

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ**

**DANA ISABELLY ANDRADE**

**ANÁLISE DINÂMICA E CONTROLE SDRE APLICADO EM UMA REAÇÃO  
AUTOCATALÍTICA COM COMPORTAMENTO CAÓTICO**

**PONTA GROSSA**

**2025**

**DANA ISABELLY ANDRADE**

**ANÁLISE DINÂMICA E CONTROLE SDRE APLICADO EM UMA REAÇÃO  
AUTOCATALÍTICA COM COMPORTAMENTO CAÓTICO**

**DYNAMICS ANALYSIS AND SRDE CONTROL APPLIED IN AN AUTOCATALYTIC  
REACTION WITH CHAOTIC BEHAVIOR**

Dissertação apresentada como requisito para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Produção da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

Orientador(a): Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Giane Gonçalves Lenzi

**PONTA GROSSA**

**2025**



[4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

Esta licença permite remixe, adaptação e criação a partir do trabalho, para fins não comerciais, desde que sejam atribuídos créditos ao(s) autor(es) e que licenciem as novas criações sob termos idênticos. Conteúdos elaborados por terceiros, citados e referenciados nesta obra não são cobertos pela licença.



Ministério da Educação  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Campus Ponta Grossa



DANA ISABELLY ANDRADE

**ANÁLISE DINÂMICA E CONTROLE SDRE APLICADO EM UMA REAÇÃO AUTOCATALÍTICA  
COM COMPORTAMENTO CAÓTICO**

Trabalho de pesquisa de mestrado apresentado como requisito para obtenção do título de Mestrado em Engenharia de Produção da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR). Área de concentração: Gestão Industrial

Data de aprovação: 26 de fevereiro de 2025

Dra. Giane Goncalves Lenzi, Doutorado - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Dr. Angelo Marcelo Tuset, Doutorado - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Dra. Kelly Cristiane Iarosz, Doutorado - Faculdade de Telêmaco Borba (Fateb)

Documento gerado pelo Sistema Acadêmico da UTFPR a partir dos dados da Ata de Defesa em 20/03/2025.

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus, pelo dom da vida, pelas muitas bênçãos e por tudo o que conquistei até aqui.

À minha família, minha fonte de inspiração e incentivo. Ao meu esposo, que teve paciência nos momentos de ausência, pelo apoio e torcida ao longo dessa jornada. Ao meu filho, que chegou de surpresa e trouxe tantas coisas boas para nossas vidas.

À minha orientadora, Dra. Giane Gonçalves Lenzi, que desde o início da jornada no curso de mestrado me apoiou, ajudou, aconselhou e foi essencial para meu progresso e sucesso dentro do programa.

Ao Dr. Angelo Marcelo Tusset, que me inspirou com o tema da pesquisa, pelos convites para participação em artigos e por todo o suporte ao longo da jornada.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção por todo o auxílio prestado e a todos os professores e colegas que contribuíram com o aprendizado.

Aos membros da banca, Dr. Angelo Marcelo Tusset e Dra. Kelly Cristiane Iarosz pela gentileza em aceitar fazer parte do processo avaliativo.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, a CAPES – Código de Financiamento 001, pelo apoio financeiro que possibilitou a condução desta pesquisa.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização desta pesquisa.

Muito obrigada.

## RESUMO

O entendimento do comportamento dinâmico dos bioprocessos e biorreatores é importante, pois este conhecimento permite a otimização do processo e controle dos parâmetros visando maior produtividade. A pesquisa de mestrado apresentada nesta dissertação teve como objetivo analisar o comportamento dinâmico de um biorreator que em seu interior ocorre uma reação autocatalítica com mutação visando a identificação das regiões com comportamento caótico e periódico. Para isto, foram aplicadas variações nos parâmetros do biorreator para identificar a influência de cada um deles na ocorrência de caos. Para maior precisão do modelo, foi utilizado o cálculo fracionário na modelagem matemática do biorreator objeto de estudo, para incluir o efeito de memória na dinâmica do sistema. Uma vez que se pretende aplicar o reator estudado para a produção de etanol, visando maior produtividade, foi também proposto um controle SDRE para levar o sistema a operar na região onde se obtém a maior concentração do produto desejado. Para verificar a relevância desta pesquisa, foi conduzida uma revisão sistemática da literatura utilizando a metodologia *Methodi Ordinatio* para identificação do cenário de pesquisas sobre o tema existentes, bem como a identificação de lacunas que poderiam ser preenchidas. Os resultados numéricos demonstraram que o sistema é sensível à variação em todos os seus parâmetros, pois tais variações podem levar o sistema a apresentar comportamento caótico ou periódico. O uso da ordem fracionária possibilitou a análise da influência dos resíduos acumulados em processos já realizados nos resultados futuros. Os resultados mostraram também que o controle proposto foi eficiente, mantendo o sistema controlado com baixo erro, e manteve o sistema no comportamento desejado com precisão de 94,12%. A análise da revisão sistemática da literatura mostrou que a presente pesquisa contribui para a literatura existente sobre o tema, pois foi capaz de responder às principais lacunas de pesquisa identificadas.

**Palavras-Chave:** reações autocatalíticas; ordem fracionária; controle não linear; caos.

## ABSTRACT

Understanding the dynamic behavior of bioprocesses and bioreactors is essential, as this knowledge allows the process to be optimized and parameters to be controlled for greater productivity. The master's research presented in this dissertation aimed to analyze the dynamic behavior of a bioreactor in which an autocatalytic reaction with mutation takes place, as well as to identify the regions with chaotic and periodic behavior. To do this, variations in the bioreactor's parameters were applied to determine their influence on the occurrence of chaos. To improve the model's accuracy, fractional calculus was used in the mathematical modeling of the bioreactor under study to include the memory effect in the system's dynamics. Since the reactor studied is intended to produce ethanol and increase productivity, SDRE control was also proposed to make the system operate in the region where the highest concentration of the desired product is obtained. To verify the relevance of this research, a systematic literature review was conducted using the *Methodi Ordinatio* methodology to identify the existing research scenario on the subject and gaps that could be filled. The numerical results showed that the system is sensitive to variation in all its parameters, which can lead the system to exhibit chaotic or periodic behavior. Using fractional order made it possible to analyze the influence of waste accumulated in processes already conducted on future results. The results also showed that the proposed control was efficient, keeping the system under control with low error and maintaining the system in the desired behavior with an accuracy of 94.12%. Analysis of the systematic literature review showed that this research contributes to the existing literature on the subject, as it was able to respond to the primary research gaps identified.

**Keywords:** autocatalytic reactions; fractional order; nonlinear control; chaos.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – ODS atendidos pela pesquisa de Mestrado .....	15
Figura 2 – Macro etapas empregadas para a produção de etanol 1G e 2G.....	24
Figura 3 – Fatores que afetam a complexidade dos biorreatores.....	29
Figura 4 – Resumo das vantagens da aplicação do cálculo fracionário na modelagem de sistemas complexos .....	36
Figura 5 – Biorreator isotérmico com reação autocatalítica .....	43
Figura 6 – Biorreator isotérmico com reação autocatalítica com controle feedback.....	49
Figura 7 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso $\alpha = [0,26 : 0,4]$ . (a) Diagramas de bifurcação para $\alpha$ versus $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para $\alpha$ versus $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para $\alpha$ versus $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov.....	53
Figura 8 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso $\beta = [0,67 : 0,75]$ . (a) Diagramas de bifurcação para $\beta$ versus $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para $\beta$ versus $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para $\beta$ versus $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov .....	54
Figura 9 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso $\delta = [0,04 : 0,1]$ . (a) Diagramas de bifurcação para $\delta$ versus $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para $\delta$ versus $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para $\delta$ versus $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov.....	55
Figura 10 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso $\theta = [0,1 : 0,2]$ . (a) Diagramas de bifurcação para $\theta$ versus $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para $\theta$ versus $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para $\theta$ versus $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov.....	56
Figura 11 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso $\gamma_1 = [400 : 500]$ . (a) Diagramas de bifurcação para $\gamma_1$ versus $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para $\gamma_1$ versus $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para $\gamma_1$ versus $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov .....	57
Figura 12 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso $\gamma_2 = [11 : 13]$ . (a) Diagramas de bifurcação para $\gamma_2$ versus $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para $\gamma_2$ versus $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para $\gamma_2$ versus $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov .....	58
Figura 13 – Histórico de tempo. (a) Histórico de tempo para o sistema com comportamento periódico. (b) Histórico de tempo para o sistema com comportamento caótico. (c) Expoente Lyapunov .....	60
Figura 14 – Diagramas de fase. (a) Diagrama de fase $x_1$ versus $x_2$ . (b) Diagrama de fase $x_1$ versus $x_3$ . (c) Diagrama de fase $x_2$ versus $x_3$ . (d) Diagrama de fase $x_1$ versus $x_2$ versus $x_3$ .....	61
Figura 15 – Diagramas de bifurcação para $q_{1,2,3} = [0,09 : 1,01]$ vs. $x_1$ .....	62
Figura 16 – Histórico de tempo, diagrama de fase e expoente de Lyapunov. (a) Histórico de tempo, (b) Diagrama de fase, (c) Expoente de Lyapunov para $q_{1,2,3} = 0,99$ . (d) Histórico de tempo, (e) Diagrama de fase, (f) Expoente de Lyapunov para $q_{1,2,3} = 0,999$ .....	63
Figura 17 – Sistema sem e com o controle proposto. (a) Erro $e_1 = x_1 - x_1^*$ , $e_2 = x_2 - x_2^*$ e $e_3 = x_3 - x_3^*$ . (b) Histórico de tempo para $x_1$ . (c) Histórico de tempo para $x_2$ . (d) Histórico de tempo para $x_3$ . (e) Sinal do controle U.....	67

<b>Figura 18 – Contribuições e relevância do estudo para a literatura .....</b>	<b>72</b>
<b>Gráfico 1 – Matriz Energética Global em 2023 .....</b>	<b>17</b>
<b>Gráfico 2 – Consumo de energia de acordo com o tipo de fonte .....</b>	<b>18</b>
<b>Gráfico 3 – Produção brasileira de biocombustíveis em 2023 .....</b>	<b>20</b>
<b>Gráfico 4 – Distribuição da produção brasileira de biocombustíveis em 2023 por região .....</b>	<b>21</b>
<b>Gráfico 5 – Maiores produtores nacionais de biocombustíveis em 2023 .....</b>	<b>22</b>
<b>Gráfico 6 – Distribuição temporal das publicações .....</b>	<b>68</b>
<b>Gráfico 7 – Análise do tipo de método empregado .....</b>	<b>69</b>
<b>Gráfico 8 – Análise do emprego de ordem fracionária .....</b>	<b>70</b>
<b>Gráfico 9 – Quantificação análise de ocorrência e efeito do caos nos sistemas .....</b>	<b>71</b>
<b>Quadro 1 – Conjuntos de palavras-chave .....</b>	<b>40</b>
<b>Quadro 2 – Procedimentos de filtragem .....</b>	<b>41</b>
<b>Quadro 3 – Classificação InOrdinatio do portfólio de artigos .....</b>	<b>85</b>

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Análise paramétrica .....	59
Tabela 2 – Análise de convergência (Eq. (20) para $q_{1,2,3} = [0,99 : 1,01]$ vs. $h = [0,01 : 0,0001]$ .....	62
Tabela 3 – Análise da dinâmica do sistema (Eq. (4)) para $q_{1,2,3} = [0,99 : 1,01]$ .....	65

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
CSTBR	<i>Continuous Stirred Tank Bioreactor</i>
CSTR	<i>Continuous Stirred Tank Reactor</i>
J	Joule
ODS	Objetivos de Desenvolvimento Sustentável
Proálcool	Programa Nacional do Alcool
RenovaBio	Política Nacional de Biocombustíveis

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	<b>11</b>
1.1	Justificativa.....	13
1.2	Objetivo Geral.....	16
1.3	Objetivos Específicos .....	16
<b>2</b>	<b>REFERENCIAL TEÓRICO</b> .....	<b>17</b>
2.1	Desafios relacionados à matriz energética mundial .....	17
2.2	Produção de biocombustíveis no Brasil .....	19
2.3	Panorama da produção de etanol .....	22
2.3.1	Produção de etanol .....	24
2.4	Biorreatores e a complexidade dos bioprocessos.....	26
2.5	Análise dinâmica e controle de bioprocessos.....	29
2.6	Ocorrência de comportamento caótico em biorreatores .....	33
2.7	Modelagem matemática de sistemas utilizando cálculo fracionário	35
2.8	Aplicação de reações autocatalíticas como um meio de descrever a complexidade de processos químicos e bioquímicos .....	37
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b> .....	<b>39</b>
3.1	Revisão Sistemática da Literatura .....	39
3.2	Modelo Matemático .....	43
3.3	Modelo Matemático em Ordem Fracionária .....	45
3.4	Controle SDRE.....	48
3.5	Análise Dinâmica.....	50
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b> .....	<b>52</b>
4.1	Análise dinâmica do sistema.....	52
4.2	Análise dinâmica do sistema para ordem fracionária.....	61
4.3	Sistema com controle do tipo SDRE .....	66
4.4	Análise do portfólio de artigos.....	68
4.4.1	Panorama da literatura sobre o tema .....	68
4.4.2	Identificação das lacunas de pesquisa .....	71
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO</b> .....	<b>73</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> .....	<b>75</b>
	<b>APÊNDICE A – PORTIFÓLIO ORDENADO DE ARTIGOS</b> .....	<b>84</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Na primeira metade da década 2020, os combustíveis fósseis continuam sendo a principal fonte de energia para atender à demanda global. No entanto, fatores como mudanças climáticas, disponibilidade limitada, instabilidade econômica e políticas internacionais levaram à maior preocupação de especialistas e de toda a sociedade sobre os riscos da dependência dos derivados de petróleo. Com o passar do tempo, a disponibilidade de combustíveis fósseis diminui e, como não são renováveis, isto resulta em crises energéticas e aumento nos preços. As reservas de petróleo são limitadas e distribuídas de forma desigual entre os países, o que as torna vulneráveis a emergências como guerras, crises financeiras e problemas tecnológicos (Rastogi; Shrivastava, 2017; Ribeiro; Braghini Junior, 2023).

O estudo de Ashraful *et al.* (2014) apresenta alguns dados da década de 2010 sobre a disponibilidade de combustíveis fósseis. Segundo os autores, na época, as reservas de petróleo estavam desaparecendo a uma taxa de 4 bilhões de toneladas por ano. Dessa forma, considerando esta taxa, as reservas de petróleo se esgotarão em 2052. Um aumento na produção de gás natural poderia suprir a demanda energética por mais oito anos, isto é, até 2060. Após isso, segundo os autores, para suprir a falta de petróleo e gás, seria necessária a utilização de carvão, cujas reservas podem suprir a demanda de energia até 2088.

O relatório do *Statistical Review of World Energy* de 2024, disponibilizado pelo *Energy Institute*, apresenta alguns dados sobre o consumo de combustíveis fósseis. De acordo com os dados, o consumo de produtos derivados de petróleo excedeu 100 milhões de barris (aproximadamente 13,6 milhões de toneladas) por dia em 2023. Ainda segundo o relatório, em 2023 a demanda por gás natural foi de 144,35 EJ<sup>1</sup> e o consumo de carvão foi de 164 EJ pela primeira vez na história. Considerando este consumo alto, junto com as informações apresentadas no estudo de Ashraful *et al.* (2014), a previsão é que os combustíveis fósseis irão esgotar antes do final do primeiro século do milênio 2000.

Um outro fator preocupante é o impacto ambiental significativo que o uso de combustíveis fósseis causa no meio ambiente, como poluição do ar, degradação ambiental e mudança climática. A queima de combustíveis fósseis é uma das

---

<sup>1</sup> EJ = exajoule = 10<sup>18</sup> J

principais fontes emissoras de gases de efeito estufa, que contribuem para o aumento da temperatura do planeta (Rial, 2024). A preocupação com o meio ambiente, somada ao aumento da demanda de energia, despertaram o interesse coletivo para o desenvolvimento, produção e consumo de energia renovável. Além de sustentáveis, as energias renováveis são amigáveis ao meio ambiente, acessíveis, seguras e convenientes. Entre elas, o etanol, alternativa mais popular ao uso da gasolina, se destaca neste cenário (Ahmed; Sarkar, 2019; Damayanti; Bahlawan; Kumoro, 2022; (Vučurović *et al.*, 2022).

Os biorreatores desempenham um papel vital na produção de etanol. São vasos onde as reações químicas ou atividades microbiológicas acontecem, ou seja, são o cerne do bioprocessamento. O projeto do biorreator deve garantir condições ótimas para a condução do bioprocessamento, de modo que seja possível obter a máxima concentração do produto e máximo rendimento. Em razão de sua grande disponibilidade comercial e boas condições de mistura, os biorreatores com agitação contínua (CSTBR) são amplamente empregados para a produção de etanol em escala laboratorial e industrial (Karagoz; Bill; Ozkan, 2019; Novia *et al.*, 2023; Sriputorn *et al.*, 2021).

Biorreatores são sistemas complexos, uma vez que os bioprocessos possuem cinética não linear e sua operação é afetada por diversos fatores, como a temperatura e pressão do sistema, o pH da solução e a concentração de oxigênio dissolvido. A qualidade e a quantidade do produto são afetadas pelo bom andamento do bioprocessamento. Por esta razão, um sistema de controle eficaz da operação do biorreator é importante. Os controladores de biorreatores devem ser robustos para lidar com instabilidades que podem ser geradas por distúrbios externos, também, precisam compensar a incerteza do modelo que existe em razão da ausência de medições em tempo real da biomassa ativa (Hajaya; Shaqarin, 2022; Mohan *et al.*, 2022).

Um exemplo de fenômeno complexo observado na operação de biorreatores é o comportamento caótico, que é prejudicial ao bioprocessamento. A presença de comportamento caótico impossibilita a previsibilidade e a estabilidade do consumo de substrato no interior do reator. Além disso, dá origem a regiões de baixo consumo de substrato, o que leva à baixa produção do produto desejado (Asif; Ali; Ajbar, 2013). Por esta razão, é necessário manter o biorreator operando em regiões periódicas, o

que é possível por meio de controladores, para assim otimizar a produção do produto desejado (Abashar, 2011; Abashar; Elnashaie, 2010).

Como nenhum biorreator está livre da ocorrência de caos, é importante estudar a resposta do sistema a este distúrbio, para assim aplicar uma ação de controle para evitar os efeitos negativos (Abashar; Elnashaie, 2010; Paz Astudillo; Cardona Alzate, 2011). A análise dinâmica de um sistema fornece muitas informações importantes que podem ser aplicadas para a síntese de um sistema de controle eficiente. Além disso, permite identificar os problemas operacionais, examinar a produtividade do reator e delinear as regiões operacionais que podem ser seguras ou ideais (Ajbar; Alqahtani; Musa, 2022; Ciesielski; Grzywacz, 2019).

A aplicação de cálculo fracionário para a análise dinâmica de sistemas complexos, como biorreatores, pode contribuir para a obtenção de uma representação matemática mais precisa do sistema, e quanto melhor esta representação, mais preciso é o seu controle. Dessa forma, a utilização de ordem fracionária permite que, mesmo para sistemas complexos, sejam obtidos modelos matemáticos mais precisos, melhorando assim o desempenho do controle, quando este é aplicado (Chen *et al.*, 2020; Munoz-Vázquez; Martínez-Reyes, 2019; Singh *et al.*, 2021; Tusset *et al.*, 2022).

Neste contexto, o presente estudo conduziu a análise dinâmica de um biorreator isotérmico que em seu interior ocorre uma reação autocatalítica. As reações autocatalíticas podem ser aplicadas na análise de bioprocessos, pois representam muitas reações bioquímicas (Painuly; Pushpavanam; Kienle, 2005).

Este estudo foi inspirado no estudo conduzido por Abasaeed (2000). No entanto, o objetivo aqui é apresentar, por meio de diagramas de bifurcação, as regiões onde o sistema se comporta de forma caótica e analisar como cada um dos parâmetros analisados contribuiu para a ocorrência de caos. Além disso, foi considerado o caso em que a análise dinâmica foi feita em ordem fracionária, para considerar os efeitos de memória do sistema. Por fim, com o intuito de otimizar a produção de etanol, verificou-se a possibilidade de aplicação de controle ao sistema.

## 1.1 Justificativa

Conforme a população mundial cresce e se desenvolve, há maior demanda de energia. Logo, é um desafio a nível global atender à demanda energética, com acesso equitativo aos recursos e desenvolvimento sustentável. Para isto, faz-se

necessária uma transição de combustíveis fósseis para fontes renováveis. Neste contexto, os biocombustíveis, como o etanol, são combustíveis mais sustentáveis ao petróleo, e como são renováveis, podem contribuir significativamente para a redução dos impactos ambientais e garantia da segurança energética (Gayen; Chatterjee; Roy, 2024; Rial, 2024; Tiburcio; Macêdo; Pereira Neto, 2023).

O crescente interesse em biocombustíveis impulsionou muitos estudos visando melhoria nos bioprocessos. Uma vez que o biorreator é a parte principal de um bioprocessos, a análise dinâmica desse sistema é fundamental para a identificação dos parâmetros que afetam o modelo que o descreve, uma vez que este contém incertezas, oriundas da complexidade presente nos bioprocessos (Ochoa *et al.*, 2016).

Dessa forma, a análise dinâmica do biorreator conduzida no presente estudo possibilitou verificar como as variações dos parâmetros influenciam no comportamento do sistema, e com isso, identificar a região de operação onde é possível obter maior produção do produto desejado. Além disso, foi possível propor um sistema de controle para levar o sistema a operar na região onde se obtém maior concentração do produto desejado.

Este estudo limitou-se à análise de um combustível líquido, no caso, o etanol. A escolha deste combustível reflete não apenas a relevância industrial e ambiental do etanol, mas também considera outros aspectos técnicos, que tornam esta abordagem mais adequada ao escopo da pesquisa. De acordo com a literatura, os biorreatores do tipo tanque agitado (STBR) são os mais utilizados para a produção de etanol em escala laboratorial e industrial. De acordo com Alhumaizi (1999), as reações autocatalíticas que ocorrem em um reator CSTR se configuram em um dos sistemas mais simples para estudos de bifurcação. Portanto, a escolha do etanol como combustível líquido é justificada pela simplicidade experimental oferecida pelo CSTR para estudos dinâmicos e pela relevância do etanol como alternativa sustentável aos combustíveis fósseis.

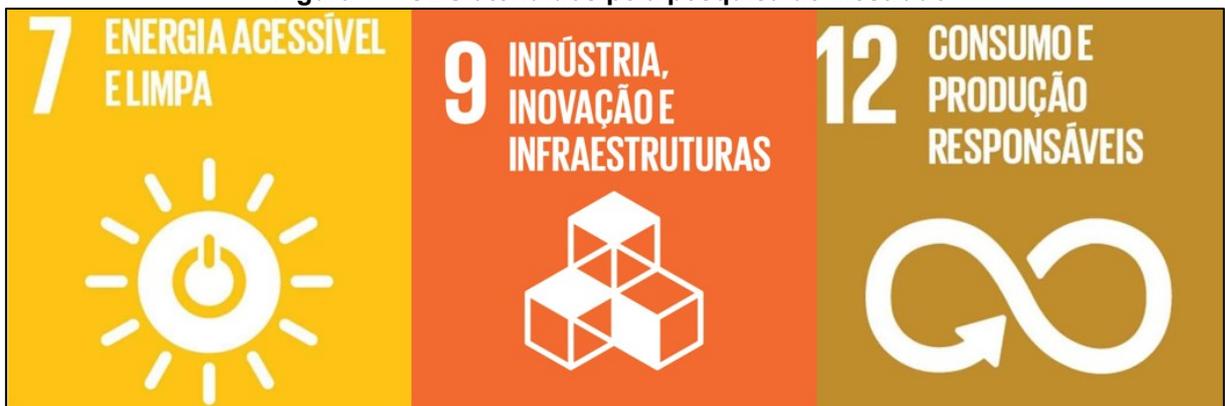
No estudo de bioprocessos, como o que ocorre na produção de etanol, a utilização de reações autocatalíticas na análise é relevante, pois estas reações representam muitas reações bioquímicas, que são complexas e de cinética não linear. Quando se considera o caso com mutação, a complexidade do sistema é ainda maior.

