conquista, pois cada incentivo, cada conselho e até mesmo cada “puxão de orelha” foram essenciais para que eu não desistisse e chegasse até aqui.

Aos meus professores da graduação, especialmente à minha orientadora, Andréia, e ao meu coorientador, César, agradeço pela dedicação, paciência e confiança durante a elaboração deste trabalho. Seus ensinamentos foram fundamentais não apenas para a construção deste estudo, mas também para a minha formação acadêmica e pessoal.

Aos amigos que a universidade me presenteou, Anne, Alexsandra, Bárbara, Elian, Isa, Julio, Karen, Lucas e, em especial, Victória, minha sincera gratidão por tornarem essa jornada mais leve e significativa. A convivência diária, as trocas de conhecimento, as dificuldades compartilhadas e as risadas foram essenciais para que esse percurso se tornasse inesquecível. Levarei cada momento comigo e espero que nossa amizade permaneça viva por muitos anos.

Aos meus amigos de longa data, Ana, Chen, Carol, Gabrielly, Laura, Larissa, Sarah e Theodora, agradeço por estarem presentes em todos os momentos, pelos conselhos, pela paciência e pelo apoio constante. Vocês estiveram ao meu lado nos dias difíceis, celebraram minhas conquistas como se fossem suas e me deram forças quando pensei em desistir. O carinho e o apoio de vocês foram indispensáveis para que eu chegasse até aqui. Amo vocês de todo o coração.

RESUMO

A crescente geração de resíduos orgânicos alimentícios e a necessidade de diversificação da matriz energética têm impulsionado a busca por alternativas sustentáveis para a produção de biocombustíveis. Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo avaliar a viabilidade técnica da produção de etanol de segunda geração (2G) a partir de resíduos orgânicos alimentícios, associando ensaios experimentais à modelagem matemática e simulação computacional em MATLAB®. A metodologia experimental compreendeu as etapas de preparo e caracterização da biomassa, hidrólise ácida, detoxificação, fermentação alcoólica e destilação simples. A caracterização da biomassa indicou teor de umidade de 86,86% e matéria seca de 13,14%. Foram realizados ensaios experimentais para avaliação do processo, sendo obtidos teores alcoólicos de 19,80% (v/v) no Experimento 2 e 8,85% (v/v) no Experimento 3. A modelagem computacional foi estruturada de forma modular, contemplando a hidrólise ácida por meio do modelo cinético de Saeman, a fermentação alcoólica pelo modelo de Monod e a destilação com base no equilíbrio líquido-vapor não ideal, utilizando a equação de atividade de Van Laar. Considerando uma base de cálculo de 10 g de biomassa seca, a simulação resultou em 4,90 g de açúcares após a hidrólise, 4,85 g de açúcares aproveitáveis após a detoxificação e 2,18 g de etanol ao final da fermentação, correspondendo a um rendimento global de 0,22 g de etanol por grama de biomassa. Na etapa de destilação, foi estimado um teor alcoólico de 24,1% (v/v), valor superior ao obtido experimentalmente para a mesma carga de biomassa. Os resultados demonstraram coerência entre o comportamento previsto pelo modelo e os dados experimentais, evidenciando o potencial da rota avaliada para a valorização de resíduos alimentícios. Entretanto, os teores alcoólicos obtidos ainda são insuficientes para a utilização direta como combustível comercial, indicando a necessidade de aprimoramentos, especialmente na etapa de separação, por meio da adoção de processos de destilação mais eficientes.

Palavras-chave: etanol de segunda geração; resíduos orgânicos alimentícios; biomassa lignocelulósica; modelagem matemática; MATLAB®; fermentação alcoólica.

RESUMEN

La creciente generación de residuos orgánicos alimentarios y la necesidad de diversificar la matriz energética han impulsado la búsqueda de alternativas sostenibles para la producción de biocombustibles. En este contexto, el presente trabajo tuvo como objetivo evaluar la viabilidad técnica de la producción de etanol de segunda generación (2G) a partir de residuos orgánicos alimentarios, mediante la asociación de ensayos experimentales con modelización matemática y simulación computacional en MATLAB®. La metodología experimental comprendió las etapas de preparación y caracterización de la biomasa, hidrólisis ácida, detoxificación, fermentación alcohólica y destilación simple. La caracterización de la biomasa indicó un contenido de humedad del 86,86% y un contenido de materia seca del 13,14%. Se realizaron ensayos experimentales para evaluar el proceso, obteniéndose contenidos alcohólicos de 19,80% (v/v) en el Experimento 2 y 8,85% (v/v) en el Experimento 3. El modelo computacional fue estructurado de manera modular, contemplando la hidrólisis ácida mediante el modelo cinético de Saeman, la fermentación alcohólica mediante el modelo de Monod y la destilación con base en el equilibrio líquido-vapor no ideal, utilizando la ecuación de actividad de Van Laar. Considerando una base de cálculo de 10 g de biomasa seca, la simulación resultó en 4,90 g de azúcares después de la hidrólisis, 4,85 g de azúcares aprovechables después de la detoxificación y 2,18 g de etanol al final de la fermentación, correspondientes a un rendimiento global de 0,22 g de etanol por gramo de biomasa. En la etapa de destilación, se estimó un contenido alcohólico de 24,1% (v/v), superior al obtenido experimentalmente para la misma carga de biomasa. Los resultados demostraron coherencia entre el comportamiento previsto por el modelo y los datos experimentales, evidenciando el potencial de la ruta evaluada para la valorización de residuos alimentarios. Sin embargo, los contenidos alcohólicos obtenidos aún son insuficientes para su utilización directa como combustible comercial, lo que indica la necesidad de mejoras, especialmente en la etapa de separación, mediante la adopción de procesos de destilación más eficientes.

Palabras clave: etanol de segunda generación; residuos orgánicos alimentarios; biomasa lignocelulósica; modelización matemática; MATLAB®; fermentación alcohólica.

ABSTRACT

The increasing generation of organic food waste and the need to diversify the energy matrix have driven the search for sustainable alternatives for biofuel production. In this context, this study aimed to evaluate the technical feasibility of second-generation (2G) ethanol production from organic food waste by combining experimental assays with mathematical modeling and computational simulation in MATLAB®. The experimental methodology comprised biomass preparation and characterization, acid hydrolysis, detoxification, alcoholic fermentation, and simple distillation. Biomass characterization indicated a moisture content of 86.86% and a dry matter content of 13.14%. Experimental assays were conducted to evaluate the process, resulting in alcohol contents of 19.80% (v/v) in Experiment 2 and 8.85% (v/v) in Experiment 3. The computational model was structured in a modular manner, comprising acid hydrolysis based on the Saeman kinetic model, alcoholic fermentation using the Monod model, and distillation based on the non-ideal vapor-liquid equilibrium, using the Van Laar activity equation. Considering a calculation basis of 10 g of dry biomass, the simulation resulted in 4.90 g of sugars after hydrolysis, 4.85 g of usable sugars after detoxification, and 2.18 g of ethanol at the end of fermentation, corresponding to an overall yield of 0.22 g of ethanol per gram of biomass. In the distillation stage, an alcohol content of 24.1% (v/v) was estimated, which was higher than the experimental value obtained for the same biomass load. The results demonstrated consistency between the behavior predicted by the model and the experimental data, highlighting the potential of the evaluated route for the valorization of food waste. However, the alcohol contents obtained are still insufficient for direct use as commercial fuel, indicating the need for improvements, particularly in the separation stage, through the adoption of more efficient distillation processes.

Keywords: second-generation ethanol; organic food waste; lignocellulosic biomass; mathematical modeling; MATLAB®; alcoholic fermentation.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Fluxograma do processo de produção de etanol.....	20
Figura 2 – Estrutura lignocelulósica de uma biomassa vegetal.....	28
Figura 3 – Estrutura molecular da celulose com unidades de β -D-glicose ligadas por ligações $\beta(1\rightarrow4)$	29
Figura 4 – Estrutura da hemicelulose.....	31
Figura 5 – Estrutura da lignina.....	32
Figura 6 – Estrutura do HMF e Furfural.....	39
Figura 7 – Resíduos alimentícios orgânicos utilizados como matéria-prima.....	45
Figura 8 – Fluxograma da metodologia utilizada para produção de etanol a partir de resíduos alimentícios orgânicos.....	46
Figura 9 – Amostra antes e depois do processo de secagem.....	47
Figura 10 – Amostra durante processo de trituração.....	48
Figura 11 – Amostra após o processo de hidrólise ácida.....	50
Figura 12 – Meio de cultura antes e após autoclave.....	51
Figura 13 – Amostras dos experimentos 2 e 3 antes da fermentação.....	53
Figura 14 – Espectro FTIR da biomassa utilizada.....	71
Figura 15 – Leituras de sólidos solúveis totais (°Brix) dos hidrolisados obtidos nos três experimentos.....	74
Figura 16 – Levedura após procedimento preparo do inóculo.....	76
Figura 17 – Amostra do experimento 2 antes e depois da fermentação.....	77
Figura 18 – Amostra do experimento 3 antes e depois da fermentação.....	77
Figura 19 – Espectros de FTIR da amostra antes da destilação do experimento 2.....	78
Figura 20 – Espectros de FTIR da amostra antes da destilação do experimento 3.....	78
Figura 21 – Sistema de destilação simples.....	80
Figura 22 – Espectro FTIR do destilado proveniente do experimento 2.....	82
Figura 23 – Espectro FTIR do destilado proveniente do experimento 3.....	84
Figura 24 – Análise por RMN ¹ H do destilado proveniente do experimento 2.....	86
Figura 25 – Hidrólise Ácida (modelo Saeman).....	90

Figura 26 – Fermentação (modelo de Monod).....	91
Figura 27 – Curva de equilíbrio da mistura.....	92

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Reagentes químicos e microrganismo utilizados.....	45
Quadro 2 – Comparação dos parâmetros operacionais e resultados entre os ensaios experimentais e a simulação computacional.....	93

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Principais diferenças entre o etanol 1G e 2G.....	25
Tabela 2 – Composição lignocelulósica de algumas biomassas utilizadas para produção de biocombustíveis.....	29
Tabela 3 – Resultados da determinação do teor de umidade da biomassa.....	70
Tabela 4 – Principais bandas observadas no espectro FTIR da biomassa e suas atribuições.....	72
Tabela 5 – Valores de pH e sólidos solúveis totais (°Brix) dos hidrolisados obtidos nos diferentes experimentos.....	74
Tabela 6 – Principais bandas observadas no espectro FTIR da biomassa e suas atribuições da amostra do experimento 2.....	79
Tabela 7 – Principais bandas observadas no espectro FTIR da biomassa e suas atribuições da amostra do experimento 3.....	79
Tabela 8 – Resumo dos dados observados no espectro FTIR do destilado proveniente do experimento 2.....	82
Tabela 9 – Resumo dos dados observados no espectro FTIR do destilado proveniente do experimento 2.....	84
Tabela 10 – Resultados do RMN ¹ H do destilado proveniente do experimento 2.....	87
Tabela 11 – Teor alcoólico (%) dos destilados provenientes dos experimentos 2 e 3.....	88
Tabela 12 – Balanço de massa e concentrações ao longo das etapas do processo simulado.....	90

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

1G — Primeira geração

2G — Segunda geração

A_i — Fator pré-exponencial da reação i

A_{12} — Parâmetro de interação binária da equação de Van Laar

A_{21} — Parâmetro de interação binária da equação de Van Laar

ABNT — Associação Brasileira de Normas Técnicas

C_{acid} — Concentração de ácido sulfúrico empregada na hidrólise

CONAB — Companhia Nacional de Abastecimento

D — Concentração de produtos de degradação

D_{final} — Concentração final de inibidores após a detoxificação

$D_{inicial}$ — Concentração inicial de inibidores antes da detoxificação

D_{over} — Concentração de inibidores remanescentes após o overliming

E_{ai} — Energia de ativação da reação i

ELV — Equilíbrio Líquido-Vapor

$eff_{carvão}$ — Eficiência de remoção de inibidores pelo carvão ativado

$eff_{overlim}$ — Eficiência de remoção de inibidores pelo overliming

f_{carb} — Fração mássica de carboidratos presentes na biomassa

η_{ferm} — Eficiência global da fermentação

f_{ferm} — Fração fermentável dos açúcares disponíveis

FTIR — Espectroscopia no Infravermelho por Transformada de Fourier

HMF — 5-Hidroximetilfurfural

ILATIT — Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e Território

k_1 — Constante cinética da conversão dos polissacarídeos em açúcares fermentáveis

k_2 — Constante cinética da degradação dos açúcares fermentáveis

$K_{\square}$ — Constante de meia-saturação de Monod

L_0 — Quantidade inicial de matéria líquida no refeedor

$L_{\square}$ — Quantidade de matéria líquida remanescente no refeedor no instante t

$m_{açúcar}$ — Massa total de açúcar disponível para a fermentação

m_{bio} — Massa seca da biomassa

MATLAB® — MATrix LABoratory

μ — Taxa específica de crescimento do microrganismo

μ_{max} — Taxa específica máxima de crescimento do microrganismo

P — Concentração de etanol na etapa de fermentação
 P_0 — Concentração inicial de polissacarídeos potencialmente hidrolisáveis
 P_{final} — Concentração final de etanol no mosto fermentado
 $P.A.$ — Puro para análise
 P_i^{sat} — Pressão de vapor de saturação do componente i
 $P_{\square}$ — Polissacarídeos presentes na biomassa
 p_A — Fração de açúcar perdida durante os processos de precipitação e filtração
 R — Constante universal dos gases ideais
 $\text{RMN de } ^1\text{H}$ — Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio
 S — Concentração de açúcares fermentáveis ou substrato
 S_0 — Concentração inicial de substrato fermentável
 S_{final} — Concentração final de açúcares fermentáveis
 S_{inicial} — Concentração inicial de açúcares fermentáveis antes da detoxificação
 S_{out} — Concentração de açúcares disponíveis após a detoxificação
 T — Temperatura absoluta do sistema
 t — Tempo de reação ou de processo
 t_{ferm} — Tempo de fermentação
 U — Umidade da biomassa
 UNILA — Universidade Federal da Integração Latino-Americana
 V — Volume total do hidrolisado tratado
 V_{hid} — Volume do meio reacional utilizado na hidrólise
 X — Concentração de biomassa celular
 X_0 — Concentração inicial de biomassa celular
 $X_{\square}$ — Conversão dos polissacarídeos
 x — Fração molar de etanol na fase líquida
 x_0 — Fração molar inicial de etanol na fase líquida
 $x_{\square}$ — Fração molar de etanol na fase líquida residual no instante t
 x_i — Fração molar do componente i na fase líquida
 x_1 — Fração molar de etanol na fase líquida
 x_2 — Fração molar de água na fase líquida
 $Y_{\square\square}$ — Coeficiente de rendimento de etanol em relação ao substrato consumido
 $Y_{x\square}$ — Coeficiente de rendimento celular em relação ao substrato consumido

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	16
2 OBJETIVOS.....	17
2.1 OBJETIVO GERAL.....	17
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	17
3 REFERENCIAL TEÓRICO.....	18
3.1 ETANOL.....	18
3.1.1 Conceitos e propriedades.....	18
3.1.2 Processo de produção de etanol.....	19
3.1.4 Etanol de segunda geração (2G).....	21
3.1.5 Etanol 1G X 2G.....	23
3.2 BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA.....	25
3.2.1 Conceito de biomassa lignocelulósica.....	25
3.2.2 Composição da biomassa lignocelulósica.....	26
3.2.2.1 Celulose.....	28
3.2.2.2 Hemicelulose.....	29
3.2.2.3 Lignina.....	31
3.3 PRÉ-TRATAMENTO DA BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA.....	33
3.3.1 Pré-tratamento Físico-Químico.....	33
3.3.2 Pré-tratamento Biológico.....	34
3.4 HIDRÓLISE DA BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA.....	35
3.4.1 Hidrólise Enzimática.....	35
3.4.2 Hidrólise Química.....	36
3.4.3 Hidrólise Ácida Diluída.....	37
3.4.4 Fatores que Afetam a Hidrólise.....	37
3.4.5 Formação de Furfural e HMF.....	38
3.5 DETOXIFICAÇÃO DO HIDROLISADO.....	39
3.5.1 Neutralização do Hidrolisado.....	39
3.5.2 Tratamento com Carvão Ativado.....	39
3.5.3 Remoção de Furfural e HMF.....	40
3.5.4 Importância da Detoxificação para a Fermentação.....	40
3.6 FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA.....	41
3.6.1 <i>Saccharomyces cerevisiae</i>	41
3.6.2 Conversão de Açúcares em Etanol.....	42
3.6.3 Fatores que Influenciam a Fermentação.....	42
4 METODOLOGIA.....	44
4.1 MATERIAIS E REAGENTES.....	44
4.1.1 Equipamentos.....	44
4.1.2 Matéria-prima lignocelulósica.....	44
4.1.3 Vidrarias.....	45
4.1.4 Reagentes e microrganismos.....	45

4.2 PRODUÇÃO DE ETANOL A PARTIR DE RESÍDUOS ALIMENTÍCIOS ORGÂNICOS.....	46
4.2.1 Preparo da biomassa.....	47
4.2.2 Caracterização da biomassa.....	48
4.2.3 Hidrólise Ácida.....	50
4.2.4 Processo de inoculação.....	50
4.2.5 Detoxificação do Hidrolisado.....	51
4.2.6 Fermentação Alcoólica.....	52
4.2.7 Destilação Simples.....	53
4.2.8 Determinação de sólidos solúveis (°Brix).....	54
4.2.9 Determinação do teor alcoólico.....	54
4.3 SIMULAÇÃO DO PROCESSO EM MATLAB.....	55
4.3.1 Abordagem da Modelagem Computacional.....	55
4.3.2 Estrutura do Simulador.....	56
4.3.3 Modelagem Matemática.....	56
4.3.3.1 Hidrólise ácida.....	56
4.3.3.2 Detoxificação.....	59
4.3.3.3 Fermentação alcoólica.....	62
4.3.3.4 Destilação Simples.....	65
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	69
5.1 CARACTERIZAÇÃO DA BIOMASSA.....	69
5.1.1 Teor de umidade.....	70
5.1.2 Composição lignocelulósica.....	71
5.2 AVALIAÇÃO DA HIDRÓLISE ÁCIDA.....	73
5.3 AVALIAÇÃO DA DETOXIFICAÇÃO.....	75
5.4 AVALIAÇÃO DA FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA.....	76
5.5 AVALIAÇÃO DA DESTILAÇÃO SIMPLES.....	80
5.6 AVALIAÇÃO DO TEOR ALCOÓLICO E DO RENDIMENTO FERMENTATIVO.....	88
5.7 SIMULAÇÃO DO PROCESSO.....	89
5.8 COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS E O MODELO DE SIMULAÇÃO.....	93
6 CONCLUSÃO.....	95
REFERÊNCIAS.....	96

1 INTRODUÇÃO

A crescente demanda por energia, somada às preocupações climáticas e aos impactos dos combustíveis fósseis, tem impulsionado a busca por fontes renováveis para a matriz energética global (EPE, 2024). Nesse cenário, os biocombustíveis ganham destaque, especialmente o etanol, que ocupa posição estratégica no Brasil devido ao seu amplo uso no setor de transportes e à sua contribuição para a redução das emissões de gases de efeito estufa (BNDES; CGEE, 2008; LINS, 2021).

No país, a produção de etanol está historicamente ligada à cana-de-açúcar, cadeia consolidada desde a década de 1970 com o Programa Nacional do Álcool (Proálcool). Contudo, a forte dependência de uma única matéria-prima evidencia a necessidade de diversificação. Segundo a Companhia Nacional de Abastecimento, a safra brasileira de cana-de-açúcar 2025/2026 foi estimada em 663,4 milhões de toneladas, uma redução de cerca de 2% em relação ao ciclo anterior devido a condições climáticas adversas (CONAB, 2025). Esse panorama reforça a importância do desenvolvimento de rotas tecnológicas que aproveitem outras biomassas disponíveis de forma sustentável.

Entre essas alternativas, destaca-se o etanol de segunda geração (2G), produzido a partir de biomassas lignocelulósicas e resíduos orgânicos que não competem com a produção de alimentos. Diferente do etanol de primeira geração, obtido de matérias-primas ricas em açúcares ou amido, o etanol 2G permite o aproveitamento estrutural da biomassa vegetal, ampliando a eficiência do uso da terra e valorizando materiais frequentemente descartados (ALBARELLI, 2013; BRAGION; SANTOS, 2012; LINS, 2021).

Diante disso, os resíduos orgânicos alimentícios surgem como matéria-prima promissora por conterem frações de açúcares, amidos, celulose e hemicelulose passíveis de conversão em açúcares fermentescíveis, reduzindo também os impactos ambientais associados ao descarte inadequado (LINS, 2021; SINGH et al., 2022). Nesse contexto, o desenvolvimento de modelos matemáticos em ambiente computacional, utilizando o software MATLAB, possibilita representar as principais etapas do processo de produção de etanol por meio de balanços de massa, hipóteses simplificadoras e parâmetros operacionais.

2 OBJETIVOS

Este capítulo apresenta o objetivo geral e os específicos deste presente trabalho.

2.1 OBJETIVO GERAL

Avaliar experimentalmente a metodologia proposta por Lins (2021) para a produção de etanol a partir de resíduos orgânicos alimentícios, integrando os resultados experimentais ao desenvolvimento de um modelo computacional no software MATLAB para representar o processo em condições ideais, comparar os resultados simulados com os obtidos em laboratório e analisar o desempenho técnico da metodologia.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Os objetivos específicos do trabalho são:

- Avaliar a metodologia proposta por Lins (2021) para a produção de etanol a partir de resíduos orgânicos alimentícios, considerando as etapas de preparo da biomassa, hidrólise ácida, ajuste do meio, fermentação e destilação;
- Determinar parâmetros experimentais relevantes ao processo, como rendimento obtido, volume de destilado, condições de pH, temperatura e tempo de operação;
- Desenvolver um modelo computacional no MATLAB para representar as principais etapas do processo de produção de etanol, considerando hipóteses ideais, balanços de massa, conversões e parâmetros operacionais descritos na metodologia.
- Comparar os resultados experimentais com os obtidos pelo modelo computacional, avaliando o desempenho do processo e as diferenças entre as condições ideais e reais;
- Propor melhorias e oportunidades de otimização para a metodologia de produção de etanol com base na análise conjunta dos resultados experimentais e simulados.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

Este capítulo apresenta a revisão bibliográfica que fundamenta o desenvolvimento deste trabalho. São abordados os principais aspectos, com ênfase nas rotas tecnológicas empregadas na produção de etanol a partir de biomassa lignocelulósica. Além disso, são discutidos os métodos de pré-tratamento e hidrólise aplicáveis a essa matéria-prima, os processos fermentativos envolvidos na conversão dos açúcares em etanol, bem como os conceitos de escalonamento de processos e os critérios utilizados na avaliação econômica preliminar da tecnologia proposta.

3.1 ETANOL

Este tópico é dedicado à revisão bibliográfica abordando tópicos como: conceito de etanol, etanol de 1ª geração (1G) e 2ª geração (2G), propriedades físico-químicas e características, bem como à descrição do processo de fermentação alcoólica responsável por sua obtenção.

3.1.1 Conceitos e propriedades

O etanol, ou álcool etílico (C_2H_6O), é um composto orgânico pertencente à classe dos álcoois. Ele se caracteriza por ser incolor, líquido e volátil em temperatura ambiente (CAREY; GIULIANO, 2014). Diferente de outros combustíveis derivados do petróleo, o etanol apresenta um elevado teor de oxigênio, cerca de 35% em massa, o que contribui para uma combustão mais completa e limpa, mesmo quando misturado à gasolina (BNDES; CGEE, 2008).

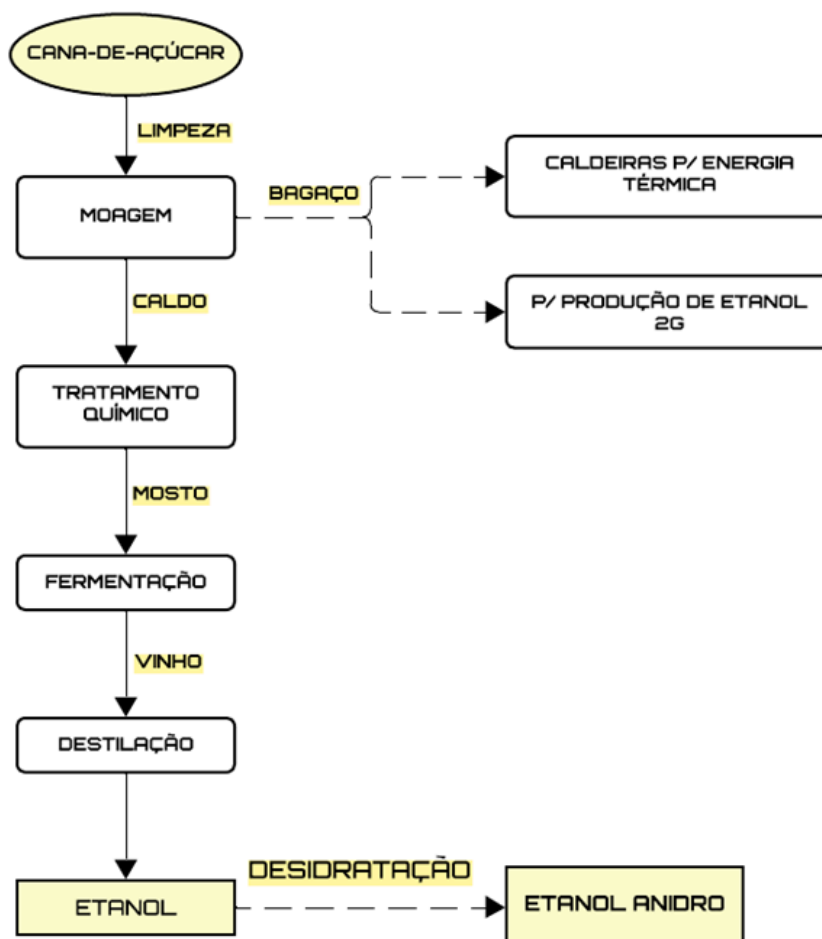
Segundo Solomons e Fryhle (2012) em condições normais de temperatura e pressão (CNTP) a substância apresenta um ponto de ebulição de 78,3°C e -117°C de fusão. A partir de 13°C o etanol emite vapores que podem entrar em combustão quando em contato com alguma fonte de calor, sendo assim ele é considerado como altamente inflamável.