Ao investigar a análise dinâmica e o controle do comportamento caótico de um sistema definido por um conjunto de reações autocatalíticas, este estudo contribui

para o conhecimento em sistemas complexos, ao aplicar métodos para a modelagem, análise e controle de bioprocessos industriais. A relevância do estudo também está alinhada com as demandas globais de produção de energia mais renováveis e sustentáveis.

Assim, o estudo contribui para uma das grandes áreas da Engenharia de Produção, que é a Pesquisa Operacional, dentro do tópico “Modelagem, Simulação e Otimização”, pois visa buscar aprimoramento do processo de obtenção de um combustível renovável. Com isso, o estudo também atende aos seguintes ODS: Energia limpa e acessível (ODS 7), Indústria, inovação e infraestrutura (ODS 9) e Consumo e produção responsáveis (ODS 12), cujos símbolos estão apresentados na figura 1.

**Figura 1 – ODS atendidos pela pesquisa de Mestrado**



**Fonte: Adaptado de Nações Unidas Brasil (2025)**

Dentro desses ODS, o estudo pode contribuir com as seguintes metas:

- ODS 7, Meta 7.2: Até 2030, aumentar substancialmente a participação de energias renováveis na matriz energética global.
- ODS 9, Meta 9.4: Até 2030, modernizar a infraestrutura e reabilitar as indústrias para torná-las sustentáveis, com eficiência aumentada no uso de recursos e maior adoção de tecnologias e processos industriais limpos e ambientalmente corretos; com todos os países atuando de acordo com suas respectivas capacidades.
- ODS 12, Meta 12.2: Até 2030, alcançar a gestão sustentável e o uso eficiente dos recursos naturais.

## 1.2 Objetivo Geral

- Conduzir a análise dinâmica de um biorreator isotérmico que em seu interior ocorre uma reação autocatalítica e identificar a região de maior produção do produto desejado.

## 1.3 Objetivos Específicos

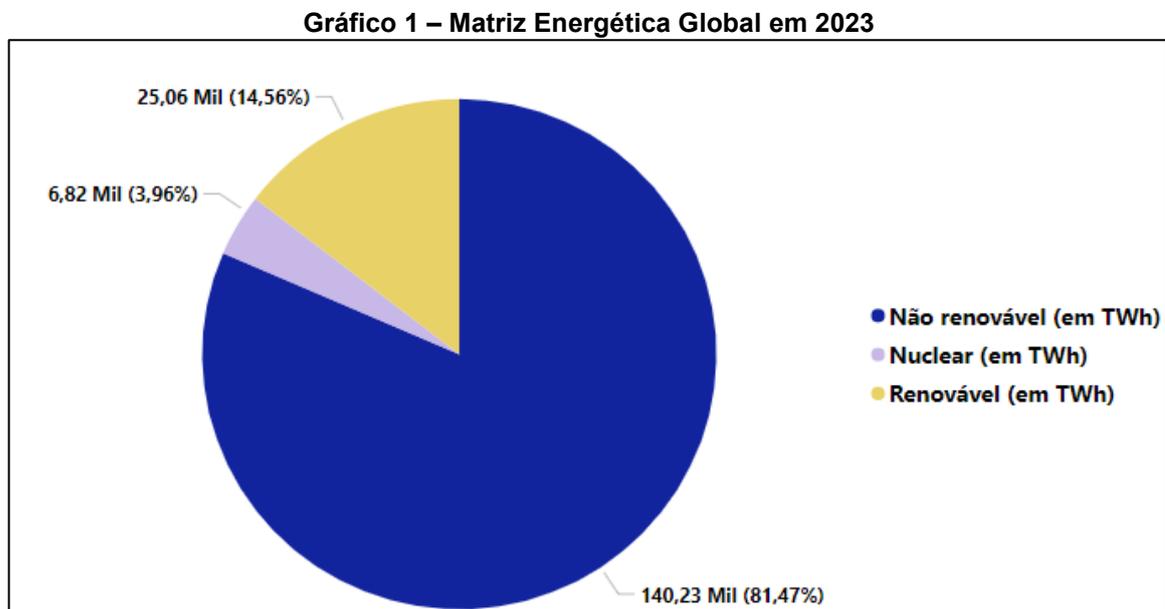
- Aplicar a metodologia *Methodi Ordinatio* para construir um portfólio de artigos relacionados ao tema;
- Identificar o cenário da literatura disponível sobre o tema;
- Conduzir a análise dinâmica do sistema em ordem inteira e em ordem fracionária;
- Identificar a contribuição de cada um dos parâmetros no comportamento do sistema;
- Propor um sistema de controle para conduzir o sistema à região de maior produção de produto desejado;
- Indicar as contribuições do estudo para preencher as lacunas de pesquisa identificadas.

## 2 REFERENCIAL TEÓRICO

### 2.1 Desafios relacionados à matriz energética mundial

A produção de energia global é majoritariamente proveniente de fontes não-renováveis, principalmente de combustíveis fósseis, como petróleo, carvão e gás natural. Tais fontes de energia possibilitaram a transformação da civilização humana de agrícola para industrial e têm como principal vantagem o custo baixo. No entanto, são recursos finitos e que deverão se esgotar futuramente, uma vez que não podem ser substituídas na natureza, pois são oriundas da decomposição de animais e plantas ao longo de milhares de anos (Ribeiro; Braghini Junior, 2023).

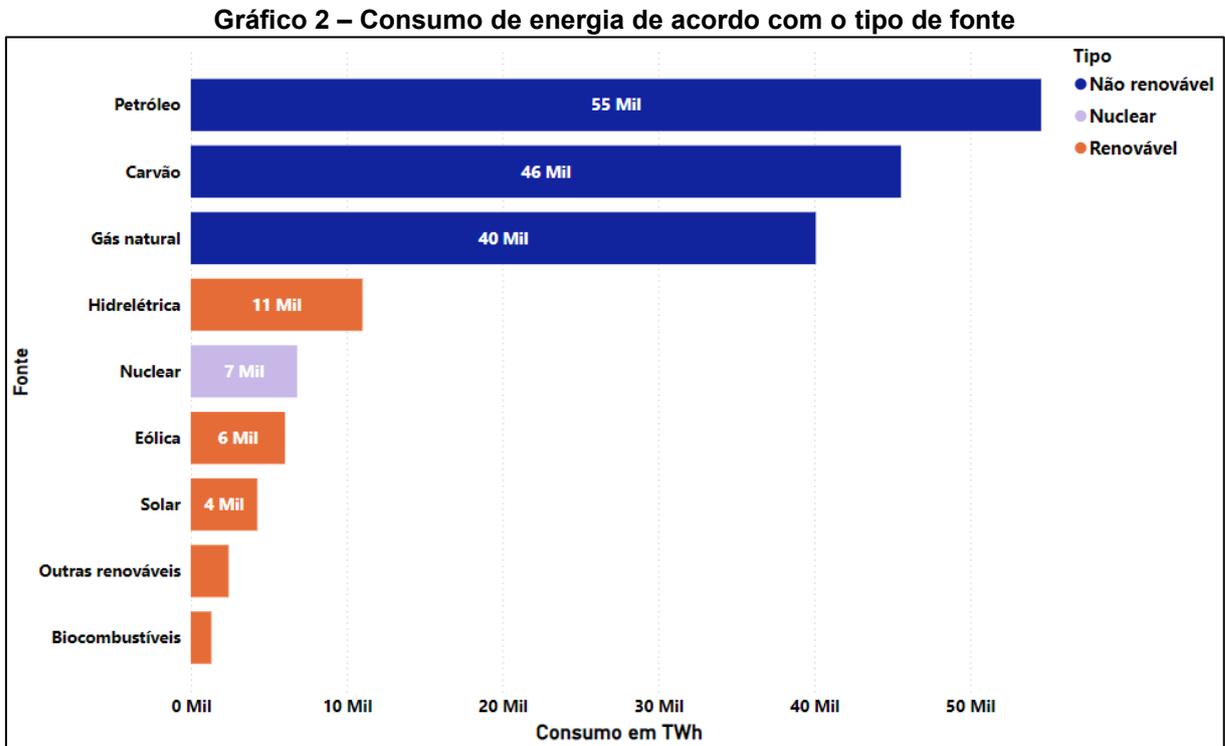
O gráfico 1 apresenta a distribuição da matriz energética global no ano de 2023. O gráfico foi elaborado com os dados apresentados por Ritchie e Rosado (2020) (publicado no site *Our World in Data* em 2020 e revisado em 2024).



Fonte: Autoria própria (2024)

De acordo com o gráfico 1, as fontes não renováveis foram responsáveis em atender cerca de 81% da demanda global de energia em 2023, enquanto as fontes renováveis foram responsáveis por atender aproximadamente 15% da demanda global, evidenciando assim o perfil da matriz energética global atual.

O gráfico 2 apresenta a distribuição do consumo de energia em relação ao tipo de fonte. O gráfico foi elaborado com os dados apresentados por Ritchie e Rosado (2020) (publicado no site *Our World in Data* em 2020 e revisado em 2024).



De acordo com o gráfico 2, as fontes não renováveis, como petróleo, carvão e gás natural foram responsáveis pela produção de mais de 140 mil TWh de energia. Somadas, as fontes renováveis produziram cerca de 25 mil TWh de energia. De acordo com Montoya *et al.* (2021), em razão do fato de a matriz energética global ser majoritariamente não renovável, o setor de energia é caracterizado como a principal fonte de emissões, responsável por cerca de 73% das emissões de gases de efeito estufa. Dessa forma, a transição para uma matriz energética renovável é necessária para reduzir as emissões de gases e mitigar os efeitos das mudanças climáticas.

Além da questão ambiental, a transição para uma matriz energética renovável é necessária em razão dos desafios associados à dependência de fontes não-renováveis, que são limitadas e distribuídas de forma desigual entre os países, o que as torna vulneráveis à volatilidade dos preços, políticas internacionais e cenários de crise como pandemias, guerras e conflitos, o que pode comprometer o atendimento

da demanda necessária, gerando assim uma crise energética (França *et al.*, 2023; Ribeiro; Braghini Junior, 2023).

Visando o desenvolvimento sustentável, muitos países buscam implementar legislações e regulamentações para enfrentar os desafios atuais do consumo e produção de energia. O Protocolo de Kyoto (1997) e o Acordo de Paris (2015) são exemplos de esforços para a cooperação e colaboração internacional para a mudança climática, que fornecem a base para a transição para uma matriz energética de baixo carbono. Apesar de vantajosa e promissora, a utilização de energias renováveis enfrenta desafios e obstáculos que precisam ser superados, como o alto custo inicial e complexidade técnica dos projetos, infraestrutura adequada, questões burocráticas, bem como a dificuldade em substituir os combustíveis fósseis em termos de dominância (Gayen; Chatterjee; Roy, 2024; Tian *et al.*, 2022).

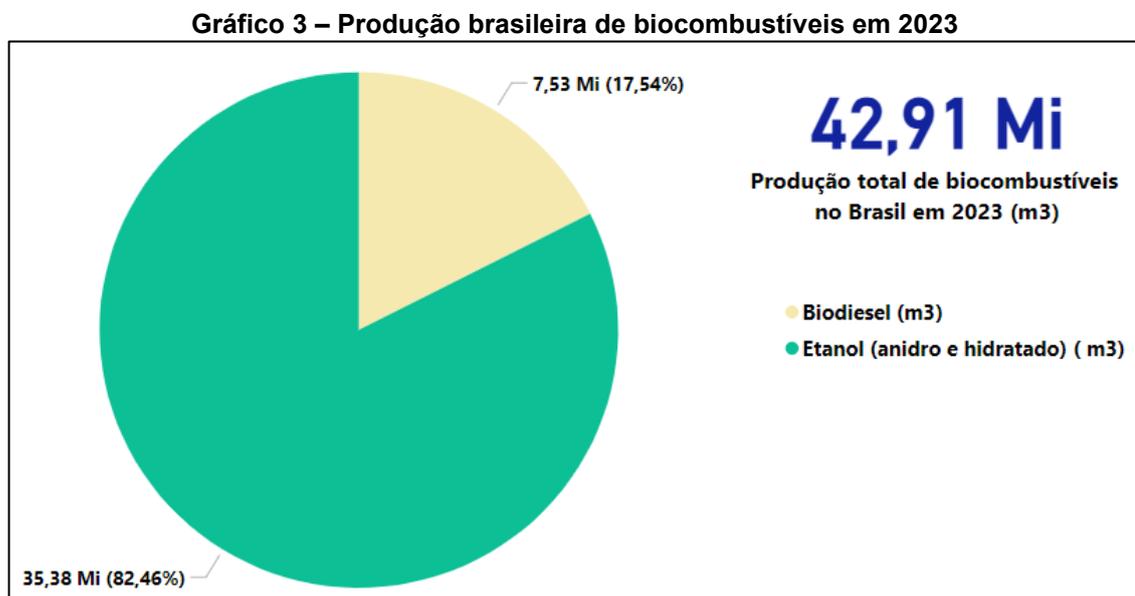
## **2.2 Produção de biocombustíveis no Brasil**

Os biocombustíveis possuem um papel fundamental na redução da dependência dos combustíveis fósseis, e assim, contribuem com a transição para uma matriz energética renovável. São produzidos a partir de processos químicos e bioquímicos e apresentam vantagens como propriedades oxigenadas interessantes, são sustentáveis, uma vez que são provenientes de biomassa, e são considerados neutros em termos de carbono, pois a combustão dos biocombustíveis libera dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), e estas emissões são compensadas durante a fotossíntese. O setor de transporte é um dos principais impulsionadores do consumo e produção de biocombustíveis. Estados Unidos, Brasil e União Europeia são atualmente os maiores produtores de biocombustíveis (Canabarro *et al.*, 2023; Mumtaz *et al.*, 2022; Prasad *et al.*, 2024).

O Brasil se destaca no cenário global como um dos maiores produtores e consumidores de biocombustíveis, tanto etanol como biodiesel. O país é o segundo maior produtor de etanol e o terceiro maior produtor de biodiesel. O Brasil produz dois tipos de etanol: o anidro, que é misturado na gasolina comercial, e o hidratado, que é vendido separadamente como combustível. Mais de 98% da produção de etanol do país utiliza a cana-de-açúcar como matéria-prima, sendo o milho também utilizado

para a produção do biocombustível. Com relação às matérias-primas utilizadas para a produção de biodiesel no Brasil, 68% é soja, 11% é sebo, 2% é óleo de palma e 19% é outros (gordura de frango ou porco, óleo de algodão, óleo de cozinha usado, óleo de milho e óleo de canola) (Canabarro *et al.*, 2023; Tiburcio; Macêdo; Pereira Neto, 2023).

O gráfico 3 apresenta a distribuição da produção de biocombustíveis no Brasil em 2023, de acordo com os dados do Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, fornecido pela ANP.



Fonte: Autoria própria (2024)

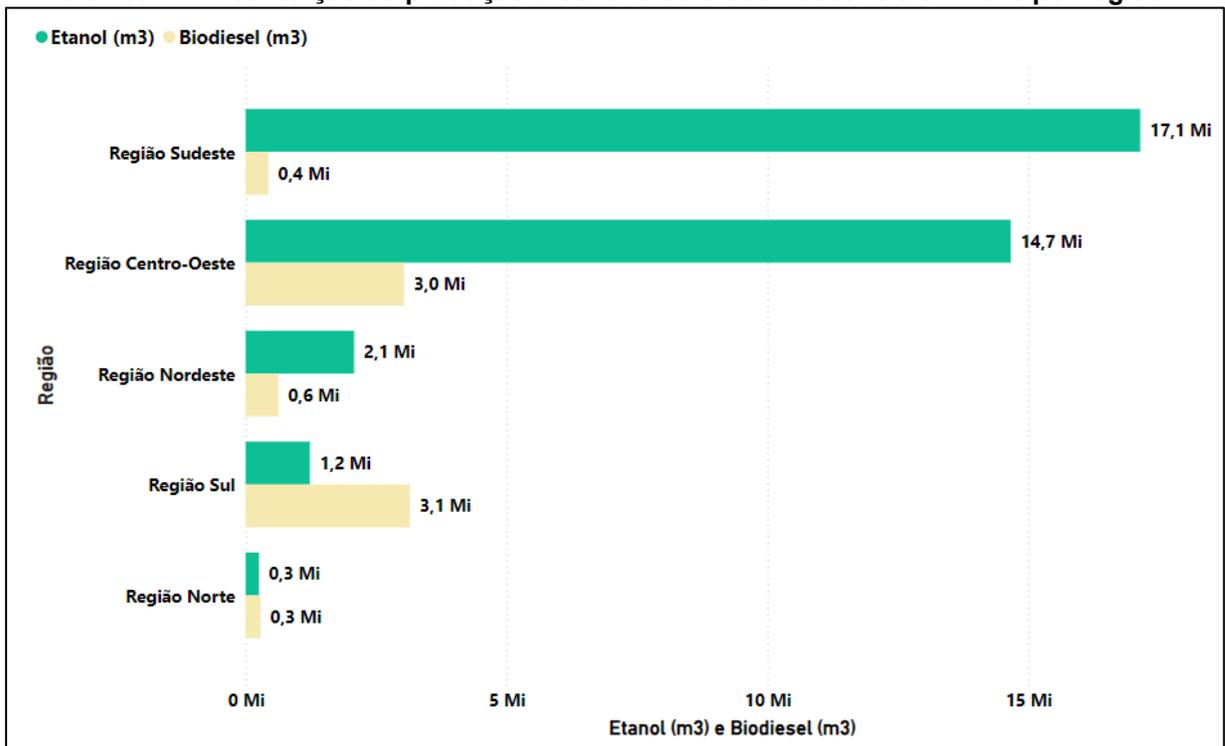
De acordo com os dados da ANP, 42,91 bilhões de litros de biocombustíveis foram produzidos no Brasil em 2023, sendo que 82,46% (35,38 bilhões de litros) é referente à produção de etanol (anidro e hidratado) e 17,54% (7,53 bilhões de litros) se refere à produção de biodiesel.

Algumas políticas nacionais foram responsáveis pelo destaque do Brasil no cenário de biocombustíveis. Desde 1931, era obrigatória a adição de pelo menos 5% de etanol anidro na composição da gasolina. Em 1970, foi lançado o Programa Nacional do Álcool (Proálcool) que aumentou este percentual para 25% e introduziu o etanol hidratado (95% etanol e 100% água) para uso como combustível em veículos leves. Atualmente, o percentual obrigatório de álcool na gasolina é de 27%. Em 2005 foi promulgada a lei 11.097 que dispõe da introdução do biodiesel na matriz energética

nacional, onde a quantidade obrigatória de biodiesel adicionado ao diesel iniciou em 2% (B2) e atualmente este percentual é de 12% (B12), com previsão de aumento para 13% em 2024 (B13) e 14% em 2025 (B14) e 15% em 2026 (B15). Em 2017, por meio da Lei 13. 576, foi estabelecida a Política Nacional de Biocombustíveis (RenovaBio) que, por meio de iniciativas como a geração de créditos de carbono, visa promover a expansão adequada dos biocombustíveis na matriz energética nacional, e assim, assegurar a previsibilidade para o mercado de combustíveis, induzir ganhos de eficiência energética e de redução de emissões de gases causadores do efeito estufa na produção, comercialização e uso de biocombustíveis (Canabarro *et al.*, 2023; Tiburcio; Macêdo; Pereira Neto, 2023; Brasil, 2023; Brasil, 2017).

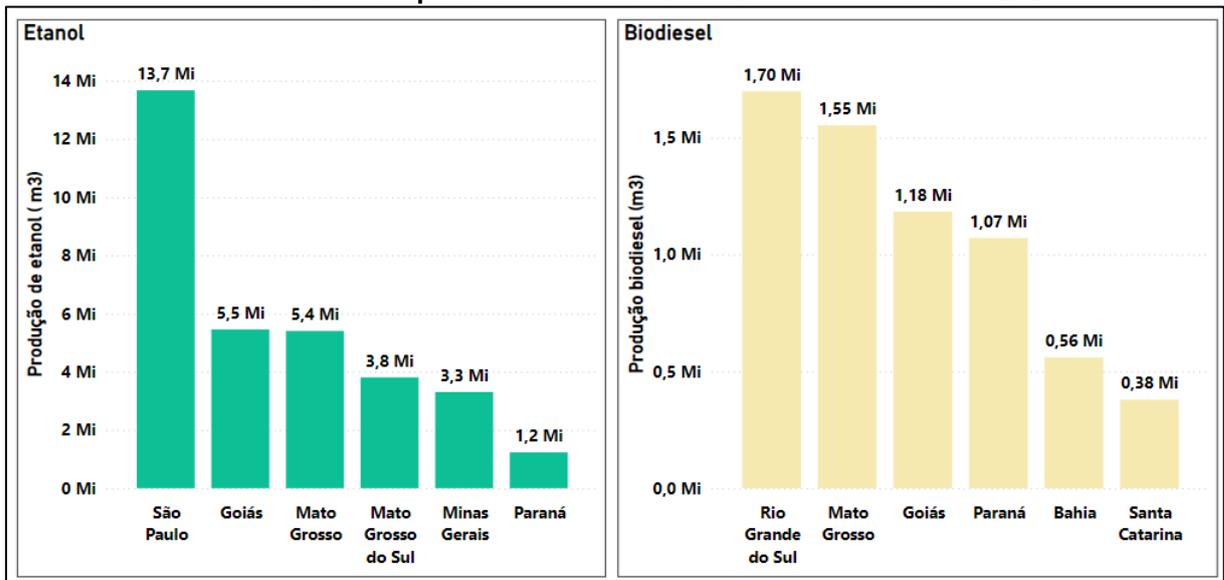
O gráfico 4 apresenta a distribuição da produção de biocombustíveis entre as regiões do Brasil e o gráfico 5 apresenta os estados brasileiros que se destacam na produção de etanol e biodiesel, de acordo com os dados da ANP.

**Gráfico 4 – Distribuição da produção brasileira de biocombustíveis em 2023 por região**



Fonte: Autoria própria (2024)

Gráfico 5 – Maiores produtores nacionais de biocombustíveis em 2023



Fonte: Autoria própria (2024)

Ao analisar os gráficos, verifica-se que as regiões Sudeste e Centro-Oeste são as maiores produtoras de biocombustíveis no país, principalmente o etanol. Com relação à produção de biodiesel, destaque para a região Sul, que possui produção nos três estados que a compõe. O estado de São Paulo se destaca na produção de etanol, 13,7 bilhões de litros produzidos em 2023, e o estado do Rio Grande do Sul é o maior produtor de biodiesel, com 1,70 bilhões de litros produzidos em 2023.

### 2.3 Panorama da produção de etanol

O consumo de etanol tem emergido no mundo todo. É considerado um tipo de energia verde, uma vez que este combustível é derivado de culturas agrícolas, que são fontes biológicas e renováveis. O etanol pode ser comercializado como etanol hidratado, quando é comercializado sozinho nas bombas de combustível, ou como etanol anidro, quando está misturado com gasolina. Dessa forma, espera-se que a produção em larga escala deste biocombustível possa reduzir significativamente a dependência de combustíveis fósseis (Canabarro *et al.*, 2023; Murata *et al.*, 2021; Nuanpeng *et al.*, 2023; Qu *et al.*, 2021).