A produção industrial de etanol pode ser realizada por processos químicos, como a hidratação de alcenos ou a redução de aldeídos e compostos carbonílicos (McMurry, 2010). Para fins energéticos, como o biocombustível que será o foco deste trabalho, o método mais utilizado é a fermentação alcoólica.

3.1.2 Processo de produção de etanol

O processo de produção de etanol a partir da cana-de-açúcar envolve etapas sequenciais que incluem a preparação do mosto alcoólico, fermentação e destilação, conforme ilustrado na Figura 1. Após a colheita, a cana é transportada para a unidade industrial, onde passa por trituração e moenda, etapas que visam liberar o caldo contido nas células vegetais. Durante a moagem, adiciona-se água para facilitar a extração dos açúcares e diluir o caldo, obtendo-se uma mistura de garapa e bagaço (CHIEPPE JUNIOR, 2012).

Figura 1 - Fluxograma do processo de produção etanol.



Fonte: Adaptado de CHIEPPE JUNIOR, 2012.

O caldo extraído é então submetido a tratamentos físicos e químicos, como aquecimento e filtração, para reduzir a carga de microrganismos indesejados, incluindo bactérias e leveduras contaminantes, que poderiam comprometer o rendimento fermentativo. Em algumas usinas, também se adiciona sulfito ou

realiza-se tratamento ácido do inóculo para controle microbiano (DORTA et al., 2006; GÓES-FAVONI et al., 2018). Após esses procedimentos, o mosto açucarado encontra-se pronto para a fermentação, sendo ajustadas condições de pH, temperatura e nutrientes, de modo a favorecer a ação das leveduras, principalmente do gênero *Saccharomyces* (LIMA et al., 2001; SOUSA; MONTEIRO, 2011).

A fermentação é conduzida em sistemas contínuos ou em bateladas alimentadas, como o processo Melle-Boinot, muito utilizado nas destilarias brasileiras devido à maior produtividade, reaproveitamento das células e redução de contaminações (VENTURINI FILHO, 2010; PACHECO, 2010). O produto resultante dessa etapa, denominado vinho, apresenta teor alcoólico entre 7 e 10%, sendo posteriormente submetido à destilação, a fim de concentrar o etanol e obter o etanol hidratado, com aproximadamente 94% de teor alcoólico (SILVA, 2010).

Quando necessário, realiza-se a etapa de desidratação do etanol hidratado para obtenção do etanol anidro, também chamado álcool puro, que apresenta até 1% de água em sua composição. Essa forma de etanol é essencial para aplicações como combustível automotivo e síntese química (ALBARELLI, 2013; ANP, 2021). Além disso, o rendimento global do processo depende não apenas da eficiência fermentativa, mas também do controle rigoroso de parâmetros operacionais, como pH, temperatura, concentração de levedura e controle de contaminantes, garantindo a produção de etanol de qualidade industrial (GÓES-FAVONI et al., 2018).

3.1.3 Etanol de primeira geração (1G)

Os combustíveis de primeira geração, como o biodiesel e o etanol, são obtidos a partir do processamento de matérias-primas ricas em amido, óleos vegetais, gorduras animais ou açúcares. No caso específico do etanol de primeira geração, sua produção tem como base culturas como cana-de-açúcar, beterraba, trigo, mandioca e milho (CARVALHO et al., 2013).

No Brasil, a produção de etanol ainda ocorre, em sua maior parte, por meio da fermentação dos açúcares presentes na cana-de-açúcar, extraídos através da moagem. No entanto, as destilarias que realizam a fermentação exclusivamente do caldo de cana têm se tornado menos comuns. Essas unidades, conhecidas como destilarias autônomas, vêm sendo incorporadas às usinas de açúcar, onde o processo

fermentativo utiliza tanto o caldo quanto o melaço, este último resultante da etapa de cristalização da sacarose durante a fabricação do açúcar.

O uso do melaço como substrato apresenta vantagens, pois além de possuir um elevado teor de sólidos solúveis (aproximadamente 90 °Brix), sendo cerca de 60% açúcares redutores, também contém nutrientes suficientes para que a fermentação ocorra sem a necessidade de suplementação externa (ANDRIETTA et al., 2006). A escolha da cana-de-açúcar como principal matéria-prima para a produção de etanol no país deve-se, principalmente, ao seu bom rendimento energético e à sua ampla disponibilidade, uma vez que o Brasil se destaca mundialmente tanto na produção quanto no domínio tecnológico dessa cultura (BERNARDO NETO, 2009).

3.1.4 Etanol de segunda geração (2G)

A produção de etanol convencional, também denominada de primeira geração, apresenta como limitação principal a necessidade de extensas áreas de cultivo de matérias-primas agrícolas, como a cana-de-açúcar. Embora essa restrição ainda não represente um problema crítico, projeta-se que, futuramente, possa haver conflitos entre o uso da terra para fins alimentares e energéticos. Nesse contexto, o aproveitamento dos resíduos provenientes dos processos tradicionais surge como uma estratégia ambiental e economicamente vantajosa, favorecendo o incremento da produção de biocombustíveis sem a expansão da fronteira agrícola (LINS, 2022).

O etanol de segunda geração (2G) tem como principal matéria-prima a biomassa lignocelulósica, composta essencialmente por celulose, hemicelulose e lignina. Essa biomassa está presente em diversos resíduos vegetais, como o bagaço e a palha da cana-de-açúcar, serragem, palha de milho e outros resíduos agrícolas. Dessa forma, o etanol 2G apresenta vantagens ambientais e econômicas, pois possibilita o aproveitamento de resíduos agroindustriais e a ampliação da produção sem o aumento da área plantada (CARVALHO et al., 2013; JARDINE et al., 2009).

Em comparação, o rendimento médio de etanol obtido a partir da cana-de-açúcar é de cerca de 90 L por tonelada de matéria-prima, enquanto o milho e a beterraba apresentam rendimentos de aproximadamente 460 L/t e 100 L/t, respectivamente (BNDES; CGEE, 2008; MACHADO; ABREU, 2006 apud MANOCHIO, 2014). Apesar das vantagens associadas ao uso da biomassa lignocelulósica, o custo de produção do etanol 2G ainda é superior ao dos processos

convencionais, devido à complexidade tecnológica envolvida (CARDONA; SÁNCHEZ, 2007).

A conversão da biomassa lignocelulósica em etanol é composta, de modo geral, por cinco etapas principais: pré-tratamento, hidrólise da celulose, fermentação, separação do etanol e tratamento de efluentes. O pré-tratamento tem como objetivo romper a estrutura do complexo lignina-celulose-hemicelulose, tornando a celulose mais acessível à ação enzimática. Durante essa etapa, há redução da cristalinidade e aumento da porosidade do material (KELLER; HAMILTON; NGUYEN, 2003). Dependendo das condições operacionais, como pH e temperatura, diferentes frações da biomassa são solubilizadas em pH ácido, há maior remoção de hemicelulose e formação de xilose, enquanto em meio básico ocorre solubilização parcial da lignina (GARLOCK et al., 2011).

Essa etapa é crucial, visto que rendimentos de hidrólise enzimática sem pré-tratamento raramente ultrapassam 20%, podendo atingir mais de 90% quando o pré-tratamento é adequadamente conduzido (HAMELINCK; VAN HOOIJDONK; FAAIJ, 2005).

Na sequência, a hidrólise converte a celulose em glicose fermentável. Esse processo pode ocorrer por via ácida ou enzimática. A hidrólise ácida apresenta bons rendimentos, mas gera subprodutos inibidores, requer recuperação do catalisador e não é ambientalmente favorável (GURGEL, 2010). Já a hidrólise enzimática é mais seletiva e ocorre em condições brandas, sem degradação da glicose, embora o alto custo das enzimas e o longo tempo de reação ainda representem desafios à sua aplicação em escala industrial (CARDONA; QUINTERO; PAZ, 2010). Estudos recentes também investigam a hidrólise em meio supercrítico, utilizando água como solvente catalítico, possibilitando elevada taxa de conversão e menor tempo de reação, embora a tecnologia ainda esteja em fase de desenvolvimento (ZHAO et al., 2012; RENMATIX, 2011).

Após a obtenção dos açúcares fermentescíveis, ocorre a conversão a etanol por meio da fermentação alcoólica. Essa etapa pode ser realizada separadamente da hidrólise, no processo denominado *Separate Hydrolysis and Fermentation* (SHF), ou de forma integrada, no processo *Simultaneous Saccharification and Fermentation* (SSF). A integração dessas etapas reduz o tempo total de processo, diminui o uso de enzimas e eleva o rendimento alcoólico (SUPING et al., 2009; PICCOLO; BEZZO, 2009). Estudos recentes também investigam a

Simultaneous Saccharification and Co-Fermentation (SSCF), que permite a fermentação simultânea de açúcares C5 e C6, ampliando o aproveitamento da biomassa.

Por fim, o tratamento dos efluentes e resíduos sólidos é essencial para a sustentabilidade do processo. A fração orgânica residual pode ser destinada à produção de biogás, utilizado na cogeração de energia, enquanto a lignina remanescente pode ser aproveitada como combustível ou matéria-prima para gaseificação (PICCOLO; BEZZO, 2009; DIAS, 2011).

Assim, o etanol de segunda geração representa uma alternativa promissora para o fortalecimento da matriz energética renovável brasileira, contribuindo para o uso racional dos recursos e a mitigação dos impactos ambientais associados aos combustíveis fósseis. Contudo, o desenvolvimento tecnológico e a redução de custos ainda constituem desafios para a consolidação dessa rota em escala comercial.

3.1.5 Etanol 1G X 2G

A produção de bioetanol é tradicionalmente classificada em duas principais categorias: etanol de primeira geração (1G) e etanol de segunda geração (2G). O etanol de primeira geração é produzido a partir de matérias-primas ricas em açúcares fermentescíveis ou amido, como cana-de-açúcar, milho, trigo e mandioca (ADITIYA et al., 2016). Trata-se de uma tecnologia amplamente consolidada e empregada em escala comercial em diversos países, destacando-se o Brasil pela elevada produtividade agrícola da cana-de-açúcar e pela eficiência de seu setor sucroenergético (BNDES; CGEE, 2008). O processo produtivo envolve etapas de extração da matéria-prima, preparo do mosto, fermentação alcoólica e destilação do etanol (ADITIYA et al., 2016). Apesar de apresentar rendimentos elevados e tecnologia madura, o etanol 1G enfrenta limitações relacionadas à disponibilidade de terras agricultáveis, à competição potencial com a produção de alimentos e à dependência de condições climáticas favoráveis para a manutenção da produtividade (ROSA; GARCIA, 2009).

Como alternativa a essas limitações, o etanol de segunda geração tem se destacado como uma rota tecnológica mais sustentável, alinhada aos princípios da economia circular e do aproveitamento integral da biomassa (SARKAR et al., 2012). Nessa abordagem, utilizam-se matérias-primas lignocelulósicas, como

resíduos agrícolas, florestais, urbanos e alimentares, compostos principalmente por celulose, hemicelulose e lignina (ADITIYA et al., 2016). Pela complexidade estrutural desses materiais, torna-se necessária a aplicação de etapas de pré-tratamento e hidrólise para romper a matriz lignocelulósica e disponibilizar açúcares fermentescíveis para a produção de etanol (SARKAR et al., 2012).

Entre as principais vantagens do etanol 2G destacam-se a ampliação da produção sem a necessidade de expansão das áreas cultivadas, a valorização de resíduos que seriam descartados e a redução dos impactos ambientais associados ao manejo inadequado desses materiais (ROSA; GARCIA, 2009).

Segundo Singh et al. (2022), resíduos alimentares possuem composição particularmente favorável à produção de bioetanol, por apresentarem teores elevados de carboidratos como amido, celulose e hemicelulose, o que possibilita sua conversão eficiente em açúcares fermentáveis após o pré-tratamento adequado. Comparando as rotas do 1G e 2G é visto que, embora o processo 2G seja mais complexo e custoso, especialmente devido ao preço das enzimas e às dificuldades de fermentação de açúcares C5, ele apresenta vantagens ambientais e sociais expressivas. As principais diferenças entre etanol 1G e 2G podem ser observadas a seguir na Tabela 1:

Tabela 1 – Principais diferenças entre o etanol 1G e 2G

Critério	Etanol 1G	Etanol 2G
Matéria-prima	Açúcares simples e amido	Biomassa lignocelulósica e resíduos
Complexidade do processo	Baixa	Alta
Maturidade tecnológica	Totalmente consolidada	Em desenvolvimento
Custo de produção	Mais baixo	Mais elevado
Limitações	Necessidade de terras agricultáveis	Custo enzimático, logística, inibidores
Sustentabilidade	Boa	Superior

Fonte: Autora (2026).

Apesar do potencial de sustentabilidade, a rota 2G enfrenta desafios tecnológicos importantes. De acordo com Singh et al. (2022), o custo das enzimas representa uma das principais limitações do processo, podendo corresponder a uma parcela significativa dos custos operacionais.

Além disso, muitos pré-tratamentos resultam na formação de compostos inibidores, como furfural e HMF, que prejudicam o desempenho fermentativo. Soma-se a isso a dificuldade de fermentar pentoses, como a xilose, que exige microrganismos modificados ou consórcios específicos, e o próprio desafio logístico associado à coleta, transporte e homogeneização de resíduos alimentares, cuja composição pode variar substancialmente de um lote para outro.

Além desses obstáculos, avanços notáveis vêm sendo registrados na literatura, incluindo a utilização de microrganismos termotolerantes, a otimização de pré-tratamentos hidrotérmicos e o desenvolvimento de processos integrados como SSCF e CBP, que permitem reduzir custos e simplificar etapas.

Entretanto, essa tecnologia ainda apresenta desafios relacionados aos custos de produção, à eficiência dos processos de conversão da biomassa e à viabilidade econômica em larga escala (ADITIYA et al., 2016).

3.2 BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA

A biomassa lignocelulósica é uma matéria-prima amplamente utilizada na produção de etanol de segunda geração devido à sua abundância, baixo custo e caráter renovável. É composta principalmente por celulose, hemicelulose e lignina, componentes que influenciam diretamente os processos de conversão da biomassa em biocombustíveis (SANTOS et al., 2012; MOOD et al., 2013). Neste tópico, são apresentados os principais aspectos relacionados à composição e às características desses constituintes.

3.2.1 Conceito de biomassa lignocelulósica

A biomassa lignocelulósica corresponde à fração estrutural dos materiais vegetais e é considerada o recurso renovável mais abundante disponível na natureza (YOUSUF; PIROZZI; SANNINO, 2020). Essa biomassa é formada principalmente por celulose, hemicelulose e lignina, componentes organizados em uma estrutura complexa que confere resistência mecânica e proteção às paredes celulares das plantas (YOUSUF; PIROZZI; SANNINO, 2020).

As principais fontes de biomassa lignocelulósica incluem resíduos agrícolas, resíduos florestais, subprodutos agroindustriais e culturas energéticas. Devido à sua ampla disponibilidade, baixo custo e potencial de aproveitamento de resíduos, essa biomassa tem sido amplamente estudada como matéria-prima para a

produção de biocombustíveis de segunda geração, especialmente o etanol celulósico (MOOD et al., 2013; CANILHA et al., 2012).

O interesse crescente pela utilização da biomassa lignocelulósica está associado à busca por alternativas energéticas sustentáveis e à redução da dependência de combustíveis fósseis. Além disso, o aproveitamento de resíduos ricos em material lignocelulósico contribui para a valorização de subprodutos e para a redução dos impactos ambientais relacionados ao seu descarte. Nesse contexto, a conversão dessa biomassa em etanol de segunda geração apresenta-se como uma estratégia promissora para a produção de energia renovável e para o desenvolvimento de processos alinhados aos princípios da economia circular (CANILHA et al., 2012; YOUSUF; PIROZZI; SANNINO, 2020).

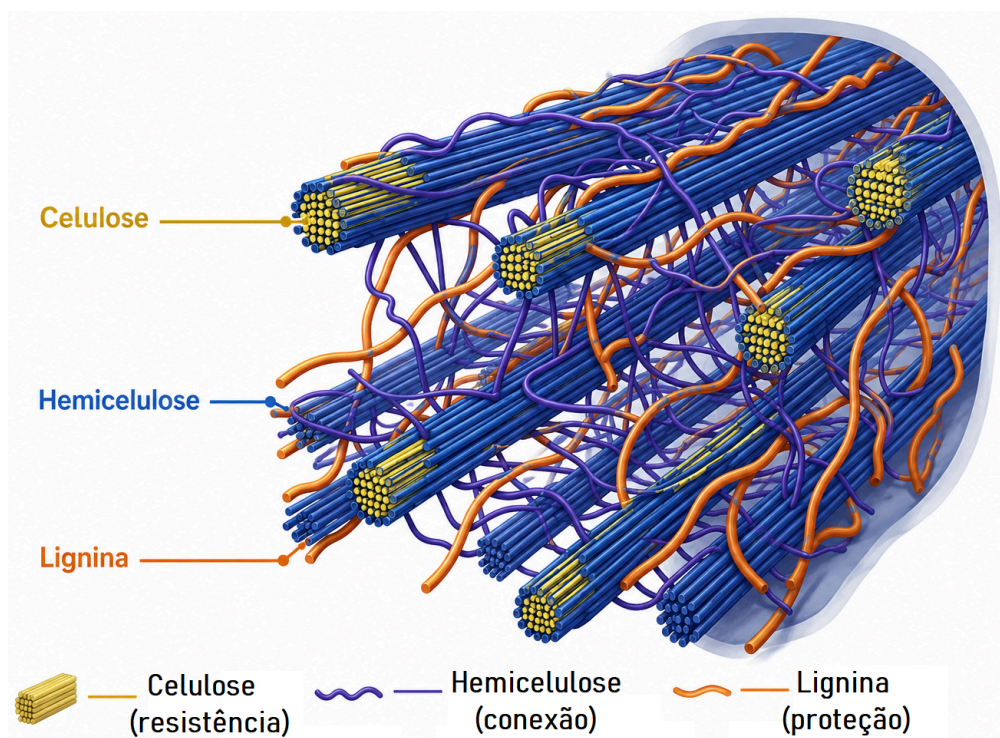
3.2.2 Composição da biomassa lignocelulósica

A biomassa lignocelulósica é composta principalmente por celulose, hemicelulose e lignina, além de pequenas quantidades de extrativos e materiais inorgânicos, frequentemente denominados cinzas (YOUSUF; PIROZZI; SANNINO, 2020). A proporção desses componentes pode variar de acordo com a espécie vegetal, as condições de cultivo e a parte da planta considerada.

A celulose e a hemicelulose constituem a fração carboidratada da biomassa e representam aproximadamente 70% de sua massa seca, sendo as principais fontes de açúcares fermentescíveis para a produção de biocombustíveis e outros produtos de base biológica (YOUSUF; PIROZZI; SANNINO, 2020). Já a lignina corresponde, em média, a cerca de 25% da biomassa e atua como um polímero estrutural responsável por conferir rigidez, resistência mecânica e proteção às paredes celulares vegetais.

Estruturalmente, as microfibrilas de celulose encontram-se envolvidas por uma matriz de hemicelulose e lignina, formando uma estrutura complexa e recalcitrante à degradação, conforme demonstrado na Figura 2. Essa organização dificulta o acesso aos polissacarídeos durante os processos de conversão da biomassa, tornando necessárias etapas de pré-tratamento para aumentar a disponibilidade dos açúcares destinados à produção de etanol de segunda geração (MOOD et al., 2013; CANILHA et al., 2012).

Figura 2 – Estrutura lignocelulósica de uma biomassa vegetal



Fonte: Autora (com apoio de inteligência artificial), 2026.

Os principais constituintes da biomassa lignocelulósica e suas funções são apresentados nas seções seguintes. A biomassa utilizada neste trabalho foi composta por uma mistura de resíduos alimentícios orgânicos. Em razão da variabilidade da composição desses materiais, a Tabela 2 apresenta valores de referência para algumas biomassas lignocelulósicas e resíduos agroindustriais semelhantes encontrados na literatura.

Tabela 2 – Composição lignocelulósica de algumas biomassas utilizadas para produção de biocombustíveis

Biomassa	Celulose (%)	Hemicelulose (%)	Lignina (%)
Bagaço de cana-de-açúcar	32–48	19–24	23–32
Casca de limão	23,06	8,09	7,56
Bagaço de limão	36,22	11,05	7,55

Bagaço de maçã (Apple pomace)	21,0	23,0	19,0
-------------------------------	------	------	------

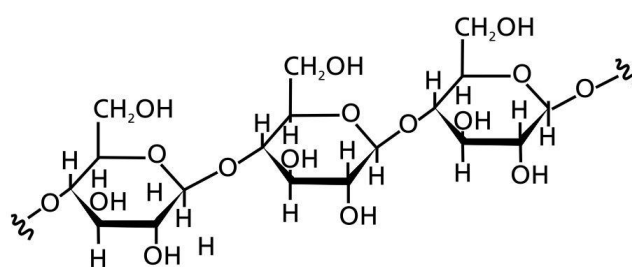
Fonte: Adaptado de Pinto et al. (2015), Marín et al. (2007) e Pingret et al. (2021).

3.2.2.1 Celulose

A celulose é o composto orgânico mais abundante da biosfera e o principal polímero estrutural presente na parede celular das plantas, correspondendo a aproximadamente 35% a 50% da massa seca vegetal, de fórmula geral $(C_6H_{10}O_5)_n$, onde n representa o grau de polimerização da molécula. Além de estar presente em vegetais superiores, também pode ser encontrada em algas e alguns microrganismos. Sua principal função é fornecer suporte mecânico, rigidez e proteção às células vegetais (MARECOS, 2024; YOUSUF, 2017).

Quimicamente, a celulose é um homopolissacarídeo constituído por unidades de D-glicose ligadas por ligações glicosídicas β -(1,4), formando uma cadeia linear não ramificada, como demonstrado na Figura 3. Sua unidade estrutural de repetição é a celobiose, composta por duas moléculas de glicose. O grau de polimerização da celulose pode variar de centenas a milhares de unidades de glicose, dependendo da origem da biomassa e das condições de processamento (AGUIAR, 2017; YOUSUF, 2017).

Figura 3 – Estrutura molecular da celulose com unidades de β -D-glicose ligadas por ligações β (1→4)



Fonte: CEDERJ (2011).

As cadeias de celulose organizam-se em estruturas denominadas microfibrilas, mantidas por extensas redes de ligações de hidrogênio intra e intermoleculares, além de interações de Van der Waals. Essa organização confere elevada estabilidade estrutural ao polímero e contribui para sua resistência à degradação química e biológica (YOUSUF, 2017).

Estruturalmente, a celulose apresenta regiões cristalinas e amorfas. As regiões cristalinas caracterizam-se pelo elevado grau de organização das cadeias

poliméricas, resultando em maior resistência mecânica e menor acessibilidade aos agentes hidrolíticos. Em contrapartida, as regiões amorfas apresentam menor ordenação molecular, favorecendo a difusão de água e o acesso de reagentes químicos ou enzimas responsáveis pela hidrólise. O grau de cristalinidade varia conforme a espécie vegetal e o método de obtenção da biomassa, situando-se geralmente entre 50% e 70% (AGUIAR, 2017; MARECOS, 2024).

Na biomassa lignocelulósica, as microfibrilas de celulose encontram-se envolvidas por uma matriz composta por hemicelulose e lignina, formando uma estrutura altamente integrada e resistente à degradação. Essa organização estrutural é um dos principais fatores responsáveis pela recalcitrância da biomassa, dificultando o acesso aos polissacarídeos durante os processos de conversão (SILVA, 2014; YOUSUF, 2017).

Para a produção de etanol de segunda geração, a celulose é considerada o componente mais importante da biomassa lignocelulósica, pois sua hidrólise libera glicose, o principal açúcar fermentescível utilizado pelos microrganismos na produção de etanol. Entretanto, sua elevada cristalinidade e a proteção exercida pela hemicelulose e pela lignina dificultam o acesso aos polissacarídeos, tornando necessárias etapas de pré-tratamento capazes de aumentar a eficiência dos processos de hidrólise e fermentação (SILVA, 2014; MARECOS, 2024).

3.2.2.2 Hemicelulose

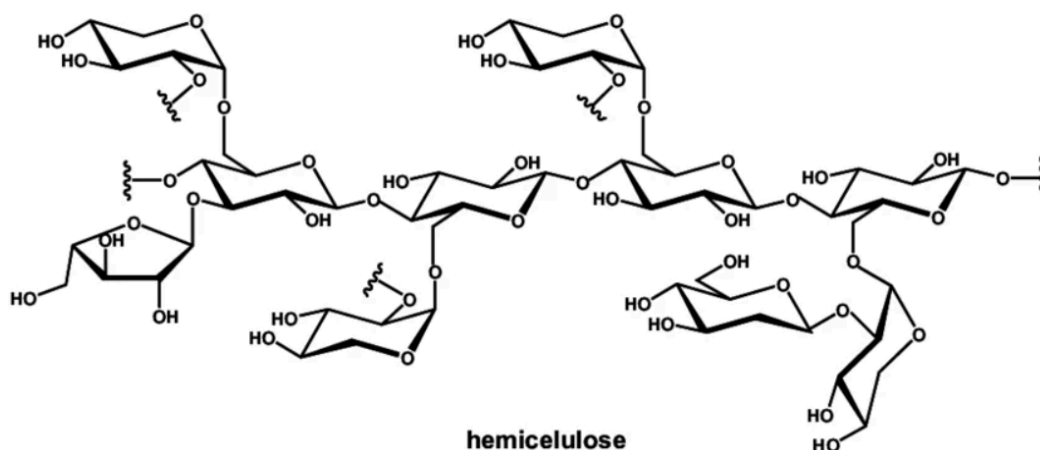
As hemiceluloses são polissacarídeos complexos e heterogêneos que, juntamente com a celulose, constituem a maior parte da fração carboidratada da biomassa lignocelulósica, representando cerca de 70% de sua massa seca. Diferentemente da celulose, que apresenta uma estrutura linear e homogênea, a hemicelulose é formada por uma rede de cadeias ramificadas compostas por diferentes monossacarídeos, incluindo pentoses, como xilose e arabinose, e hexoses, como glicose, manose, galactose e ramnose. Além desses açúcares, sua composição pode incluir grupos acetilados e ácidos urônicos, conferindo-lhe elevada diversidade estrutural (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017; YOUSUF, 2017; TOOR et al., 2020).

A composição da hemicelulose varia de acordo com a espécie vegetal. Em resíduos agrícolas e gramíneas, predominam as xilanas, cuja principal unidade estrutural é a xilose, enquanto em madeiras moles são encontradas

concentrações mais elevadas de manose. Essa variabilidade influencia diretamente as propriedades físico-químicas e o comportamento da biomassa durante os processos de conversão. De modo geral, a hemicelulose apresenta estrutura amorfa, sem organização cristalina definida, característica que a torna mais hidrofílica e suscetível à ação de reagentes químicos e enzimas quando comparada à celulose, assim como demonstrado na Figura 4.

Além disso, possui menor massa molar e grau de polimerização relativamente reduzido, geralmente variando entre 100 e 3.000 unidades de açúcar. Sua estrutura altamente ramificada dificulta a formação de agregados ordenados, favorecendo a solubilização e a acessibilidade aos agentes hidrolíticos (AGUIAR, 2017; YOUSUF, 2017; TOOR et al., 2020; MARECOS, 2024).

Figura 4 – Estrutura da hemicelulose



Fonte: Adaptado de Donate (2014).

Na parede celular vegetal, a hemicelulose exerce uma função estrutural fundamental ao atuar como elemento de ligação entre as microfibrilas de celulose e a lignina. Essa interação ocorre por meio de ligações de hidrogênio com a celulose e de ligações covalentes, principalmente do tipo éster e éter, com a lignina, contribuindo para a rigidez, a elasticidade e a estabilidade mecânica da biomassa vegetal (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017; YOUSUF, 2017; MARECOS, 2024).

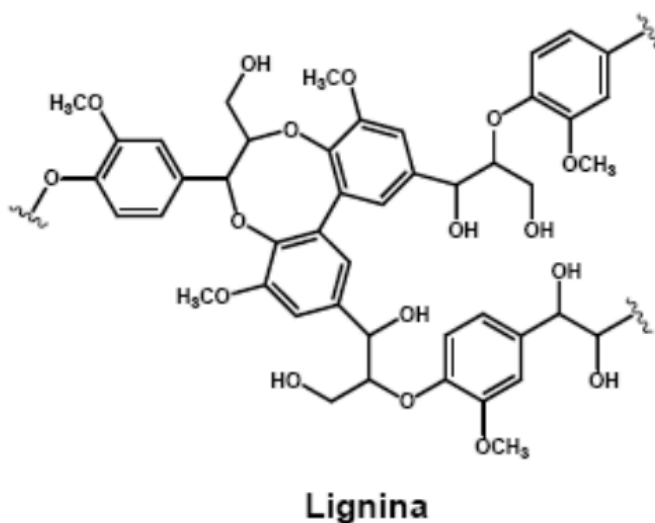
No contexto da produção de bioetanol de segunda geração, a hemicelulose assume papel estratégico por ser o componente mais facilmente solubilizado durante as etapas de pré-tratamento, especialmente nos processos ácido e hidrotérmico. Sua hidrólise libera principalmente pentoses, com destaque para a xilose, ampliando o potencial de aproveitamento dos carboidratos presentes na biomassa e contribuindo para o aumento do rendimento global de etanol. Entretanto,

a conversão eficiente desses açúcares ainda representa um desafio tecnológico, uma vez que a levedura industrial mais utilizada, *Saccharomyces cerevisiae*, não possui capacidade natural de fermentar pentoses. Sendo assim, é necessário empregar microrganismos geneticamente modificados ou espécies naturalmente aptas à fermentação da xilose, como *Scheffersomyces stipitis*, visando maximizar o aproveitamento da fração hemicelulósica (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017; TAVARES, 2016; MARECOS, 2024).

3.2.2.3 Lignina

A lignina é o segundo componente mais abundante da biomassa vegetal, ficando atrás apenas da celulose, e representa uma parcela significativa da matéria orgânica presente na biosfera. A lignina é uma macromolécula polifenólica complexa, caracterizada por uma estrutura tridimensional amorfa e altamente heterogênea, mostrado na Figura 5.

Figura 5 – Estrutura da lignina



Fonte: Adaptado de Donate (2014).

Sua formação ocorre por meio da polimerização de três monolignóis principais: os álcoois p-cumarílico, coniferílico e sinapílico. A combinação dessas unidades origina uma rede molecular extensa e fortemente entrelaçada, composta por diferentes tipos de ligações químicas, o que confere elevada resistência à degradação química e biológica (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017; YOUSUF, 2017; VERARDI et al., 2017; TOOR et al., 2020; MARECOS, 2024).

Na parede celular vegetal, a lignina exerce funções essenciais para o desenvolvimento e a sobrevivência das plantas. Sua presença atua como um agente

cimentante entre as fibras de celulose e hemicelulose, proporcionando rigidez estrutural, resistência mecânica e sustentação aos tecidos vegetais. Além disso, reduz a permeabilidade da parede celular, favorecendo o transporte eficiente de água e nutrientes pelos vasos condutores. Outra função importante está relacionada à proteção da planta, uma vez que a lignina forma uma barreira física que dificulta a ação de microrganismos, fungos e enzimas capazes de degradar os componentes da parede celular (AGUIAR, 2017; YOUSUF, 2017; MARECOS, 2024).

No contexto da produção de bioetanol de segunda geração, a lignina é reconhecida como o principal fator de recalcitrância da biomassa lignocelulósica. Sua estrutura envolve e protege os polissacarídeos presentes na parede celular, dificultando o acesso das enzimas à celulose e à hemicelulose durante a etapa de hidrólise. Além disso, a lignina pode adsorver enzimas celulolíticas de forma não produtiva, reduzindo a eficiência da conversão dos carboidratos em açúcares fermentescíveis. Por essa razão, os processos de pré-tratamento são fundamentais para promover a deslignificação ou modificar a estrutura da lignina, aumentando a acessibilidade dos polissacarídeos e favorecendo as etapas subsequentes de sacarificação e fermentação (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017; MARECOS, 2024).

Embora não possa ser convertida diretamente em etanol pelos processos biológicos convencionais, a lignina possui elevado potencial de aproveitamento dentro do conceito de biorrefinaria. Devido ao seu alto poder calorífico, pode ser utilizada na cogeração de energia térmica e elétrica para suprir parte da demanda energética da própria planta industrial. Logo, o aproveitamento da lignina contribui também para a valorização integral da biomassa e para o desenvolvimento de sistemas produtivos mais sustentáveis (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017; YOUSUF, 2017; TOOR et al., 2020).

3.3 PRÉ-TRATAMENTO DA BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA

O pré-tratamento constitui uma das etapas mais importantes na conversão de biomassa lignocelulósica em etanol de segunda geração, sendo responsável por modificar a estrutura da biomassa e aumentar a acessibilidade dos polissacarídeos às etapas subsequentes de hidrólise e fermentação (SILVA, 2014; MARECOS, 2024). Sua necessidade está associada à recalcitrância natural da parede celular vegetal, resultante da organização complexa entre celulose,

hemicelulose e lignina, que dificulta o acesso de agentes químicos, enzimas e microrganismos aos açúcares fermentescíveis (ZHANG, 2017; AGUIAR, 2017).

De modo geral, o pré-tratamento tem como objetivo promover alterações físicas e químicas na biomassa, aumentando sua porosidade e área superficial, reduzindo a cristalinidade da celulose e removendo parcial ou totalmente a hemicelulose e a lignina. Essas modificações favorecem a liberação dos açúcares estruturais e contribuem para o aumento da eficiência da hidrólise, etapa fundamental para a produção de bioetanol (ALBARELLI, 2013; MARECOS, 2024).

Além de influenciar diretamente o rendimento da produção de etanol, o pré-tratamento representa uma das etapas de maior impacto econômico no processo. Dessa forma, um método eficiente deve maximizar a disponibilidade dos açúcares fermentescíveis, minimizando simultaneamente o consumo de energia, a utilização de reagentes e a formação de compostos inibidores, como furfural e hidroximetilfurfural (HMF), que podem comprometer o desempenho da fermentação (AGUIAR, 2017; MARECOS, 2024).

3.3.1 Pré-tratamento Físico-Químico

O pré-tratamento físico-químico combina a ação de fatores térmicos, mecânicos e químicos para promover alterações estruturais na biomassa lignocelulósica. Em geral, esses métodos utilizam condições controladas de temperatura e pressão para aumentar a porosidade do material e facilitar o acesso aos polissacarídeos presentes na parede celular vegetal (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017).

Entre as tecnologias mais empregadas destaca-se a explosão a vapor (steam explosion), na qual a biomassa é submetida a vapor saturado sob alta pressão por um curto período, seguido de uma rápida descompressão. Esse processo promove a desestruturação da matriz lignocelulósica, favorecendo a solubilização da hemicelulose e modificações na estrutura da lignina. Como vantagens, apresenta baixo consumo de reagentes e relativa simplicidade operacional, embora possa gerar compostos inibidores quando submetido a condições severas de processamento (MARECOS, 2024; ALBARELLI, 2013).

Outro método amplamente estudado é o AFEX (*Ammonia Fiber Explosion*), que utiliza amônia líquida sob pressão seguida de rápida descompressão. Esse tratamento promove alterações na estrutura da biomassa e reduz a

recalcitrância da celulose, aumentando sua susceptibilidade à hidrólise. Além disso, apresenta baixa formação de compostos inibidores, embora os custos associados à recuperação da amônia ainda limitem sua aplicação industrial (ZHANG, 2017; AGUIAR, 2017).

O pré-tratamento hidrotérmico, também conhecido como *Liquid Hot Water* (LHW), emprega água em estado líquido sob altas temperaturas e pressão, sem a necessidade de reagentes químicos adicionais. Nessas condições, ocorre a hidrólise parcial da hemicelulose e a remoção de parte da lignina, aumentando a acessibilidade da fração celulósica. Apesar de ser considerado um método ambientalmente favorável, seu principal desafio está relacionado ao elevado consumo energético necessário para o aquecimento da água (SILVA, 2014; MARECOS, 2024).

Embora os métodos físico-químicos apresentem resultados promissores na desestruturação da biomassa lignocelulósica, sua aplicação depende de fatores como custo operacional, disponibilidade de equipamentos e características da matéria-prima utilizada.

3.3.2 Pré-tratamento Biológico

O pré-tratamento biológico consiste na utilização de microrganismos ou de suas enzimas para promover a degradação seletiva dos componentes da biomassa lignocelulósica. O principal objetivo dessa abordagem é remover ou modificar a lignina e, em menor grau, a hemicelulose, aumentando a acessibilidade da celulose às etapas subsequentes de conversão (ZHANG, 2017; MARECOS, 2024).

Entre os agentes biológicos mais estudados destacam-se os fungos de podridão branca, como *Phanerochaete chrysosporium*, *Pleurotus ostreatus* e *Ceriporiopsis subvermispura*, capazes de degradar a lignina por meio da produção de enzimas oxidativas, como lacases e peroxidases. Algumas bactérias também apresentam potencial para a degradação de componentes estruturais da biomassa, embora sua aplicação ainda seja menos difundida (VERARDI et al., 2017; ZHANG, 2017).

Uma das principais vantagens desse método é a realização do processo em condições brandas de temperatura e pressão, resultando em baixo consumo energético e reduzida utilização de produtos químicos. Além disso, a elevada seletividade dos microrganismos favorece a formação de menores

quantidades de compostos inibidores, quando comparada a outros métodos de pré-tratamento (MARECOS, 2024; SINGH et al., 2022).

Apesar desses benefícios, a aplicação industrial do pré-tratamento biológico ainda é limitada pela baixa velocidade do processo, que pode exigir vários dias ou semanas para atingir resultados satisfatórios. Adicionalmente, parte dos açúcares presentes na biomassa pode ser consumida pelos próprios microrganismos durante seu crescimento, reduzindo o rendimento final da conversão. Dessa forma, o pré-tratamento biológico é frequentemente empregado em associação com outras tecnologias, buscando combinar eficiência de processamento e sustentabilidade operacional (ZHANG, 2017; MARECOS, 2024).

3.4 HIDRÓLISE DA BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA

A hidrólise é uma etapa fundamental na produção de bioetanol de segunda geração, sendo responsável pela conversão dos polissacarídeos presentes na biomassa lignocelulósica em açúcares fermentescíveis. Nesse processo, as cadeias de celulose e hemicelulose são quebradas em unidades menores, como glicose e xilose, que posteriormente podem ser metabolizadas por microrganismos durante a fermentação (MARECOS, 2024; AGUIAR, 2017; ALBARELLI, 2013).

3.4.1 Hidrólise Enzimática

A hidrólise enzimática é um processo de conversão dos polissacarídeos presentes na biomassa lignocelulósica em açúcares fermentescíveis por meio da ação de enzimas específicas. Diferentemente da hidrólise química, essa técnica opera sob condições mais brandas de temperatura e pH, o que reduz a degradação dos açúcares formados e minimiza a geração de compostos inibidores da fermentação (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017).

A degradação da celulose ocorre pela ação conjunta de um complexo enzimático conhecido como celulasas. As endoglucanases atuam nas regiões internas das cadeias celulósicas, criando novos pontos de ataque, as exoglucanases promovem a liberação de moléculas de celobiose a partir das extremidades das cadeias; e as β -glicosidasas convertem a celobiose em glicose, disponibilizando esse açúcar para a etapa de fermentação (MARECOS, 2024; AGUIAR, 2017).

Quando a biomassa ainda apresenta quantidades significativas de hemicelulose, também podem ser empregadas hemicelulasas, como as xilanases,

que auxiliam na degradação dessa fração e facilitam o acesso das celulases às microfibrilas de celulose. Os coquetéis enzimáticos utilizados industrialmente são produzidos principalmente por fungos filamentosos dos gêneros *Trichoderma*, *Aspergillus* e *Penicillium* (VERARDI et al., 2017; AGUIAR, 2017).

Entre as principais vantagens da hidrólise enzimática destacam-se a elevada especificidade das enzimas, as condições operacionais brandas e a baixa formação de subprodutos indesejáveis. Entretanto, a aplicação dessa tecnologia em larga escala ainda é limitada pelo alto custo das enzimas e pelo longo tempo necessário para a conversão dos polissacarídeos. Além disso, fatores como a presença de lignina e o acúmulo de glicose e celobiose podem reduzir a eficiência do processo, tornando indispensável a realização de um pré-tratamento adequado da biomassa (SILVA, 2014; ALBARELLI, 2013).

Embora apresente elevado potencial para a produção de bioetanol de segunda geração, a hidrólise enzimática ainda enfrenta desafios relacionados à viabilidade econômica, motivo pelo qual a hidrólise ácida continua sendo amplamente empregada em processos que buscam maior simplicidade operacional e menores custos de implementação (MARECOS, 2024; SINGH et al., 2022).

3.4.2 Hidrólise Química

A hidrólise química utiliza reagentes capazes de catalisar a ruptura das ligações glicosídicas presentes nos polissacarídeos da parede celular vegetal. Entre os diferentes agentes empregados, os mais utilizados são os ácidos minerais fortes, especialmente o ácido sulfúrico, devido à sua elevada eficiência na liberação de açúcares e ao seu baixo custo de aplicação. Diferente da hidrólise enzimática, esse processo ocorre em condições mais severas de temperatura e acidez, permitindo a despolimerização dos carboidratos presentes na biomassa lignocelulósica (AGUIAR, 2017; MARECOS, 2024; SINGH et al., 2022).

3.4.3 Hidrólise Ácida Diluída

A hidrólise com ácido diluído é uma das rotas mais utilizadas para a conversão de biomassa lignocelulósica, sendo amplamente estudada devido à sua simplicidade operacional e viabilidade econômica. O processo geralmente emprega soluções de ácido sulfúrico em concentrações inferiores a 5%, associadas a elevadas

temperaturas e pressões, favorecendo a quebra das ligações glicosídicas e a liberação dos açúcares estruturais da biomassa (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017).

Frequentemente, a hidrólise ocorre em duas etapas. De início, são utilizadas condições mais brandas para promover a solubilização da hemicelulose, que é mais suscetível ao ataque ácido. Em seguida, condições mais severas são aplicadas para aumentar a conversão da celulose em glicose. Embora essa estratégia permita uma recuperação significativa dos açúcares fermentescíveis, a exposição prolongada a condições severas pode favorecer a degradação dos monossacarídeos formados, reduzindo o rendimento global do processo (ALBARELLI, 2013; AGUIAR, 2017).

3.4.4 Fatores que Afetam a Hidrólise

A eficiência da hidrólise ácida depende de diversos parâmetros operacionais que influenciam diretamente a conversão da biomassa e a formação de subprodutos. Entre eles, a temperatura é considerada um dos fatores mais importantes, pois acelera a velocidade das reações de hidrólise. Porém, temperaturas excessivamente elevadas podem promover a degradação dos açúcares liberados.

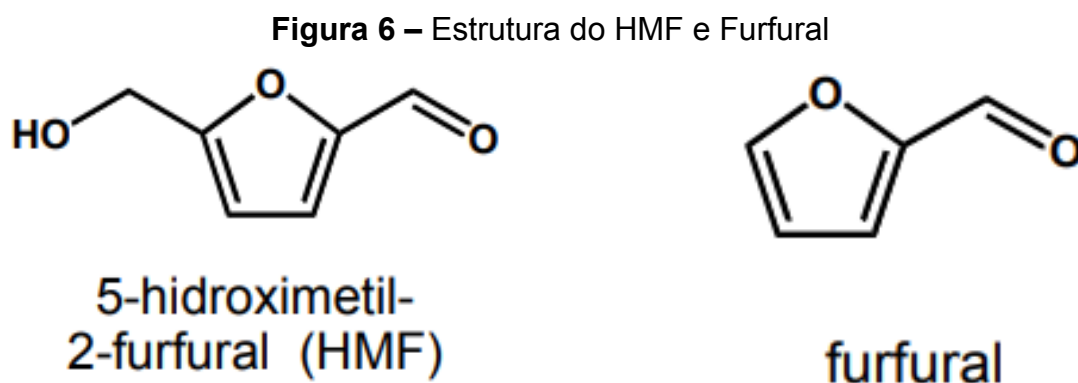
A concentração de ácido também exerce papel decisivo no processo. Concentrações mais elevadas aumentam a taxa de ruptura das ligações glicosídicas, porém podem intensificar a corrosão dos equipamentos, elevar os custos de neutralização e favorecer a formação de compostos inibitórios. De maneira semelhante, tempos prolongados de reação podem aumentar a conversão dos polissacarídeos, mas também ampliam as perdas de açúcares por degradação térmica e química (SILVA, 2014; ZHANG, 2017).

Outro parâmetro relevante é a razão sólido-líquido, que influencia a transferência de massa e a difusão do ácido no interior da biomassa. Em geral, concentrações muito elevadas de sólidos dificultam a homogeneização do meio e podem reduzir a eficiência da hidrólise, enquanto concentrações mais baixas favorecem o contato entre o reagente e a superfície do material lignocelulósico (SILVA, 2014; AGUIAR, 2017).

3.4.5 Formação de Furfural e HMF

Um dos principais desafios associados à hidrólise ácida é a formação de compostos inibidores resultantes da degradação dos açúcares liberados durante o

processo. Em condições de elevada temperatura, acidez e tempo de reação, as pentoses presentes na hemicelulose podem ser convertidas em furfural, enquanto as hexoses provenientes da celulose podem originar o 5-hidroximetilfurfural (HMF) e o furfural, demonstrados na Figura 6 (VERARDI et al., 2017; AGUIAR, 2017).



Fonte: Adaptado de Donate (2014).

Esses compostos são considerados inibidores da fermentação, pois afetam o metabolismo dos microrganismos utilizados na produção de etanol, reduzindo seu crescimento e sua capacidade de conversão dos açúcares em produto final. Além disso, o furfural e o HMF podem sofrer reações adicionais de degradação, formando ácidos orgânicos que aumentam a toxicidade do meio. Dessa forma, o controle adequado das condições operacionais da hidrólise é essencial para maximizar a liberação de açúcares fermentescíveis e minimizar a geração de compostos indesejáveis (SILVA, 2014; MARECOS, 2024).

3.5 DETOXIFICAÇÃO DO HIDROLISADO

A detoxificação, também denominada condicionamento do hidrolisado, é uma etapa importante na produção de bioetanol de segunda geração a partir de biomassa lignocelulósica. Durante o pré-tratamento e a hidrólise ácida, parte dos açúcares e da lignina pode ser degradada, originando compostos como furfural, 5-hidroximetilfurfural (HMF), ácidos orgânicos e fenólicos. Essas substâncias apresentam efeito tóxico sobre os microrganismos fermentativos, reduzindo o crescimento celular e, conseqüentemente, a produtividade de etanol (AGUIAR, 2017; VERARDI et al., 2017; NAVARRO LINS, 2021).

O principal objetivo da detoxificação é reduzir a concentração desses compostos inibitórios sem causar perdas significativas dos açúcares fermentescíveis presentes no hidrolisado, tornando o meio mais adequado para a etapa de fermentação.

3.5.1 Neutralização do Hidrolisado

A neutralização é uma das primeiras etapas realizadas após a hidrólise ácida, tendo como finalidade ajustar o pH do hidrolisado para valores compatíveis com o crescimento microbiano e a fermentação. Entre os métodos mais utilizados destaca-se o overliming, que consiste na adição de hidróxido de cálcio $[Ca(OH)_2]$, seguida do ajuste do pH para a faixa desejada de operação (AGUIAR, 2017).

Além da correção do pH, esse tratamento contribui para a redução de parte dos compostos inibitórios presentes no meio, especialmente furfural e HMF. Durante o processo, também ocorre a precipitação de determinados compostos e sais insolúveis, que podem ser removidos por filtração. Apesar de sua simplicidade e baixo custo, a neutralização isoladamente nem sempre é suficiente para eliminar todos os inibidores presentes no hidrolisado (AGUIAR, 2017; ALBARELLI, 2013).

3.5.2 Tratamento com Carvão Ativado

O uso de carvão ativado é uma das técnicas mais eficientes para a remoção de compostos inibitórios de hidrolisados lignocelulósicos. Seu mecanismo de ação baseia-se na adsorção dos contaminantes em sua elevada área superficial e estrutura porosa, permitindo a retenção de compostos fenólicos, derivados furânicos e parte dos ácidos orgânicos presentes no meio (AGUIAR, 2017; TAVARES et al., 2016).

Quando comparado à neutralização isolada, o carvão ativado apresenta maior capacidade de remoção de substâncias tóxicas, contribuindo para o aumento da fermentabilidade do hidrolisado. Sua eficiência depende de fatores como concentração de adsorvente, tempo de contato, temperatura e pH do meio. Por esse motivo, sua aplicação é frequentemente associada ao ajuste prévio de pH, potencializando a remoção dos compostos indesejáveis (TAVARES et al., 2016; NAVARRO LINS, 2021).

Em função de sua elevada eficiência na remoção de compostos fenólicos e derivados furânicos, o carvão ativado tem sido amplamente empregado em estudos de produção de bioetanol de segunda geração, incluindo processos que utilizam hidrolisados obtidos por hidrólise ácida.

3.5.3 Remoção de Furfural e HMF

Entre os compostos gerados durante a hidrólise ácida, o furfural e o 5-hidroximetilfurfural (HMF) são considerados os principais inibidores da fermentação. O furfural é formado pela degradação de pentoses, especialmente xilose, enquanto o HMF é originado da degradação de hexoses, como a glicose (AGUIAR, 2017; NAVARRO LINS, 2021).

Esses compostos afetam diretamente o metabolismo celular, prolongando a fase de adaptação dos microrganismos e reduzindo a conversão dos açúcares em etanol. Por essa razão, a sua remoção é uma das principais metas dos processos de detoxificação. Além da neutralização e do tratamento com carvão ativado, podem ser empregados métodos como extração com solventes, resinas de troca iônica, biodetoxificação por microrganismos e processos de separação por membranas (VERARDI et al., 2017).

3.5.4 Importância da Detoxificação para a Fermentação

A eficiência da fermentação está diretamente relacionada à qualidade do hidrolisado utilizado como meio de cultivo. A presença de compostos inibitórios pode reduzir a atividade metabólica dos microrganismos, comprometer o consumo de açúcares e diminuir o rendimento final de etanol. Compostos fenólicos derivados da lignina são particularmente prejudiciais, pois podem causar danos à membrana celular e interferir em importantes rotas metabólicas (AGUIAR, 2017).

Dessa forma, a detoxificação desempenha papel fundamental na viabilização do processo fermentativo, permitindo a obtenção de um meio mais adequado ao desenvolvimento dos microrganismos. Quando realizada de forma eficiente, essa etapa contribui para aumentar a viabilidade celular, melhorar o aproveitamento dos açúcares e elevar a produtividade da fermentação alcoólica (VERARDI et al., 2017; NAVARRO LINS, 2021).

3.6 FERMENTAÇÃO ALCÓOLICA

A fermentação alcoólica é a etapa responsável pela conversão dos açúcares fermentescíveis obtidos a partir da biomassa lignocelulósica em etanol. Nesse processo, microrganismos utilizam compostos como glicose e xilose como fonte de energia, produzindo etanol e dióxido de carbono como principais produtos metabólicos. Em processos de produção de bioetanol de segunda geração, a eficiência da fermentação está diretamente relacionada à composição do hidrolisado e à presença de compostos inibitórios oriundos das etapas de pré-tratamento e hidrólise (AGUIAR, 2017; MARECOS, 2024; NAVARRO LINS, 2021).

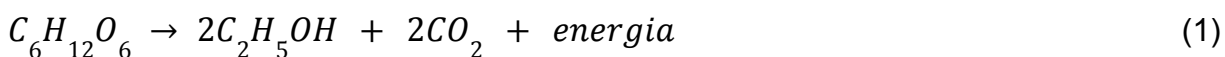
3.6.1 *Saccharomyces cerevisiae*

A levedura *Saccharomyces cerevisiae* é o microrganismo mais utilizado na produção industrial de etanol devido à sua elevada capacidade fermentativa, robustez operacional e tolerância a diferentes condições de processo (VERARDI et al., 2017; GÓES-FAVONI et al., 2018). Trata-se de um microrganismo anaeróbio facultativo, capaz de alternar entre respiração e fermentação de acordo com as condições do meio.

Uma de suas principais características é a eficiência na conversão de hexoses, especialmente glicose e frutose, em etanol. Além disso, apresenta boa tolerância ao etanol produzido durante o processo e resistência a variações moderadas de pH e temperatura, fatores que favorecem sua aplicação em escala industrial. Entretanto, linhagens convencionais de *S. cerevisiae* não metabolizam pentoses de forma eficiente, limitando o aproveitamento integral da fração hemicelulósica da biomassa lignocelulósica (AGUIAR, 2017; VERARDI et al., 2017).