No cenário atual (década de 2020), o Brasil ocupa posição de destaque na produção e consumo de biocombustíveis. O país é o segundo maior produtor global

de etanol e é responsável por aproximadamente 90% da produção total de biocombustíveis na América Latina (Canabarro *et al.*, 2023; Mumtaz *et al.*, 2022; Tiburcio; Macêdo; Pereira Neto, 2023).

O etanol é produzido por meio da fermentação de açúcares utilizando leveduras. As fontes de açúcares utilizadas para a produção de etanol podem ser classificadas em: culturas à base de amido, culturas ricas em açúcar livre e biomassa lignocelulósica. O etanol à base de amido e açúcar livre dominam a produção mundial, com taxas de 60% e 40%, respectivamente. Os produtores do etanol utilizam principalmente culturas à base de amido para a produção de etanol, como os grão de milho nos Estados Unidos e trigo ou beterraba na União Europeia. No caso do Brasil, o etanol é majoritariamente produzido a partir da cana-de-açúcar (Li *et al.*, 2022; Qu *et al.*, 2021).

De acordo Robak e Balcerek (2018), dependendo do tipo de matéria-prima e do processo empregado, o etanol pode ser classificado como etanol de primeira geração (1G), etanol de segunda geração (2G) e etanol de terceira geração (3G).

O etanol 1G utiliza como matéria-prima culturas com altos teores de açúcar e amido, que também são utilizadas como alimentos, como cana-de-açúcar, milho, cevada, entre outras. A produção em larga escala do etanol 1G gera preocupações quanto às suas consequências socioeconômicas e ambientais, uma vez que a produção de etanol compete com a produção de alimentos por água e terra arável, o que pode levar à escassez de recursos e aumento nos preços (Robak; Balcerek, 2018).

O etanol 2G utiliza biomassa lignocelulósica, oriunda de resíduos agroindustriais, que é uma matéria-prima renovável, não alimentícia, de baixo custo e abundante. No entanto, por razões técnicas e econômicas, ainda não são produzidas em larga escala, em razão da exigência de um pré-tratamento da matéria-prima antes da fermentação. Dessa forma, ainda são necessários estudos para otimizar o processo de produção de etanol 2G (Vedovatto *et al.*, 2021).

Por fim, o etanol 3G utiliza a biomassa de algas como matéria-prima. O cultivo de algas apresenta como vantagens a capacidade de se adaptar a diferentes ambientes, alta eficiência na fixação de CO<sub>2</sub>, alto potencial de acúmulo de carboidratos, além de causar impacto na produção de alimentos. Embora a produção de etanol 3G ainda não esteja otimizada, há muitas pesquisas em todo o mundo para

explorar métodos que viabilizem a produção em larga escala e que, no futuro, este combustível oferecerá muitas vantagens como utilização de resíduos e esgoto para cultivo, redução da pegada hídrica, aumento da segurança alimentar e disponibilidade de energia renovável (Müller *et al.*, 2023).

### 2.3.1 Produção de etanol

O processo padrão para obtenção de etanol a partir de cana-de-açúcar no Brasil consiste nas seguintes etapas principais: limpeza, extração do caldo e separação do bagaço, tratamento e concentração do caldo, fermentação, destilação. No caso de etanol anidro, a última etapa do processo é a desidratação. Nas plantas de etanol 1G, ocorre a cogeração de energia, onde o bagaço é utilizado para gerar energia a partir da queima da biomassa (Oliveira; Cruz, 2023). Nos casos de produção de etanol 2G, o bagaço da cana-de-açúcar passa pelas etapas de pré-tratamento, hidrólise enzimática, fermentação, destilação e desidratação (etanol anidro) (Robak; Balcerek, 2018).

A figura 2 apresenta a sequência das macros etapas empregadas para a produção de etanol anidro e hidratado. No fluxograma, são apresentadas as etapas para a produção de etanol de primeira geração (1G) e etanol de segunda geração (2G).



Fonte: Autoria própria (2024)

Nos tópicos a seguir, estão detalhadas as macros etapas da produção de etanol, de acordo com as descrições do processo apresentadas nos estudos de Zanardi e Costa Junior (2016) e Oliveira e Cruz (2023).

- A cana-de-açúcar, matéria-prima para a fabricação de etanol 1G, é composta de suco (água e sólidos solúveis, como glucose, sucrose, sais e ácidos orgânicos) e fibras (bagaço – componentes lignocelulósicos e cinzas). Após a limpeza, a cana-de-açúcar é enviada para um conjunto de moendas, onde o caldo é extraído das fibras por aplicações sucessivas de pressão.

- O caldo é separado do bagaço e enviado para a etapa de tratamento, que envolve as etapas de adição de químicos como fosfato e leite de cal (calagem) para a remoção de compostos voláteis, decantação (onde ocorre a remoção de sólidos) e filtração (onde a lama é lavada e se obtém o filtrado). A etapa de tratamento é finalizada com a concentração do caldo limpo em evaporadores.

- Após, o caldo é enviado para a fermentação, onde ocorre a conversão de açúcares em etanol e CO<sub>2</sub>. As leveduras são os microrganismos mais empregados na fermentação e o tipo *Saccharomyces cerevisiae* (*S. cerevisiae*) é a mais estudada e empregada em escala industrial. O produto obtido da fermentação é denominado vinho bruto, que contém células de levedura em suspensão. O vinho bruto é centrifugado, obtendo o creme de levedura, que é recuperado, tratado, purgado e reciclado para ser utilizado em uma nova fermentação, e o vinho final que é enviado para a destilação. A composição do vinho final é de aproximadamente 88 a 93% de água, 7 a 12% de etanol e pequenas proporções de outros álcoois.

- Para obter etanol de alta pureza, emprega-se a destilação, que separa os componentes de uma mistura de acordo com sua volatilidade. A destilação ocorre em várias colunas, onde no fundo retira-se a vinhaça, efluente do processo, e no topo obtém-se os vapores ricos em etanol. Ao final deste processo, obtém-se o etanol hidratado, com concentração de 93,2 °INPM<sup>2</sup>.

- Uma vez que a mistura de etanol e água é uma mistura azeotrópica<sup>3</sup>, não é possível obter etanol anidro ao final do processo de destilação. Faz-se necessária a aplicação de métodos químicos e físicos para promover a desidratação

---

<sup>2</sup> °INPM é a razão em gramas de álcool absoluto contido em 100 gramas de uma mistura hidroalcoólica.

<sup>3</sup> São aquelas que se comportam como uma substância pura durante o processo de ebulição.

do etanol, como a desidratação azeotrópica por cicloexano, que o método mais utilizado no Brasil. Neste processo, o etanol hidratado é misturado com o cicloexano em uma coluna desidratadora, que apresenta a seguinte distribuição: na região superior tem-se o ternário, água, etanol e desidratante, na zona intermediária tem-se a mistura etanol e desidratante, e, na zona inferior, obtém-se o produto final, etanol anidro, com concentração 99,3 °INPM.

Na etapa de moagem, além do caldo, obtém-se o bagaço, que pode ser empregado como biomassa para queima nas caldeiras, e assim produzir energia elétrica, ou ser utilizado para a obtenção do etanol 2G.

De acordo com Prasad *et al.* (2024) e Robak e Balcerek (2018), o bagaço da cana-de-açúcar é uma biomassa lignocelulósica com grande potencial para a produção de etanol. Em seus estudos, os autores apresentam as etapas empregadas para a produção de etanol 2G, que estão descritas nos seguintes tópicos.

- Em razão de sua estrutura complexa, com lignina não biodegradável e celulose cristalina e hemicelulose com baixa digestibilidade, faz-se necessário um pré-tratamento da biomassa antes da fermentação. Os processos empregados no pré-tratamento podem ser biológicos, químicos ou físicos. A escolha de qual pré-tratamento será adotado depende da composição da biomassa lignocelulósica e são a principal causa do alto custo da produção de etanol 2G.

- Após o pré-tratamento, a biomassa segue para a etapa de hidrólise enzimática, quem tem o objetivo que quebrar os polímeros celulose e hemicelulose em açúcares mais simples, que podem ser convertidos em etanol durante a fermentação. A hidrólise dos polímeros é realizada por enzimas, como a endoglucanase (EG), exocelobiohidrolase (CBH) e  $\beta$ -glucosidase (BGL).

- Após hidrólise enzimática, o material hidrolisa obtido segue para as etapas de fermentação, destilação e desidratação, como ocorre na produção de etanol 1G.

## **2.4 Biorreatores e a complexidade dos bioprocessos**

Os biorreatores são vasos onde em seu interior ocorre um bioprocessos, isto é, uma reação biológica. Os biorreatores são o núcleo de diversos processos

biológicos que envolvem microrganismos (bactérias, fungos, leveduras etc.), enzimas, células animais e vegetais e tecidos. Para cada bioprocessos específicos, há um tipo de biorreator adequado. Os diversos tipos e configurações de biorreatores existentes surgiram dos estudos aprofundados do sistema biológico, incluindo crescimento celular, metabolismo, manipulação genética, entre outros fatores, para entender as exigências dos processos biológicos (Wang; Zhong, 2007).

Os biorreatores do tipo STBR têm sido amplamente aplicados para a produção de etanol, tanto em escala laboratorial quanto industrial. A ação dos agitadores promove um sistema homogêneo e uma mistura uniforme no interior do STBR, no entanto, também é responsável por um alto consumo de energia (Sripitorn *et al.*, 2021). Os biorreatores STBR com agitação contínua, denominados CSTBR, possuem uma ampla disponibilidade comercial, onde a entrada de nutrientes e a retirada de produtos ocorre de forma regular. Os substratos são alimentados no sistema com concentração e taxas de fluxo definidas e o número de células é controlado pela sua remoção do biorreator (Karagoz; Bill; Ozkan, 2019).

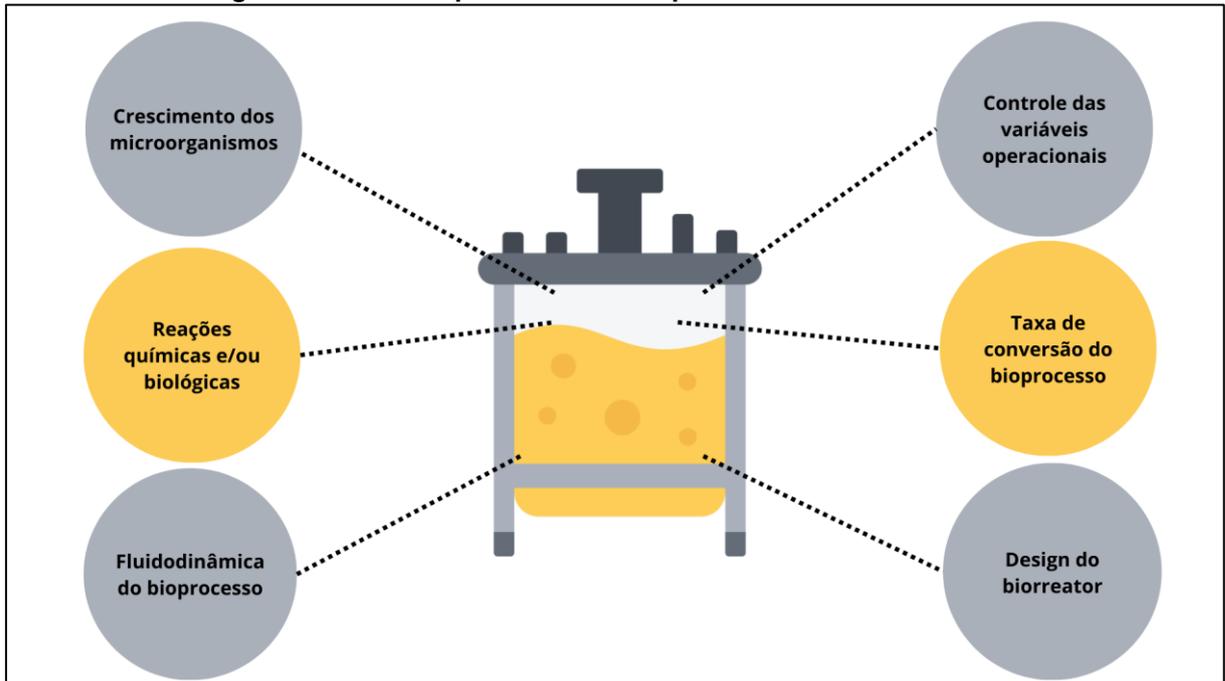
Na literatura, há diversos estudos que utilizaram reatores CSTBR para a produção de etanol, como o trabalho de Liu *et al.* (2020) onde um CSTR foi empregado na fermentação anaeróbica de águas residuais de melaço, que serviram de substrato para a produção de etanol e hidrogênio. O trabalho de Sun *et al.* (2019) utilizou um CSTR para a produção de etanol a partir do gás de síntese utilizando biochar de resíduos da avicultura como meio. Em seu estudo, Lee *et al.* (2017) empregou o CSTR na produção de etanol a partir do glicerol, um subproduto da produção de biodiesel. De acordo com os autores, além de uma alternativa para a reutilização desta substância residual, a produção de etanol a partir do glicerol apresenta um processo simplificado, obtendo assim redução dos custos de produção.

Independentemente do tipo biorreator utilizado, este deve oferecer as condições ideais para a condução do bioprocessos e para melhor rendimento do produto. O biorreator deve ser projetado visando maximizar o nível de produção e minimizar o quanto for possível o consumo de energia. Algumas variáveis de processo afetam a performance biológica em um biorreator e precisam ser monitoradas. A temperatura é um dos parâmetros mais críticos, uma vez que afeta o crescimento dos microrganismos. A mistura adequada também deve ser controlada para garantir o suprimento de nutrientes necessários. Outro fator importante é o suprimento de

oxigênio dissolvido, que afeta tanto o crescimento dos microrganismos como a formação de produtos. O pH também deve ser monitorado, uma vez que durante a fermentação, este valor pode mudar em razão dos metabólitos liberados no meio. Portanto, se faz necessário examinar o sistema biológico afetado e as circunstâncias que aumentam a atividade do microrganismo e taxa de conversão, visando obter maior concentração do produto (Novia *et al.*, 2023; Zhong, 2010).

Tais parâmetros afetam o crescimento do microrganismo no interior do biorreator e, conseqüentemente, a eficiência do bioprocesso. Este fato, somado com a natureza transformadora do bioprocesso e sua cinética não linear e incerta, faz com o biorreator seja um sistema difícil de modelar e controlar (Hajaya; Shaqarin, 2022; Mohan *et al.*, 2022). A modelagem de bioprocessos é desafiadora, pois estes processos são consideravelmente mais difíceis de caracterizar que os processos químicos, em razão das reações metabólicas e dinâmica do fluido da cultura. Além disso, os bioprocessos são altamente sensíveis às mudanças nas condições operacionais do processo. O comportamento dos bioprocessos ainda não é bem compreendido, assim, é difícil descrever com precisão os mecanismos que ditam o comportamento dos microrganismos (Forster *et al.*, 2023; Petsagkourakis *et al.*, 2020). Os principais fatores que contribuem para a complexidade dos biorreatores estão apresentados na figura 3.

**Figura 3 – Fatores que afetam a complexidade dos biorreatores**



Fonte: Autoria própria (2024)

Em seu estudo, Asif, Ali, Ajbar (2013) apresentam outros fatores que contribuem para a complexidade dos bioprocessos. Segundo os autores, no interior do biorreator ocorre o fenômeno da competição entre as espécies microbianas, o que é comum em ecossistemas naturais. Na competição simples, as espécies competem pelo recurso que afeta o crescimento de todas elas. Além disso, ao analisar o comportamento dinâmico do bioprocessamento, os autores identificaram um comportamento complexo, com duplicação de período e ocorrência de caos. Em seu trabalho, Ajbar, Alqahtani, Musa (2022) afirmam que os biorreatores contínuos são altamente não lineares e podem apresentar problemas operacionais, como multiplicidade de estado e oscilações indesejadas, que comprometem a operação segura e eficiente do biorreator, e devem ser, portanto, evitadas.

## 2.5 Análise dinâmica e controle de bioprocessos

De acordo com Ladyman, Lambert e Wiesner (2013), não existe na literatura uma forma concisa para definir sistemas complexos, muito menos uma definição na qual todos os cientistas concordem.

Em seu estudo, os autores revisaram outros estudos que tentaram caracterizar sistemas complexos e analisaram um conjunto de recursos que são

associados a sistemas complexos na literatura por estudiosos da área. Como resultado, os autores propuseram uma tentativa de definição de complexidade, considerando o aspecto físico. Segundo os autores, “um sistema complexo é um conjunto de elementos que estão interagindo de forma desordenada, resultando em uma organização e memória robustas”.

A operação de um bioprocessamento pode apresentar limitações, uma vez que a interação entre as células e o ambiente no interior do biorreator é um processo complexo. Quando o comportamento dinâmico de um biorreator é conhecido, é possível definir as melhores condições de partida e operação, visando os melhores resultados da fermentação, e assim, evitar fenômenos indesejados ou aproveitar aqueles que levam aos resultados esperados (Paz Astudillo; Cardona Alzate, 2011) .

Dessa forma, a análise da estabilidade é importante no estudo de biorreatores, pois permite obter informações importantes sobre sua operação, como estabelecimento das condições estáveis, conhecer o comportamento do sistema ao longo do tempo e determinação da existência dos estados estáveis, que estão diretamente relacionados aos estados de operação. Além disso, o projeto e o desenvolvimento de um sistema de controle eficiente devem incluir o cálculo dos estados estáveis, dessa forma, o comportamento dinâmico do biorreator deve ser conhecido. Para conduzir a análise de estabilidade do sistema, faz-se necessário o desenvolvimento de um modelo matemático que reproduza o comportamento dinâmico do processo. Estes modelos matemáticos mostram-se ferramentas úteis para explorar os fenômenos complexos que ocorrem no interior de um biorreator, além disso, podem ser usados para estudos paramétricos do sistema e fornecer informações sobre meios de aumentar a produtividade do processo (Ajbar; Alqahtani; Musa, 2022; Alqahtani *et al.*, 2021; Paz Astudillo; Cardona Alzate, 2011).

Em seu estudo, Paz Astudillo e Cardona Azate (2011) afirmam que um dos modelos mais aplicados para a análise dinâmica de sistema é a teoria de bifurcação, que descreve as mudanças bruscas que ocorrem em um sistema quando um parâmetro de controle é alterado. Nos diagramas de bifurcação, as variáveis de saída do sistema são plotadas em relação a um parâmetro crítico. A teoria de bifurcação permite identificar os parâmetros que influenciam a estabilidade do sistema, bem como determinar um intervalo de valores adequado para eles, o que é fundamental para as estratégias de otimização e controle.

Na literatura, há exemplos de estudos que conduziram a análise dinâmica de biorreatores e obtiveram resultados interessantes. A análise não linear de estado estável de um biorreator do tipo CSTR aplicado para a produção de etanol foi conduzida no estudo de Ciesielski e Grzywacz (2019). A taxa de diluição e a concentração de glicose na alimentação foram utilizadas como parâmetros de bifurcação. De acordo com os autores, os diagramas de bifurcação ilustraram bem a complexidade do modelo, possibilitaram identificar situações a serem evitadas e a região onde ocorre a maior concentração de etanol.

O estudo de Altimari *et al.* (2022) consistiu em analisar a competição entre bactérias e microalgas em um biorreator do tipo CSTR. A análise de bifurcação possibilitou a determinação das regiões de estabilidade de monoculturas de bactérias e microalgas, também na situação de consórcio entre elas. A análise forneceu expressões que definem os limites de espaço de parâmetros, o que garante a estabilidade dos diferentes estados estacionários, e conseqüentemente, oferece diretrizes para o projeto e controle do biorreator.

Em seu trabalho, Villafuerte-Segura *et al.* (2023) apresenta um modelo matemático Lotka-Volterra com atraso de tempo para um biorreator. O tempo de paralisação foi utilizado como parâmetro para identificação das condições para as condições de bifurcação. De acordo com os autores, os resultados obtidos contribuem para melhorar a estabilidade da fermentação, a qualidade do produto e fornecer informações sobre a dinâmica do sistema analisado. Modelagem e simulações numéricas foram empregadas no estudo de Abashar (2018) para investigar a influência das excitações da membrana na produção de etanol em um fermentador forçado. Por meio de diagramas de bifurcação, os autores identificaram a ocorrência de fenômenos interessantes, como caos, hiper caos e grandes janelas de bolhas. Os resultados mostraram também que a região caótica apresenta maior potencial para implementação das excitações da membrana.

Os resultados obtidos com a análise dinâmica possibilitam o desenvolvimento de um sistema de controle para biorreatores. No entanto, o controle de biorreatores é uma tarefa desafiadora em razão de seu comportamento dinâmico complexo e não linear, presença de distúrbios externos e dificuldade de medir variáveis representativas. Além disso, os biorreatores podem apresentar sensibilidade aos parâmetros de bifurcação e comportamento caótico. Apesar de desafiador, o controle

de bioprocessos é necessário para minimizar o custo do processo, garantir produtividade e preservar a qualidade do produto final (Carrillo-Ahumada *et al.*, 2020; Fernández *et al.*, 2019; Pachauri; Rani; Singh, 2017). Por esta razão, muitos estudos têm se dedicado no desenvolvimento de sistemas de controle eficientes para biorreatores.

Em seu estudo, Tusset *et al.* (2022) propuseram um projeto de controle LQR para controlar a temperatura de um biorreator. O trabalho dos autores contribuiu para o entendimento do controle de ordem reduzida, pois para o controle foram consideradas apenas as equações que representam a variação de temperatura no reator e na camisa.

No trabalho de Natarajan, Moghadam e Jagannathan (2021) é proposto um controlador adaptativo baseado em redes neurais para o rastreamento de um bioprocessos. Este controlador apresenta a capacidade de autoaprendizagem em condições de circuito fechado em razão da fase de aprendizagem online. De acordo com os autores, o controlador proposto pode ser utilizado para explorar os desafios do controle de bioprocessos e, no futuro, poderá ser aplicado para o rastreamento eficiente de bioprocessos onde a dinâmica não é completamente conhecida.

Um esquema de controle inferencial baseado em rede neural adaptativa (ADALINE) foi proposto por Pachauri, Singh e Rani (2017) para o controle do processo de fermentação de etanol. A concentração de etanol é estimada a partir do perfil de temperatura do processo utilizando um sensor suave. Os autores ainda propuseram um meio de melhorar a precisão da previsão do ADALINE por meio do retreinamento com medições anteriores imediatas.

O estudo de Petre, Selişteanu e Roman (2021) apresenta um projeto de esquemas de controle avançados para um processo contínuo de produção de etanol. Estes esquemas envolvem leis de controle adaptativo e algoritmos de estimativa não linear, como observadores de modo deslizante e estimadores de estados e parâmetros, para monitorar a concentração de substrato e a temperatura durante a fermentação. Apesar da ocorrência de incertezas e perturbações, o sistema proposto atingiu com sucesso a meta de produção de etanol, minimizando a quantidade de substrato residual.

No trabalho desenvolvido por Fonseca *et al.* (2013) foi proposto o uso de controladores fuzzy-PI e fuzzy-PID em conjunto com uma estratégia de intervalo

dividido para controlar a temperatura de um biorreator que foi modelado como um CSTR. O desempenho desses sistemas de controle foi comparado por meio da integral de erro, demanda de utilidade e esforço de controle. De acordo com os autores, o sistema de controle proposto foi capaz de regular a temperatura adequadamente em todos os testes e apresenta como vantagens o baixo consumo de utilidades e sinal de saída suave, o que evita a necessidade de manutenção não programada.

## 2.6 Ocorrência de comportamento caótico em biorreatores

O design eficiente, a operação e o controle de reatores, bem como sua operação e performance são afetados profundamente por distúrbios forçados (intencionais) ou naturais (não intencionais). No entanto, nenhum reator é capaz de operar livre de distúrbios em sua alimentação. Dessa forma, é importante estudar a resposta do sistema a tais distúrbios, para utilizá-los nas situações em que são benéficos, ou então, evitá-los, por meio de controladores, quando os efeitos são negativos (Abashar, 2011). Em seu estudo, Abashar e Elnashaie (2010) analisaram a resposta dinâmica de um biorreator empregado na produção de etanol às perturbações sinusoidal da concentração de entrada. Como resposta a tais perturbações, sistema apresentou uma dinâmica rica e complexa, como a ocorrência de caos.

De acordo com Brown e Chua (1996), ao longo dos anos houve várias tentativas de estudiosos para definir o que é caos. Segundo os autores, a dependência sensível às condições iniciais é amplamente associada como um sinônimo de caos. Em seu estudo, os autores apresentam dois conceitos que consideram o núcleo do entendimento sobre caos: a perda rápida da correlação entre futuro e passado e a perda rápida da informação ao longo do tempo.

O trabalho de Cattani *et al.* (2017) apresenta uma definição de caos determinístico que, segundo os autores, ocorre quando as medições do estado de um sistema em um momento específico podem não permitir prever seu futuro, mesmo que as equações que regem o sistema sejam conhecidas.

Uma outra definição é apresentada no estudo de Gan (1996), que diz que um sistema dinâmico caótico é um sistema determinístico que apresenta comportamento aleatório por meio de sua dependência sensível às condições iniciais. Ainda segundo

os autores, o caos também apresenta características fractais, ou seja, apresenta autossimilaridade.

De acordo com as definições apresentadas, os sistemas caóticos apresentam grande sensibilidade às condições iniciais e, uma vez que podem percorrer uma grande parte do espaço de fase, quando ocorre uma variação em um parâmetro do sistema ou em uma condição inicial, mesmo que pequena, todas as regiões visitadas podem ser alteradas consideravelmente (Bandyopadhyay; Ravikumar; Kulkarni, 1993). O comportamento oscilatório afeta o desempenho do processo e prejudica sua otimização. Este fenômeno não é indesejável apenas do ponto de vista do controle de processos, mas no caso em que se trabalha com substâncias tóxicas, o comportamento oscilatório pode originar situações perigosas, que comprometem a operação segura do biorreator (Lenbury; Sukprasong; Novapruteep, 1996).

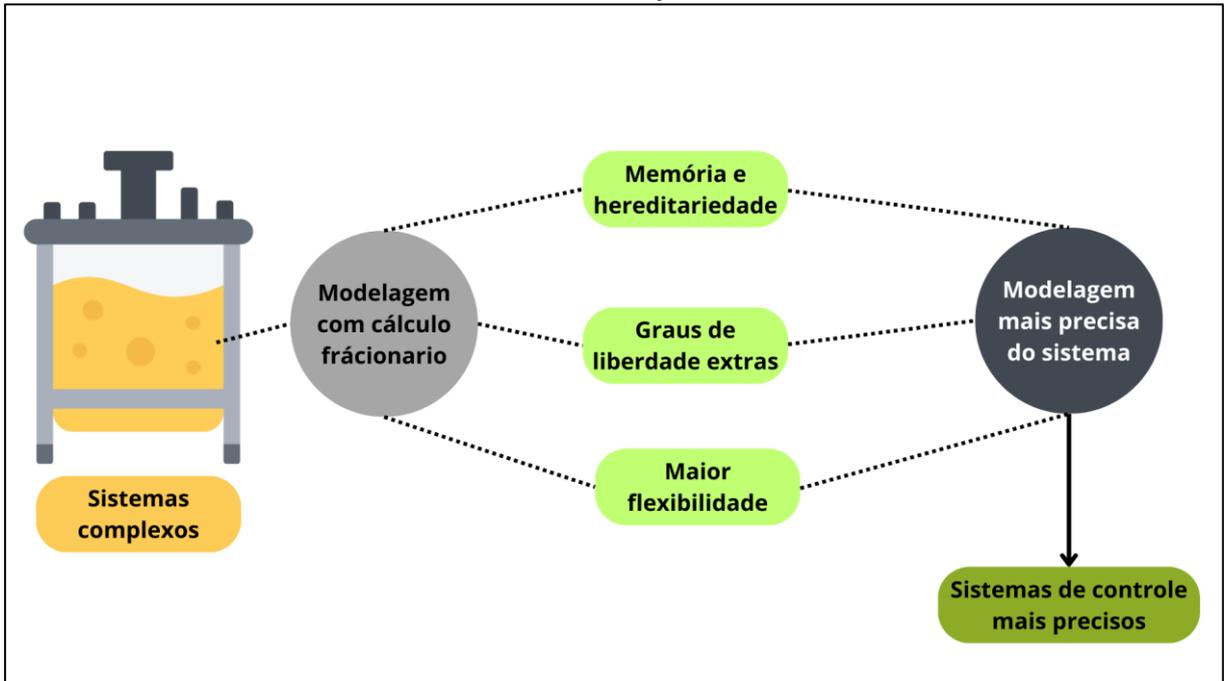
A ocorrência de fenômenos complexos, como o caos, é indesejável e problemática em processos químicos e em bioprocessos, pois pode estar associada à ocorrência de limitação de difusão, efeitos de gel em reatores de polimerização, ou inibição de substrato em biorreatores. Em razão da problemática relacionada à ocorrência de caos e da necessidade de projetar reatores mais eficientes e seguros, pesquisas relacionadas ao controle de caos têm despertado a atenção dentro no campo de dinâmica não linear (Ho; Chuang; Li, 2005; Zhang; Seider; Chen, 2016). Um desses trabalhos é o de Rasoulilian e Shahrokhi (2010) que propôs um sistema de controle da concentração do produto desejado em um CSTR não isotérmico que apresenta comportamento caótico. Para isso, um controlador *feedback* de estado ideal foi projetado. Em razão das singularidades e não linearidades do sistema, foi proposta a estratégia de controle *feedback* de estado linear. Dessa forma, os autores visaram controlar o comportamento caótico do reator acima de seu ponto de equilíbrio. Um outro exemplo foi o trabalho desenvolvido por Vaidyanathan (2015), onde foi feita a análise dinâmica de um reator químico com comportamento caótico, que permitiu obter a descrição detalhada da dinâmica do reator, bem como identificar os valores nos quais o sistema apresentou comportamento caótico. Após esta análise, os autores propuseram uma lei de controle adaptativo para o controle global do caos do reator com parâmetros desconhecidos.

## 2.7 Modelagem matemática de sistemas utilizando cálculo fracionário

Os modelos matemáticos são importantes para a engenharia, pois são uma forma de descrever o que acontece em fenômenos reais. A partir dos dados coletados sobre um determinado fenômeno, um modelo matemático é proposto com o intuito de prever como as variáveis de saída se comportam em razão da variação de outros fatores. Na área de engenharia, os processos são modelados para prever sua dinâmica, transformar a escala de laboratório em escala industrial e otimizar processos por meio condições operacionais e projetos de equipamentos. No entanto, é importante ampliar os modelos obtidos para incluir as interações do sistema em várias escalas. A análise de alguns sistemas mostrou que alguns fenômenos e processos não podem ser modelados adequadamente utilizando as equações diferenciais de ordem inteira. Neste contexto, destacam-se as derivadas fracionárias para a modelagem de fenômenos físicos complexos (Flores-Tlacuahuac; Biegler, 2014; Lopes Ferrari *et al.*, 2024).

O cálculo fracionário existe há muitos anos e tem sido cada vez mais explorada na literatura e aprimorada por vários pesquisadores para a modelagem de sistemas e desenvolvimento de controladores. O cálculo fracionário apresenta vantagens interessantes, como efeito de memória e herança, graus de liberdade extras e maior flexibilidade, o que permitem desenvolver modelos matemáticos mais precisos fenômenos físicos avançados, bem como projetar controles mais robustos para sistemas dinâmicos complexos. Quando comparados com os de ordem inteira, os controladores de ordem fracionária apresentam melhor resposta, uma vez que o cálculo fracionário permite que os sistemas sejam mais bem definidos, descritos e modelados, e quanto melhor a descrição matemática do sistema, mais preciso é o seu controle (Chen *et al.*, 2020; Munoz-Vázquez; Martínez-Reyes, 2019; Singh *et al.*, 2021). A figura 4 apresenta um resumo das vantagens da utilização do cálculo fracionário na modelagem de sistemas.

**Figura 4 – Resumo das vantagens da aplicação do cálculo fracionário na modelagem de sistemas complexos**



Fonte: Autoria própria (2024)

Na literatura, há exemplos de estudos que empregaram o cálculo fracionário para a modelagem de processos químicos e bioprocessos. O estudo de Aranha *et al.* (2024) teve como objetivo ajustar modelos cinéticos de secagem e extração de lipídios de sementes de maracujá, utilizando os modelos tradicionais e o cálculo fracionário. Os resultados do estudo mostraram que o modelo de ordem fracionária ofereceu ajustes iguais ou superiores aos modelos tradicionais para a cinética de extração do óleo e secagem das sementes. O trabalho desenvolvido por Silva *et al.* (2024) apresentou um modelo de cálculo fracionário como um modelo cinético generalizado para prever o rendimento máximo de metano e a cinética de degradação em ensaios de potencial de biometano (BMP). De acordo com os autores, o modelo fracionário superou os modelos cinéticos comuns de primeira ordem e apresentou a capacidade de capturar as complexidades da produção de metano sem perder a precisão do modelo.

Há também estudos que utilizaram o cálculo fracionário no desenvolvimento de sistema de controles para sistemas complexos, como os biorreatores, em razão de seu desempenho superior. Em seu estudo, Pachauri, Singh e Rani (2018) projetaram e implementaram um controlador PID com ordem fracionária e dois graus de liberdade (2DOOF-FOPID) para o controle da temperatura de um biorreator. Os autores

utilizaram os algoritmos genéticos para estimar os parâmetros do controlador. O desempenho do controlador proposto foi comparado com um PID de ordem inteira no rastreamento do *setpoint*, supressão de ruído, rejeição de distúrbios e análise de robustez. Os resultados obtidos mostraram que o controlador proposto obteve desempenho superior em todos os testes feitos e foi capaz de fornecer um controle eficiente, preciso e robusto e pode ser aplicado para o controle da temperatura em diferentes aplicações industriais.

O trabalho de Mohan *et al.* (2022) apresentou uma estratégia de controle em cascata baseada em PD/PI fuzzy de ordem fracionária (FOFPD/PI) para controlar o processo de fermentação dentro de um biorreator. O FOFPI é usado para controlar a concentração de etanol no loop interno, enquanto o FOFPD é usado para o controle de temperatura do biorreator no loop externo. O desempenho do controlador FOFPD/PI projetado foi comparado com o de outros controladores, inclusive seu equivalente de ordem inteira (IOFPD/PI), 2DOF FOPID, 2DOF PID e o controlador PID clássico. Sob diferentes condições de operação, o controlador FOFPD/PI proposto demonstrou controle preciso em comparação com os outros controladores. Por outro lado, o controlador PID clássico apresentou o desempenho mais fraco, o que confirma a superioridade do controlador de ordem fracionária em relação ao PID clássico.

## **2.8 Aplicação de reações autocatalíticas como um meio de descrever a complexidade de processos químicos e bioquímicos**

As reações autocatalíticas são aquelas onde produto gerado é responsável por aumentar a taxa do processo, isto é, o produto atua como o catalisador da reação. A autocatálise resume a capacidade dos sistemas vivos de reprodução e acredita-se que este processo esteve presente desde as formas primitivas de metabolismo, nos primeiros estágios da origem da vida. Em uma reação autocatalítica, o produto da primeira reação pode aumentar a taxa de outra reação, e o produto desta aumenta a taxa da primeira reação. Este efeito é conhecido como *loop feedback* positivo. Reações químicas e bioquímicas podem ser analisados no contexto de processos autocatalíticos (Gadgil; Kulkarni, 2009; Unterberger; Nghe, 2022).

A partir da segunda metade do século 20, houve um aumento do interesse no estudo da dinâmica complexa, com foco em sistemas de reações químicas que apresentam fenômenos não lineares, como oscilações e padrões especiais. Neste contexto, as reações autocatalíticas se destacam, pois apresentam comportamentos

interessantes, como o efeito feedback positivo e fenômenos dinâmicos complexos, como a ocorrência de caos, sendo uma ferramenta útil para o estudo e análise de processos químicos e biológicos (Arcadia *et al.*, 2021; Schuster, 2019).

No estudo de sistemas que apresentam complexidade estática e dinâmica, o reator CSTR auto térmico é um clássico paradigma. Nos últimos anos, um outro sistema que tem despertado a atenção dos pesquisadores é o CSTR isotérmico com reação autocatalítica, que se configura como um dos sistemas mais simples para estudos de bifurcação. O processo autocatalítico, em razão do efeito *feedback*, fornece ao sistema multiplicidade de estados variáveis, oscilações sustentadas e até mesmo caos (Alhumaizi; Abasaeed, 2000; Birol; Teymour; Keener, 2000).

De acordo com Alhumaizi (2000), quando se adiciona à autocatálise o processo de mutação, adiciona-se maior complexidade ao sistema, uma vez que a espécie mutante compete com o autocatalisador original. Em seu estudo, o autor examinou uma reação autocatalítica que ocorre em um CSTR, onde o autocatalisador sofre mutação. A análise dinâmica do sistema mostrou que este apresenta comportamento caótico, bem como múltiplas transições entre comportamento periódico e caótico. Segundo o autor, o sistema proposto é útil para melhor compreensão do caos e oscilações químicas em sistemas químicos e biológicos, pois se trata de um sistema simples que permite a análise sistemática e detalhada de vários tipos de comportamentos dinâmicos complexos.

Em seu estudo, Galanics, Sintár e Szalai (2023) empregaram um conjunto de quatro reações autocatalíticas, com propriedades complementares, para explorar os fenômenos não lineares em um reator de fluxo tubular. O objetivo do estudo foi obter evidências experimentais de fenômenos dinâmicos, como biestabilidade, excitabilidade e oscilações, e entender como esses fenômenos ocorrem em um ambiente onde o fluxo é laminar e a advecção domina o transporte. Além disso, o estudo buscou mostrar como a variação do tempo de residência ao longo do comprimento do reator resultou no surgimento de diferentes estados dinâmicos, contribuindo assim para uma melhor compreensão da química de fluxo não linear.

### 3 METODOLOGIA

#### 3.1 Revisão Sistemática da Literatura

A revisão sistemática da literatura foi realizada por meio da metodologia *Methodi Ordinatio*, proposta por Pagani, Kovaleski e Resende (2015) e atualizada por Pagani *et al.* (2022).

A metodologia se baseia em um método de decisão multicritério para a obtenção de um portfólio de artigos, ordenados de acordo com sua relevância científica. Para isto, a metodologia considera o ano de publicação, o fator de impacto do periódico e a número de citações do artigo. Para cada um destes critérios, é atribuído um fator de relevância, que atribuído pelo pesquisador. A execução da metodologia *Methodi Ordinatio* deve seguir alguns passos.

- **Passo 1: Busca dos artigos nas bases de dados**

As bases de dados selecionadas para a busca de artigos foram a *Scopus* e *Web of Science*. A pesquisa nas bases de dados foi feita nos campos “Título, resumo e palavras-chave”. Para a pesquisa, foram utilizados seis conjuntos de palavras-chave. O quadro 1 apresenta os conjuntos de palavras-chave utilizados na pesquisa, bem como a quantidade de artigos que foram encontrados nas duas bases de dados consultadas.

**Quadro 1 – Conjuntos de palavras-chave**

<b>Palavras-chave</b>	<b>Scopus</b>	<b>Web of Science</b>
<i>"bioreactor" AND "chaotic behavior" AND "bifurcation analysis"</i>	3	4
<i>"bioreactor" AND "chaos control"</i>	2	4
<i>"bioreactor" AND ("fractional order systems" OR "fractional calculus")</i>	7	5
<i>"bioreactor" AND "autocatalytic reactio**"</i>	8	2
<i>"autocatalytic reactio**" AND "chaotic behavior"</i>	12	13
<i>"autocatalytic reactio**" AND ("CSTR" OR "CSTBR")</i>	50	54
<b>Total</b>	<b>164</b>	

**Fonte: Aatoria propria (2023)**

Conforme as informações do quadro 1, somando os resultados obtidos nas buscas nas duas bases de dados consultadas, foram encontrados 164 documentos. Em um primeiro momento, não foi colocada nenhuma restrição na pesquisa, isto é, foram considerados todos os tipos de documento, idiomas e não foi aplicado nenhum corte temporal. Os procedimentos de filtragem serão aplicados na próxima etapa da metodologia.

- **Passo 2: Procedimentos de filtragem**

Neste passo, foram aplicados procedimentos de filtragem para a construção do portfólio final. O primeiro procedimento aplicado foi a remoção de artigos duplicados. Esta etapa resultou na remoção de 55 artigos.

Em seguida, foi feita a filtragem por tipo de documento. Para compor o portfólio, foram selecionados apenas artigos de pesquisa e artigos de revisão. Desta forma, documentos do tipo livros, capítulos de livros e artigos de conferência foram removidos. Esta etapa resultou na remoção de 7 artigos.

Em seguida, foi feita uma leitura prévia dos artigos selecionados. Nesta etapa, foram removidos todos os artigos cujo idioma não era o inglês. Foram removidos também artigos incompletos ou sem os dados de acesso. Por fim, foi feita a remoção dos artigos cuja temática não estava de acordo com o objetivo da presente pesquisa. Esta etapa resultou em 56 artigos excluídos. Ao final dos procedimentos de filtragem, o portfólio final resultou em 46 artigos.

O quadro 2 apresenta o resultado dos procedimentos de filtragem aplicados.

**Quadro 2 – Procedimentos de filtragem**

Procedimentos de filtragem	Total de documentos removidos
Artigos duplicados	55
Tipo de documento (livro, capítulo de livro, artigo de conferência)	7
Fora da temática	41
Idioma não é o inglês	4
Artigo incompleto ou sem dados de acesso	11
Total de artigos excluídos	118
<b>Total de artigos no portfólio</b>	<b>46</b>

Fonte: Autoria própria (2023)

Após a filtragem e seleção dos artigos para análise, o próximo passo da metodologia consiste em ordenar os artigos em ordem de relevância.

- **Passo 3: Organização do portfólio**

Na metodologia *Methodi Ordinatio*, a organização do portfólio de artigos é feita de acordo com sua relevância, e para isto, é utilizada a equação *InOrdinatio 2.0*, apresentada na equação (1), que determina a importância dos artigos com base em três critérios: fator de impacto, número de citações e ano de publicação.

$$InOrdinatio\ 2.0 = \left\{ [\Delta * (IF)] - \left[ \lambda * \left( \frac{ResearchYear - PubYear}{CitedHalfLife} \right) \right] + \Omega * \left[ \frac{C_i}{(ResearchYear + 1) - PubYear} \right] \right\} \quad (1)$$

De acordo com Pagani *et al.* (2022),  $\Delta$  é um fator de ponderação, de valor que varia de 1 a 10, que indica a importância do fator de impacto do periódico (*IF*);  $\lambda$  é um fator de ponderação, de valor que varia de 1 a 10, que indica a importância do ano de publicação do artigo (*PubYear*); *ResearchYear* se refere ao ano no qual a pesquisa está sendo conduzida (neste caso, 2023); *CitedHalfLife* se refere à mediana da meia-vida citada de periódicos com JCR 2020; e  $\Omega$  é um fator de ponderação, de valor que varia de 1 a 10, que indica a importância do número de citação ( $C_i$ ).

Os valores dos fatores de ponderação  $\Delta$ ,  $\lambda$  e  $\Omega$  são atribuídos pelo pesquisador e, quanto maior o valor destes fatores, maior é a importância dos

parâmetros analisados. Para o estudo em questão, os valores atribuídos para  $\Delta$ ,  $\lambda$  e  $\Omega$  foram, respectivamente, 10, 8 e 8. O fator de impacto dos periódicos foi obtido por meio da métrica *Journal Citation Reports (JCR)*, disponível no portal da CAPES e o número de citações foi obtido por meio da plataforma *Google Scholar*.

O valor do *InOrdinatio* foi calculado para cada um dos artigos do portfólio, por meio da equação 1. Os artigos foram organizados em ordem decrescente do valor do *InOrdinatio*, cujos valores estão no intervalo de 193,40 a -29,20. Quanto maior o valor do *InOrdinatio*, maior a relevância do artigo para o tema estudado.

O próximo passo da metodologia consiste na leitura dos artigos e condução das análises bibliométricas e/ou de conteúdo, conforme a necessidade da pesquisa.

- **Passo 4: Análise ordenada dos artigos do portfólio**

A análise dos artigos foi feita de acordo com a ordenação do portfólio, do mais relevante para o menos relevante. Esta análise teve como objetivo identificar algumas informações como a evolução temporal do tema estudado, as técnicas utilizadas, identificar os sistemas analisados e os resultados obtidos. Esta análise busca responder às seguintes perguntas de pesquisa:

**P1: Como é a distribuição temporal de publicações de estudos relacionados ao tema ao longo dos últimos anos?**

**P2: Quais foram as técnicas utilizadas na análise dinâmica dos sistemas estudados?**

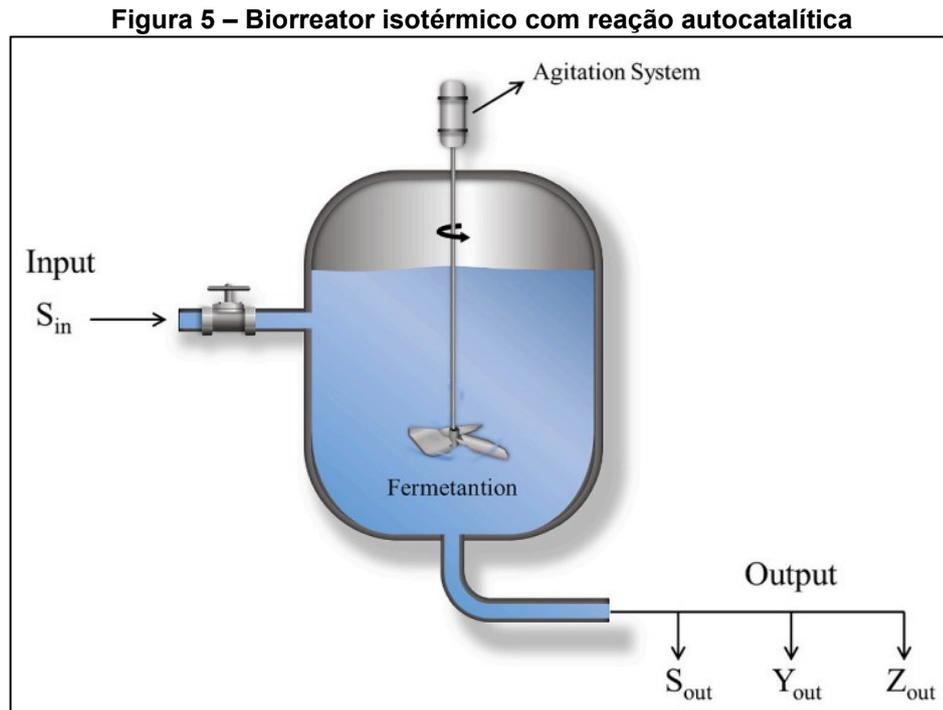
**P3: Houve a identificação e análise de comportamento caótico?**

**P4: Qual foi a lacuna de pesquisa identificada?**

Ao responder a estas questões, busca-se obter um panorama atual de estudos publicados sobre o tema. Também, busca-se apontar a relevância deste trabalho para literatura, isto é, mostrar como os resultados deste estudo podem contribuir para sanar as lacunas de pesquisa identificadas durante a análise do portfólio de artigos.