3.6.2 Conversão de Açúcares em Etanol

A conversão da glicose em etanol ocorre por meio de uma série de reações metabólicas conhecidas como glicólise e fermentação alcoólica. De forma simplificada, esse processo pode ser representado pela de Gay-Lussac (Equação 1):



De acordo com essa relação estequiométrica, um mol de glicose é convertido em dois mols de etanol e dois mols de dióxido de carbono. Em condições

ideais, o rendimento teórico máximo corresponde a aproximadamente 0,511 g de etanol por grama de glicose consumida. Entretanto, na prática, parte do substrato é direcionada para a formação de biomassa celular e outros metabólitos, resultando em rendimentos inferiores ao valor teórico (SILVA, 2014; MARTINEZ, 2016).

3.6.3 Fatores que Influenciam a Fermentação

O desempenho da fermentação alcoólica depende de diversos fatores relacionados tanto às condições operacionais quanto à composição do meio fermentativo. Entre os principais parâmetros estão o pH, a temperatura, a concentração de açúcares, a disponibilidade de nutrientes e a presença de compostos inibitórios.

A faixa de pH normalmente utilizada situa-se entre 4,0 e 5,0, condição que favorece o crescimento da levedura e reduz o risco de contaminações microbiológicas. Da mesma forma, a temperatura exerce influência direta sobre a atividade metabólica das células, sendo geralmente empregadas temperaturas entre 28 °C e 35 °C para processos fermentativos com *S. cerevisiae* (GÓES-FAVONI et al., 2018).

A concentração de açúcares também deve ser cuidadosamente controlada, pois valores muito elevados podem causar estresse osmótico, enquanto concentrações reduzidas limitam a produção de etanol. Além disso, compostos como furfural, 5-hidroximetilfurfural (HMF), ácidos orgânicos e fenólicos podem prejudicar o metabolismo celular e reduzir a produtividade fermentativa. Por esse motivo, etapas de detoxificação são frequentemente necessárias antes da fermentação de hidrolisados lignocelulósicos (AGUIAR, 2017; VERARDI et al., 2017).

4 METODOLOGIA

Este capítulo apresenta os materiais utilizados e os procedimentos adotados para a produção de etanol a partir de resíduos alimentícios orgânicos. Os experimentos foram realizados com base na metodologia proposta por Lins (2021), buscando validar sua aplicação em escala laboratorial. Durante a execução dos ensaios, algumas adaptações foram necessárias em função das condições operacionais disponíveis e das dificuldades observadas em determinadas etapas do processo, as quais são descritas ao longo deste capítulo.

4.1 MATERIAIS E REAGENTES

4.1.1 Equipamentos

Os equipamentos utilizados neste trabalho foram: Estufa com ventilação forçada; balança analítica; moinho de facas tipo Willey; liquidificador industrial; peneira 30 mesh; manta aquecedora; bomba a vácuo (sistema de filtração); termômetro digital com espeto; termômetro digital de infravermelho; pHmetro digital; fitas de pH; placa aquecedora com agitação magnética; capela de fluxo laminar; incubadora shaker e autoclave horizontal.

4.1.2 Matéria-prima lignocelulósica

A matéria lignocelulósica utilizada foi uma mistura de resíduos alimentícios orgânicos, a amostra era composta por cascas de melão, casca e bagaço de limão; casca e extremidades de pepino e casca de maçã. Antes do processamento experimental a amostra foi sanitizada com hipoclorito de sódio a 100 ppm por 15 minutos para reduzir a carga microbiana e remover possíveis impurezas superficiais, foi então escorrido e distribuído em uma forma retangular, de modo a garantir a secagem uniforme de todo o material. A Figura 7 mostra a aparência visual da amostra utilizada.

Figura 7 – Resíduos alimentícios orgânicos utilizados como matéria-prima



Fonte: Autora, 2026.

4.1.3 Vidrarias

As vidrarias utilizadas durante os experimentos incluíram béqueres, Erlenmeyers, provetas graduadas, funis de vidro, kitassato e demais acessórios necessários para a preparação das soluções, filtração, fermentação e destilação.

4.1.4 Reagentes e microrganismos

Os reagentes e microrganismos utilizados foram listados no Quadro 1. O microrganismo utilizado na etapa de fermentação alcoólica foi a levedura *Saccharomyces cerevisiae*, empregada na forma de fermento biológico seco instantâneo comercial (Fleischmann®), amplamente utilizada em processos de panificação. A escolha desse microrganismo deve-se à sua disponibilidade.

Quadro 1 – Reagentes químicos e microrganismo utilizados (continuação)

Reagente/Microrganismo	Marca/Fabricante	Concentração/Pureza	Aplicação
Ácido sulfúrico (H_2SO_4)	Neon	95–98%	Pré-tratamento ácido
Hidróxido de cálcio [$\text{Ca}(\text{OH})_2$]	Dinâmica	PA, $\geq 95\%$	Neutralização
Hidróxido de sódio (NaOH)	Dinâmica	PA, $\geq 97\%$	Ajuste de pH
Ácido fosfórico (H_3PO_4)	-	16%	Ajuste de pH
Hipoclorito de sódio	Qboa	2–2,5% de cloro ativo	Sanitização

Quadro 1 – Reagentes químicos e microrganismo utilizados (conclusão)

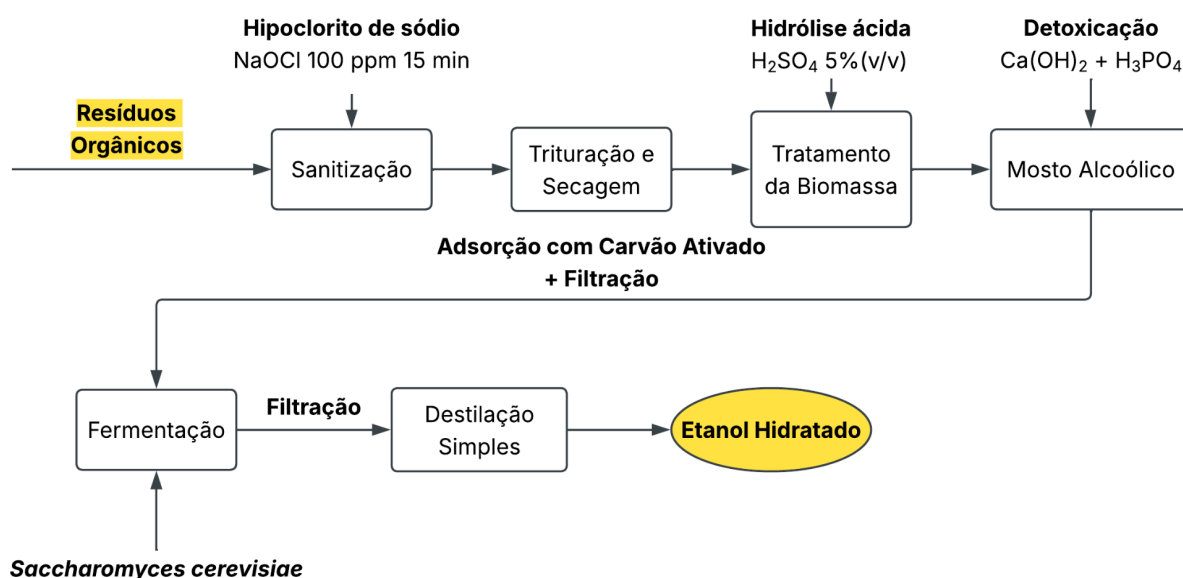
Reagente/Microrganismo	Marca/Fabricante	Concentração/Pureza	Aplicação
Carvão ativado	Alphatec	-	Destoxificação
YEAST EXTRACT	KASVI	PA	Meio de cultura
Glicose Anidra	REATEC	PA	Meio de cultura
Peptona	Synth	-	Meio de cultura
<i>Saccharomyces cerevisiae</i>	Fleischmann	Fermento biológico seco	Fermentação alcoólica

Fonte: Autora, 2026.

4.2 PRODUÇÃO DE ETANOL A PARTIR DE RESÍDUOS ALIMENTÍCIOS ORGÂNICOS

O processo de produção de etanol foi dividido em cinco etapas principais: preparo da biomassa, hidrólise ácida, detoxificação, fermentação alcoólica e destilação, como demonstrado no fluxograma apresentado na Figura 8. As etapas são descritas detalhadamente nas subseções a seguir.

Figura 8 – Fluxograma da metodologia utilizada para produção de etanol a partir de resíduos alimentícios orgânicos



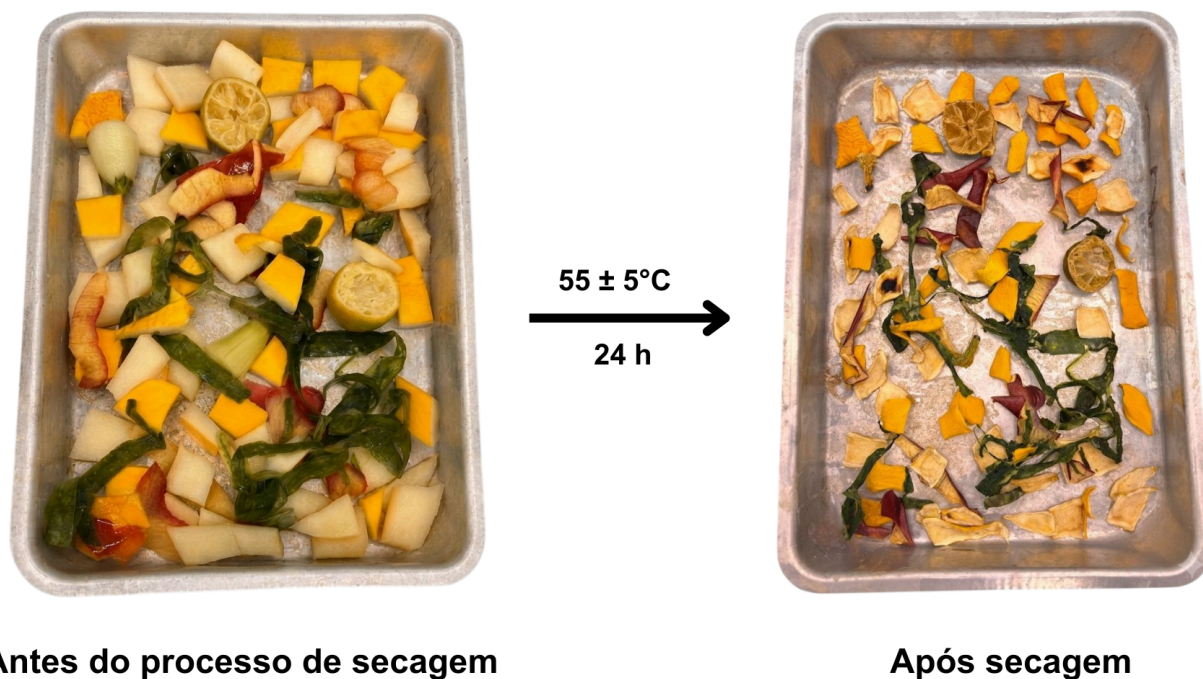
Fonte: Adaptado de Lins (2021).

4.2.1 Preparo da biomassa

O preparo da biomassa teve início com a sanitização dos resíduos alimentícios em solução de hipoclorito de sódio a 100 ppm durante 15 minutos. Em

seguida, após o escoamento da solução sanitizante, o material foi distribuído em bandejas de alumínio e submetido à secagem em estufa com ventilação forçada a $55 \pm 5^\circ\text{C}$ por um período de 24 horas, demonstrado na Figura 9.

Figura 9 – Amostra antes e depois do processo de secagem



Fonte: Autora, 2026.

Após a secagem, a biomassa foi triturada inicialmente em liquidificador industrial e posteriormente em moinho de facas (Figura 10), com o objetivo de reduzir o tamanho das partículas e obter um material mais uniforme. Na sequência, o material triturado foi peneirado em peneira de 30 mesh para padronização da granulometria. Por fim, a biomassa preparada foi armazenada em recipiente plástico hermético, permanecendo acondicionada até sua utilização nas etapas experimentais seguintes.

Figura 10 – Amostra durante processo de trituração



Fonte: Autora, 2026.

4.2.2 Caracterização da biomassa

Com o objetivo de caracterizar os resíduos alimentícios orgânicos utilizados como matéria-prima para a produção de bioetanol de segunda geração (2G) e fornecer os parâmetros de entrada necessários para a modelagem computacional desenvolvida em MATLAB, a biomassa foi submetida à determinação do teor de umidade, à estimativa da composição lignocelulósica e à confirmação da presença de celulose, hemicelulose e lignina por espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR).

Inicialmente, determinou-se o teor de umidade da biomassa pelo método gravimétrico, baseado na perda de massa por secagem (SILVA, 2014; MARTINEZ, 2016). Para isso, as amostras foram pesadas em balança analítica e submetidas à secagem em estufa com circulação forçada de ar a 55 ± 5 °C, até a obtenção de massa constante, conforme a metodologia empregada por Silva (2014) e Lins (2021). O teor de umidade foi calculado a partir da diferença entre a massa inicial da amostra úmida e a massa final após a secagem, sendo os resultados expressos em porcentagem de massa.

Devido à elevada heterogeneidade característica dos resíduos alimentícios urbanos e à dificuldade de determinação experimental individual de todos os seus constituintes lignocelulósicos, as frações de celulose, hemicelulose e lignina foram estimadas com base em dados consolidados da literatura (MARECOS, 2024; LINS, 2021). Essa abordagem fundamenta-se na utilização de composições médias

reportadas para resíduos alimentícios (food waste), obtidas por metodologias padronizadas para a quantificação de carboidratos estruturais e lignina em biomassas lignocelulósicas, conforme os protocolos desenvolvidos pelo National Renewable Energy Laboratory (NREL) (SLUITER et al., 2010). A utilização desses valores de referência é amplamente empregada em estudos de modelagem de processos, uma vez que possibilita a realização de balanços de massa consistentes e fornece parâmetros confiáveis para a representação das transformações envolvidas na conversão da biomassa em etanol (ALBARELLI, 2013; TAVARES et al., 2016; MORALES et al., 2021).

A caracterização estrutural da biomassa foi realizada por espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), com o objetivo de identificar os principais grupos funcionais presentes e confirmar qualitativamente a composição química do material lignocelulósico. Os espectros foram obtidos na região do infravermelho médio, compreendida entre 4000 e 400 cm^{-1} , faixa espectral amplamente empregada para a caracterização de biomassas por abranger as principais vibrações moleculares associadas aos grupos hidroxila, carbonila, ligações C–H, C–O, C–O–C e estruturas aromáticas características da celulose, hemicelulose e lignina (COATES, 2000; BOERIU et al., 2004).

Os dados brutos de transmitância foram exportados em formato de texto estruturado (.txt/.csv) e submetidos a processamento computacional utilizando a linguagem de programação *Python*, em ambiente *Google Colaboratory* (*Google Colab*), plataforma baseada em *cloud computing* que permite a execução de códigos em Python sem a necessidade de instalação local (BISONG, 2019). Inicialmente, os arquivos foram importados e organizados em estruturas do tipo *DataFrame* por meio da biblioteca Pandas, possibilitando a manipulação, organização e tratamento dos dados espectrais de forma eficiente (MCKINNEY, 2022).

Em seguida, os espectros foram normalizados pelo método Min-Max, procedimento amplamente empregado no pré-processamento de dados espectrais por padronizar a escala das intensidades e facilitar a comparação entre diferentes amostras, preservando as características relativas do sinal (JAIN; DUIN; MAO, 2000).

A identificação automática das principais bandas de absorção foi realizada utilizando a função `find_peaks`, disponível no módulo `scipy.signal`, a qual permite localizar máximos locais em sinais unidimensionais com base em critérios como altura, proeminência e distância entre picos (VIRTANEN et al., 2020).

Posteriormente, os espectros normalizados foram representados graficamente utilizando a biblioteca *Matplotlib*, sendo inseridas marcações nas bandas de maior relevância para a identificação dos grupos funcionais característicos da biomassa, conforme apresentado na Figura 14 (HUNTER, 2007).

4.2.3 Hidrólise Ácida

Nesta etapa do processo, a metodologia original previa a realização da hidrólise em autoclave, utilizando ácido sulfúrico a 5% (v/v). Porém, devido às restrições técnicas do equipamento, que não permite a aplicação de soluções ácidas em seu interior, foi necessária uma adaptação. Dessa forma, a hidrólise foi conduzida em estufa, mantendo as mesmas condições operacionais do método original, com temperatura de 121 °C e tempo de reação de 60 minutos. Para garantir o fechamento adequado do sistema durante o tratamento térmico, foi utilizada uma tampa hermética feita com algodão e gaze, como mostra a Figura 11.

Figura 11 – Amostra após o processo de hidrólise ácida



Amostra após hidrólise

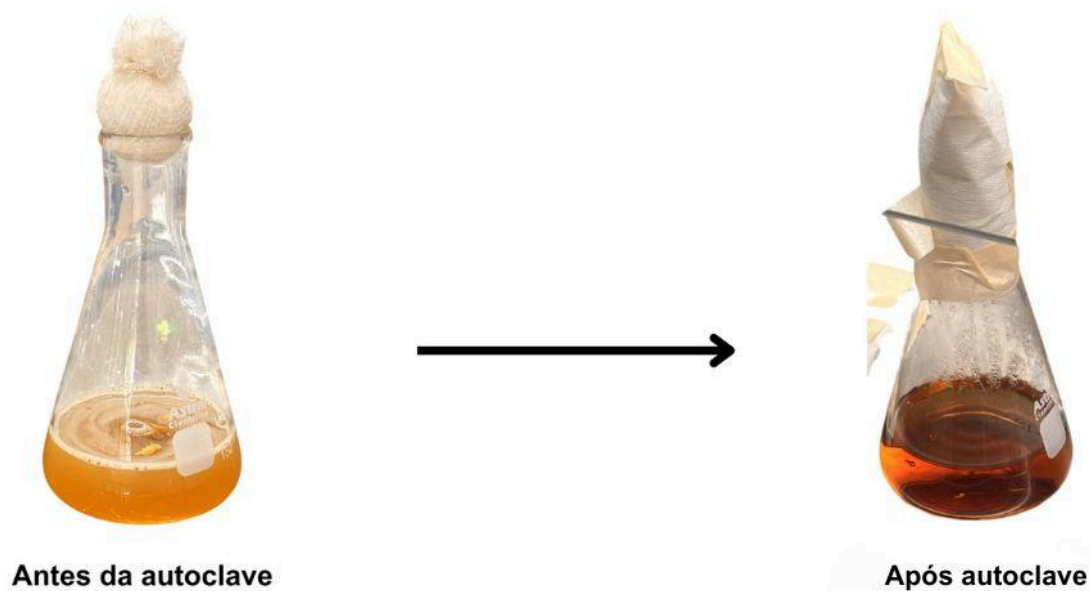
Fonte: Autora, 2026.

4.2.4 Processo de inoculação

Esse processo foi realizado simultaneamente ao de produção do etanol, nele foi feito o preparo do meio de cultura (YPD), utilizando 2 gramas de glicose, 1 grama de extrato de levedura e 2 gramas de peptona. Os sólidos foram transferidos para um erlenmeyer de 250 mL e então adicionado 100 mL de água destilada, com agitação manual moderada até que tudo fosse solubilizado. Em seguida, com a tampa hermética de algodão, o meio foi autoclavado, para evitar proliferação de outro microrganismo que pudesse atrapalhar o crescimento da

levedura posteriormente. A Figura 12 apresenta o meio de cultivo antes e depois da autoclave.

Figura 12 – Meio de cultura antes e após o autoclave



Fonte: Autora, 2026.

Após autoclave, o meio foi resfriado naturalmente até atingir a temperatura de 30 °C. Em seguida, foi adicionado aproximadamente 1 g de levedura *Saccharomyces cerevisiae*, na forma de fermento biológico seco comercial. Posteriormente, o sistema foi mantido a 30 °C por um período entre 12 e 24 horas, com o objetivo de promover a ativação e o crescimento celular da levedura, preparando o meio para a etapa de fermentação alcoólica. A manipulação e adição da levedura foram realizados na capela de fluxo laminar para evitar contaminações no meio.

4.2.5 Detoxificação do Hidrolisado

A etapa de destoxificação do hidrolisado consistiu inicialmente na elevação do pH até aproximadamente 10, seguida de um período de estabilização. Posteriormente, o pH foi reduzido para 5 e novamente mantido em repouso para estabilização do meio. Após esse ajuste, foi adicionado carvão ativado com a finalidade de adsorver compostos inibidores da fermentação, como furfural e 5-hidroximetilfurfural (HMF), além de outras substâncias potencialmente prejudiciais ao desenvolvimento das leveduras. Ao final do processo, o meio foi submetido à filtração para remoção do carvão ativado e dos compostos adsorvidos. Todas as

etapas foram realizadas sob aquecimento controlado e agitação magnética em placa aquecedora.

Durante a execução do primeiro experimento, foram observadas dificuldades no ajuste de pH utilizando o reagente recomendado pela metodologia original, o hidróxido de cálcio $[\text{Ca}(\text{OH})_2]$. Mesmo após a adição de quantidades consideráveis da base, não foi observada variação significativa no pH do hidrolisado. Como alternativa, foram realizados testes com hidróxido de sódio (NaOH) grau P.A., tanto na forma sólida quanto em solução aquosa, porém sem sucesso na neutralização do meio. Em razão dessa limitação, a etapa de destoxificação não pôde ser concluída no primeiro experimento.

Nos experimentos subsequentes, a concentração de ácido sulfúrico empregada na hidrólise foi reduzida de 5% para 3%, e a base utilizada foi o NaOH 1 mol. Essa modificação possibilitou o ajuste adequado do pH e a conclusão da etapa de destoxificação, permitindo a continuidade dos demais procedimentos experimentais previstos na metodologia. Assim, as amostras dos experimentos 2 e 3 passaram pelo processo de aumento de pH até 10 com a adição de aproximadamente 60 mL da solução de NaOH, mantidas sob agitação moderada para melhor dissolução, e então esperou-se 15 minutos para as amostras estabilizarem, passados os 15 minutos, iniciou-se a adição do ácido fosfórico 16% vagarosamente até que o pH das amostras atingissem 5, e então novamente foi esperado 15 minutos para estabilização, por fim é adicionado 2 gramas de carvão ativado, ainda sob agitação, esperou-se 30 minutos para filtrar componente que poderiam interferir na fermentação. Ao concluir essa etapa, as amostras foram filtradas a vácuo, a parte líquida foi reservada para as etapas seguintes.

4.2.6 Fermentação Alcoólica

A etapa de fermentação foi iniciada pela inoculação da levedura previamente ativada no hidrolisado, utilizando-se a proporção de 10 mL de suspensão de levedura para cada 100 mL de hidrolisado. Após a adição, a mistura foi homogeneizada manualmente por meio de agitação moderada, de modo a promover a adequada dispersão dos microrganismos no meio fermentativo.

Em seguida, os recipientes foram vedados com uma tampa hermética confeccionada com algodão e gaze, permitindo a troca gasosa necessária ao metabolismo celular e, ao mesmo tempo, reduzindo o risco de contaminação externa.

Posteriormente, o sistema foi mantido em repouso a 30 °C durante 48 horas, período destinado ao desenvolvimento da fermentação alcoólica. A Figura 13 apresenta a amostra após a adição da levedura antes de ser colocada para fermentar, a (II) é a do experimento 2 e analogamente a (III) do experimento 3.

Figura 13 – Amostras dos experimentos 2 e 3 antes da fermentação



Fonte: Autora, 2026.

4.2.7 Destilação Simples

Nesta parte do processo, as amostras foram filtradas para então serem submetidas a uma destilação simples, a temperatura era controlada manualmente ajustando a distância do balão à manta e também com o ajuste de temperatura na própria manta. A temperatura foi elevada até a faixa de 78-80°C que é a faixa equivalente à temperatura de ebulição do etanol, e mantida nesse intervalo por aproximadamente 30 minutos, porém a destilação teve início apenas quando a temperatura excedeu essa faixa, atingindo em torno de 98 °C, isso ocorreu para ambos os experimentos.

Ao finalizar a destilação, uma quantidade aproximada de 10 mL foi reservada em tubo de ensaio, além de um tubo para a amostra antes da destilação. Essas amostras foram submetidas ao teste de espectroscopia de absorção na região do infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), e também utilizadas no cálculo do teor alcoólico pela densidade. Vale ressaltar que para a amostra do destilado do experimento 2, foi feito também o teste de ressonância magnética nuclear de prótons (RMN de ^1H), para observar a presença do etanol.

4.2.8 Determinação de sólidos solúveis (°Brix)

Após a etapa de hidrólise ácida, uma alíquota do hidrolisado obtido em cada experimento foi coletada para determinação dos sólidos solúveis totais. A análise foi realizada utilizando um refratômetro digital, com os resultados expressos em graus Brix (°Brix), parâmetro amplamente utilizado para estimar a concentração de açúcares e outros sólidos solúveis presentes na solução. Para cada ensaio, uma pequena quantidade do hidrolisado foi depositada na superfície de leitura do equipamento, sendo registrada a leitura correspondente. Os valores obtidos foram posteriormente utilizados para auxiliar na avaliação da eficiência da hidrólise e da disponibilidade de açúcares para a etapa de fermentação.

4.2.9 Determinação do teor alcoólico

Após a etapa de destilação, o teor alcoólico das amostras foi determinado por meio da densidade do destilado. O uso do alcoômetro, inicialmente previsto para essa análise, não foi possível devido ao baixo volume de destilado obtido nos experimentos, insuficiente para permitir a leitura adequada do instrumento.

Para a determinação da densidade, foi medida uma alíquota de volume conhecido do destilado e, posteriormente, sua massa foi determinada utilizando uma balança analítica. A densidade foi calculada a partir da razão entre a massa e o volume da amostra, conforme apresentado na Equação 2.

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (2)$$

Onde ρ representa a densidade da amostra (g mL^{-1}), (m) a massa da amostra (g) e (V) o volume analisado (mL). A partir dos valores de densidade obtidos, foi realizada uma estimativa do teor alcoólico por comparação com valores de referência para misturas água-etanol, de tabelas de teor alcoólico e massa específica a 20°C.

Além disso, com o objetivo de obter uma estimativa complementar do teor alcoólico, foi utilizada a relação entre a densidade da água e a densidade da amostra, um método de iteração, conforme apresentado na Equação 3.

$$X = \frac{(\rho_{\text{água}} - \rho_{\text{real}})}{(\rho_{\text{água}} - \rho_{\text{etanol}})} \quad (3)$$

Em que (X) corresponde à fração relativa de etanol na amostra, ($\rho_{\text{água}}$) representa a densidade da água destilada e (ρ_{real}) a densidade do destilado obtido após a fermentação. Os resultados obtidos foram posteriormente analisados e comparados para avaliar a eficiência do processo de produção de etanol.