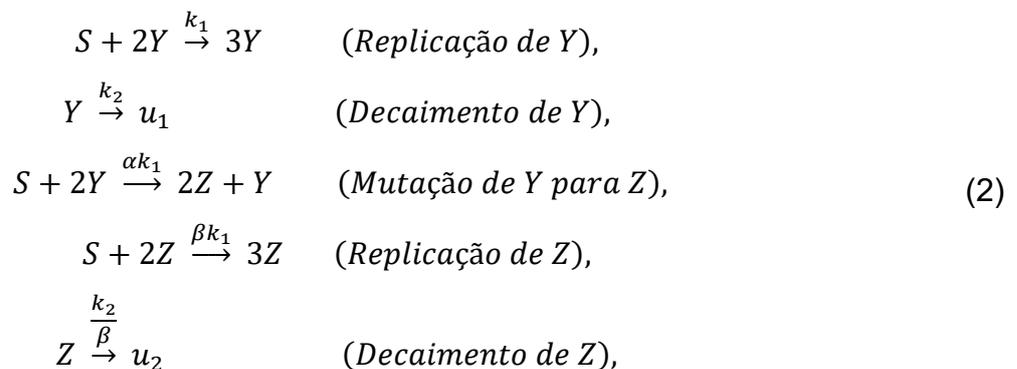
### 3.2 Modelo Matemático

A figura 5 apresenta um biorreator isotérmico objeto deste estudo, que é modelado como um CSTR. Desta forma, o sistema estudado pode ser considerado um biorreator com agitação contínua (CSTBR).



Fonte: Autoria própria (2023)

No interior do biorreator ocorre uma reação autocatalítica com mutação. Esta reação autocatalítica conceitual foi proposta inicialmente no estudo de Abasaeed (2000), e é descrita como mostra a equação (2).



onde:  $S$  é a concentração do substrato,  $Y$  é a concentração do produto desejado (neste caso, o produto desejado é o etanol),  $Z$  é concentração do mutante,  $u_1$  e  $u_2$  são as concentrações dos produtos em decomposição,  $\alpha$  é o coeficiente da mutação,  $\beta$  é a eficiência de mutação e  $k_1$  e  $k_2$  são as velocidades específica da reação.

De acordo com Abasaeed (2000), o balanço de massa do sistema resulta no sistema apresentado na equação (3).

$$\begin{aligned} V \frac{dS}{dt} &= \mu(S_f - S) - V k_1 S Y^2 - V \alpha k_1 S Y^2 - V \beta k_1 S Z^2, \\ V \frac{dY}{dt} &= \mu(Y_f - Y) - V k_1 S Y^2 - V \alpha k_1 S Y^2 - V k_2 Y, \\ V \frac{dZ}{dt} &= \mu(Z_f - Z) - V \beta k_1 S Z^2 + 2V \alpha k_1 S Y^2 - V \frac{k_2}{\beta} Y, \end{aligned} \quad (3)$$

onde:  $V$  é o volume do reator,  $\mu$  é a taxa de crescimento específico,  $S_f$  é a concentração de substrato na alimentação,  $Y_f$  é a concentração de produto desejável na alimentação e  $Z_f$  é a concentração de mutante na alimentação.

Em seu estudo, Magnitskii (2023) reescreveu o sistema apresentado por Abasaeed (2000) na forma adimensional, após considerar as seguintes substituições.

$$x_1 = \frac{(S_f - S)}{S_f} \quad x_2 = \frac{Y}{S_f} \quad x_3 = \frac{Z}{S_f}$$

Após as substituições, o sistema se apresenta como descrito na equação (4).

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -\frac{x_1}{\theta} + (1 + \alpha)\gamma_1(1 - x_1)x_2^2 + \beta\gamma_1(1 - x_1)x_3^2, \\ \dot{x}_2 &= \frac{(\delta - x_2)}{\theta} + (1 - \alpha)\gamma_1(1 - x_1)x_2^2 - \gamma_2 x_2, \\ \dot{x}_3 &= -\frac{x_3}{\theta} + \beta\gamma_1(1 - x_1)x_3^2 + 2\alpha\gamma_1(1 - x_1)x_2^2 - \frac{\gamma_2}{\beta} x_3, \end{aligned} \quad (4)$$

onde:  $\theta$  é o tempo de residência do reator,  $\delta$  é a concentração adimensional do produto desejável na alimentação,  $\gamma_1 = k_1 S_f^2$  e  $\gamma_2 = k_2$ .

Para modelagem, simulação e análise dinâmica do sistema proposto, foi utilizado o SIMULINK, um programa incorporado ao *software* Matlab®, onde as equações que descrevem o sistema foram resolvidas numericamente.

### 3.3 Modelo Matemático em Ordem Fracionária

O sistema objeto de estudo também foi modelado em ordem fracionária, considerando as derivadas fracionárias Atangana – Beleanu – Caputo, com a ordem  $q$  variável. O algoritmo utilizado é o mesmo proposto no estudo de Solís-Pérez, Gómez-Aguilar e Atangana (2018). Assume-se que quando  $t_0 = 0$  e  $0,99 \leq q \leq 1,01$ . Considerando este intervalo, a análise dinâmica do sistema em ordem fracionária possibilita a análise da influência da memória das reações químicas no comportamento caótico apresentado pelo biorreator.

Ao contrário da ordem inteira, a ordem fracionária é um operador não local que considera, além do estado atual do sistema, o histórico de seu estado passado, o que permite trabalhar com correlações de tempo de longo alcance.

O modelo em ordem fracionária do biorreator isotérmico onde ocorre uma reação autocatalítica é obtida por meio da substituição da derivada clássica para o operador, conforme apresentado na equação (5).

$$\begin{aligned} {}_0D_t^{q_1} x_1 &= -\frac{x_1}{\theta} + (1 + \alpha)\gamma_1(1 - x_1)x_2^2 + \beta\gamma_1(1 - x_1)x_3^2 \\ {}_0D_t^{q_2} x_2 &= \frac{(\delta - x_2)}{\theta} + (1 - \alpha)\gamma_1(1 - x_1)x_2^2 - \gamma_2 x_2 \\ {}_0D_t^{q_3} x_3 &= -\frac{x_3}{\theta} + \beta\gamma_1(1 - x_1)x_3^2 + 2\alpha\gamma_1(1 - x_1)x_2^2 - \frac{\gamma_2}{\beta} x_3 \end{aligned} \quad (5)$$

Na equação (5), considera-se que as variações na concentração do substrato ( $x_1$ ), na concentração do produto desejado ( $x_2$ ) e na concentração do mutante ( $x_3$ ) são influenciadas pelo efeito de memória e podem ser modeladas por uma equação diferencial fracionária.

De acordo com o estudo de Solís-Pérez, Gómez-Aguilar e Atangana (2018), considerando a derivada de ordem variável de Atangana – Beleanu – Caputo, obtém-se a equação 6.

$${}^{abc}D_t^q y(t) = f(t, y(t)) \quad (6)$$

Aplicando o teorema fundamental do cálculo fracionário na equação (6), obtém-se a equação (7).

$$y(t) - y(0) = \frac{1-q}{b(q)} f(t, y(t)) + \frac{q}{\Gamma(q)b(q)} \int_0^t f(\rho, y(\rho))(t-\rho)^{q-1} d\rho \quad (7)$$

onde:  $b(q) = 1 - q + \frac{q}{\Gamma(q)}$ . Então, para  $t_{n+1}$  temos:

$$y_{n+1}(t) = y(0) + \frac{\Gamma(q)(1-q)}{\Gamma(q)(1-q) + q} f(t_n, y_n(t)) + \frac{q}{\Gamma(q) + q(1-\Gamma(q))} \sum_{m=0}^n \int_{t_m}^{t_{m+1}} f(\rho, y(\rho))(t_{n+1} - \rho)^{q-1} d\rho \quad (8)$$

Aplicando a interpolação polinomial de Lagrange em duas etapas na função  $f(t_n, y_n(t))$  obtém-se:

$$P_k(\rho) \simeq \frac{f(t_m, y_m)}{h} (\rho - t_{m-1}) - \frac{f(t_{m-1}, y_{m-1})}{h} (\rho - t_m) \quad (9)$$

Substituindo a equação (9) na equação (8), obtém-se:

$$y_{n+1}(t) = y(0) + \frac{\Gamma(q)(1-q)}{\Gamma(q)(1-q) + q} f(t_n, y_n(t)) + \frac{q}{\Gamma(q) + q(1-\Gamma(q))} \sum_{m=0}^n \left( \frac{f(t_m, y_m)}{h} \int_{t_m}^{t_{m+1}} (\rho - t_{m-1})(t_{n+1} - \rho)^{q-1} d\rho - \frac{f(t_{m-1}, y_{m-1})}{h} \int_{t_m}^{t_{m+1}} (\rho - t_m)(t_{n+1} - \rho)^{q-1} d\rho \right) \quad (10)$$

Com:

$$a_{q,m,1} = h^{q+1} \frac{(n+1-m)^q (n-m+2+q) - (n-m)^q (n-m+2+2q)}{q(q+1)} \quad (11)$$

$$a_{q,m,2} = h^{q+1} \frac{(n+1-m)^q - (n-m)^q (n-m+1+q)}{q(q+1)}$$

Integrando a equação (11) e substituindo na equação (10), obtém-se a seguinte aproximação:

$$\begin{aligned}
 y_{n+1}(t) = & y(0) + \frac{\Gamma(q)(1-q)}{\Gamma(q)(1-q)+q} f(t_n, y_n(t)) + \frac{1}{(q+1)(1-q)\Gamma(q)+q} \times \\
 & \sum_{m=0}^n (h^q f(t_m, y_m) ((n+1-m)^q (n-m+2+q) - (n-m)^q (n-m+2a)) \\
 & - h^q f(t_{m-1}, y_{m-1}) ((n+1-m)^q - (n-m)^q (n-m+1+q)))
 \end{aligned} \quad (12)$$

Aplicando a equação (11) em todas as equações do sistema apresentado na equação (5), obtém-se um algoritmo para a integração numérica do sistema em ordem fracionária.

Para a concentração do substrato ( $x_1$ ), tem-se:

$$\begin{aligned}
 x_{1n+1}(t) = & x_1(0) + \frac{\Gamma(q_1)(1-q_1)}{\Gamma(q_1)(1-q_1)+q_1} f_1(t_n, x_{1n+1}(t), x_{2n+1}(t), x_{3n+1}(t)) \\
 & + \frac{1}{(q_1+1)(1-q_1)\Gamma(q_1)+q_1} \times \\
 & \sum_{m=0}^n (h^{q_1} f_1(t_m, x_{1m}, x_{2m}, x_{3m}) ((n+1-m)^{q_1} (n-m+2+q_1) \\
 & - (n-m)^{q_1} (n-m+2a)) \\
 & - h^{q_1} f_1(t_{m-1}, x_{1m-1}, x_{2m-1}, x_{3m-1}) ((n+1-m)^{q_1} \\
 & - (n-m)^{q_1} (n-m+1+q_1)))
 \end{aligned} \quad (13)$$

Para a concentração do produto desejado ( $x_2$ ), tem-se:

$$\begin{aligned}
 x_{2n+1}(t) = & x_2(0) + \frac{\Gamma(q_2)(1-q_2)}{\Gamma(q_2)(1-q_2)+q_2} f_2(t_n, x_{1n+1}(t), x_{2n+1}(t), x_{3n+1}(t)) \\
 & + \frac{1}{(q_2+1)(1-q_2)\Gamma(q_2)+q_2} \times \\
 & \sum_{m=0}^n (h^{q_2} f_2(t_m, x_{1m}, x_{2m}, x_{3m}) ((n+1-m)^{q_2} (n-m+2+q_2) \\
 & - (n-m)^{q_2} (n-m+2a)) \\
 & - h^{q_2} f_2(t_{m-1}, x_{1m-1}, x_{2m-1}, x_{3m-1}) ((n+1-m)^{q_2} \\
 & - (n-m)^{q_2} (n-m+1+q_2)))
 \end{aligned} \quad (14)$$

Para a concentração do mutante ( $x_3$ ), tem-se:

$$\begin{aligned}
 x_{3n+1}(t) = & x_3(0) + \frac{\Gamma(q_3)(1-q_3)}{\Gamma(q_3)(1-q_3) + q_3} f_3(t_n, x_{1n+1}(t), x_{2n+1}(t), x_{3n+1}(t)) \\
 & + \frac{1}{(q_3 + 1)(1 - q_3)\Gamma(q_3) + q_3} \times \\
 & \sum_{m=0}^n \left( h^{q_3} f_3(t_m, x_{1m}, x_{2m}, x_{3m}) \left( (n+1-m)^{q_3} (n-m+2+q_3) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - (n-m)^{q_3} (n-m+2a) \right) \right. \\
 & \quad \left. - h^{q_3} f_3(t_{m-1}, x_{1m-1}, x_{2m-1}, x_{3m-1}) \left( (n+1-m)^{q_3} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - (n-m)^{q_3} (n-m+1+q_3) \right) \right)
 \end{aligned} \tag{15}$$

onde:

$$\begin{aligned}
 f_1(t, x_1, x_2, x_3) &= -\frac{x_1}{\theta} + (1+\alpha)\gamma_1(1-x_1)x_2^2 + \beta\gamma_1(1-x_1)x_3^2 \\
 f_2(t, x_1, x_2, x_3) &= \frac{(\delta-x_2)}{\theta} + (1-\alpha)\gamma_1(1-x_1)x_2^2 - \gamma_2 x_2 \\
 f_3(t, x_1, x_2, x_3) &= -\frac{x_3}{\theta} + \beta\gamma_1(1-x_1)x_3^2 + 2\alpha\gamma_1(1-x_1)x_2^2 - \frac{\gamma_2}{\beta} x_3
 \end{aligned} \tag{16}$$

Para a análise do sistema em ordem fracionária, foram conduzidas simulações numéricas das equações por meio do *software* SIMULINK/Matlab®.

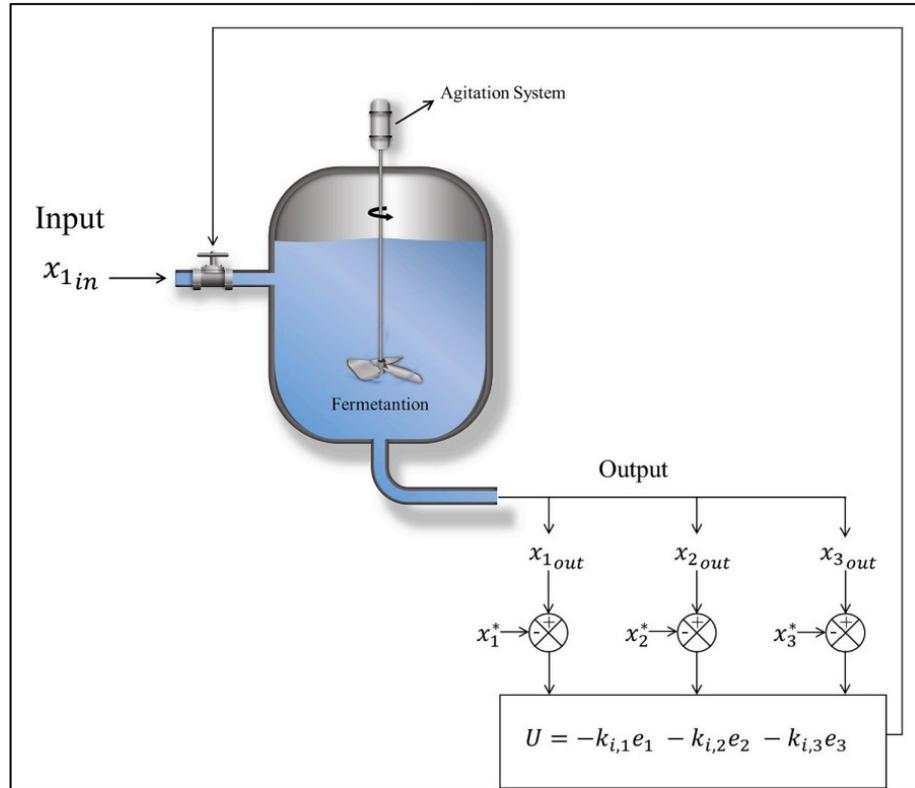
### 3.4 Controle SDRE

Considerando que o sistema estudado, um biorreator onde ocorre uma reação autocatalítica, apresenta comportamento caótico. De acordo com as informações dos trabalhos de Abashar e Elnashaie (2010) e Bandyopadhyay, Ravikumar e Kulkarni (1993), sistemas com comportamento caótico são sensíveis às variações nas condições iniciais. Dessa forma, o planejamento da produção de etanol (produto desejado) pode ser afetado negativamente, uma vez que tais variações na entrada no sistema compromete a possibilidade de previsibilidade.

Para sanar este problema, o presente estudo propõe a inclusão de um controle SDRE ao sistema para suprimir o comportamento caótico e manter a produção de etanol em níveis desejáveis. A figura 6 mostra a o biorreator considerando a introdução do controle proposto. O controle proposto considera a

correção das variáveis  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  através de um controle *feedback* que considera o erro de saída.

**Figura 6 – Biorreator isotérmico com reação autocatalítica com controle feedback**



**Fonte: Autoria própria (2023)**

O controle geralmente envolve a parametrização das variáveis em uma matriz de estados  $X$ . O controle SDRE captura as não linearidades do sistema com a matriz SDC (*State-Dependent Coefficient* – Coeficiente dependente do estado), denominadas matrizes  $A$  e  $B$ .

Considerando o sistema controlado na forma de equações de estado, conforme apresentado nos estudos de Bressan *et al.* (2019) e Tusset *et al.* (2020, 2023a).

$$\dot{X} = AC + BU, \quad (17)$$

onde  $B$  é a matriz de controle,  $A$  é a matriz de estado e  $U$  é o controle *feedback*, definido conforme a equação (18).

$$U = -R^{-1}B^T P e, \quad (18)$$

onde:  $e = [X - X^*]$ , com  $X$  representando os estados do sistema e  $X^*$  os estados desejados.

A matriz  $P$  é obtida por meio da solução da equação de Ricatti, definida na equação (19).

$$A^T P + PA - PBR^{-1}B^T P + Q = 0 \quad (19)$$

O custo funcional do problema de controle de feedback é dado na equação (20).

$$J = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{\infty} (e^T Q e + U^T R U) dt, \quad (20)$$

onde  $Q$  e  $R$  são matrizes definidas positivas.

Para verificar a eficácia do controle proposto, novamente foram conduzidas simulações numéricas das equações por meio do *software* SIMULINK/Matlab®.

### 3.5 Análise Dinâmica

Além da proposta de um controle da concentração do produto desejado, o presente estudo apresenta uma análise dinâmica detalhada do biorreator. A análise dinâmica foi feita por meio de históricos de tempo, retratos de fase e diagramas de bifurcação.

Os expoentes de Lyapunov, o teste 0-1 e o índice de escala com base no teste de *wavelet* são aplicados para comprovar o comportamento do sistema. A presença de expoentes de Lyapunov positivos indica a presença de caos no biorreator (Vaidyanathan *et al.*, 2015). Já o teste 0-1 determina um parâmetro  $K = [0:1]$  a partir de dados do sistema. O sistema é considerado caótico para valores de  $K$  próximos a 1 e periódico para valores de  $K$  próximos a zero (Tusset *et al.*, 2023b). No caso do índice de escala baseado no teste *wavelet*, determina-se um parâmetro  $iscale = [0:1]$  a partir de dados do sistema. O comportamento do sistema é considerado periódico para valores de *iscale* próximos a 0, e para valores de *iscale* próximos a 1, considera-se um comportamento não periódico (Tusset *et al.*, 2020).

Para a construção dos diagramas de bifurcação e obtenção dos expoentes de Lyapunov, foram utilizados os algoritmos disponíveis no estudo de Tusset *et al.*

(2023a). Para o desenvolvimento do teste 0-1, foram utilizadas as equações apresentadas no estudo de Tusset *et al.* (2023b). Para o cálculo do teste de índice de escala baseado em *wavelet*, foram utilizadas as equações apresentadas no estudo de Tusset *et al.* (2020).

Dos 46 artigos que compõem o portfólio obtido com a metodologia *Methodi Ordinatio*, 35 deles conduziram análise dinâmica dos sistemas objetos de estudo. Entre estes artigos, 28 deles (80%) aplicaram os diagramas de bifurcação nas análises. Uma vez que esta técnica possui ampla aplicação na literatura consultada e se mostrou eficiente para o propósito que foi empregada, optou-se por aplicá-la no presente estudo também.

Entre os artigos do portfólio, 20 estudos (43,48%) empregaram técnicas para identificar a ocorrência de caos em seus sistemas. Após o emprego de diagramas de bifurcação, a técnica mais utilizada para identificação do comportamento caótico foi o Expoente de Lyapunov. Uma vez que esta técnica é comum na identificação de ocorrência de caos, e já foi validada em outros estudos, optou-se por utilizá-la neste estudo.

Com relação ao teste 0-1, esta técnica tem se tornado popular nos últimos anos, uma vez que têm surgido diversos estudos que a aplicaram para a detecção de caos em sistemas dinâmicos, especialmente nos casos em que as abordagens clássicas são difíceis de aplicar. Esta técnica apresenta vantagens como simples implementação numérica e o fato de poder ser aplicado diretamente na saída do sistema, independente das características deste. Além disso, pode ser aplicada a qualquer sistema dinâmico para a identificação de caos (Bernardini; Litak, 2016; Piccirillo *et al.*, 2016). Para validar a eficácia do teste 0-1, optou-se por aplicá-lo também neste estudo para a na identificação da ocorrência de caos.