4.3 SIMULAÇÃO DO PROCESSO EM MATLAB

Com o objetivo de complementar a análise experimental, foi desenvolvido um modelo fenomenológico-matemático determinístico em ambiente MATLAB para simular o processo de produção de etanol de segunda geração de acordo com a metodologia. O modelo considera um cenário ideal de operação, com conversões estequiométricas e condições teóricas de máxima eficiência. Os resultados da simulação foram utilizados como referência para comparação com os dados experimentais, possibilitando avaliar os rendimentos do processo, identificar perdas ao longo das etapas e analisar a influência dos principais parâmetros operacionais.

4.3.1 Abordagem da Modelagem Computacional

A simulação computacional do processo de produção de etanol de segunda geração (2G) a partir de resíduos de frutas e hortaliças foi desenvolvida utilizando o software MATLAB® (versão R2023). A escolha dessa plataforma ocorreu devido à sua elevada capacidade de processamento numérico, facilidade de implementação de modelos matemáticos e possibilidade de integração entre diferentes etapas do processo em um único ambiente computacional.

Optou-se por uma abordagem de modelagem fenomenológica modular, na qual cada etapa foi representada por um modelo matemático independente. Essa estratégia permite que cada etapa do processo seja analisada individualmente, facilitando a validação dos resultados, a calibração dos parâmetros e futuras adaptações do simulador.

O processo foi dividido nas seguintes etapas: hidrólise ácida, detoxificação do hidrolisado, fermentação alcoólica e destilação. Os resultados obtidos em cada etapa servem como dados de entrada para a etapa subsequente, reproduzindo computacionalmente o fluxo de produção do etanol.

4.3.2 Estrutura do Simulador

O núcleo do programa é composto por um script principal (main), responsável por definir as condições de operação, executar a sequência das etapas do processo, realizar a otimização dos parâmetros operacionais e consolidar os resultados obtidos.

As etapas do processo foram implementadas em funções auxiliares, como hidrólise, detoxificação, fermentação e destilação. Essa organização permite que modificações em uma determinada etapa não afetem diretamente o restante do simulador.

4.3.3 Modelagem Matemática

Cada etapa do processo teve sua função auxiliar definida, explicada separadamente nas seções a seguir.

4.3.3.1 Hidrólise ácida

Para representar matematicamente esse fenômeno foi desenvolvido um modelo cinético fenomenológico baseado na cinética clássica proposta por Saeman, posteriormente revisada e amplamente empregada na modelagem da hidrólise de biomassas lignocelulósicas (NEGAHDAR; DELIDOVICH; PALKOVITS, 2015). Nesse modelo, considera-se que a hidrólise ocorre por meio de duas reações consecutivas e irreversíveis de pseudo-primeira ordem, nas quais os polissacarídeos são inicialmente convertidos em açúcares fermentáveis e, posteriormente, parte desses açúcares sofre degradação térmica, originando compostos indesejáveis. O mecanismo reacional pode ser representado pela Equação (4).



Em que P_s representa os polissacarídeos presentes na biomassa, S corresponde aos monossacarídeos liberados durante a hidrólise e D representa os produtos de degradação, principalmente HMF, furfural e outros derivados provenientes da desidratação dos açúcares. Além disso, k_1 e k_2 são as constantes cinéticas de velocidade, as mesmas foram consideradas dependentes tanto da temperatura quanto da concentração do ácido.

Considerando um reator operando em batelada, a variação temporal das concentrações foi descrita por um sistema de equações diferenciais ordinárias, apresentado nas Equações 5, 6 e 7.

$$d[P]/dt = -k_1[P] \quad (5)$$

$$d[S]/dt = k_1[P] - k_2[S] \quad (6)$$

$$d[D]/dt = k_2[S] \quad (7)$$

Essas equações permitem acompanhar simultaneamente o consumo dos polissacarídeos, o acúmulo dos açúcares fermentáveis e sua posterior degradação ao longo do tempo de reação. Essa abordagem apresenta boa concordância com resultados experimentais encontrados na literatura para processos de hidrólise de biomassas submetidas a condições de temperatura elevada e meio ácido (MOSIER et al., 2005; NEGAHDAR; DELIDOVICH; PALKOVITS, 2015).

Os parâmetros cinéticos utilizados no modelo foram definidos com base em valores reportados na literatura e posteriormente ajustados para representar o comportamento específico dos resíduos orgânicos alimentares estudados. Segundo Negahdar, Delidovich e Palkovits (2015), a energia de ativação para a hidrólise de biomassas pode variar entre aproximadamente 105 e 188 kJ mol⁻¹, dependendo da composição estrutural do material. Biomassas com elevada cristalinidade, como a celulose, apresentam maiores energias de ativação devido à organização das fibras e à maior resistência à ruptura das ligações de hidrogênio. Em contrapartida, resíduos alimentícios apresentam elevada fração amorfa, rica em amido e hemicelulose, tornando-os significativamente mais suscetíveis ao ataque ácido.

A utilização da equação de Arrhenius é amplamente consolidada para representar processos de hidrólise ácida, pois permite descrever adequadamente o aumento exponencial da velocidade reacional com a elevação da temperatura. Em temperaturas mais elevadas ocorre maior frequência de colisões efetivas entre as moléculas, acelerando a quebra das ligações glicosídicas. Entretanto, o aumento excessivo da temperatura também intensifica a degradação dos açúcares produzidos, reduzindo o rendimento final do processo conforme representado na Equação 8 (MOSIER et al., 2005; HENDRIKS; ZEEMAN, 2009).

$$k_i = A_i * (C_{acid})^{n_i} * \exp[-E_{ai}/RT] \quad (8)$$

Em que A_i representa o fator pré-exponencial da reação, C_{acid} corresponde à concentração de ácido sulfúrico empregada na hidrólise (5% v/v), n_i representa a ordem de reação em relação ao catalisador ácido, E_{ai} é a energia de ativação da reação (101 kJ mol⁻¹), R é a constante universal dos gases ideais (8,314 J mol⁻¹ K⁻¹) e T corresponde à temperatura absoluta do sistema, adotada como 394,15 K (121 °C).

As condições iniciais da simulação foram definidas considerando a massa de biomassa seca utilizada experimentalmente e uma razão sólido-líquido de 1:10, condição amplamente empregada em processos de hidrólise por favorecer a transferência de massa e reduzir limitações difusionais (SUN; CHENG, 2002). A concentração inicial de polissacarídeos potencialmente hidrolisáveis foi calculada considerando a incorporação de uma molécula de água durante a conversão das unidades de anidroglicose (162 g mol⁻¹) em glicose livre (180 g mol⁻¹), conforme apresentado na Equação 9.

$$P_0 = (m_{bio} * \frac{f_{carb}}{V_{hid}}) * (\frac{180}{162}) \quad (9)$$

Em que m_{bio} corresponde à massa seca da biomassa, f_{carb} representa a fração mássica de carboidratos presentes no resíduo e V_{hid} corresponde ao volume do meio reacional. As concentrações iniciais de açúcares livres e de produtos de degradação foram assumidas iguais a zero, uma vez que, antes do início da reação, não há formação desses compostos.

A resolução do sistema de equações diferenciais foi realizada numericamente no ambiente MATLAB®, utilizando a rotina *ode45*, baseada no método adaptativo de Runge-Kutta de quarta e quinta ordem. Esse solucionador é amplamente empregado na resolução de sistemas não lineares devido à sua elevada precisão, estabilidade numérica e capacidade de ajustar automaticamente o passo de integração em função do erro estimado (MATHWORKS, 2024). O intervalo de integração considerado foi de 0 a 60 minutos, correspondente ao tempo de residência adotado experimentalmente durante a hidrólise.

Após a integração numérica, o desempenho do processo foi avaliado por meio da conversão dos polissacarídeos e do rendimento de açúcares

fermentáveis. A conversão representa a fração da biomassa carboidratada efetivamente hidrolisada durante a reação e foi calculada conforme a Equação 10.

$$X_p = 1 - \left(\frac{P_{final}}{P_0}\right) \quad (10)$$

O rendimento de açúcares fermentáveis (η_A) foi determinado pela razão entre a concentração final de monossacarídeos (S_{final}) disponíveis e a concentração inicial de carboidratos potencialmente hidrolisáveis (P_0), conforme apresentado na Equação 11.

$$\eta_A = \frac{S_{final}}{P_0} \quad (11)$$

Esses dois parâmetros constituem indicadores fundamentais da eficiência da hidrólise, pois permitem avaliar simultaneamente o grau de conversão da biomassa e as perdas ocasionadas pelas reações secundárias de degradação. Por fim, a concentração final de açúcares obtida ao término da hidrólise foi utilizada como condição inicial para a etapa subsequente de fermentação alcoólica, estabelecendo a integração entre os modelos matemáticos desenvolvidos para representar todo o processo de produção de etanol a partir de resíduos orgânicos alimentares.

4.3.3.2 Detoxificação

Para simular computacionalmente esta etapa, desenvolveu-se uma função no software MATLAB fundamentada em um modelo fenomenológico empírico. O método simulado baseia-se em um tratamento sequencial validado na literatura científica, composto por um ajuste de pH (overliming) seguido de adsorção por carvão ativado. Conforme destacam Tavares, Sene e Christ (2016), as metodologias de detoxificação visando a redução de inibidores frequentemente empregam o ajuste de pH aliado à adsorção com carvão ativado para condicionar o hidrolisado para os bioprocessos.

Matematicamente, o processo foi transcrito por meio de equações de balanço de massa simples, que aplicam eficiências de remoção para os inibidores e um fator de perda inevitável para os açúcares.

A etapa de detoxificação do processo pode ser compreendida por meio do balanço de massa das correntes do biorreator. Durante a variação brusca de pH e a etapa de filtração a vácuo, uma pequena fração dos açúcares recuperados na hidrólise é degradada ou retida na torta de filtração. A concentração final de açúcar

disponível para fermentação é calculada pela Equação 12, assumindo-se uma perda estimada de 5% ($p_A = 0,05$), conforme embasado pelos estudos de Mussatto e Roberto (2004).

$$S_{final} = S_{inicial} * (1 - p_A) \quad (12)$$

Nesta relação, S_{final} representa a concentração final de açúcares fermentáveis após a detoxificação expressa em g/L, enquanto $S_{inicial}$ indica a concentração inicial de açúcares advindos da etapa de hidrólise, também em g/L, e p_A corresponde à fração decimal empírica e adimensional de açúcar perdida durante os processos de precipitação e filtração. Para obter a massa absoluta em gramas, o código multiplica a concentração final pelo volume através da relação $m_{acucar} = S_{final} * V$, onde m_{acucar} é a massa total de açúcar disponível para a próxima etapa em gramas e V é o volume total do hidrolisado tratado em litros.

Em paralelo aos açúcares, a simulação da remoção dos compostos inibitórios fundamentais, como o furfural e o hidroximetilfurfural (HMF), ocorre em dois estágios independentes e sequenciais. A Equação 13 representa a fração destes compostos que permanece no meio após a precipitação no *overliming*.

$$D_{over} = D_{inicial} * (1 - eff_{overlim}) \quad (13)$$

Neste balanço, D_{over} é a concentração de inibidores que restaram no líquido após o ajuste alcalino de pH (g/L), $D_{inicial}$ é a concentração inicial de inibidores gerados na hidrólise ácida que entraram na etapa de detoxificação (g/L), e $eff_{overlim}$ define a eficiência fracionária adimensional de remoção atribuída exclusivamente à precipitação por cálcio. A segunda etapa modela a adsorção pelo carvão ativado atuando sobre o líquido remanescente da primeira fase, sendo este processo representado pela Equação 14.

$$D_{final} = D_{over} * (1 - eff_{carvao}) \quad (14)$$

Nesta equação, D_{final} denota a concentração final de inibidores no hidrolisado detoxificado em g/L, ao passo que eff_{carvao} representa a eficiência fracionária adimensional de remoção proporcionada pela área superficial do carvão ativado. Para avaliar o sucesso global dessa rotina sequencial, calcula-se a taxa de remoção total dos inibidores do sistema, apresentada na Equação 15.

$$\eta_{global} = \frac{D_{inicial} - D_{final}}{D_{inicial} + \epsilon} \quad (15)$$

Nesta última expressão, η_{global} representa a eficiência global da detoxificação, variando de 0 a 1 de forma adimensional, e ϵ atua como uma constante computacional do MATLAB que representa o menor número positivo de ponto flutuante, sendo utilizada matematicamente no denominador apenas para evitar um erro de divisão por zero caso o hidrolisado de entrada $D_{inicial}$ não apresente inibidores.

Os parâmetros numéricos adotados nestas equações foram estimados com base em comportamentos validados na literatura. Em hidrolisados de biomassas diversas, a concentração inicial de inibidores antes do tratamento com carvão pode atingir faixas críticas, sendo comumente relatados valores na ordem de 0,04 a 0,26 g/L para o furfural e de 0,008 a 1,56 g/L para o HMF (TAVARES; SENE; CHRIST, 2016).

Embora o *overliming* possua uma eficiência de remoção moderada, fixada no modelo ao redor de 30% ($eff_{overlim} = 0,30$), a literatura demonstra que a adição de carvão ativado em proporções adequadas, cerca de 20 g/L, é o método mais agressivo contra furanos (MUSSATTO; ROBERTO, 2004). Como o modelo busca representar um processo ideal foi adotado para a simulação uma eficiência $eff_{carvao} = 0,95$, refletindo 95% de eficiência de adsorção. A adoção conjunta destas estimativas confere ao modelo computacional uma representação realista e fundamentada do comportamento das correntes materiais em biorreatores.

4.3.3.3 Fermentação alcoólica

Para a simulação desta etapa no software MATLAB, o código emprega a levedura *Saccharomyces cerevisiae*, que é o microrganismo biológico padrão e mais utilizado na indústria sucroalcooleira.

Na simulação computacional, a variável "fração fermentável" (f_{ferm}) atua como um fator de correção matemático, esse fator é em outras palavras um número multiplicador inserido na equação para simular e representar o que ocorre na realidade biológica do processo. Durante a etapa de hidrólise ácida, toda a matriz de carboidratos da biomassa é despolimerizada, gerando uma mistura de açúcares totais

composta tanto por açúcares de seis carbonos (hexoses, como a glicose, proveniente do amido e da celulose) quanto por açúcares de cinco carbonos (pentoses, como a xilose, proveniente da hemicelulose). No entanto, a *S. cerevisiae* possui uma limitação metabólica natural, ela consome e converte eficientemente as hexoses em etanol, mas é incapaz de fermentar as pentoses (NEGAHDAR; DELIDOVICH; PALKOVITS, 2016). Portanto, a variável f_{ferm} tem a função de isolar, a partir da concentração total de açúcares recuperados da etapa de detoxificação (S_{out}), apenas a parcela que será efetivamente metabolizada pela levedura. A concentração inicial de substrato real fermentável (S_0) é calculada pela Equação 16.

$$S_0 = S_{out} * f_{ferm} \quad (16)$$

Diferentemente de biomassas estritamente lignocelulósicas (como o bagaço de cana ou a palha de trigo, que possuem altas frações de hemicelulose e, conseqüentemente, muita xilose não fermentável), os resíduos alimentícios orgânicos (como sobras de restaurantes, cascas, pães, massas e tubérculos) são esmagadoramente ricos em amido. O amido é um polímero composto exclusivamente por moléculas de glicose. De acordo com revisões extensas da literatura focadas na valorização de resíduos alimentares para a produção de bioetanol (HAFID et al., 2017), a quebra da fração de carboidratos destes resíduos libera majoritariamente compostos glicosídicos de fácil degradação. Segundo essas análises de composição para esta matriz específica, entre 85% e 95% dos açúcares liberados na hidrólise são hexoses perfeitamente fermentáveis pela levedura. Por esse motivo, o código sugere adotar um f_{ferm} estimado entre 0,85 e 0,95. A escolha desta estimativa garante que o balanço de massa do biorreator não superestime a produção de etanol, descontando adequadamente os 5% a 15% de pentoses que permanecerão intactas (sem serem consumidas) no mosto fermentado ao final das 48 horas.

A cinética da fermentação, que engloba o crescimento celular, o consumo de açúcar e a formação de etanol, foi fundamentada no modelo fenomenológico clássico proposto por Jacques Monod (MONOD, 1949). Este modelo correlaciona a taxa de crescimento específico do microrganismo (μ) com a concentração do substrato limitante (S) no meio pela Equação 17.

$$\mu = \mu_{max} * \left(\frac{S}{K_s} + S \right)$$

(17)

Nessa Equação 13, μ_{max} representa a taxa de crescimento específico máximo do microrganismo, alcançada quando o substrato está em excesso. O parâmetro K_s é a constante de meia-saturação de Monod, que corresponde à concentração de substrato na qual a taxa de crescimento é exatamente a metade da taxa máxima, refletindo numericamente a afinidade do microrganismo pelo açúcar disponível. A partir da determinação desta taxa de crescimento, o comportamento dinâmico do reator em batelada (onde não há entrada ou saída de massa durante todo o período de processo) é descrito por um sistema de três equações diferenciais ordinárias acopladas.

A Equação 18 descreve a variação da concentração de biomassa celular (X) em função do tempo, que depende diretamente da taxa específica de crescimento e da população microbiana já existente.

$$\frac{dX}{dt} = \mu * X \quad (18)$$

De forma simultânea, a taxa com que o substrato é consumido pelas células é modelada pela Equação 19.

$$\frac{dS}{dt} = - \frac{1}{Y_{xs}} * \mu * X \quad (19)$$

Nesta equação 19, Y_{xs} é o coeficiente de rendimento celular, que indica a massa de células produzidas por massa de substrato consumido. O sinal negativo é utilizado matematicamente para indicar que o substrato está sendo exaurido do meio reacional ao longo do tempo.

A produção de etanol (P) também está diretamente atrelada ao metabolismo e consumo de substrato pelas células, sendo descrita pela Equação 20.

$$\frac{dP}{dt} = Y_{ps} * \frac{1}{Y_{xs}} * \mu * X \quad (20)$$

O termo Y_{ps} representa o coeficiente de rendimento de produto, ou seja, a massa de etanol gerada por massa de substrato consumido. Enquanto o rendimento teórico estequiométrico máximo de Gay-Lussac é de 0,511 g/g, na prática biológica industrial, a levedura desvia uma parcela do carbono consumido para a biossíntese celular (multiplicação da biomassa) e para a produção de metabólitos secundários essenciais à sua sobrevivência, como o glicerol. Por essa razão, a eficiência fermentativa real de processos biotecnológicos situa-se tipicamente em

torno de 90% do máximo teórico, justificando a adoção de um coeficiente de rendimento prático ao redor de 0,46 g/g (BASSO; BASSO; ROCHA, 2011). Esta estimativa é necessária para compensar a parcela de açúcar que o microrganismo desvia da via alcoólica para sua própria manutenção celular e biossíntese de subprodutos (como o glicerol).

Para a resolução numérica e temporal deste sistema, o código estabelece as condições iniciais no instante zero: a concentração de substrato calculada (S_0), a concentração inicial do inóculo de levedura (X_0), estimado na prática como 10% v/v de cultura ativada) e a concentração inicial de produto, assumindo que não há etanol no início do processo ($P = 0$). O sistema matemático é resolvido no MATLAB utilizando o método explícito de Runge-Kutta por meio da rotina *ode45*, integrando as taxas de variação ao longo de um período de 48 horas (t_{ferm}).

Após finalizar a integração, o algoritmo extrai a concentração final de etanol atingida no mosto (P_{final}). A massa total de etanol produzida é então calculada multiplicando-se essa concentração final pelo volume útil do reator. Por fim, a eficiência geral da fermentação (η_{ferm}) é calculada dividindo a concentração final de etanol pelo produto entre o substrato inicial e o coeficiente de rendimento teórico máximo ($S_0 * Y_{ps}$). Este indicador final permite avaliar com precisão o quão próximo o rendimento real da simulação esteve do seu limite estequiométrico absoluto.

4.3.3.4 Destilação Simples

Para a simulação desse processo em MATLAB, foi desenvolvido um modelo de destilação diferencial simples em batelada, que descreve a vaporização progressiva da mistura ao longo do processo, sem a utilização de uma coluna de destilação com refluxo.

A mistura etanol-água apresenta comportamento não ideal e um desvio positivo em relação à Lei de Raoult, associado à formação de um azeótropo. No ponto azeotrópico, as composições das fases líquida e vapor tornam-se iguais, o que limita a separação dos componentes por destilação convencional. Para o sistema etanol-água, esse comportamento ocorre próximo a 95,6% em volume de etanol.

Dessa forma, a representação adequada do equilíbrio líquido-vapor no modelo requer a consideração da não idealidade da fase líquida.

A dinâmica da destilação diferencial em batelada é descrita por meio do balanço de massa diferencial de Rayleigh (RAYLEIGH, 1902). Essa relação estabelece a correspondência entre a quantidade de líquido remanescente no refeedor e a variação de sua composição ao longo do processo, conforme apresentado na Equação 21.

$$\ln\left(\frac{L_0}{L_t}\right) = \int_{x_t}^{x_0} \frac{dx}{y-x} \quad (21)$$

Em que L_0 representa a quantidade inicial de matéria, expressa em mol, presente no refeedor, enquanto L_t corresponde à quantidade de matéria remanescente no instante t . Os limites de integração correspondem à fração molar inicial de etanol no líquido, x_0 , e à fração molar de etanol no líquido residual, x_t . A variável y representa a fração molar de etanol na fase vapor em equilíbrio com a composição líquida x .

No modelo desenvolvido, a integral de Rayleigh é resolvida numericamente para acompanhar o esgotamento progressivo do etanol no refeedor e determinar a composição média do destilado acumulado. Para isso, é necessário estabelecer a relação entre as composições das fases líquida e vapor, representadas por x e y , respectivamente, ao longo de toda a faixa de composição considerada.

Para a obtenção dessa relação, foi utilizado um vetor contendo 150 pontos de composição líquida, distribuídos entre 0 e 1. O valor ($x=0$) representa uma fase líquida constituída exclusivamente por água, enquanto ($x=1$) corresponde à composição de etanol puro. Para cada valor de composição líquida, o programa calcula a composição correspondente da fase vapor em equilíbrio, utilizando uma forma modificada da Lei de Raoult.

Para uma mistura ideal, a Lei de Raoult estabelece que a contribuição de cada componente para a pressão total do sistema é proporcional à sua fração molar na fase líquida e à sua respectiva pressão de vapor de saturação. Essa relação pode ser expressa pela Equação 22.

$$y_i * P = x_i * P_i^{sat} \quad (22)$$

Em que P representa a pressão total do sistema, fixada em 1 atm, equivalente a 760 mmHg, x_i corresponde à fração molar do componente i na fase líquida, y_i representa sua fração molar na fase vapor e P_i^{sat} corresponde à pressão de vapor de saturação do componente.

No modelo, as pressões de vapor de saturação do etanol e da água são determinadas por meio da equação de Antoine, que relaciona a pressão de vapor de uma substância à temperatura do sistema. Como a composição da mistura se altera continuamente durante a destilação, sua temperatura de ebulição também varia ao longo do processo. Assim, a temperatura correspondente ao ponto de bolha é determinada iterativamente no MATLAB por meio da função *fzero*, conforme a abordagem descrita por Smith, Van Ness e Abbott (2007).

Entretanto, a aplicação direta da Lei de Raoult pressupõe comportamento ideal da mistura, condição que não é observada para o sistema etanol-água. As interações intermoleculares entre os componentes provocam desvios em relação ao comportamento ideal, alterando a tendência de vaporização de cada espécie. Para representar esse comportamento no modelo, é introduzido o coeficiente de atividade (γ_i), que permite considerar a não idealidade da fase líquida. A relação de equilíbrio líquido-vapor passa, então, a ser expressa pela Equação 23.

$$y_i * P = x_i * P_i^{sat} * \gamma_i \quad (23)$$

Quando a solução apresenta comportamento ideal, o coeficiente de atividade assume valor unitário, isto é, ($\gamma_i = 1$). Para a mistura etanol-água, entretanto, os coeficientes de atividade são diferentes de 1 e variam com a composição da fase líquida. No modelo desenvolvido, esses coeficientes são calculados por meio da equação de Van Laar, permitindo representar matematicamente o desvio da mistura em relação ao comportamento ideal.

A consideração da não idealidade é particularmente importante para a descrição do comportamento azeotrópico do sistema. À medida que a composição da mistura se aproxima da composição azeotrópica, a diferença entre as composições das fases líquida e vapor diminui. No ponto azeotrópico, essas composições tornam-se iguais, de modo que a vaporização deixa de promover o enriquecimento

adicional da fase vapor em etanol. Para o sistema estudado, esse comportamento está associado à concentração de aproximadamente 95,6% em volume de etanol, estabelecendo o limite de separação por destilação simples considerado no modelo.

A equação de Van Laar é utilizada para calcular os coeficientes de atividade dos componentes de uma mistura líquida binária a partir de parâmetros de interação. No modelo, as frações molares de etanol e água na fase líquida são representadas por x_1 e x_2 , respectivamente, enquanto A_{12} e A_{21} correspondem aos parâmetros de interação binária. Foram utilizados os valores ($A_{12} = 1,6798$) e ($A_{21} = 0,9227$), obtidos a partir de dados experimentais disponíveis na literatura. Os parâmetros representam, respectivamente, as interações entre os componentes da mistura em suas diferentes combinações.

Os coeficientes de atividade do etanol, γ_1 , e da água, γ_2 , são calculados pelas Equações 24 e 25.

$$\gamma_1 = \exp[A_{12}/(1 + (A_{12} * x_1)/(A_{21} * x_2))^2] \quad (24)$$

$$\gamma_2 = \exp[A_{21}/(1 + (A_{21} * x_2)/(A_{12} * x_1))^2] \quad (25)$$

Após o cálculo dos 150 pares de composição (x-y), os pontos obtidos são interpolados numericamente, permitindo representar de forma contínua a relação entre as fases líquida e vapor e, conseqüentemente, resolver a integral de Rayleigh ao longo do intervalo de composição considerado.

Além do balanço de massa, o modelo considera o balanço de energia para determinar a evolução temporal do processo. A quantidade de vapor formada depende da energia fornecida pelo refulvador e do calor latente necessário para promover a vaporização da mistura. Como o calor latente de vaporização varia com as condições do sistema e com a temperatura de ebulição, o modelo utiliza a equação de Watson, juntamente com as correlações propostas por Coker (2007), para estimar a energia necessária à vaporização dos componentes da mistura.