Para a obtenção dos diagramas de bifurcação, Expoente de Lyapunov e teste 0-1, foram conduzidas simulações numéricas das equações que descrevem o sistema utilizando o *software* SIMULINK/Matlab®.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

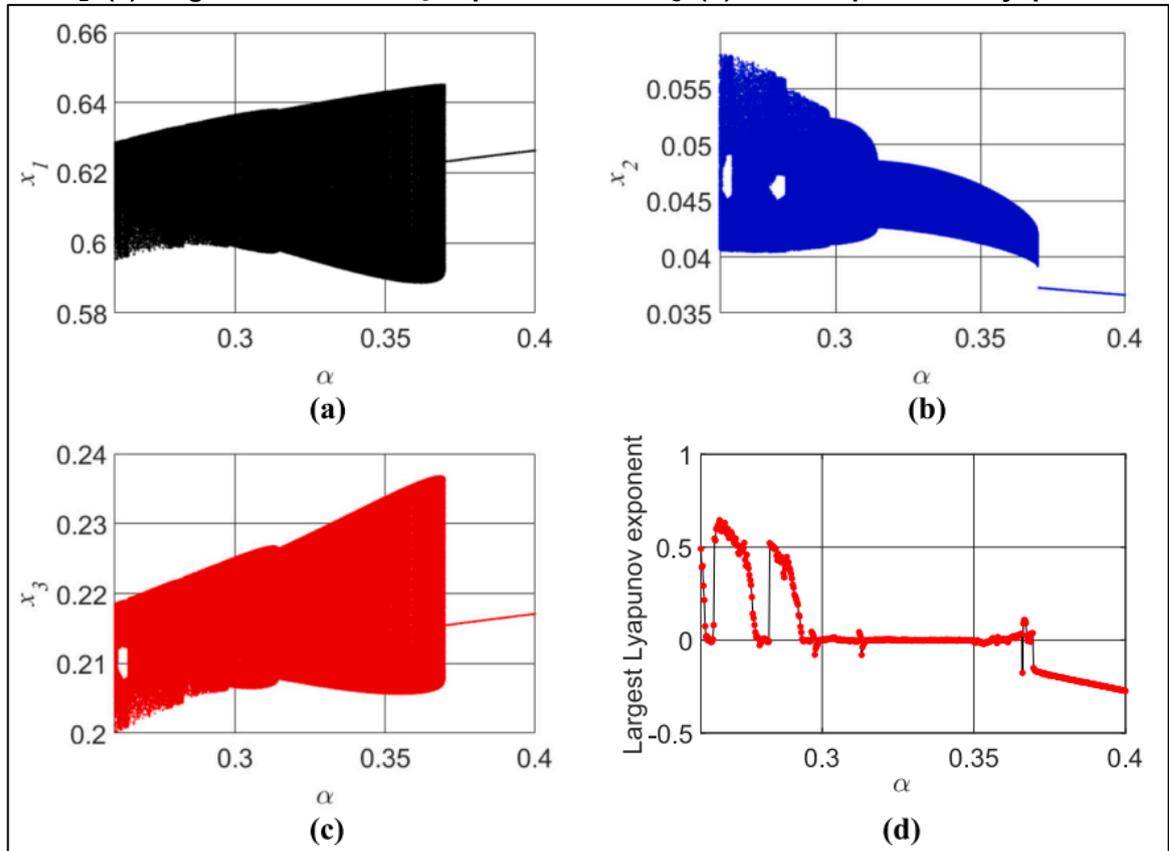
### 4.1 Análise dinâmica do sistema

Nesta seção, será apresentada a análise dinâmica do sistema. Para isto, foram considerados os parâmetros  $\alpha = [0,26 : 0,4]$ ,  $\beta = [0,67 : 0,75]$ ,  $\delta = [0,04 : 0,1]$ ,  $\theta = [0,1 : 0,2]$ ,  $\gamma_1 = [400 : 500]$ ,  $\gamma_2 = [11 : 13]$ .

Para as simulações numéricas, foi considerada a equação (2) integrada pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem, com passo de integração  $h = 0,01$ , com os parâmetros iniciais fixados em:  $\alpha = 0,272$ ,  $\beta = 0,68$ ,  $\delta = 0,067$ ,  $\theta = 0,10984$ ,  $\gamma_1 = 450$ ,  $\gamma_2 = 11,25$ .

Na figura 7 estão apresentados os diagramas de bifurcação, considerando o parâmetro  $\alpha = [0,26 : 0,4]$ .

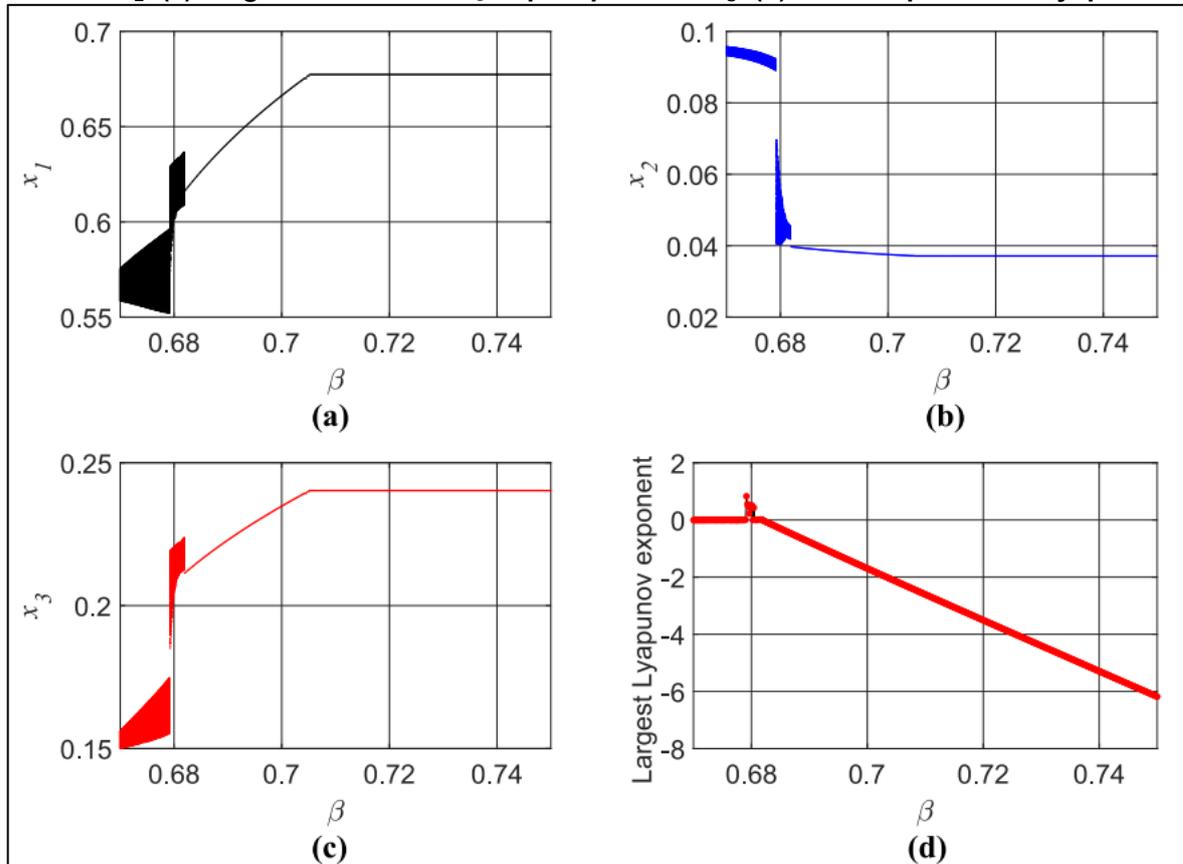
**Figura 7 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso  $\alpha = [0,26 : 0,4]$ . (a) Diagramas de bifurcação para  $\alpha$  versus  $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para  $\alpha$  versus  $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para  $\alpha$  versus  $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov**



Fonte: Autoria própria (2023)

Na figura 8 estão apresentados os diagramas de bifurcação, considerando o parâmetro  $\beta = [0,67 : 0,75]$ .

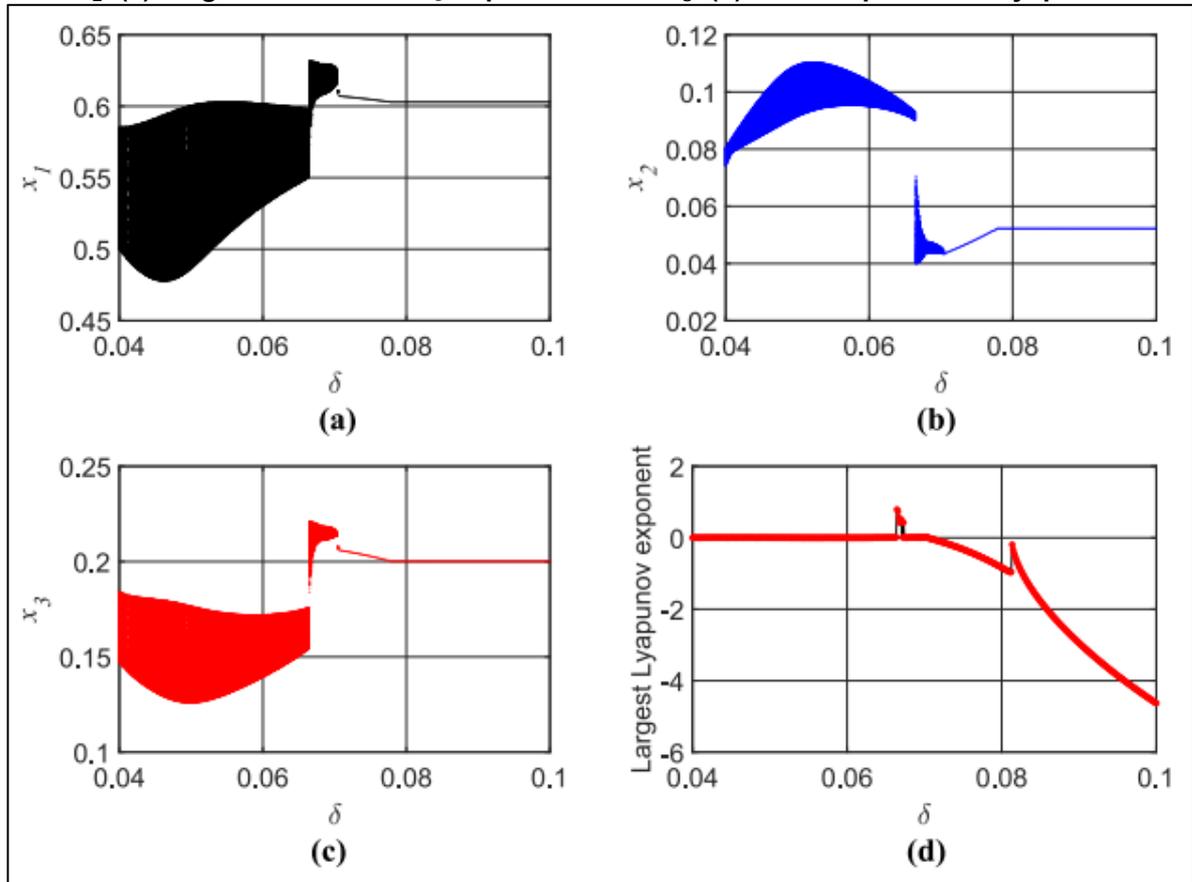
**Figura 8 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso  $\beta = [0,67 : 0,75]$ . (a) Diagramas de bifurcação para  $\beta$  versus  $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para  $\beta$  versus  $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para  $\beta$  versus  $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov**



Fonte: Autoria própria (2023)

Na figura 9 estão apresentados os diagramas de bifurcação, considerando o parâmetro  $\delta = [0,04 : 0,1]$ .

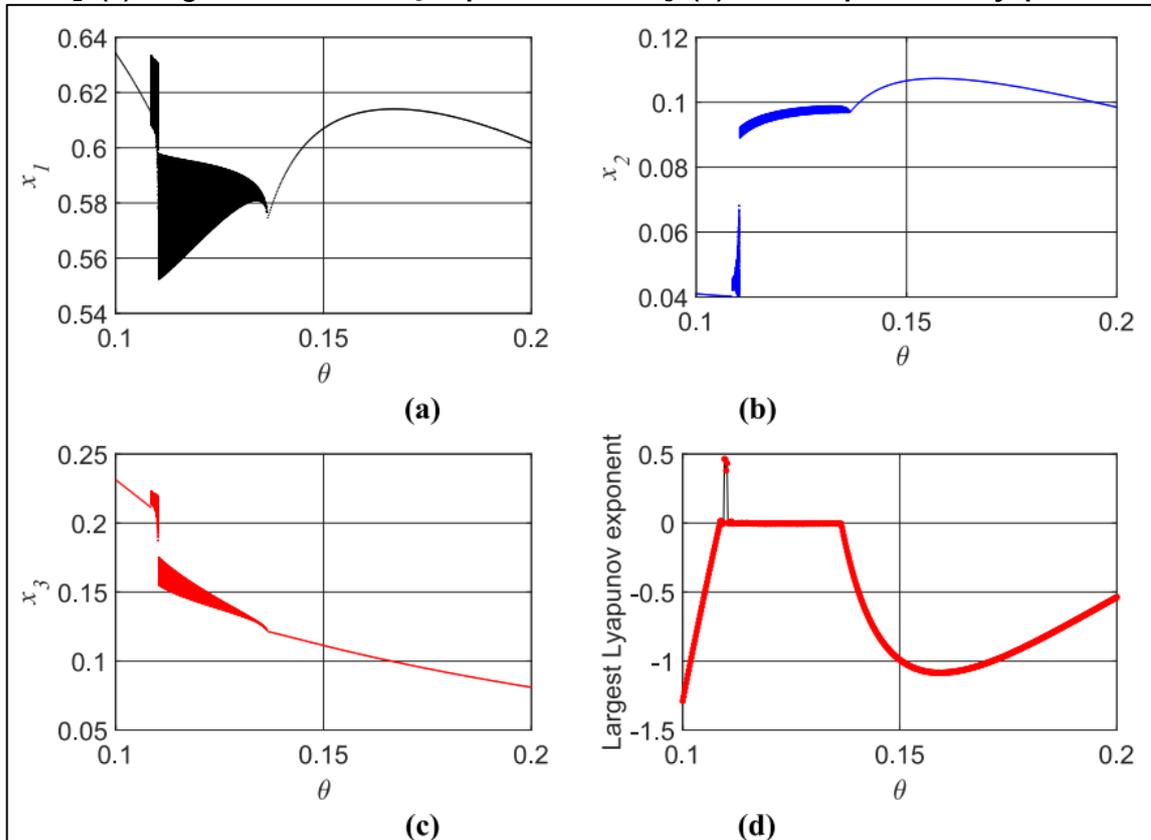
**Figura 9 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso  $\delta = [0,04 : 0,1]$ . (a) Diagramas de bifurcação para  $\delta$  versus  $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para  $\delta$  versus  $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para  $\delta$  versus  $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov**



Fonte: Autoria própria (2023)

Na figura 10 estão apresentados os diagramas de bifurcação, considerando o parâmetro  $\theta = [0,1 : 0,2]$ .

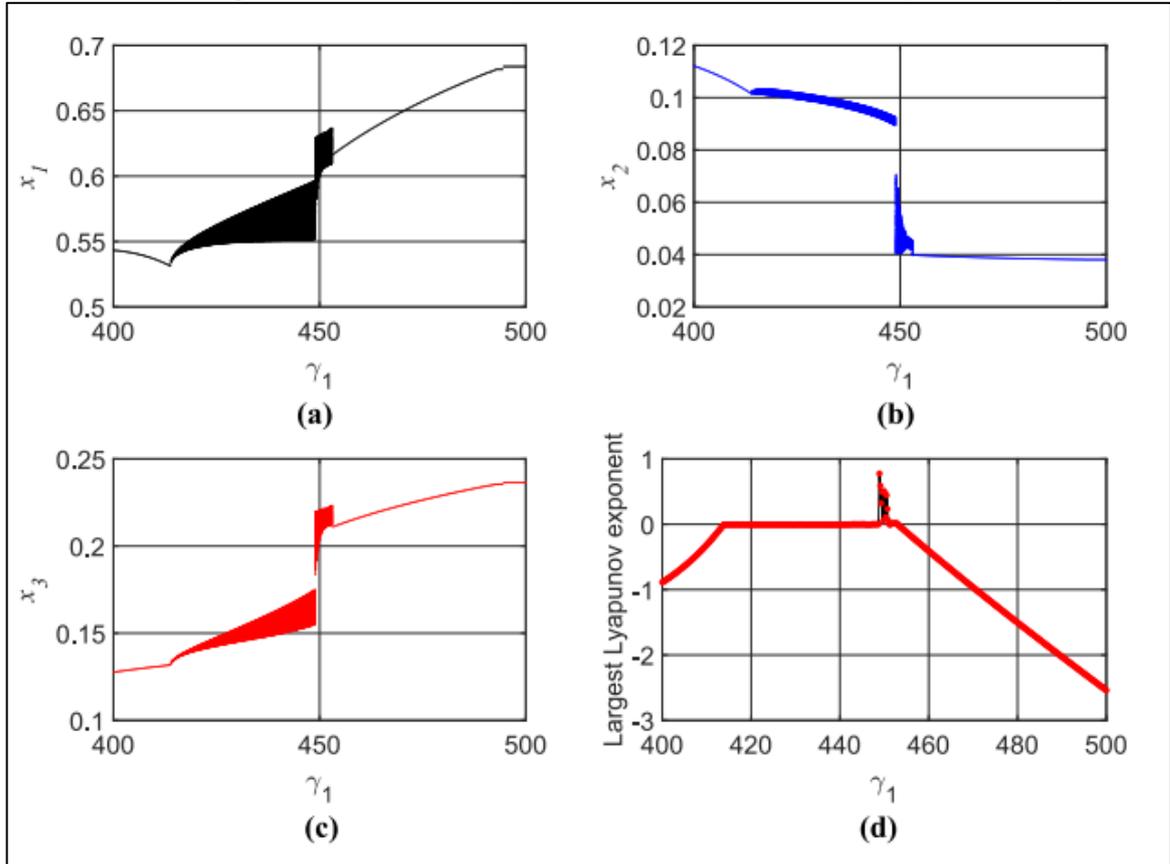
**Figura 10 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso  $\theta = [0, 1 : 0, 2]$ . (a) Diagramas de bifurcação para  $\theta$  versus  $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para  $\theta$  versus  $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para  $\theta$  versus  $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov**



Fonte: Autoria própria (2023)

Na figura 11 estão apresentados os diagramas de bifurcação, considerando o parâmetro  $\gamma_1 = [400 : 500]$ .

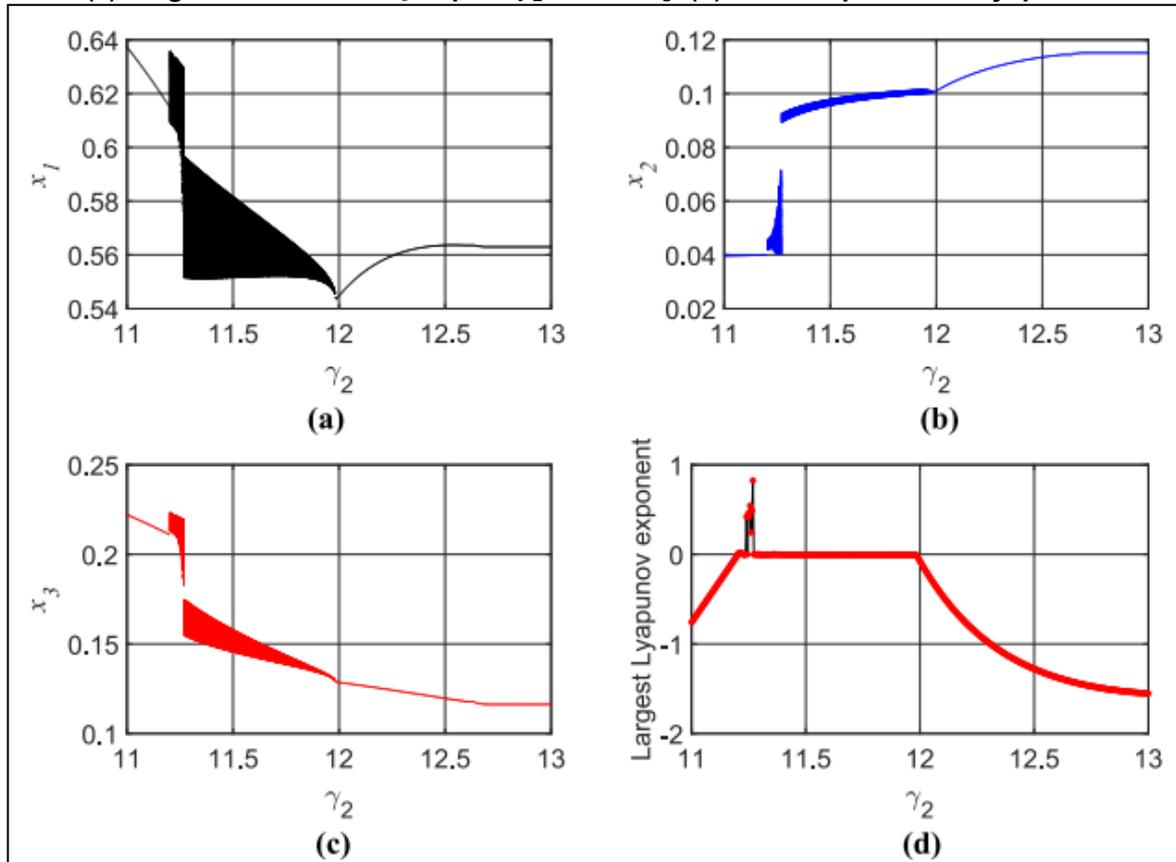
**Figura 11 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso  $\gamma_1 = [400 : 500]$ . (a) Diagramas de bifurcação para  $\gamma_1$  versus  $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para  $\gamma_1$  versus  $x_2$ . (c) Diagramas de bifurcação para  $\gamma_1$  versus  $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov**



Fonte: Autoria própria (2023)

Na figura 12 estão apresentados os diagramas de bifurcação, considerando o parâmetro  $\gamma_2 = [11 : 13]$ .

**Figura 12 – Diagramas de bifurcação e maior Expoente de Lyapunov para o caso  $\gamma_2 = [11 : 13]$ .  
 (a) Diagramas de bifurcação para  $\gamma_2$  versus  $x_1$ . (b) Diagramas de bifurcação para  $\gamma_2$  versus  $x_2$ .  
 (c) Diagramas de bifurcação para  $\gamma_2$  versus  $x_3$ . (d) Maior Expoente de Lyapunov**



Fonte: Autoria própria (2023)

Ao analisar os diagramas de bifurcação apresentados nas figuras 7-12, verifica-se que a concentração de etanol ( $x_2$ ) aumenta apenas quando os valores dos parâmetros  $\theta$  (tempo de residência do reator) e  $\gamma_2$  (constante) aumentam. Dessa forma, para otimizar a produção de etanol, conclui-se que se deve empregar no biorreator os valores máximos para  $\theta$  e  $\gamma_2$  e manter os valores mínimos para os demais parâmetros.

Por meio da análise dos valores do Expoente de Lyapunov é possível identificar os intervalos dos parâmetros  $\alpha, \beta, \delta, \theta, \gamma_1$  e  $\gamma_2$  onde ocorre comportamento caótico, que são, respectivamente:  $\alpha = [0,2639 : 0,2791]$ ,  $\alpha = [0,2827 : 0,2934]$ ,  $\alpha = [0,2996 : 0,3063]$  e  $\alpha = [0,3122 : 0,3127]$ ,  $\beta = [0,679 : 0,68]$  e  $\beta = [0,6811 : 0,6819]$ ,  $\delta = [0,0663 : 0,0741]$ ,  $\theta = [0,1094 : 0,1104]$ ,  $\gamma_1 = [448,7 : 451,1]$ ,  $\gamma_2 = [11,24 : 11,27]$ .

O comportamento caótico é evidenciado em razão do valor positivo do Expoente de Lyapunov que foi obtido nestes intervalos de parâmetros. O expoente

positivo indica que há divergências, e conforme o expoente cresce, estas divergências aumentam, evidenciando assim a presença de caos no sistema. Ao passo que, um expoente negativo indica que as divergências mudam com o passar do tempo. Logo, quando o valor do Expoente de Lyapunov é negativo, não é detectada a ocorrência de caos no sistema.

A tabela 1 apresenta os valores de variações máximas do produto desejado ( $x_2$ ), neste caso o etanol, considerando as variações paramétricas apresentadas nas figuras 7-12.