Por fim, após a resolução dos balanços de massa, de equilíbrio e de energia, o modelo utiliza a Lei de Amagat, baseada na aditividade dos volumes parciais, para converter as informações obtidas em frações molares em propriedades de interesse prático. A partir dessa etapa, são determinadas a densidade da mistura e a concentração final de etanol em volume, expressa em percentual volumétrico (%)

v/v), equivalente à graduação alcoólica em graus Gay-Lussac (°GL), conforme a abordagem apresentada por Smith, Van Ness e Abbott (2007).

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos a partir da aplicação da metodologia experimental para produção de etanol de segunda geração utilizando resíduos alimentícios orgânicos, bem como os resultados gerados pelo modelo computacional desenvolvido em MATLAB.

Inicialmente, são apresentados os resultados referentes à caracterização da biomassa, ao pré-tratamento, à hidrólise ácida, à fermentação e à destilação, permitindo avaliar o comportamento do processo em cada uma de suas etapas. Em seguida, os resultados experimentais são comparados com aqueles obtidos pelo modelo computacional, com o objetivo de verificar sua capacidade de representar o processo de produção de etanol de segunda geração e reproduzir os dados experimentais empregados na validação.

Por fim, são apresentados os resultados da otimização dos parâmetros operacionais, realizada por meio de uma busca, identificando as combinações de concentração de ácido sulfúrico, temperatura e tempo de hidrólise que proporcionam a máxima produção de etanol. Os resultados são discutidos considerando os modelos cinéticos, os balanços de massa, as simplificações termodinâmicas adotadas e sua aplicação como ferramenta de apoio à análise e otimização do processo.

5.1 CARACTERIZAÇÃO DA BIOMASSA

Essa etapa teve como objetivo identificar algumas de suas principais características, como teor de umidade, composição lignocelulósica e grupos funcionais presentes na estrutura do material.

A avaliação desses parâmetros é importante para compreender o potencial dos resíduos alimentícios orgânicos como matéria-prima para a produção de etanol de segunda geração, além de fornecer informações que auxiliam na interpretação dos resultados experimentais e na simulação do processo no MATLAB.

5.1.1 Teor de umidade

A Tabela 3 apresenta os resultados relacionados a umidade da biomassa. A conta realizada para encontrar a umidade está descrita como:

$$Umidade(\%) = (m_{inicial} - m_{final})/m_{inicial} ,$$

onde:

- ($m_{inicial}$) é a massa em gramas da amostra antes da secagem e trituração;
- (m_{final}) é a massa em gramas da amostra após secagem e trituração.

Foi realizado também um cálculo para matéria seca, descrita como:

$$Matéria\ seca\ (\%) = (m_{seca}/m_{inicial}) * 100\% . \text{ Onde:}$$

- ($m_{inicial}$) é a massa em gramas da amostra antes da secagem e trituração;
- (m_{seca}) é a massa em gramas da amostra após secagem e trituração.

Tabela 3 – Resultados da determinação do teor de umidade da biomassa

Massa Inicial (g)	Massa Seca s/ Trituração (g)	Massa Seca c/ Trituração (g)	Massa Final (g)	Umidade (%)	Matéria Seca (%)
350	54,35	46,00	46,00	86,86	13,14

Fonte: Autora, 2026.

Os resultados apresentados na Tabela 3 mostram que a biomassa utilizada possui um elevado teor de umidade (86,86%), o que já era esperado devido à composição da mistura de resíduos alimentícios empregada neste estudo. Como consequência, a matéria seca representou apenas 13,14% da massa total da amostra, correspondendo à fração efetivamente disponível para os processos de conversão.

Esse comportamento é comum em resíduos de frutas e hortaliças, que naturalmente apresentam grande quantidade de água em sua composição. Embora a alta umidade reduza a quantidade de biomassa seca disponível para a produção de etanol, ela não impede seu aproveitamento como matéria-prima para a obtenção de biocombustíveis.

Além disso, a remoção do excesso de água contribui para um melhor controle das condições experimentais e para uma avaliação mais precisa do potencial de conversão dos resíduos em etanol de segunda geração.

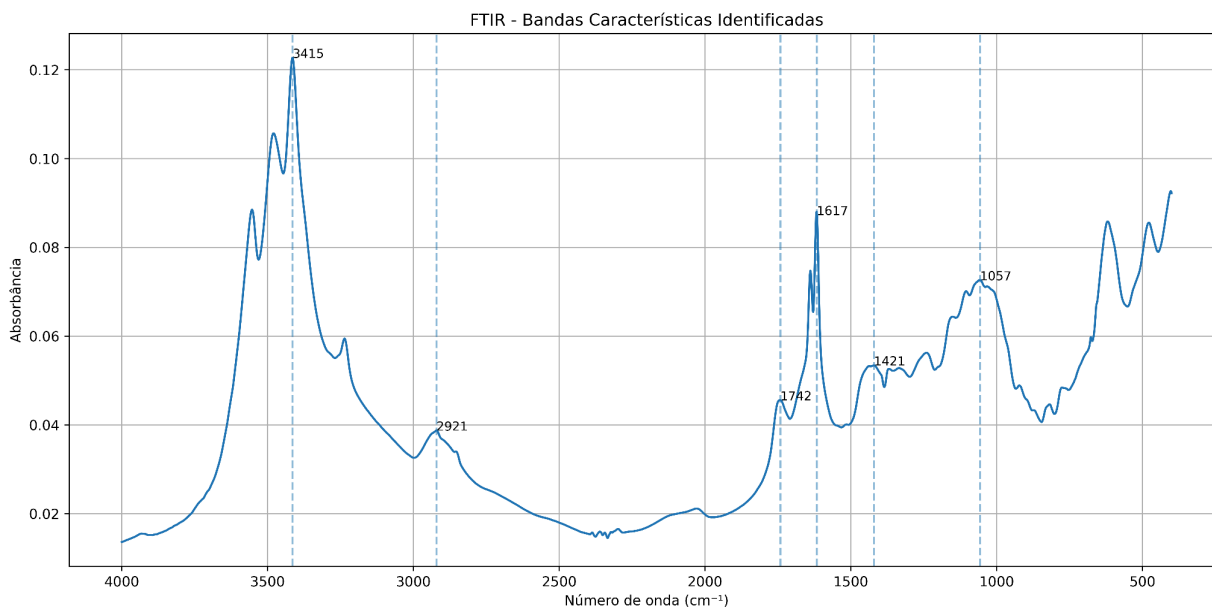
5.1.2 Composição lignocelulósica

Os dados brutos de absorbância em função do número de onda cm^{-1} , obtidos por FTIR, foram exportados em formato de texto estruturado (.csv) para posterior processamento computacional. A análise dos dados foi realizada utilizando a linguagem de programação *Python*, em ambiente *Colab Notebook*.

Inicialmente, os arquivos foram importados e organizados em estruturas do tipo *DataFrame* por meio da biblioteca *Pandas*, permitindo o tratamento e a manipulação eficiente dos dados espectrais. Em seguida, os espectros foram normalizados pelo método Min-Max, com o objetivo de padronizar a escala de intensidade e possibilitar a comparação direta entre as amostras.

A identificação automática das principais bandas de absorção foi realizada utilizando a função *find_peaks*, disponível no módulo *scipy.signal*, a qual permitiu determinar os números de onda correspondentes aos máximos de absorbância presentes nos espectros. Posteriormente, os espectros normalizados foram representados graficamente com o auxílio da biblioteca *Matplotlib*, sendo inseridas marcações nas bandas de maior relevância para a identificação dos grupos funcionais característicos da biomassa, conforme apresentado na Figura 14.

Figura 14 – Espectro FTIR da biomassa utilizada



Fonte: Autora, 2026.

Essa técnica permitiu avaliar a composição química da biomassa por meio da identificação de bandas de absorção características, fornecendo informações sobre a presença de compostos lignocelulósicos, como celulose, hemicelulose e lignina.

A Tabela 4 apresenta as bandas observadas com os grupos funcionais identificados.

Tabela 4 – Principais bandas observadas no espectro FTIR da biomassa e suas atribuições

Banda observada (cm ⁻¹)	Banda teórica (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Atribuição	Absorbância
3415	3400	O-H	Celulose, hemicelulose, lignina e água adsorvida	0,1227
2921	2920	C-H	Grupos alifáticos	0,0387
1742	1730	C=O	Carbonilas da hemicelulose	0,0456
1617	1600	C=C aromático	Lignina	0,088
1421	1420	CH ₂	Celulose cristalina	0,0534
1057	1030	C-O	Celulose e hemicelulose	0,0726

Fonte: Autora, 2026.

Os resultados obtidos pelo FTIR evidenciaram o perfil químico característico da biomassa, permitindo a identificação dos principais constituintes estruturais do material, como celulose, hemicelulose e lignina. A banda registrada em 3415 cm⁻¹, próxima ao valor teórico de 3400 cm⁻¹ e correspondente à maior intensidade de absorbância observada (0,1227), foi atribuída ao estiramento das ligações hidroxila (O–H). Essa absorção está associada aos grupos funcionais presentes na celulose, hemicelulose e lignina, além da água adsorvida na estrutura da biomassa.

Na região de 2921 cm⁻¹ foi identificada uma banda relacionada ao estiramento simétrico e assimétrico das ligações C–H de grupos alifáticos, característicos das cadeias poliméricas que compõem os materiais lignocelulósicos. A presença de hemicelulose foi confirmada pela banda em 1742 cm⁻¹, atribuída ao

estiramento das ligações carbonila (C=O) de grupos éster e acetil, evidenciando a natureza ramificada desse componente estrutural.

A lignina foi identificada pela absorção em 1617 cm^{-1} , associada às vibrações de estiramento das ligações C=C aromáticas. Com absorbância significativa de 0,088, essa banda constitui um importante marcador molecular dos anéis benzênicos que compõem a estrutura fenólica da lignina, contribuindo para a rigidez e resistência mecânica da parede celular vegetal.

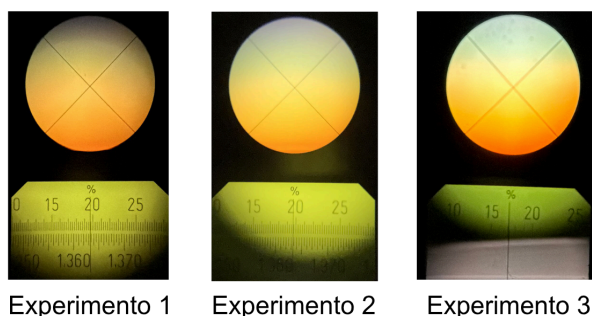
A organização estrutural da celulose também pôde ser avaliada pela banda observada em 1421 cm^{-1} , relacionada às deformações das ligações CH_2 . Essa região espectral é frequentemente associada à fração cristalina da celulose, refletindo o grau de ordenamento molecular presente na biomassa. Já a banda em 1057 cm^{-1} , com absorbância de 0,0726, foi atribuída ao estiramento das ligações C–O presentes nos anéis piranosídicos e nas ligações glicosídicas da celulose e da hemicelulose.

De forma geral, o conjunto das bandas identificadas confirmam a integridade química da biomassa estudada e demonstra a presença dos principais componentes lignocelulósicos esperados. Esses resultados fornecem uma base importante para o acompanhamento das alterações estruturais decorrentes das etapas subsequentes de pré-tratamento, hidrólise e conversão biotecnológica, permitindo avaliar a eficiência dos processos aplicados ao material.

5.2 AVALIAÇÃO DA HIDRÓLISE ÁCIDA

A hidrólise ácida teve como objetivo causar a ruptura parcial da estrutura lignocelulósica da biomassa, favorecendo a liberação de açúcares fermentescíveis para as etapas subsequentes do processo. Os resultados obtidos indicaram que a hidrólise foi efetiva nos três experimentos realizados, evidenciada tanto pelo aspecto visual do hidrolisado (Figura 11) quanto pelos valores de sólidos solúveis totais determinados pelo refratômetro analógico (Figura 15) e também pelos valores de pH obtidos e apresentados na Tabela 5. Vale lembrar que para o experimento 1 o ácido sulfúrico foi utilizado a 5%, conforme metodologia adotada, enquanto os experimentos 2 e 3 foram realizados com a concentração de 3% do ácido.

Figura 15 – Leituras de sólidos solúveis totais (°Brix) dos hidrolisados obtidos nos três experimentos



Fonte: Autora, 2026.

Tabela 5 – Valores de pH e sólidos solúveis totais (°Brix) dos hidrolisados obtidos nos diferentes experimentos

Experimento	pH da solução ácida	pH do hidrolisado	°Brix
1	~ 0	0,515	20
2	~ 0	0,385	20
3	~ 0	0,390	18

Fonte: Autora, 2026.

Os hidrolisados provenientes dos experimentos 1 e 2 apresentaram valores de aproximadamente 20 °Brix, enquanto o experimento 3 registrou cerca de 18 °Brix, valores esses que estão dentro do intervalo ideal para fermentação, de 16-23°Brix. Apesar de ter sido observado uma pequena redução no teor de sólidos solúveis do terceiro ensaio, os resultados demonstram que a hidrólise foi eficiente em todos os experimentos, promovendo a solubilização dos componentes da biomassa e a consequente liberação de açúcares e outros compostos solúveis.

A diferença observada no experimento 3 pode estar relacionada à menor massa de biomassa utilizada durante o processo. Enquanto os experimentos 1 e 2 foram conduzidos com 10 g de biomassa seca, o terceiro utilizou apenas 6,697 g. Dessa forma, a menor quantidade de material lignocelulósico disponível para hidrólise pode ter reduzido a concentração de açúcares liberados para o meio, refletindo no valor de °Brix ligeiramente inferior. Ainda assim, a proximidade entre os resultados obtidos indica que o processo apresentou comportamento consistente e capacidade satisfatória de conversão da biomassa em compostos solúveis.

Os valores de pH dos hidrolisados apresentaram-se próximos ao pH da solução ácida empregada na hidrólise, indicando que o meio permaneceu

fortemente ácido ao longo do processo. Isso sugere que a biomassa não exerceu efeito tamponante significativo capaz de neutralizar os íons H^+ presentes na solução, preservando as condições necessárias para a ocorrência das reações hidrolíticas.

De acordo com AGUIAR (2017) e MARECOS (2024), a manutenção de um pH baixo é desejável durante a hidrólise ácida, pois favorece a ruptura das ligações glicosídicas presentes nos polissacarídeos estruturais da biomassa, promovendo a liberação de açúcares solúveis para o meio reacional. Entretanto, a elevada acidez residual observada nos hidrolisados evidencia a necessidade da etapa subsequente de neutralização e detoxificação, uma vez que valores de pH muito baixos podem comprometer o crescimento de microrganismos fermentativos e reduzir a eficiência da produção de etanol.

5.3 AVALIAÇÃO DA DETOXIFICAÇÃO

A detoxificação do hidrolisado tem o objetivo de neutralizar o meio reacional e reduzir possíveis compostos que poderiam inibir a fermentação. No entanto, no experimento 1, chamou atenção a dificuldade em ajustar o pH, indicando que o sistema apresentava uma forte resistência à alcalinização.

Mesmo com a adição gradual de hidróxido de cálcio $[Ca(OH)_2]$ sob agitação magnética, não foi observada mudança significativa no pH. Nesse experimento, a baixa solubilidade apresentada pelo hidróxido impediu a neutralização da solução. Diante disso, foram feitas novas tentativas utilizando solução de hidróxido de sódio (NaOH) e, posteriormente, pastilhas de NaOH P.A., totalizando seis unidades. Ainda assim, o pH praticamente não se alterou, mesmo com a adição contínua de base.

Esse comportamento sugere que o hidrolisado pode apresentar uma alta capacidade tamponante, além de possíveis ácidos orgânicos formados durante a hidrólise que continuam consumindo os agentes alcalinizantes. Também é possível que haja compostos orgânicos com caráter ácido que dificultem ainda mais a neutralização do meio. Em conjunto, esses fatores ajudam a explicar a dificuldade observada no ajuste de pH e indicam uma limitação importante da etapa de detoxificação nas condições testadas.

Dessa forma, o experimento 1 não foi utilizado para o estudo das demais etapas do processo, devido à impossibilidade de ajuste adequado do pH.

Ainda assim, os resultados anteriores de hidrólise indicam que a etapa foi bem sucedida.

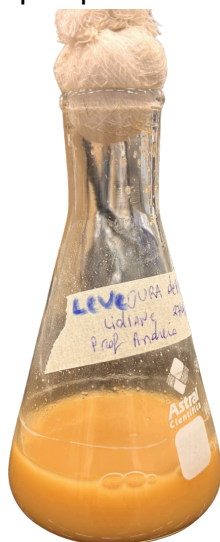
A cor e o cheiro das amostras mudaram significativamente graças ao carvão. Em seguida, as amostras foram filtradas com o auxílio de uma bomba de vácuo antes de seguir para a penúltima etapa do processo.

5.4 AVALIAÇÃO DA FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA

Como descrito na metodologia, simultaneamente ao processo de produção de etanol, foi realizado o preparo do inóculo da levedura, de forma que as etapas seguintes pudessem ser realizadas em sequência. Assim, após as etapas da hidrólise e da detoxificação, as células de levedura previamente crescidas já estavam disponíveis para o processo fermentativo.

Nesse procedimento experimental, foi utilizada a proporção de 10 mL de levedura para cada 100 mL de hidrolisado. Quando as leveduras foram retiradas do período de incubação, pôde-se observar que o meio apresentava aspecto turvo, além da presença de pequenas bolhas e um odor levemente azedo, características que indicam atividade metabólica das leveduras, como mostra a Figura 16.

Figura 16 – Levedura após procedimento preparo do inóculo

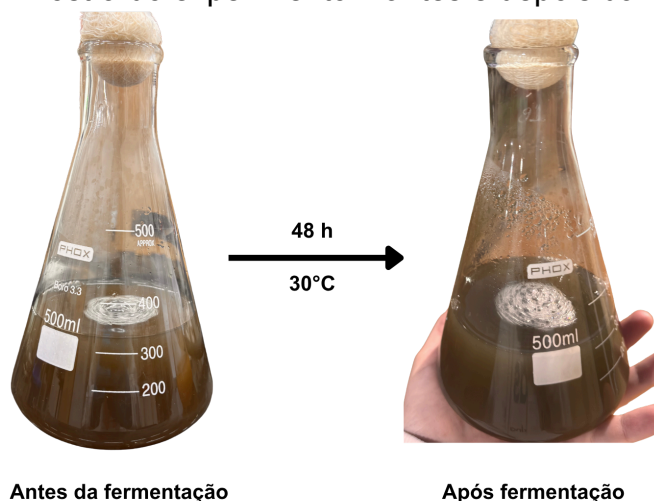


Fonte: Autora, 2026.

Após a adição da levedura ao hidrolisado, o erlenmeyer foi agitado manualmente de forma moderada, com o objetivo de promover uma melhor homogeneização das células na amostra. Em seguida, o sistema foi hermeticamente fechado e mantido em ambiente com temperatura controlada de 30 °C por um período

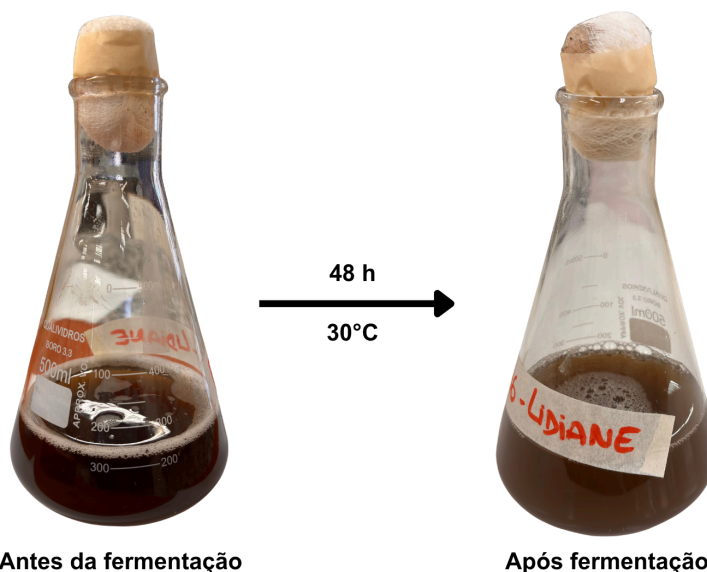
de 48 horas, permitindo que o processo de fermentação ocorresse sob condições adequadas. As Figuras 17 e 18 mostram as amostras dos experimentos 2 e 3, respectivamente, antes e após a fermentação.

Figura 17 – Amostra do experimento 2 antes e depois da fermentação



Fonte: Autora, 2026.

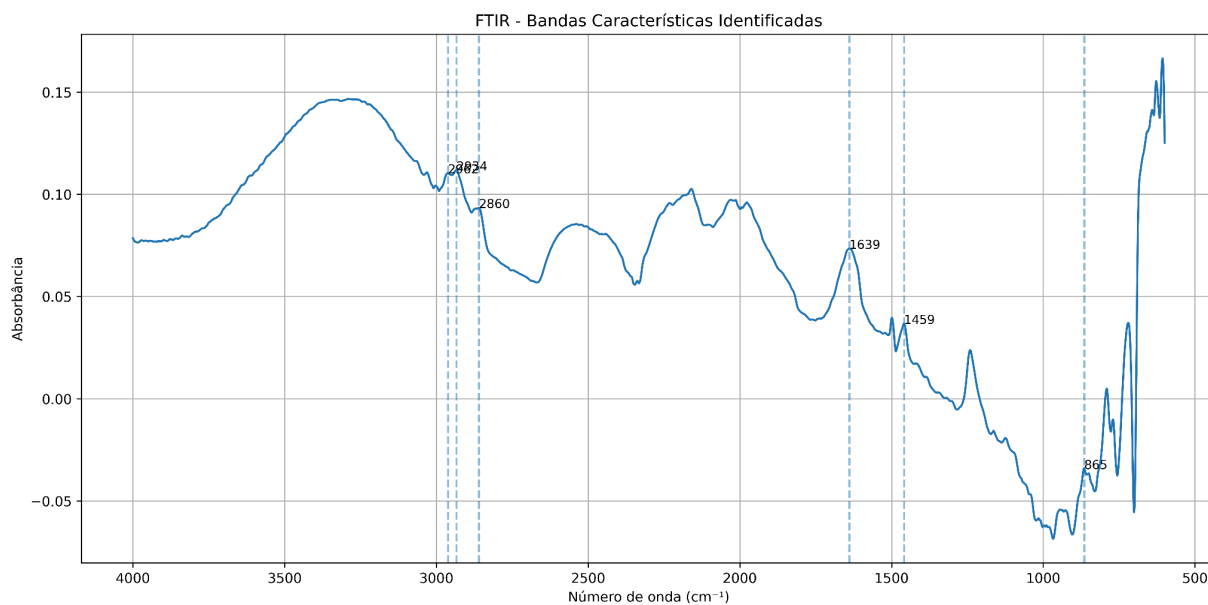
Figura 18 – Amostra do experimento 3 antes e depois da fermentação



Fonte: Autora, 2026.

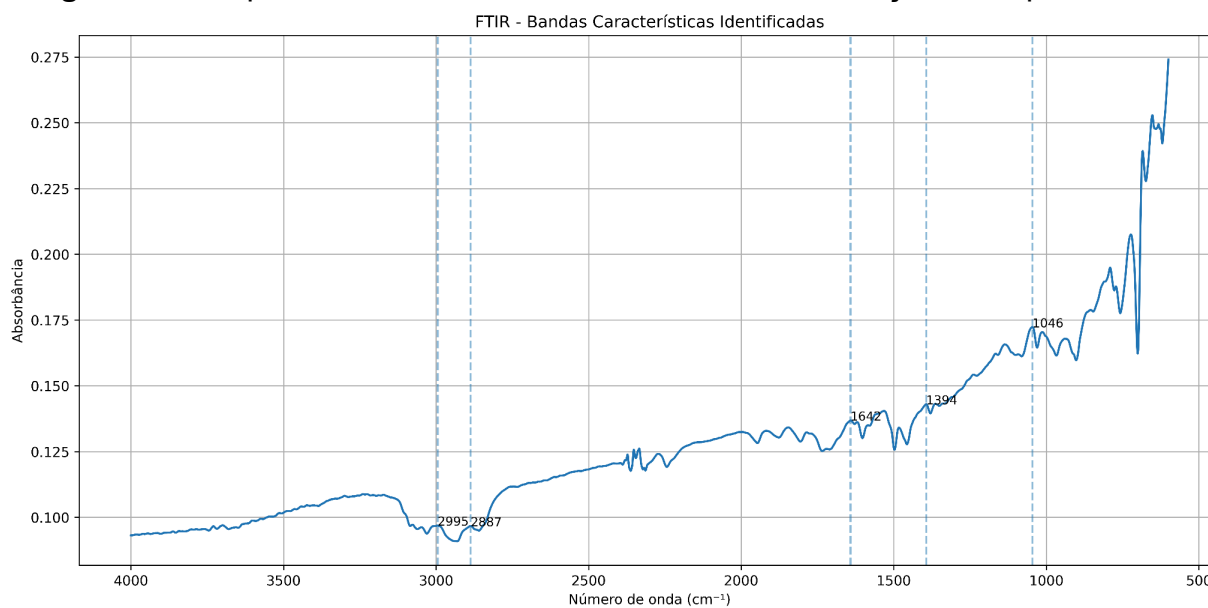
Ao final da fermentação, em ambos os casos, pode-se observar algumas bolhas e também odor levemente azedo que indicou atividade da levedura. A coloração teve uma pequena mudança, dado a adição da levedura à amostra. Após a fermentação, as amostras foram filtradas. Alíquotas das amostras antes do processo de destilação foram reservadas para o teste de FTIR. Os resultados do teste para as amostras, são apresentados nas Figuras 19 e 20, e descritos nas Tabelas 6 e 7.

Figura 19 – Espectros de FTIR da amostra antes da destilação do experimento 2



Fonte: Autora, 2026.

Figura 20 – Espectros de FTIR da amostra antes da destilação do experimento 3



Fonte: Autora, 2026.

Tabela 6 – Principais bandas observadas no espectro FTIR da amostra antes da destilação do experimento 2

Banda observada (cm^{-1})	Banda teórica (cm^{-1})	Grupo funcional	Atribuição	Absorbância
2962	2970	C-H assimétrico	Grupos metila e metileno	0,1103

2934	2930	C-H	Etanol e compostos alifáticos	0,1118
2860	2880	C-H simétrico	Etanol	0,0934
1639	1640	H-O-H	Água	0,0734
1459	1450	CH ₂	Etanol	0,0368
865	880	C-C-O	Álcool primário	-0,034

Fonte: Autora, 2026.

Tabela 7 – Principais bandas observadas no espectro FTIR da amostra antes da destilação do experimento 3

Banda observada (cm ⁻¹)	Banda teórica (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Atribuição	Absorbância
2995	2970	C-H assimétrico	Grupos metila e metileno	0,0969
2887	2880	C-H simétrico	Etanol	0,0967
1642	1640	H-O-H	Água	0,1368
1394	1380	CH ₃	Etanol	0,143
1046	1045	C-O	Etanol	0,1723

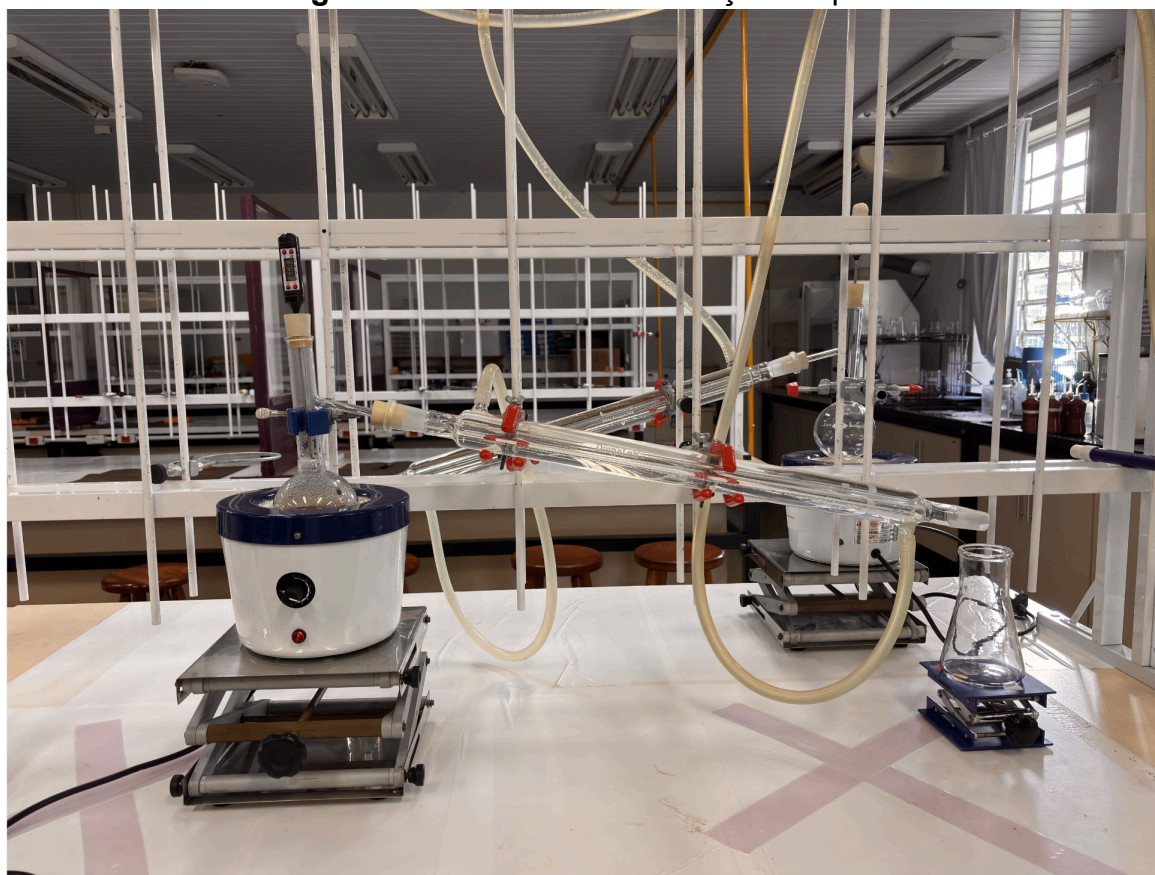
Fonte: Autora, 2026.

Com base nos resultados descritos, pode-se confirmar a ocorrência da fermentação em ambos os experimentos, que apresentaram picos característicos de produtos da fermentação, próximos aos valores teóricos das bandas associadas à presença do etanol. O sucesso do processo fermentativo é evidente em ambas as amostras pelos estiramentos assimétricos e simétricos de ligações carbono (C–H) alifáticas nas regiões de 2962 e 2934 cm⁻¹ (Experimento 2) e 2995 e 2887 cm⁻¹ (Experimento 3), todas características dos grupos metila e metileno constituintes da molécula de etanol. Adicionalmente, as assinaturas estruturais do biocombustível foram confirmadas pelas deformações dos grupos CH₂ em 1459 cm⁻¹ (Experimento 2), CH₃ em 1394 cm⁻¹ (Experimento 3), bem como pelos estiramentos funcionais da ligação C–O em 1046 cm⁻¹ e do esqueleto C–C–O em 865 cm⁻¹, característicos de álcoois primários. Paralelamente, os picos em 1639 cm⁻¹ e 1642 cm⁻¹ (H–O–H) registram a presença de água no meio reacional, o que é esperado para o caldo fermentado bruto antes de passar pelas etapas de purificação térmica (BASSO; BASSO; ROCHA, 2011).

5.5 AVALIAÇÃO DA DESTILAÇÃO SIMPLES

Na etapa final do processo, foi realizada a destilação simples das amostras fermentadas. A temperatura do sistema de destilação foi controlada por meio do ajuste da altura da manta térmica, utilizando um elevador hidráulico, além da regulação da intensidade de aquecimento na própria manta, o termômetro utilizado foi um modelo digital de espeto, como na Figura 21.

Figura 21 – Sistema de destilação simples



Fonte: Autora, 2026.

Durante a destilação dos experimentos 2 e 3, observou-se que, mesmo mantendo a temperatura na faixa de ebulição do etanol (78–80 °C), a formação de condensado foi mínima. O sistema permaneceu aproximadamente 30 minutos nessa faixa de temperatura, porém não foi observado o início efetivo da destilação. Nesse período, pequenas gotas chegaram a se formar na região de passagem entre o balão e o condensador, porém não percorreram todo o trajeto até o coletor, motivo pelo qual não foram consideradas como início da destilação.

Para os três experimentos, a destilação somente teve início quando a temperatura atingiu aproximadamente 90–98 °C, valor superior ao ponto de ebulição do etanol puro (78,37 °C a 1 atm). Esse comportamento é esperado em misturas

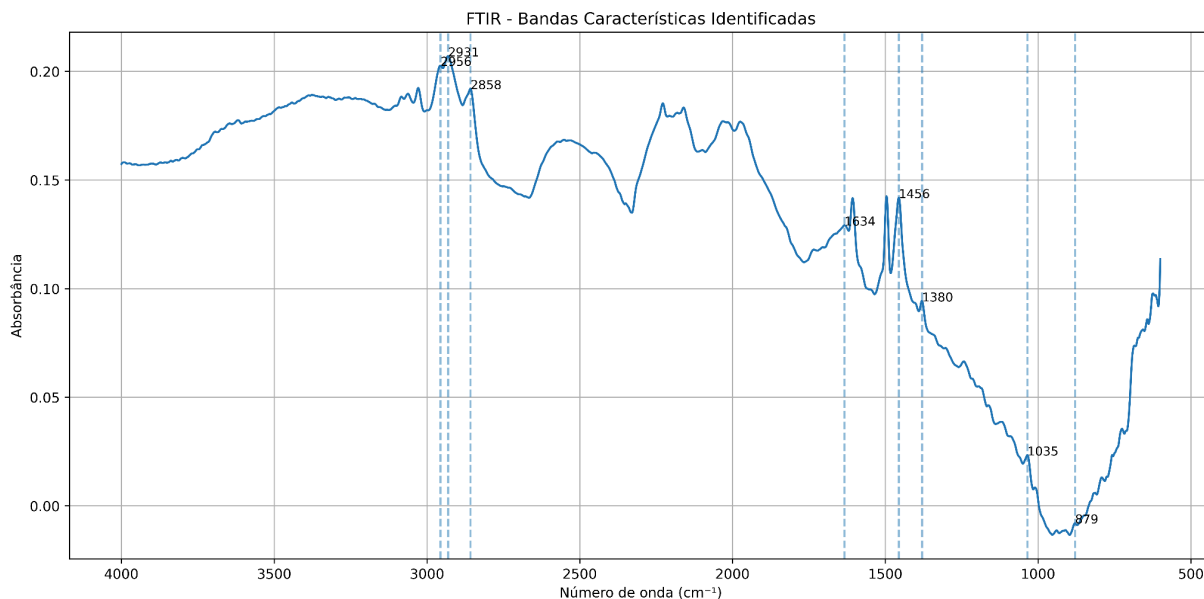
hidroalcoólicas provenientes da fermentação, uma vez que a presença predominante de água e de outros compostos dissolvidos modifica o equilíbrio líquido-vapor do sistema. Dessa forma, a temperatura medida durante a destilação reflete o comportamento da mistura e não o ponto de ebulição de um único componente (PERRY; GREEN; SOUTHARD, 2019; SEADER; HENLEY; ROPER, 2016).

Os destilados obtidos nos três experimentos apresentaram aspecto incolor, porém com diferenças perceptíveis de odor. As amostras dos experimentos 2 e 3 apresentaram características olfativas bastante semelhantes entre si, sendo compatíveis com a formação de compostos voláteis típicos da fermentação alcoólica, incluindo o etanol, enquanto a amostra do experimento 1 apresentou odor distinto. Em relação ao pH, os destilados dos experimentos 2 e 3 apresentaram valor igual a 5, indicando um produto levemente ácido. Em comparação, a ficha de dados de segurança do etanol absoluto PA da Labsynth informa pH igual a 7, caracterizando um produto próximo à neutralidade. Dessa forma, o menor valor de pH observado nos destilados sugere a presença de compostos ácidos residuais provenientes do processo fermentativo e/ou arrastados durante a destilação (LABSYNTH, 2023).

Com o objetivo de confirmar a presença de etanol, as amostras dos destilados dos experimentos 2 e 3 foram submetidas à análise por FTIR, com os resultados apresentados na Figura 21 e Tabela 8, e Figura 22 e Tabela 9, respectivamente. Além disso, a amostra de destilado do experimento 2 foi selecionada para análise por RMN de ^1H , buscando uma confirmação adicional da presença de etanol. O resultado dessa análise está representado na Figura 23 com o espectro formado e descrito na Tabela 10.

A análise por espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) foi realizada com o objetivo de caracterizar qualitativamente a composição química do destilado obtido após o processo de destilação. Os espectros obtidos por FTIR, apresentados na Figura 21 e descritos na Tabela 8, indicaram bandas compatíveis com grupos funcionais característicos do etanol, demonstrando que as etapas de hidrólise, detoxificação e fermentação foram efetivas para a produção do etanol hidratado.

Figura 22 – Espectro FTIR do destilado proveniente do experimento 2



Fonte: Autora, 2026.

Tabela 8 – Resumo dos dados observados no espectro FTIR do destilado proveniente do experimento 2

Banda observada (cm ⁻¹)	Banda teórica (cm ⁻¹)	Grupo funcional	Atribuição	Absorbância
2956	2970	C-H assimétrico	Grupos metila e metileno	0,2026
2931	2930	C-H	Etanol e compostos alifáticos	0,207
2858	2880	C-H simétrico	Etanol	0,192
1634	1640	H-O-H	Água	0,1291
1456	1450	CH ₂	Etanol	0,1418
1380	1380	CH ₃	Etanol	0,0944
1035	1045	C-O	Etanol	0,0233
879	880	C-C-O	Álcool primário	-0,0079

Fonte: Autora, 2026.

O espectro de FTIR obtido para o destilado do experimento 2 (Figura 23) apresentou bandas de absorção características de uma mistura composta predominantemente por etanol e água, evidenciando que o processo de destilação foi capaz de concentrar o álcool produzido durante a fermentação. De modo geral, as frequências experimentais mostraram excelente concordância com os valores descritos na literatura, sendo observados apenas pequenos deslocamentos,

compatíveis com as interações intermoleculares estabelecidas entre as moléculas de etanol e água, principalmente por meio de ligações de hidrogênio.

Na região de maiores números de onda, destacam-se as bandas associadas aos estiramentos das ligações C–H da cadeia alifática do etanol. A banda em 2956 cm^{-1} , com absorvância de 0,2026, corresponde ao estiramento assimétrico dos grupos metila e metileno, apresentando discreta diferença em relação ao valor teórico de 2970 cm^{-1} . Também foram observadas bandas em 2931 cm^{-1} (absorvância de 0,207), atribuída ao estiramento C–H de compostos alifáticos e do etanol, em excelente concordância com o valor teórico de 2930 cm^{-1} , e em 2858 cm^{-1} (absorvância de 0,192), relacionada ao estiramento simétrico das ligações C–H da molécula de etanol.

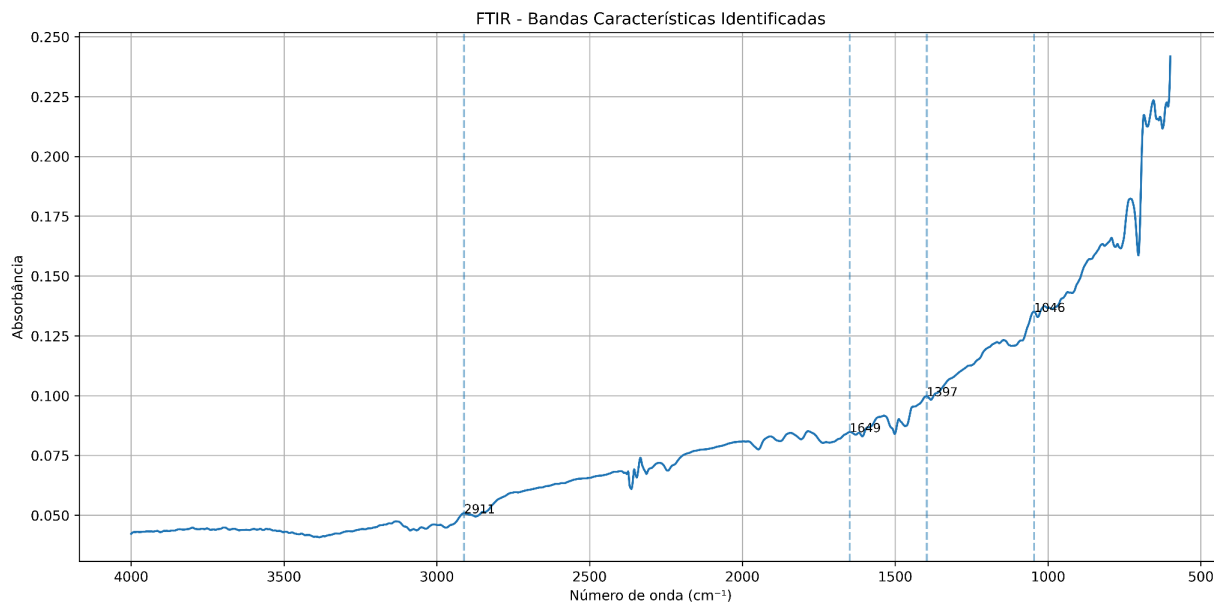
A presença de água residual no destilado foi evidenciada pela banda em 1634 cm^{-1} (absorvância de 0,1291), atribuída à deformação angular da ligação H–O–H, muito próxima ao valor de referência de 1640 cm^{-1} . Esse resultado era esperado, uma vez que a destilação simples não permite a completa separação entre etanol e água devido à formação do azeótropo etanol–água, limitando a obtenção de etanol totalmente anidro apenas por esse processo.

Na região conhecida como impressão digital, foram identificadas bandas que reforçam a presença do etanol na amostra. A absorção em 1456 cm^{-1} (absorvância de 0,1418) corresponde à deformação dos grupos CH_2 , apresentando boa concordância com o valor teórico de 1450 cm^{-1} . Em seguida, a banda em 1380 cm^{-1} (absorvância de 0,0944) foi atribuída à deformação simétrica dos grupos metila (CH_3), coincidindo exatamente com o valor descrito na literatura e constituindo uma importante evidência estrutural da molécula de etanol.

Por fim, na região de menores frequências, observou-se uma banda em 1035 cm^{-1} , com absorvância de 0,0233, correspondente ao estiramento da ligação C–O, característica de álcoois primários e muito próxima do valor teórico de 1045 cm^{-1} . Além disso, foi identificada uma banda em 879 cm^{-1} , atribuída ao estiramento do esqueleto carbônico C–C–O, também em excelente concordância com o valor de referência de 880 cm^{-1} . A identificação conjunta dessas bandas confirma a presença do etanol no destilado obtido, demonstrando que os grupos funcionais característicos da molécula foram preservados ao longo do processo de produção e separação.

O espectro de absorbância em função do número de onda (cm^{-1}) para o destilado do experimento 3 é apresentado na Figura 22, enquanto as bandas características identificadas e suas respectivas atribuições encontram-se na Tabela 9.

Figura 23 – Espectro FTIR do destilado proveniente do experimento 3



Fonte: Autora, 2026.

Tabela 9 – Resumo dos dados observados no espectro FTIR do destilado proveniente do experimento 3

Banda observada (cm^{-1})	Banda teórica (cm^{-1})	Grupo funcional	Atribuição	Absorbância
2911	2930	C-H	Etanol e compostos alifáticos	0,0509
1649	1640	H-O-H	Água	0,0848
1397	1380	CH_3	Etanol	0,0998
1046	1045	C-O	Etanol	0,1351

Fonte: Autora, 2026.

O espectro obtido apresentou bandas de absorção características de uma mistura composta predominantemente por etanol e água, evidenciando a eficiência do processo de separação. As bandas observadas apresentaram boa concordância com os valores descritos na literatura para esses compostos, sendo observados apenas pequenos deslocamentos de frequência, compatíveis com efeitos de interações intermoleculares.

Na região de aproximadamente 2911 cm^{-1} foi identificada uma banda atribuída ao estiramento simétrico e assimétrico das ligações carbono-hidrogênio (C–H) de grupos alifáticos. O valor experimental apresentou pequeno deslocamento em relação ao valor teórico de referência (2930 cm^{-1}), sendo essa banda característica da cadeia carbônica presente na molécula de etanol.

Na região entre 3200 e 3500 cm^{-1} observa-se uma banda larga de baixa intensidade relativa, correspondente ao estiramento das ligações hidroxila (O–H). Essa banda é característica tanto do etanol quanto da água e apresenta alargamento devido à formação de ligações de hidrogênio entre as moléculas presentes no destilado.

Em 1649 cm^{-1} foi observada uma banda associada à deformação angular da molécula de água (H–O–H), apresentando excelente concordância com o valor teórico de 1640 cm^{-1} . A presença dessa banda confirma a permanência de água residual na fração destilada, comportamento esperado devido à formação do azeótropo etanol-água, que limita a obtenção de etanol completamente anidro por destilação simples.

Outra banda característica foi identificada em 1397 cm^{-1} , próxima ao valor teórico de 1380 cm^{-1} , sendo atribuída à deformação simétrica dos grupos metila ($-\text{CH}_3$) presentes na estrutura molecular do etanol. Essa vibração é frequentemente utilizada como uma das evidências espectroscópicas da presença de álcoois alifáticos.

A banda de maior intensidade foi registrada em 1046 cm^{-1} , apresentando absorvância de 0,1351 e excelente concordância com o valor teórico de 1045 cm^{-1} . Essa absorção é atribuída ao estiramento da ligação carbono-oxigênio (C–O), característica de álcoois primários, sendo considerada uma das principais assinaturas espectroscópicas do etanol.

A presença simultânea das bandas associadas ao estiramento C–H (2911 cm^{-1}), ao grupo hidroxila O–H ($3200\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$), à deformação do grupo metila (1397 cm^{-1}) e, principalmente, ao estiramento da ligação C–O (1046 cm^{-1}), demonstra que o destilado obtido é constituído majoritariamente por água, com o segundo grupo sendo os alcoóis.

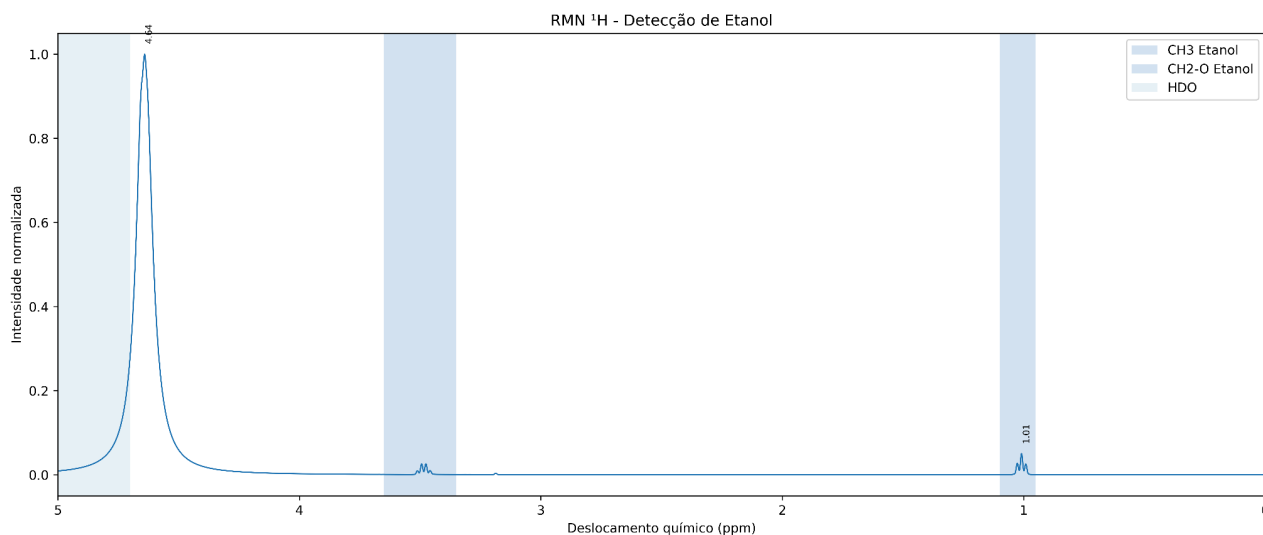
Os pequenos deslocamentos observados entre as frequências experimentais e os valores teóricos podem ser atribuídos às interações intermoleculares decorrentes das ligações de hidrogênio estabelecidas entre as

moléculas de etanol e água, fenômeno amplamente descrito para sistemas hidroalcoólicos.

Dessa forma, os resultados obtidos por FTIR corroboram os resultados das etapas de fermentação e destilação, indicando que o processo empregado foi eficiente na obtenção de uma fração enriquecida em etanol. Além disso, a comparação dos resultados obtidos com as amostras destiladas dos experimentos 2 e 3 indicam uma relação direta da quantidade de biomassa utilizada com o volume de etanol presente no destilado.

Corroborando a análise do destilado, é possível identificar na Figura 23, bandas características de etanol e água, as quais foram devidamente destacadas na figura. O pico de maior intensidade corresponde à água, o que foi identificado por meio da comparação com sua banda característica descrita na literatura (Keeler, 2011), além da posição e do formato do sinal observado. Os dois picos de menor intensidade, por sua vez, também foram analisados com base nas bandas de referência teórica (Keeler, 2011), o que permitiu confirmar a presença de etanol na amostra.

Figura 24 – Análise por RMN¹H do destilado proveniente do experimento 2.



Fonte: Autora, 2026.

Tabela 10 – Resultados do RMN ¹H do destilado proveniente do experimento 2

ppm	Intensidade	Atribuição
4,64	1	Água
1,01	0,051	CH3 Etanol

3,54

0,045

CH₂-O Etanol

 Fonte: Autora, 2026.

A análise do destilado obtido no experimento 2 por meio da Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (RMN ¹H), apresentada na Figura 23 e quantificada na Tabela 10, confirmou a formação de etanol a partir do processamento dos resíduos orgânicos alimentares. Além disso, a técnica evidenciou a presença de uma quantidade significativa de água residual na amostra.

O espectro obtido apresentou os sinais característicos da molécula de etanol (CH₃CH₂OH). Observou-se um sinal em 1,01 ppm, atribuído aos prótons do grupo metila (-CH₃), com intensidade normalizada de 0,051, e outro em 3,54 ppm, correspondente aos prótons do grupo metileno (-CH₂-O-), localizado ao lado da hidroxila, cuja intensidade foi de 0,045. Essas atribuições estão de acordo com os deslocamentos químicos descritos por Silverstein, Webster e Kiemle (2014) e Pavia et al. (2015), que relatam que prótons ligados a carbonos vizinhos a átomos eletronegativos, como o oxigênio, sofrem desblindagem magnética, deslocando o sinal do grupo metileno para a região entre 3,3 e 3,7 ppm. Em contrapartida, os prótons da metila terminal permanecem mais blindados, aparecendo próximos de 1,0 ppm. Dessa forma, os resultados experimentais corroboram o perfil espectral esperado para o etanol.

O pico de maior intensidade foi observado em 4,64 ppm, apresentando intensidade normalizada igual a 1,0. Esse sinal é característico dos prótons da água ou da espécie de troca isotópica (HDO). Segundo Gottlieb, Kotlyar e Nudelman (1997), a água residual em amostras orgânicas normalmente aparece como um singlete largo entre 4,60 e 4,80 ppm, faixa que coincide com o espectro obtido neste trabalho. A predominância desse sinal em relação aos picos do etanol indica que, embora a fermentação seguida da destilação tenha sido capaz de produzir bioetanol de segunda geração a partir dos resíduos alimentares, o destilado ainda apresenta elevada quantidade de água.

Sob a perspectiva da eficiência do processo, outro aspecto importante é a ausência de sinais relevantes na região alifática entre 0 e 3 ppm, sugerindo que a destilação promoveu uma separação satisfatória dos principais compostos voláteis. Esse comportamento indica que componentes menos voláteis, como ácidos orgânicos, açúcares não fermentados e outros subprodutos da fermentação,

permaneceram predominantemente no balão de destilação, reduzindo sua presença no destilado.

Por outro lado, a elevada intensidade do sinal de água demonstra que a etapa de purificação ainda pode ser aprimorada. Esse resultado pode estar relacionado tanto às limitações da destilação simples quanto ao baixo teor alcoólico inicial do mosto fermentado. Na produção industrial de bioetanol, a destilação convencional normalmente concentra o etanol até a composição azeotrópica, correspondente a aproximadamente 95,6% de etanol em massa. Quando se deseja obter etanol anidro, destinado principalmente ao uso como combustível, torna-se necessária uma etapa adicional de desidratação, realizada por processos como peneiras moleculares ou destilação azeotrópica, para remover a água remanescente (GOLDEMBERG, 2008).