**Tabela 1 – Análise paramétrica**

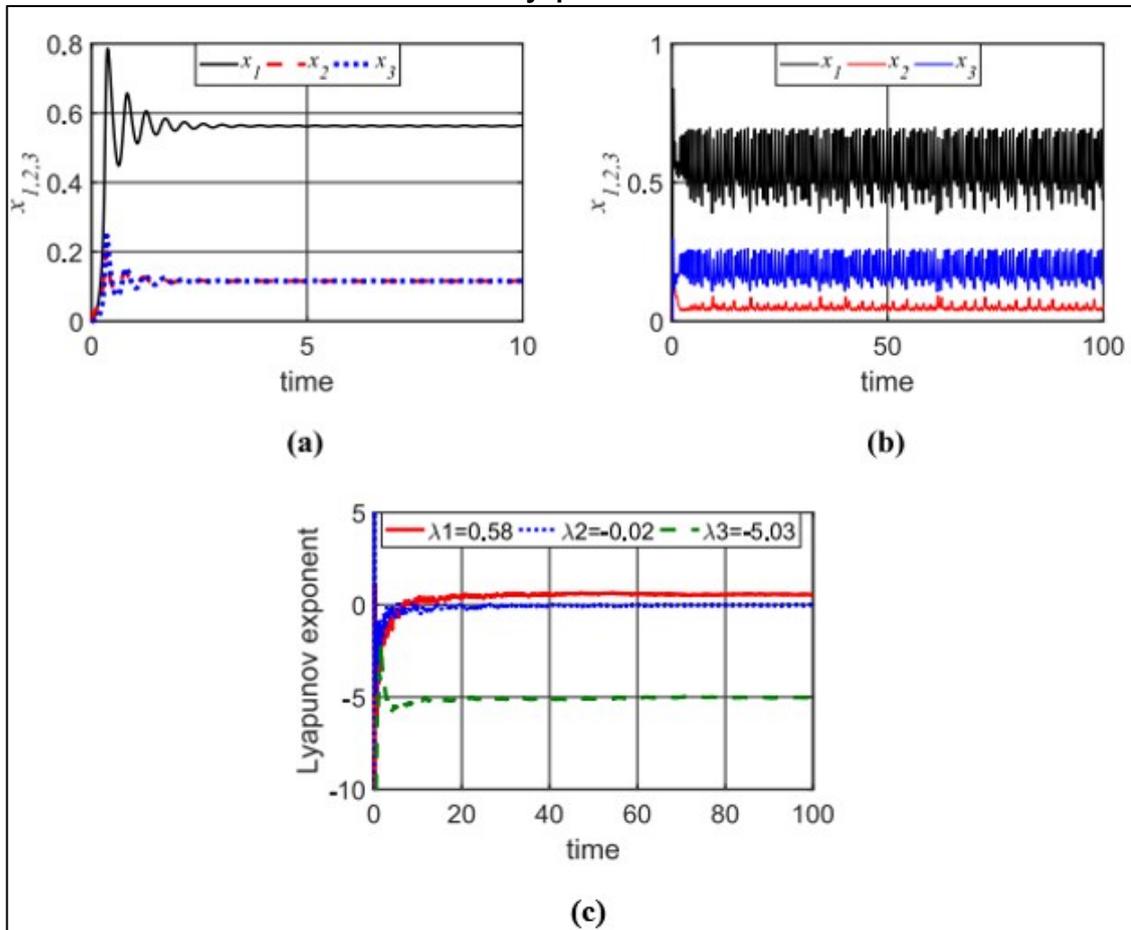
Parâmetros	Valor máximo $x_2$ (etanol)	Maior expoente de Lyapunov ( $\lambda_1$ )	Comportamento
$\alpha = 0,26$	0,04 - 0,057	0,49	Caótico
$\beta = 0,67$	0,0933 - 0,0956	- 0,003	Periódico
$\delta = 0,052$	0,1104 – 0,0933	- 0,002	Periódico
$\theta = 0,157$	0,1073	- 1,083	Periódico
$\gamma_1 = 400$	0,1120	- 0,87	Periódico
$\gamma_2 = 12,7$	0,1153	- 1,446	Periódico

**Fonte: Autoria própria (2023)**

De acordo com as informações descritas na tabela 1, ao utilizar os seguintes valores dos parâmetros  $\alpha = 272$ ,  $\beta = 0,68$ ,  $\delta = 0,067$ ,  $\theta = 0,10984$ ,  $\gamma_1 = 450$  e  $\gamma_2 = 12,7$ , o sistema atinge o melhor valor de produção de  $x_2$ . Para estes valores dos parâmetros, o sistema apresenta comportamento periódico.

Na figura 13, está apresentada a evolução histórica dos parâmetros ao longo do tempo. Na figura 13a, a construção é feita para os seguintes valores dos parâmetros:  $\alpha = 272$ ,  $\beta = 0,68$ ,  $\delta = 0,067$ ,  $\theta = 0,10984$ ,  $\gamma_1 = 450$  e  $\gamma_2 = 12,7$ . Na figura 13b, os seguintes valores de parâmetros são utilizados:  $\alpha = 272$ ,  $\beta = 0,68$ ,  $\delta = 0,067$ ,  $\theta = 0,10984$ ,  $\gamma_1 = 450$  e  $\gamma_2 = 11,25$ .

**Figura 13 – Histórico de tempo. (a) Histórico de tempo para o sistema com comportamento periódico. (b) Histórico de tempo para o sistema com comportamento caótico. (c) Expoente Lyapunov**

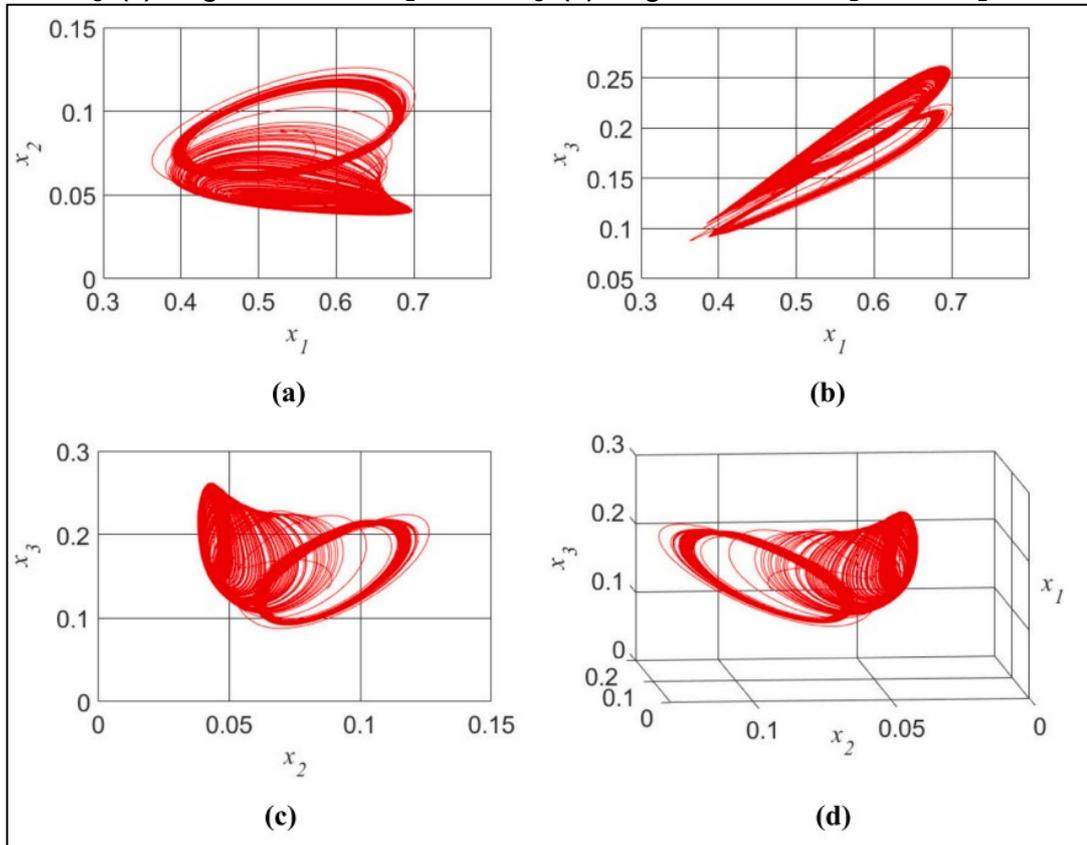


Fonte: Autoria própria (2023)

Ao analisar a figura 13a, observa-se que, para o conjunto de valores adotados para os parâmetros, o comportamento do sistema é periódico, assim como mostra as informações da tabela 1, e o valor do expoente de Lyapunov é  $\lambda_1 = -1,446$ . Já na figura 13b, para os valores dos parâmetros adotados, tem-se que o comportamento do sistema é caótico, com valor do expoente de Lyapunov de  $\lambda_1 = 0,58$ .

Na figura 14, estão apresentados os diagramas de fase do sistema com comportamento caótico.

**Figura 14 – Diagramas de fase. (a) Diagrama de fase  $x_1$  versus  $x_2$ . (b) Diagrama de fase  $x_1$  versus  $x_3$ . (c) Diagrama de fase  $x_2$  versus  $x_3$ . (d) Diagrama de fase  $x_1$  versus  $x_2$  versus  $x_3$**



Fonte: Autoria própria (2023)

## 4.2 Análise dinâmica do sistema para ordem fracionária

Esta seção irá apresentar a análise numérica da influência da ordem fracionária na dinâmica do sistema, considerando pequenas variações na ordem inteira da derivada ( $q$ ). Com esta análise, busca-se verificar a influência de pequenos resíduos de cada componente do biorreator, e assim, avaliar a memória do sistema.

Para estabilidade e convergência do esquema numérico, serão consideradas as funções residuais apresentadas na equação 21, assim como feito nos trabalhos de Sene, N. (2021) e Garrappa, R. (2018).

$$\begin{aligned}
 |x_1(t_n) - x_{1_n}| &= \wp(h^{\min\{\alpha+1,2\}}, \\
 |x_2(t_n) - x_{2_n}| &= \wp(h^{\min\{\alpha+1,2\}}, \\
 |x_3(t_n) - x_{3_n}| &= \wp(h^{\min\{\alpha+1,2\}},
 \end{aligned} \tag{21}$$

onde  $x_1(t_n)$ ,  $x_2(t_n)$  e  $x_3(t_n)$  são as soluções aproximadas do sistema caótico em ordem fracionária considerado na equação (5), enquanto  $x_{1n}$ ,  $x_{2n}$  e  $x_{3n}$  são as soluções exatas da equação (5). De acordo com Sene, N. (2021) e Garrappa, R. (2018), a convergência do método numérico adotado ocorre quando  $h \rightarrow 0$ .

A tabela 2 apresenta as variações da equação (21) para variações decrescentes do valor de  $h$ .

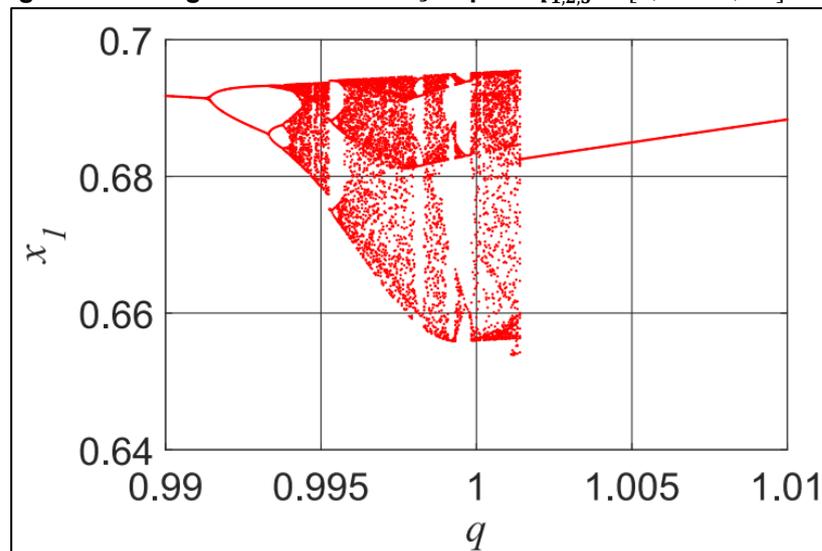
**Tabela 2 – Análise de convergência (Eq. (20) para  $q_{1,2,3} = [0,99 : 1,01]$  vs.  $h = [0,01 : 0,0001]$ )**

$h$	$q = 0,00$	$q = 0,999$	$q = 0,9999$	$q = 1,01$	$q = 1,001$	$q = 1,0001$
$h = 0,01$	$e_1 = 1,5 \cdot 10^{-3}$	$e_1 = 1,4 \cdot 10^{-3}$	$e_1 = 1,4 \cdot 10^{-3}$	$e_1 = 1,3 \cdot 10^{-3}$	$e_1 = 1,3 \cdot 10^{-3}$	$e_1 = 1,3 \cdot 10^{-3}$
	$e_2 = 1,2 \cdot 10^{-3}$	$e_2 = 1,1 \cdot 10^{-3}$	$e_2 = 6,4 \cdot 10^{-3}$	$e_2 = 1,0 \cdot 10^{-3}$	$e_2 = 1,0 \cdot 10^{-3}$	$e_2 = 1,0 \cdot 10^{-3}$
	$e_3 = 2,7 \cdot 10^{-3}$	$e_3 = 2,8 \cdot 10^{-3}$	$e_3 = 3,7 \cdot 10^{-3}$	$e_3 = 2,9 \cdot 10^{-3}$	$e_3 = 2,9 \cdot 10^{-3}$	$e_3 = 2,9 \cdot 10^{-3}$
$h = 0,001$	$e_1 = 2,1 \cdot 10^{-4}$	$e_1 = 2,2 \cdot 10^{-4}$	$e_1 = 2,2 \cdot 10^{-4}$	$e_1 = 2,1 \cdot 10^{-4}$	$e_1 = 2,1 \cdot 10^{-4}$	$e_1 = 2,0 \cdot 10^{-4}$
	$e_2 = 2,3 \cdot 10^{-4}$	$e_2 = 1,1 \cdot 10^{-4}$	$e_2 = 2,3 \cdot 10^{-4}$	$e_2 = 1,2 \cdot 10^{-4}$	$e_2 = 1,2 \cdot 10^{-4}$	$e_2 = 1,1 \cdot 10^{-4}$
	$e_3 = 3,7 \cdot 10^{-5}$	$e_3 = 4,7 \cdot 10^{-5}$	$e_3 = 2,1 \cdot 10^{-4}$	$e_3 = 4,3 \cdot 10^{-4}$	$e_3 = 4,3 \cdot 10^{-4}$	$e_3 = 4,7 \cdot 10^{-4}$
$h = 0,0001$	$e_1 = 2,4 \cdot 10^{-6}$	$e_1 = 2,0 \cdot 10^{-6}$				
	$e_2 = 2,3 \cdot 10^{-6}$	$e_2 = 9,7 \cdot 10^{-7}$	$e_2 = 2,1 \cdot 10^{-6}$	$e_2 = 2,1 \cdot 10^{-6}$	$e_2 = 1,0 \cdot 10^{-6}$	$e_2 = 9,9 \cdot 10^{-7}$
	$e_3 = 2,2 \cdot 10^{-6}$	$e_3 = 4,2 \cdot 10^{-7}$	$e_3 = 2,2 \cdot 10^{-6}$	$e_3 = 2,2 \cdot 10^{-6}$	$e_3 = 4,2 \cdot 10^{-6}$	$e_3 = 4,2 \cdot 10^{-6}$

Fonte: Autoria própria (2023)

De acordo com os dados apresentados na tabela 2, o modelo proposto (Eq. (5)) é estável e convergente. A figura 15 apresenta o diagrama de bifurcação para  $q_{1,2,3} = [0,09 : 1,01]$  e  $h = 0,0001$ .

**Figura 15 – Diagramas de bifurcação para  $q_{1,2,3} = [0,09 : 1,01]$  vs.  $x_1$**



Fonte: Autoria própria (2023)

Conforme apresentado na figura 15, o sistema é sensível às variações na ordem da derivada, exibindo comportamento caótico para valores próximos à ordem inteira e comportamento periódico para valores distantes da ordem inteira.

Na figura 16 estão apresentadas as variações de  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  para  $q_{1,2,3} = [0,09 : 1,01]$  e  $h = 0,0001$ .

**Figura 16 – Histórico de tempo, diagrama de fase e expoente de Lyapunov. (a) Histórico de tempo, (b) Diagrama de fase, (c) Expoente de Lyapunov para  $q_{1,2,3} = 0,99$ . (d) Histórico de tempo, (e) Diagrama de fase, (f) Expoente de Lyapunov para  $q_{1,2,3} = 0,999$ .**

(continua)

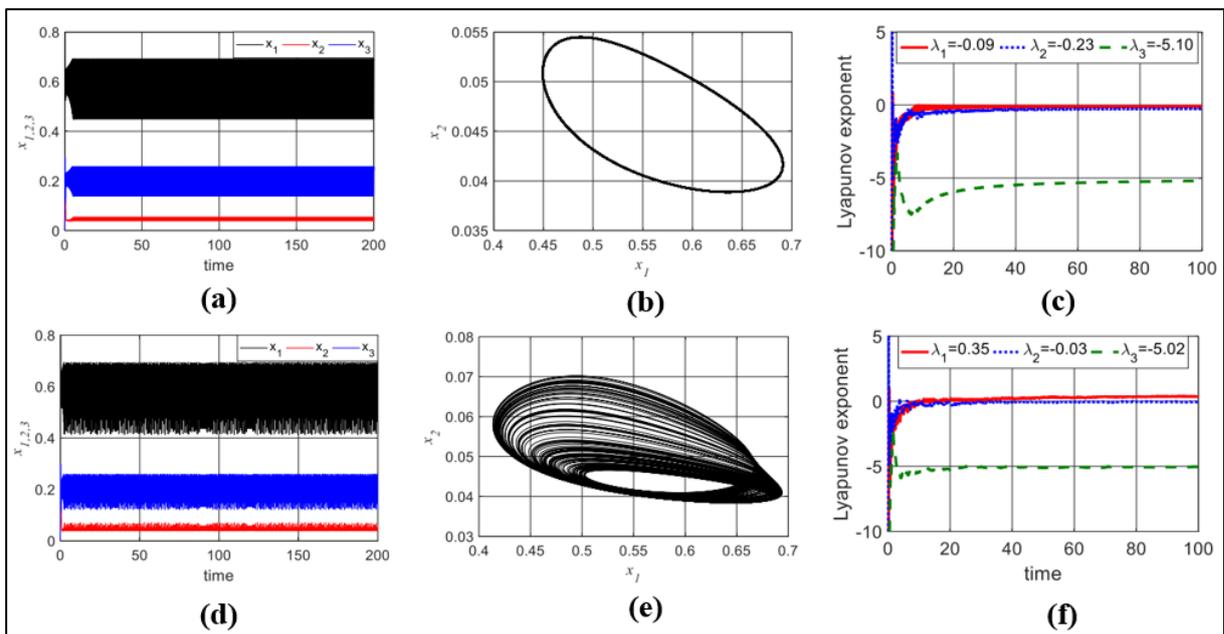


Figura 16 – Histórico de tempo, diagrama de fase e expoente de Lyapunov. (g) Histórico de tempo, (h) Diagrama de fase, (i) Expoente de Lyapunov para  $q_{1,2,3} = 0,9999$ . (j) Histórico de tempo, (k) Diagrama de fase, (l) Expoente de Lyapunov para  $q_{1,2,3} = 1,0001$ .

(continua)

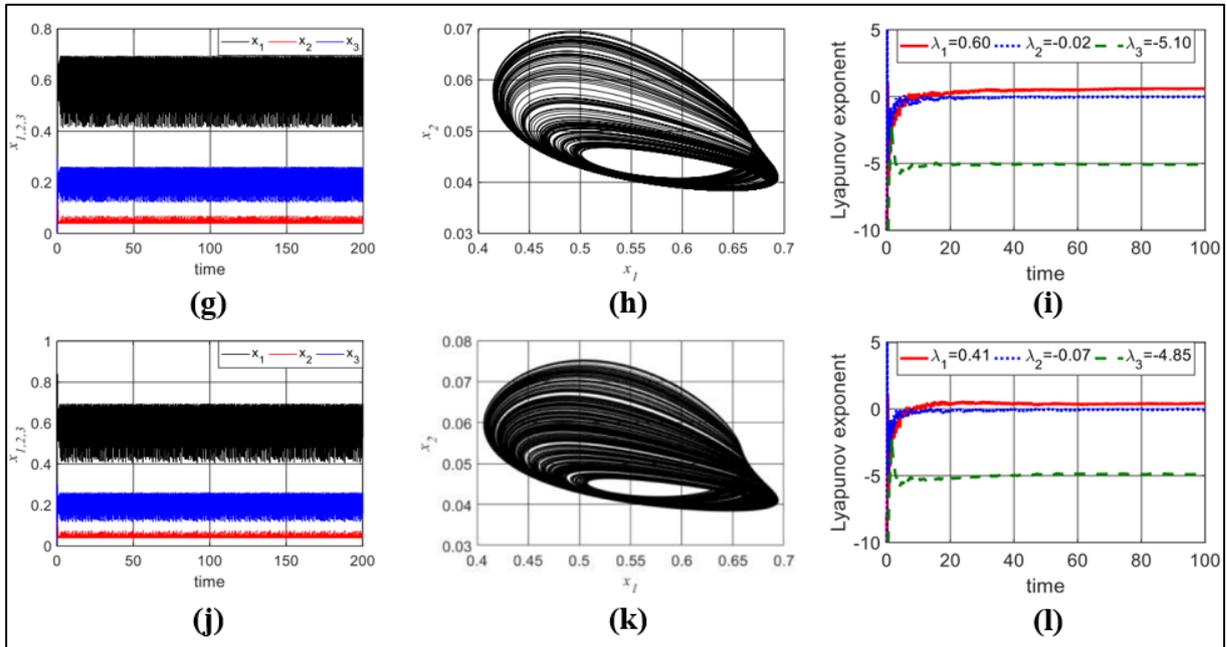
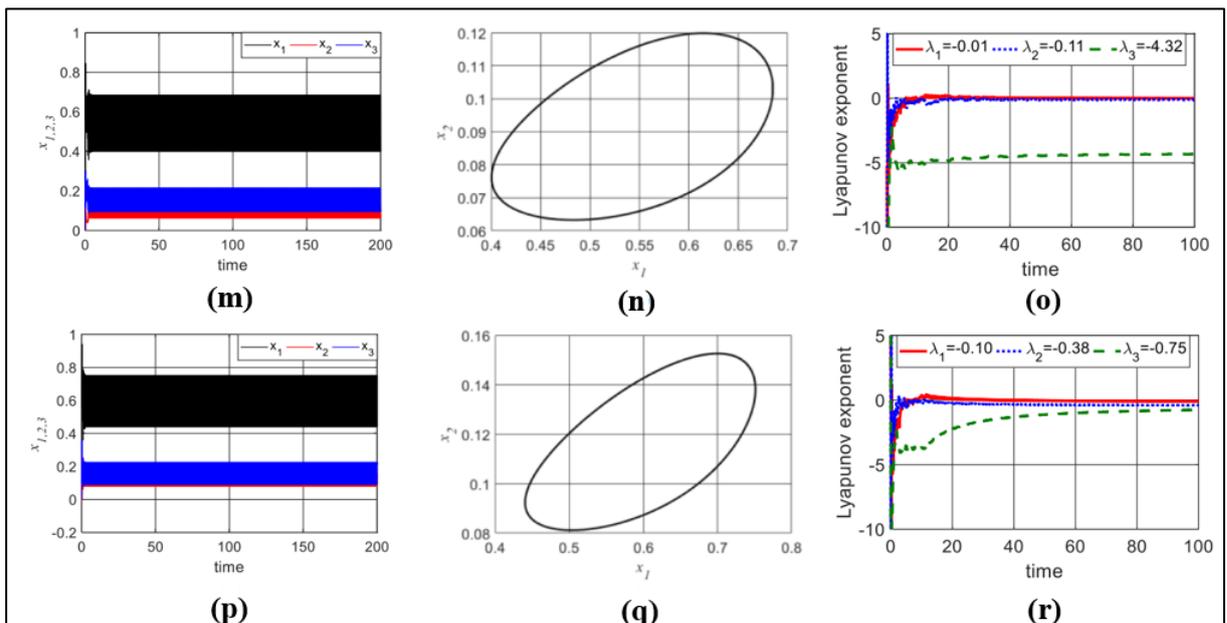


Figura 16 – Histórico de tempo, diagrama de fase e expoente de Lyapunov. (m) Histórico de tempo, (n) Diagrama de fase, (o) Expoente de Lyapunov para  $q_{1,2,3} = 01,001$ . (p) Histórico de tempo, (q) Diagrama de fase, (r) Expoente de Lyapunov para  $q_{1,2,3} = 1,01$ .