Assim, os resultados obtidos por RMN ^1H demonstram de forma consistente que o processo desenvolvido foi capaz de produzir etanol a partir da biomassa residual estudada. Ao mesmo tempo, a análise evidencia que a etapa de purificação representa o principal ponto de melhoria do processo, pela elevada fração de água presente no destilado limita a obtenção de um produto com maior grau de pureza.

5.6 AVALIAÇÃO DO TEOR ALCOÓLICO E DO RENDIMENTO FERMENTATIVO

O teor alcoólico foi calculado apenas para os destilados dos experimentos 2 e 3 que foram as amostras que obtiveram confirmação de presença de álcool na composição. Os resultados foram apresentados na Tabela 11.

Tabela 11 – Teor alcoólico (%) dos destilados provenientes dos experimentos 2 e 3

Experimento	Teor Alcoólico (%)
2	19,80
3	8,85

Fonte: Autora, 2026.

Observa-se que houve uma diferença significativa entre as amostras. O destilado do experimento 2 apresentou um teor alcoólico de 19,80%, enquanto o experimento 3 teve como resultado 8,85% de teor alcoólico. Essa variação observada nos resultados aponta uma diferença significativa na eficiência do processo fermentativo entre os experimentos, mesmo quando submetidos às mesmas condições de operação.

Além disso, a diferença entre os experimentos 2 e 3 reforça a sensibilidade do processo fermentativo às condições do hidrolisado, evidenciando que fatores como pH residual, presença de compostos inibidores, disponibilidade de açúcares fermentescíveis e composição da biomassa podem afetar diretamente o crescimento microbiano e, conseqüentemente, o rendimento final da fermentação (PALMQVIST; HAHN-HÄGERDAL, 2000; SJULANDER; KIKAS, 2020).

5.7 SIMULAÇÃO DO PROCESSO

Os resultados obtidos na simulação do processo de produção de etanol de segunda geração (2G) a partir de resíduos alimentícios orgânicos demonstraram a viabilidade técnica das etapas propostas, refletindo um encadeamento lógico e eficiente desde a quebra das macromoléculas até a purificação final do biocombustível.

O balanço de massa global partiu de uma base de cálculo de 10 gramas de biomassa seca, resultando em um rendimento final de 0,22 gramas de etanol por grama de biomassa processada. Este valor evidencia o elevado potencial energético contido nos resíduos alimentícios, que, por serem matrizes ricas em carboidratos facilmente hidrolisáveis (como amido e hemicelulose), apresentam uma excelente resposta às etapas de pré-tratamento e sacarificação.

É possível visualizar a conversão da matéria ao longo do fluxo de processos, a Tabela 12 apresenta os valores obtidos ao final de cada unidade operacional.

Tabela 12 - Balanço de massa e concentrações ao longo das etapas do processo simulado

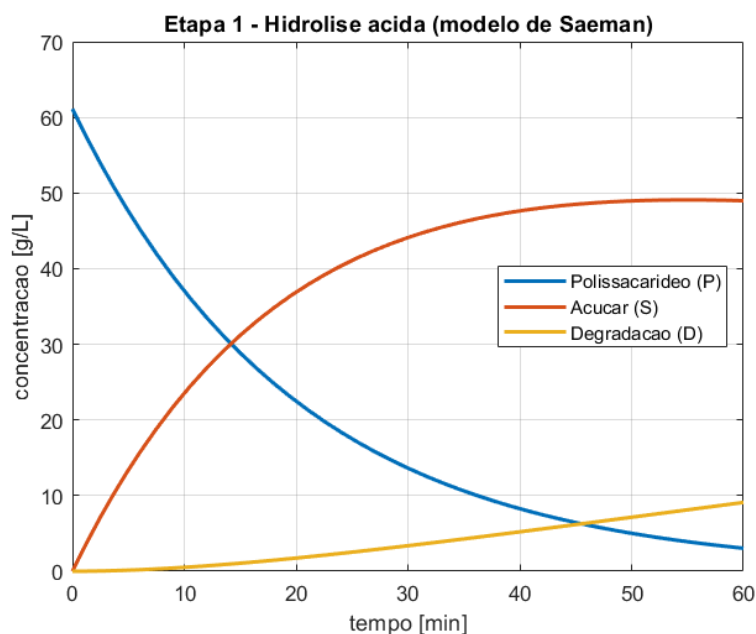
Etapa	Parâmetro Avaliado	Resultado
Hidrólise Ácida	Massa de açúcar produzido	4,90 g
	Concentração final de açúcar	49 g/L
Destoxificação	Massa de açúcar aproveitável	4,85 g
	Massa de etanol produzido	2,18 g
Fermentação		

Destilação	Concentração de etanol no mosto	22 g/L
	Teor alcoólico médio do destilado	24,1 % v/v
	Densidade do destilado	0,949 g/mL
Rendimento Global	Massa de etanol por massa de biomassa	0,22 g/g

Fonte: Autora, 2026.

A primeira etapa do processo consistiu na hidrólise ácida da biomassa, fundamentada matematicamente no modelo cinético de Saeman. A dinâmica dessa reação pode ser observada na Figura 26, que ilustra o decaimento contínuo da concentração de polissacarídeos ocorrendo de forma simultânea à geração e estabilização dos açúcares monoméricos. Ao final do tempo de residência estipulado de 60 minutos, obteve-se uma concentração de 49 g/L de açúcar.

Figura 25 – Hidrólise Ácida (modelo Saeman)

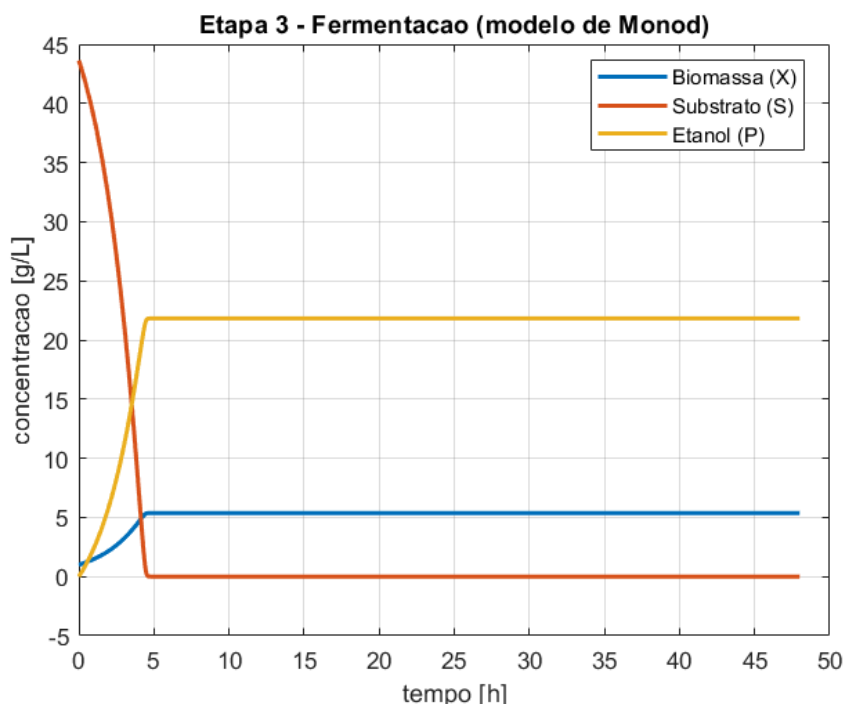


Fonte: Autora, 2026.

O perfil cinético também evidencia uma leve e contínua formação de produtos de degradação ao longo do tempo. O surgimento desses inibidores justifica plenamente a necessidade da etapa subsequente de destoxificação. O tratamento do hidrolisado, simulando a aplicação sequencial de alcalinização e adsorção por carvão ativado, demonstrou alta eficácia. A simulação apontou que a etapa foi capaz de preservar praticamente toda a carga de carboidratos, disponibilizando 4,85 gramas de açúcar para os micro-organismos e indicando que as perdas operacionais por precipitação foram mínimas.

Na fase de conversão biológica, regida pela cinética de Monod, o mosto purificado serviu de substrato para o crescimento da levedura. O comportamento metabólico do sistema está representado na Figura 26.

Figura 26 – Fermentação (modelo de Monod)

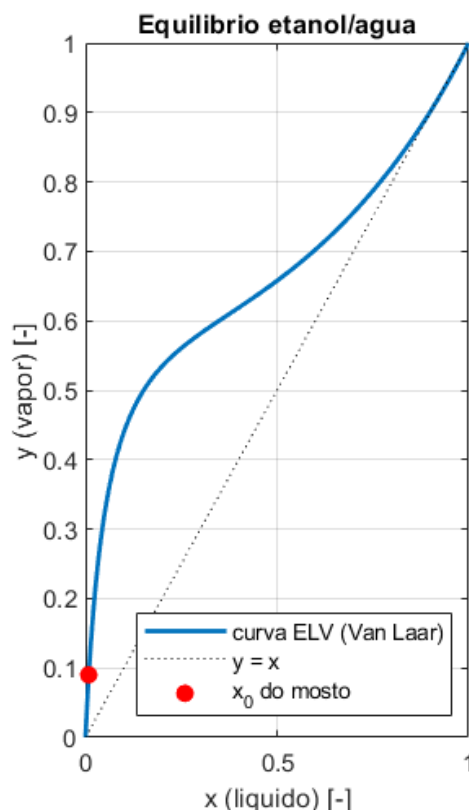


Fonte: Autora, 2026.

Nota-se que o consumo do substrato ocorre de maneira bastante acelerada nas primeiras horas de incubação, período que coincide com a fase exponencial de crescimento da biomassa celular e com a consequente secreção de etanol, atingindo um platô de 22 g/L. Esse esgotamento ágil do açúcar fermentável é um excelente indicativo de que não houve inibição severa do micro-organismo, comprovando o sucesso e a necessidade da etapa prévia de limpeza do mosto. Ao término do tempo de fermentação, o sistema acumulou 2,18 gramas de etanol.

Por fim, a etapa de separação via destilação simples foi avaliada com base no equilíbrio líquido-vapor não-ideal da mistura entre etanol e água. A termodinâmica do sistema, modelada por meio da equação de atividade de Van Laar, gerou a curva característica apresentada na Figura 27, onde a fração molar inicial do mosto fermentado encontra-se demarcada, evidenciando o ponto de partida da separação.

Figura 27 – Curva de equilíbrio da mistura



Fonte: Autora, 2026.

A partir dessa carga, a modelagem projetou a obtenção de um destilado com teor alcoólico final de 24,1 % v/v. O enriquecimento substancial da fase vapor confirma o funcionamento adequado da operação unitária de concentração. Em conjunto, os dados reforçam que a rota de segunda geração aplicada a resíduos alimentícios é não apenas tecnicamente coerente em ambiente de simulação, mas também uma alternativa promissora para a valorização de passivos ambientais urbanos.

5.8 COMPARAÇÃO ENTRE OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS E O MODELO DE SIMULAÇÃO

Para avaliar a consistência da metodologia de produção de etanol de segunda geração a partir de resíduos alimentícios orgânicos, realizou-se um confronto direto entre as variáveis operacionais e os rendimentos obtidos na prática laboratorial com as estimativas geradas pelo modelo matemático desenvolvido em MATLAB. O Quadro 2 consolida os principais indicadores para cada um dos cenários investigados.

Quadro 2 – Comparação dos parâmetros operacionais e resultados entre os ensaios experimentais e a simulação computacional

Parâmetro	Experimento 2	Experimento 3	Simulação (Ideal)
-----------	---------------	---------------	-------------------

Massa de biomassa utilizada(g)	10	6,697	10
Concentração de H ₂ SO ₄ (%)	3	3	5
Teor Alcoólico do Destilado (%)	19,8	8,85	24,1

Fonte: Autora, 2026.

Ao observar os dados, nota-se uma proximidade encorajadora entre a projeção do modelo e a realidade laboratorial. A simulação, que representa um cenário onde o processo ocorre sob condições ideais e sem perdas mecânicas, estimou um teor alcoólico final de 24,1 % v/v partindo de 10 gramas de biomassa. Em contrapartida, o Experimento 2, utilizando a mesma carga mássica de 10 gramas, alcançou 19,8 % v/v. Essa margem de diferença é esperada e perfeitamente justificável, uma vez que o ambiente físico engloba perdas de massa inerentes às transferências de recipientes, à filtração, e ao fato de que as reações de hidrólise e fermentação raramente atingem a eficiência máxima projetada em cálculos teóricos, além de o experimento físico ter operado com uma concentração ácida ligeiramente menor.

Um aspecto de suma importância revelado por essa comparação é a forte e direta proporcionalidade entre a quantidade de matéria-prima submetida ao processo e o teor alcoólico alcançado no produto final. Esse fenômeno fica evidente ao contrastar os dois ensaios práticos: enquanto o Experimento 2 (com 10 gramas) entregou 19,8 % v/v de etanol, o Experimento 3 operou com apenas 6,697 gramas de biomassa, uma redução de aproximadamente um terço na carga de sólidos, e resultou em uma queda drástica na produção, gerando um destilado com apenas 8,85 % v/v. Esse comportamento reforça a coerência fenomenológica de toda a cadeia avaliada, demonstrando que a carga inicial de resíduos dita diretamente o limite de açúcares que serão liberados para o meio e, conseqüentemente, a quantidade de etanol disponível para ser recuperada.

De modo geral, o comparativo atesta o elevado potencial da metodologia empregada para a valorização de resíduos alimentícios orgânicos. Obter quase 20 % v/v de teor alcoólico em escala de bancada, lidando com uma matriz de rejeitos, comprova a viabilidade da rota de segunda geração escolhida. Contudo, os dados também sugerem que o processo pode atingir resultados ainda mais promissores mediante modificações pontuais, especialmente no que tange ao método de separação escolhido. A limitação do teor alcoólico final, presente tanto na

simulação quanto na prática, está fortemente associada à adoção da destilação simples. Como esse método opera baseado em apenas um estágio de equilíbrio teórico, o enriquecimento da fase vapor esbarra em barreiras termodinâmicas severas. A transição futura para um método de destilação fracionada, com a implementação de uma coluna de pratos ou de recheio operando com refluxo, seria capaz de superar essas limitações. Com essa alteração, a eficiência da separação seria maximizada, permitindo a obtenção de um biocombustível com teor alcoólico substancialmente maior e muito mais próximo das exigências comerciais, consolidando o processo como uma alternativa viável e sustentável.

Além das melhorias projetadas para a etapa de separação, o refinamento das variáveis operacionais nas fases antecedentes apresenta oportunidades valiosas para alavancar ainda mais o rendimento global do processo. Ajustes na concentração do ácido utilizado na hidrólise ácida, e também o tempo e temperatura utilizada, buscando o ponto ótimo que maximize a liberação dos açúcares fermentáveis ao mesmo tempo em que minimiza a formação de compostos inibidores, atrelados ao estudo de cepas de leveduras mais robustas e adaptadas ao mosto destoxificado, podem elevar a eficiência produtiva antes mesmo da mistura chegar ao equipamento de destilação. Desse modo, a convergência entre o modelo matemático e os dados empíricos não apenas valida o arranjo tecnológico desenvolvido, mas também traça um roteiro prático e claro para a otimização contínua do sistema.

6 CONCLUSÃO

O presente trabalho atingiu seu objetivo ao comprovar a viabilidade técnica da produção de etanol de segunda geração (2G) a partir de resíduos orgânicos alimentícios. A eficácia do processo foi validada pela associação entre a modelagem matemática no MATLAB e os ensaios de bancada, com a síntese do biocombustível devidamente confirmada pelas análises espectroscópicas de FTIR e RMN de ^1H .

Os resultados demonstraram alta coerência entre a teoria e a prática. A simulação ideal projetou um teor alcoólico de 24,1% (v/v) para 10 gramas de carga inicial, enquanto o experimento físico atingiu 19,8% (v/v) sob as mesmas condições. Também ficou evidente a relação de dependência direta entre a massa de resíduos processada e a concentração do produto final, observada na queda do teor alcoólico para 8,85% (v/v) ao se utilizar apenas 6,697 gramas de biomassa. Contudo, apesar do sucesso na conversão dos carboidratos, os teores alcançados ainda não são suficientes para a utilização direta como combustível comercial. Essa limitação decorre majoritariamente do uso da destilação simples, cuja baixa eficiência termodinâmica de separação restringe o enriquecimento do etanol na fase vapor.

Conclui-se, portanto, que a rota tecnológica avaliada possui elevado potencial, necessitando de ajustes pontuais para viabilizar sua aplicação. Para trabalhos futuros, recomenda-se fortemente a substituição da etapa de purificação por uma destilação fracionada, visando maximizar a concentração final do produto. Além disso, sugere-se a investigação de diferentes parâmetros operacionais nas etapas de hidrólise e destoxificação, como a variação da razão sólido-líquido, tempo, temperatura e testes com distintos agentes químicos, buscando elevar o rendimento global e consolidar o processo para escalas industriais.

REFERÊNCIAS

- AGUIAR, Héricles Resende Ricardo de. Produção de etanol de segunda geração. 2017. 72 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2017.
- ALBARELLI, Juliana Queiroz. Produção de açúcar e etanol de primeira e segunda geração: simulação, integração energética e análise econômica. 2013. 198 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2013.
- ANKRAH, I. et al. Ethanol production from lignocellulosic waste. *Heliyon*, v. 11, n. 1, e41287, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e41287>.
- AZIZ, Azrina Abd.; YOUSUF, Abu. Integrated technique to produce sustainable bioethanol from syngas via fermentation of yeast and bacteria. *Materials Letters: X*, v. 13, p. 100127, 2022.
- BAILEY, J. E.; OLLIS, D. F. *Biochemical Engineering Fundamentals*. 2. ed. New York: McGraw-Hill, 1986.
- BARAHONA, Patricia Portero; MAYORGA, Bernardo Bastidas; MARTÍN-GIL, Jesús; MARTÍN-RAMOS, Pablo; CARVAJAL BARRIGA, Enrique Javier. Cellulosic Ethanol: Improving Cost Efficiency by Coupling Semi-Continuous Fermentation and Simultaneous Saccharification Strategies. *Processes*, Basel, v. 8, n. 11, art. 1459, 2020. DOI: 10.3390/pr8111459.
- BASSO, Luiz Carlos; BASSO, Thiago Olitta; ROCHA, Saul Nitsche. Ethanol production in Brazil: the industrial process and its impact on yeast fermentation. In: BERNARDES, Marco Aurelio dos Santos (ed.). *Biofuel Production – Recent Developments and Prospects*. Rijeka: InTech, 2011. cap. 5. DOI: 10.5772/17047.
- BOERIU, C. G.; BRAVO, D.; GOSSELINK, R. J. A.; VAN DAM, J. E. G. Characterisation of structure-dependent functional properties of lignin with infrared spectroscopy. *Industrial Crops and Products*, Amsterdam, v. 20, n. 2, p. 205–218, 2004. DOI: 10.1016/j.indcrop.2004.04.022.
- BRAGON, N.; SANTOS, A. C. dos. Variáveis que sustentam o período atual de produção de bioetanol. *INMR - Innovation & Management Review*, São Paulo, v. 9, n. 1, p. 126-140, jan./mar. 2012.
- COATES, J. Interpretation of Infrared Spectra: A Practical Approach. In: MEYERS, R. A. (Ed.). *Encyclopedia of Analytical Chemistry*. Chichester: John Wiley & Sons, 2000. p. 10815–10837. DOI: 10.1002/9780470027318.a5606.

COKER, A. K. Ludwig's Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants. 4. ed. Burlington: Gulf Professional Publishing / Elsevier, 2007. v. 1.

COMPANHIA NACIONAL DE ABASTECIMENTO (CONAB). Acompanhamento da safra brasileira de cana-de-açúcar. Brasília, DF, v. 13, n. 1, abr. 2025. Disponível em: <http://www.conab.gov.br>. Acesso em: 27 jun. 2026.

DONATE, Paulo Marcos. Síntese ambientalmente correta a partir de biomassa. Orbital: The Electronic Journal of Chemistry, Ribeirão Preto, v. 6, n. 2, p. 101-118, abr./jun. 2014.

FOGLER, H. S. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. 4. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

GMEHLING, J.; ONKEN, U.; ARLT, W. Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection: Aqueous-Organic Systems. Frankfurt: DECHEMA Chemistry Data Series, 1981. v. 1, parte 1a.

GÓES-FAVONI, Silvana Pedroso de et al. Fermentação alcoólica na produção de etanol e os fatores determinantes do rendimento. Revista Ibero-Americana de Ciências Ambientais, v. 9, n. 4, p. 285-296, 2018.

GOLDEMBERG, J. The evolution of bioenergy technologies in Brazil. Energy Policy, v. 36, n. 6, p. 2086-2092, 2008.

GOTTLIEB, H. E.; KOTLYAR, V.; NUDELMAN, A. NMR Chemical Shifts of Common Laboratory Solvents as Trace Impurities. The Journal of Organic Chemistry, v. 62, n. 21, p. 7512-7515, 1997.

GREEN, Don W.; SOUTHARD, Marylee Z. (Ed.). Perry's Chemical Engineers' Handbook. 9. ed. New York: McGraw-Hill Education, 2019.

HAFID, H. S. et al. Feasibility of using kitchen waste as substrate for bioethanol production. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 74, p. 671-686, 2017.

HAN, J. et al. Climate variability and food waste treatment: Analysis for bioenergy sustainability. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 160, p. 112336, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112336>.

IBRAHIM, Naeemah A. et al. Ethanol production from lignocellulosic waste materials: kinetics and optimization studies. RSC Advances, v. 15, p. 26091-26102, 2025. DOI: [10.1039/d5ra02272j](https://doi.org/10.1039/d5ra02272j).

JOSEPH, Annlyn Mary et al. Techno-economic feasibility and exergy analysis of second-generation bioethanol production. Energy Conversion and Management: X, v. 18, p. 100358, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ecmx.2023.100358>.

KEELER, James. Understanding NMR Spectroscopy. 2. ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2010.

LIMA, U. A.; AQUARONE, E.; BORZANI, W.; SCHMIDELL, W. Biotecnologia Industrial - Vol. 3: Processos Fermentativos e Enzimáticos. São Paulo: Edgard Blücher, 2001.

LINS, Gabriela Kaenna Zeni Navarro. Análise da viabilidade da produção de etanol a partir dos resíduos orgânicos alimentícios da cidade de Foz do Iguaçu/PR para aplicação como combustível automotivo. 2021. 47 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) – Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e Território, Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, 2021.

MARECOS, Laura Ivonne Nuñez. Bioetanol de casca de arroz: viabilidade técnica e econômica de implantação de uma planta piloto. 2024. 157 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) – Instituto Latino-Americano de Tecnologia, Infraestrutura e Território, Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, 2024.

MARTINEZ, Daiana Gotardo. Produção de etanol de segunda geração a partir de resíduos do processamento da mandioca. 2016. 47 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Energia na Agricultura) – Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Cascavel, 2016.

MONOD, J. The growth of bacterial cultures. Annual Review of Microbiology, [S. l.], v. 3, n. 1, p. 371-394, 1949.

MOON, H. C. et al. Enzymatic hydrolysis of food waste and ethanol fermentation. Biotechnology and Bioprocess Engineering, 2009.

MORALES, Marjorie et al. Integrated process simulation for bioethanol production: Effects of varying lignocellulosic feedstocks on technical performance. Bioresource Technology, v. 328, p. 124833, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2021.124833>.

PALMQVIST, Eva; HAHN-HÄGERDAL, Bärbel. Fermentation of lignocellulosic hydrolysates. II: inhibitors and mechanisms of inhibition. Bioresource Technology, Amsterdam, v. 74, n. 1, p. 25–33, 2000. DOI: 10.1016/S0960-8524(99)00161-3.

PAVIA, D. L. et al. Introdução à Espectroscopia. 5. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2015.

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

POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. The Properties of Gases and Liquids. 5. ed. New York: McGraw-Hill, 2001.

PRIADI, H. et al. Techno-enviro-economic analysis of second-generation bioethanol production from palm waste. *Energy Conversion and Management*: X, 2024.

SEADER, J. D.; HENLEY, Ernest J.; ROPER, D. Keith. Separation Process Principles: Chemical and Biochemical Operations. 4. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2016.

SILVA, Carlos Eduardo de Farias. Avaliação do potencial de uso de resíduos do processamento de frutas na produção de etanol 2G. 2014. 101 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Centro de Tecnologia, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2014.

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.

SINGH, Anusuiya et al. Production of bioethanol from food waste: Status and perspectives. *Bioresource Technology*, v. 360, p. 127651, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2022.127651>.

SJULANDER, Nikki; KIKAS, Timo. Origin, Impact and Control of Lignocellulosic Inhibitors in Bioethanol Production—A Review. *Energies*, Basel, v. 13, n. 18, p. 4751, 2020. DOI: 10.3390/en13184751.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.

SOARES, Jimmy et al. Green coconut mesocarp pretreated by an alkaline process as raw material for bioethanol production. *Bioresource Technology*, v. 216, p. 106-113, 2016.

TANIMURA, A. et al. Ethanol production from non-sterile methane fermentation. *Bioresource Technology Reports*, v. 31, p. 102285, 2025.

TAVARES, B.; SENE, L.; CHRIST, D. Valorization of sunflower meal through the production of ethanol from the hemicellulosic fraction. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, v. 20, n. 11, p. 1036-1042, 2016.

TOOR, M. et al. Bioconversion of lignocellulosic biomass to bioethanol: a comprehensive review. *Chemosphere*, v. 242, p. 125080, 2020.

ULAKPA, W. C. et al. Nano-CaO as a heterogeneous catalyst for biodiesel synthesis by transesterification of Jatropha oil. *Journal of Trace Elements and Minerals*, v. 9, p. 100183, 2024.

VAN ROOYEN, Jaybe et al. Enhancing bioethanol yield from food waste: integrating decontamination and high-solids loading for improved process efficiency. *Fuel*, v. 378, p. 133026, 2024.

VERARDI, A. et al. Bioconversion of lignocellulosic biomass to bioethanol and biobutanol. In: *Sustainable Biofuel and Bioproduct Services*. London: Academic Press, 2017. cap. 3, p. 117-134.

YOUSUF, A. Fundamentals of lignocellulosic biomass. In: *Sustainable Biofuel and Bioproduct Services*. London: Academic Press, 2017. cap. 1, p. 1-15.

ZHANG, Z. Pretreatment of lignocellulosic biomass for efficient enzymatic saccharification of cellulose. In: *Sustainable Biofuel and Bioproduct Services*. London: Academic Press, 2017. cap. 2, p. 17-55.