(conclusão)



Fonte: Autoria própria (2023)

Na tabela 3, estão apresentados os resultados do índice de escala com base no teste de *wavelet* ( $i_{scale}$ ), do teste 0 – 1 ( $K$ ) e do maior valor do expoente de Lyapunov ( $\lambda_1$ ).

**Tabela 3 – Análise da dinâmica do sistema (Eq. (4)) para  $q_{1,2,3} = [0,99 : 1,01]$**

Ordem da derivada	Índice de escala com base no teste de <i>wavelet</i> ( $i_{scale}$ )	Teste 0 – 1 ( $K$ )	Maior valor do expoente de Lyapunov ( $\lambda_1$ )	Comportamento
$q = 0,99$	0,30	0,00	$\lambda_1 = -0,99$	Periódico
$q = 0,999$	0,88	0,90	$\lambda_1 = 0,35$	Caótico
$q = 0,9999$	0,87	0,96	$\lambda_1 = 0,60$	Caótico
$q = 1,0001$	0,90	0,98	$\lambda_1 = 0,41$	Caótico
$q = 1,001$	0,13	0,00	$\lambda_1 = -0,01$	Periódico
$q = 1,01$	0,10	0,00	$\lambda_1 = -0,10$	Periódico

**Fonte: Autoria própria (2023)**

Ao analisar os resultados apresentados na figura 16 e na tabela 3, verifica-se que o sistema é sensível às variações na ordem da derivada.

Para os casos em que  $q_{1,2,3} \cong 1$ , o comportamento do sistema muda de caótico para periódico para variações de  $\pm 0,01$  ou  $\pm 0,001$  em  $q_{1,2,3}$ , retornando para comportamento periódico apenas quando se aproxima de  $q_{1,2,3} \cong 1$  novamente, com variações na ordem da derivada.

O sistema apresenta comportamento caótico nos casos em que  $q_{1,2,3} \cong 0,9999$  ou  $q_{1,2,3} \cong 1,0001$ , o que é confirmado pelo teste 0 -1, com valor de  $K = 0,96$  e pelo índice de escala com base no teste de *wavelet*, com valor de  $i_{scale} = 0,87$ . O valor do expoente de Lyapunov é  $\lambda_1 = 0,60$  para  $q_{1,2,3} \cong 0,9999$ ,  $K = 0,9$  e  $i_{scale} = 0,88$ . Para  $q_{1,2,3} \cong 0,999$ , o valor do expoente de Lyapunov é  $\lambda_1 = 0,35$ , com  $K = 0,98$  e  $i_{scale} = 0,90$ . Para o caso em que  $q_{1,2,3} \cong 1,0001$ , o valor do expoente de Lyapunov é  $\lambda_1 = 0,41$ .

De acordo com o apresentado na figura 16, dependendo do valor da derivada o sistema transita de comportamento caótico para periódico, ou até um ponto fixo, dependendo da variação.

### 4.3 Sistema com controle do tipo SDRE

A análise dinâmica do sistema permitiu verificar que, quando é possível ajustar os parâmetros do sistema, diferentes comportamentos podem ser obtidos (caótico ou periódico), bem como guiar o sistema para produzir maior quantidade do produto desejado ( $x_2$ ), que no estudo em questão, é o etanol. Nos casos em que não é possível alterar os parâmetros do sistema, a inclusão de controle de uma ou duas variáveis pode ser considerada.

Neste contexto, a presente seção apresenta a proposta de um controle para fazer a transição do sistema de um comportamento caótico para um comportamento periódico, e assim, alcançar uma maior produção de etanol ( $x_2$ ) por meio da manipulação de parâmetros.

O sistema apresentado na equação (2) com controle pode ser representado na forma matricial, conforme apresentado na equação (22).

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\theta} & (1 + \alpha)\gamma_1(1 - x_1)x_2 & \beta\gamma_1(1 - x_1)x_3 \\ -(1 - \alpha)\gamma_1x_2^2 & -\frac{1}{\theta} - \gamma_2 + (1 - \alpha)\gamma_1x_2 & 0 \\ -\beta\gamma_1x_3^2 & 2\alpha\gamma_1(1 - x_1)x_2 & -\frac{1}{\theta} - \frac{\gamma_2}{\beta} + \beta\gamma_1x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} + \mathbf{BU} \quad (22)$$

A escolha da matriz B determina quais variáveis de controle do sistema podem ser executadas. Considerando que o objetivo é alcançar uma maior produção de etanol, neste estudo, será considerada a inclusão de controle em todas as variáveis, iniciando pela variável  $x_1$ , a concentração de substrato, que em situações reais, é a mais fácil de manipular. Neste caso, tem-se que:  $B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ . Definindo os estados

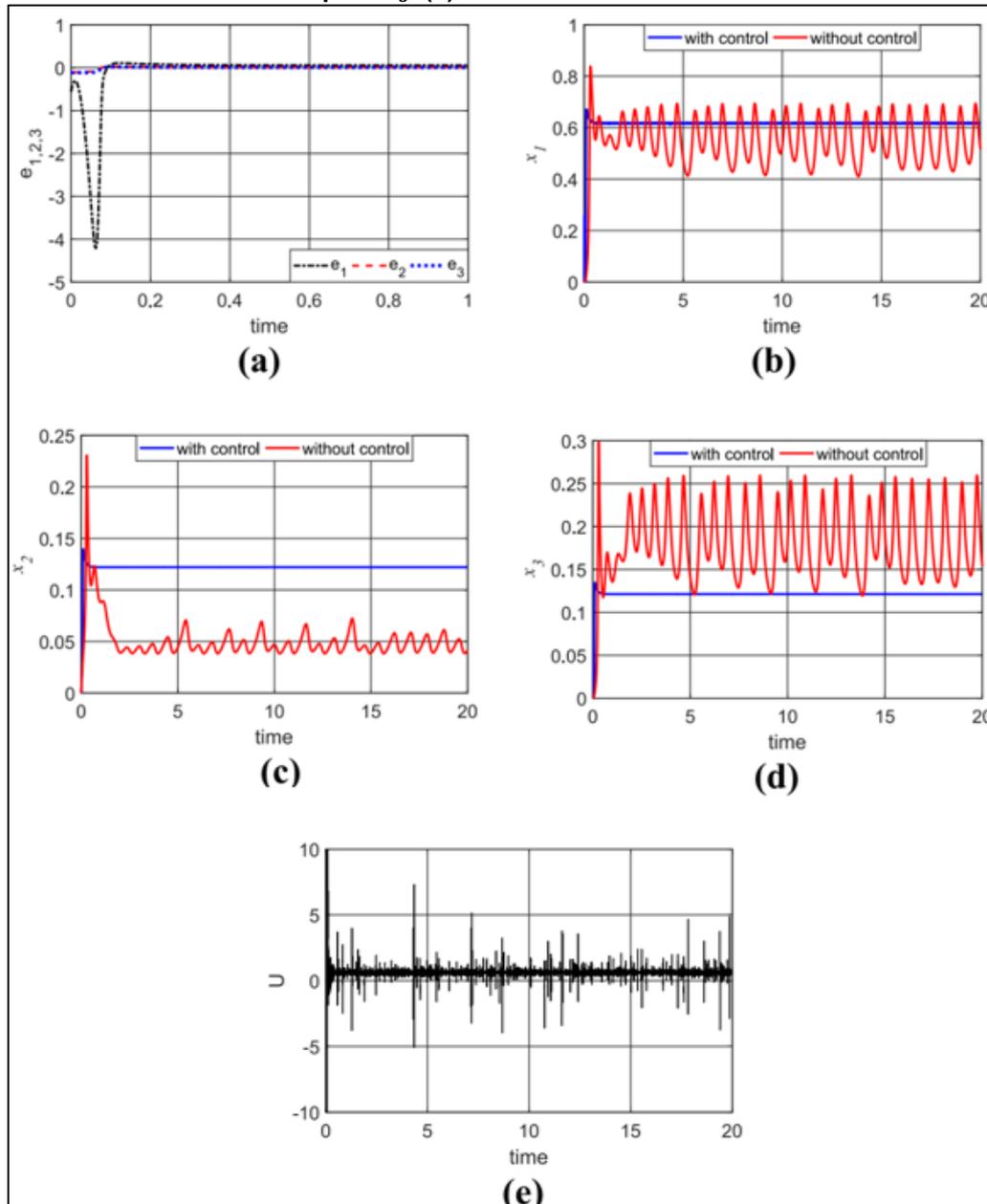
desejados, tem-se que:  $\begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ x_3^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,5636 \\ 0,1153 \\ 0,1161 \end{bmatrix}$ . A maior produção de etanol (produto

desejado) é observada na tabela 1 e as matrizes Q e R são, respectivamente:  $Q =$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 10^4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ e } R = [10^4].$$

Na figura 17 estão apresentados os resultados do sistema sem controle e com o controle proposto.

**Figura 17 – Sistema sem e com o controle proposto. (a) Erro  $e_1 = x_1 - x_1^*$ ,  $e_2 = x_2 - x_2^*$  e  $e_3 = x_3 - x_3^*$ . (b) Histórico de tempo para  $x_1$ . (c) Histórico de tempo para  $x_2$ . (d) Histórico de tempo para  $x_3$ . (e) Sinal do controle U.**



Fonte: Autoria própria (2023)

Conforme pode ser observado na figura 17, quando o sinal do controle U (figura 17e) é aplicado na primeira equação do sistema (Eq. (8)), é possível controlar o sistema, trazendo o erro de controle a um valor próximo a zero, como mostra a figura 17a.

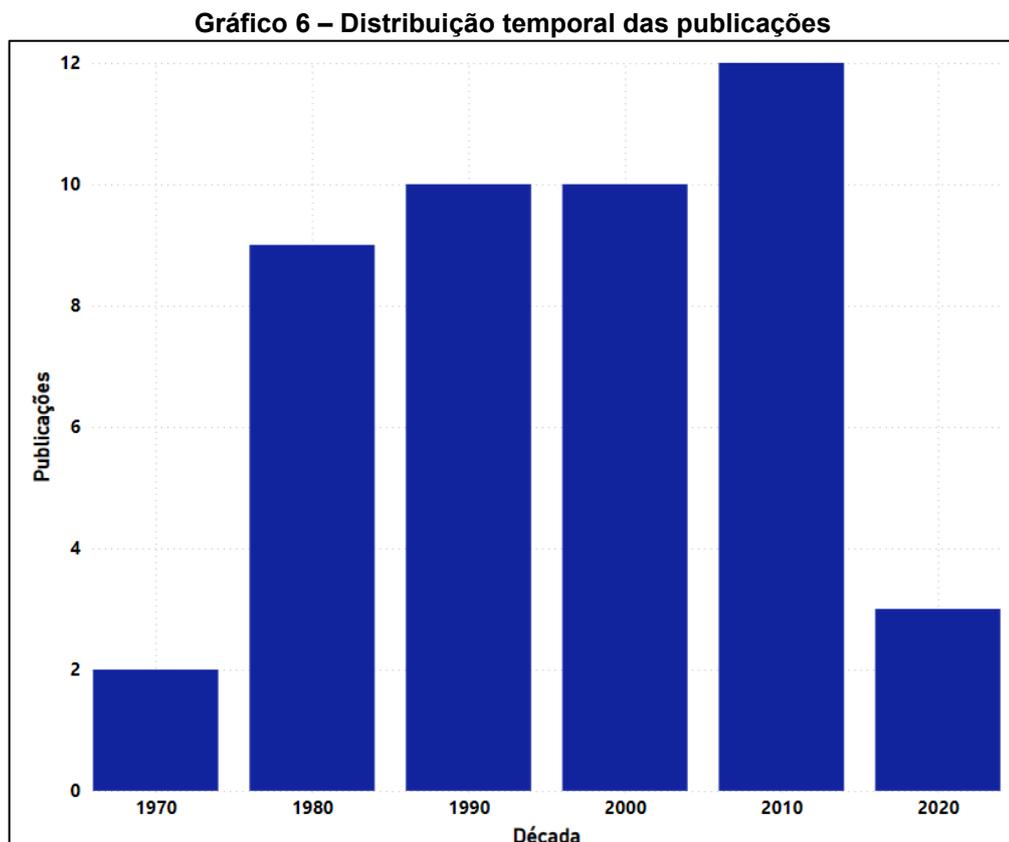
No entanto, considerando o caso em que o objetivo é controlar a quantidade de etanol produzida ( $x_2$ ), em aplicações reais, apenas a variável  $x_1$ , a concentração de substrato, pode ser manipulada. Dessa forma, observa-se que o controle proposto é eficiente para efetuar a transição do comportamento do sistema de caótico para periódico, com precisão de 94,12%.

#### 4.4 Análise do portfólio de artigos

##### 4.4.1 Panorama da literatura sobre o tema

Para obter o panorama atual da literatura sobre o tema objeto de estudo desta pesquisa de Mestrado, a análise dos artigos do portfólio foi feita com o objetivo de responder às três primeiras perguntas de pesquisa estabelecidas.

A primeira pergunta diz respeito à distribuição temporal das publicações de estudo sobre o tema. Tal distribuição é apresentada no gráfico 6.



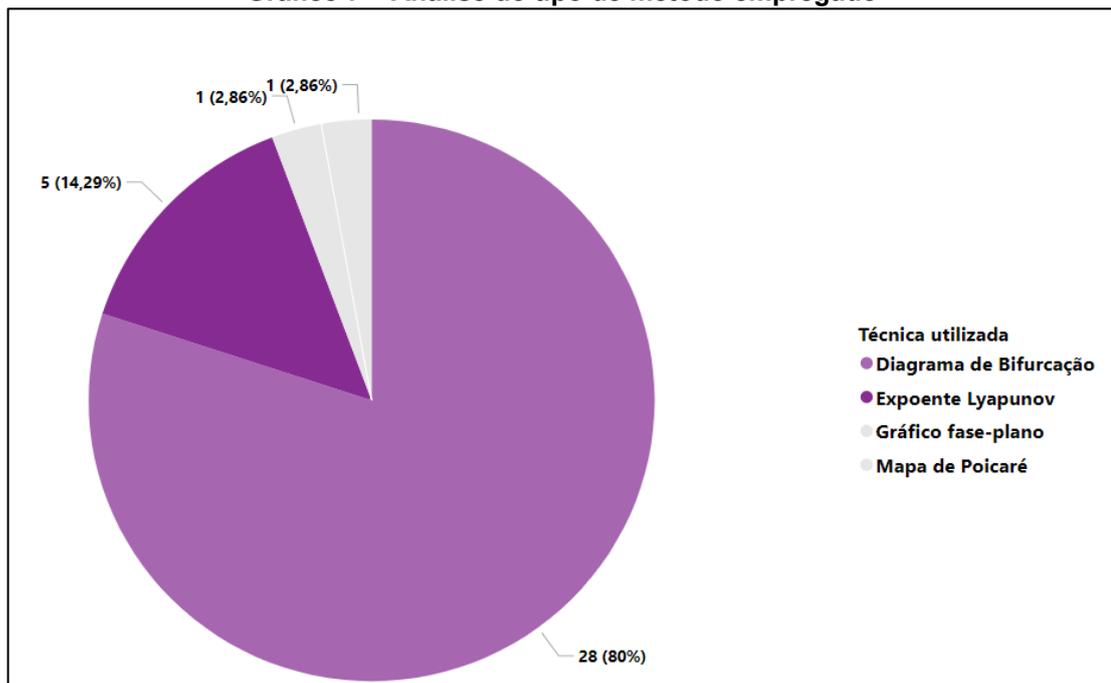
Fonte: Autoria própria (2023)

De acordo com a distribuição temporal apresentada no gráfico 6, o maior número de publicações ocorreu na década 2010, com 12 publicações, e nas décadas de 90 e 2000, com 10 publicações em cada um destes períodos.

Estes dados refletem dois problemas. O primeiro é o baixo número de publicações sobre o tema. Uma vez que foram analisados intervalos de 10 anos, considera-se que o total de publicações foi baixo em todas as décadas analisadas. Outro problema está relacionado com a dificuldade de encontrar estudos recentes sobre o tema, uma vez que na década de 2020 apenas 3 estudos foram publicados. Desta forma, as pesquisas atuais carecem de informações atualizadas sobre o tema.

A segunda pergunta de pesquisa busca verificar quais técnicas foram aplicadas para a análise do comportamento dos sistemas. No gráfico 7 estão apresentadas as técnicas aplicadas para análise dinâmica e identificação da ocorrência de caos.

**Gráfico 7 – Análise do tipo de método empregado**

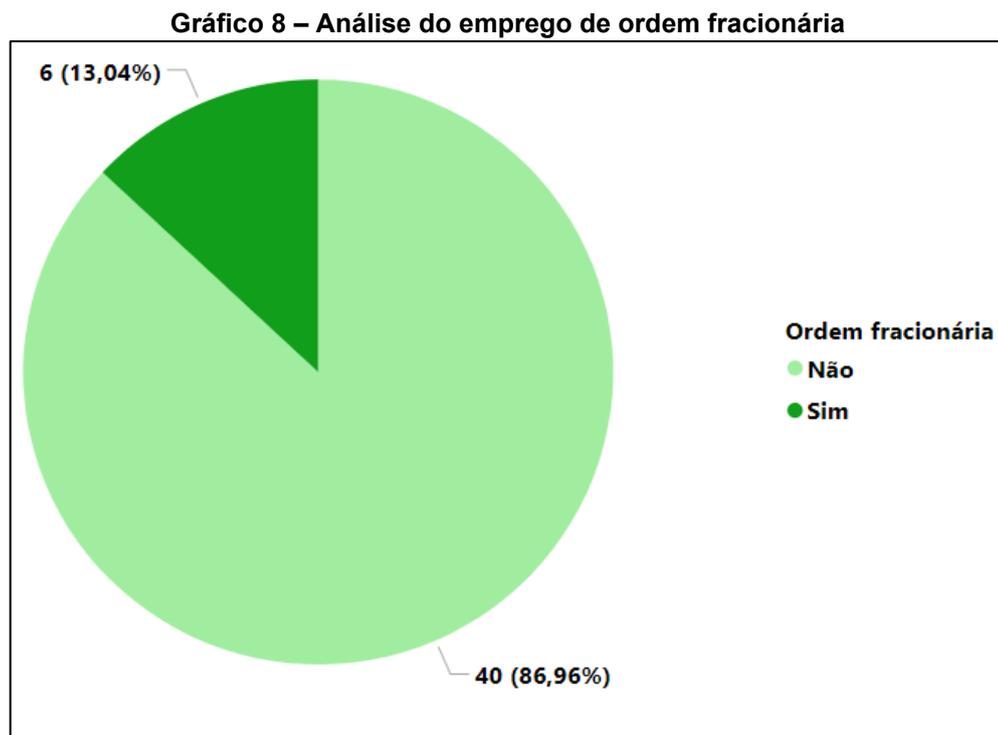


**Fonte: Autoria própria (2023)**

O resultado da análise mostra que 28 artigos (60,87%) utilizaram diagramas de bifurcação para análise dinâmica e identificação da ocorrência de caos. Outra técnica que se destaca é o Expoente de Lyapunov, comumente empregada para a identificação da ocorrência de caos. Dentro do portfólio, 11 artigos não conduziram uma análise dinâmica do sistema.

De acordo com Ojeda Toro *et al.* (2021), uma análise de bifurcação permite identificar todas as características do modelo que são responsáveis pelo comportamento dinâmico de um reator, o que justifica a ampla aplicação desta técnica nos estudos analisados.

O gráfico 8 mostra o panorama da literatura consultada com relação à utilização de ordem fracionária na análise dos sistemas.

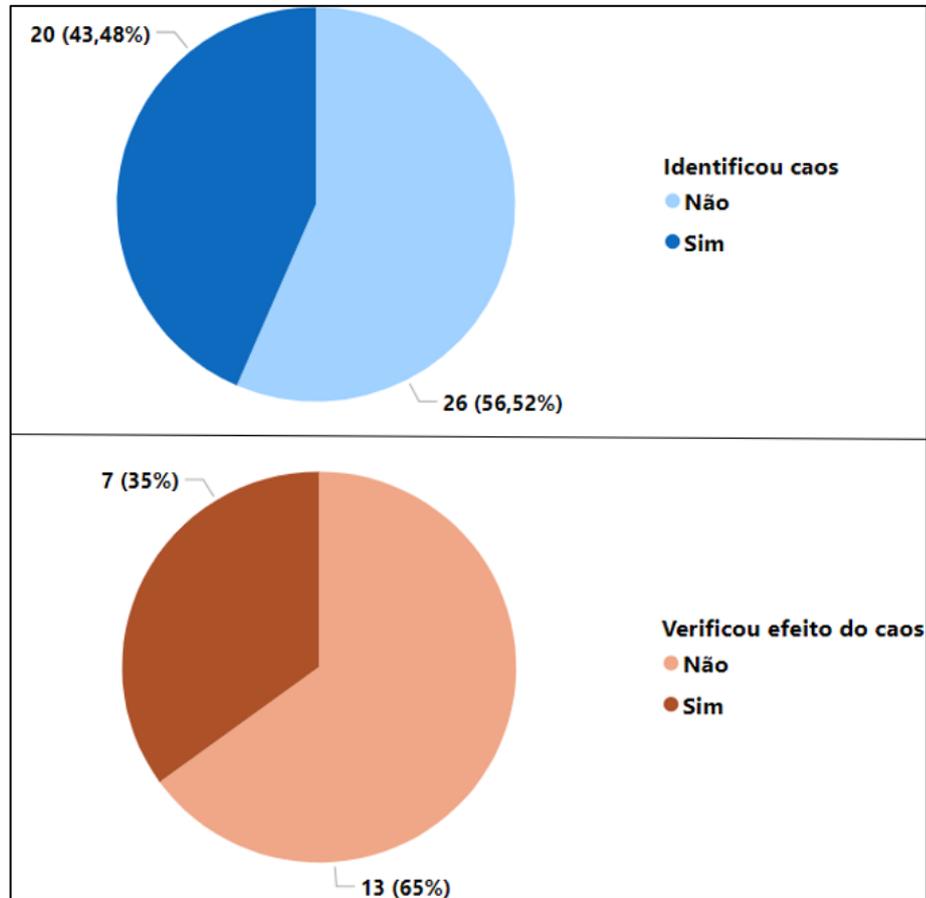


**Fonte: Autoria própria (2023)**

Os dados do gráfico 8 mostram que apenas 6 dos 46 artigos aplicaram ordem fracionária em seus estudos. Porém, estes 6 artigos estão entre os 11 estudos que não conduziram uma análise dinâmica. Desta forma, não há no portfólio um artigo que contemple a análise dinâmica com o uso de ordem fracionária.

A terceira pergunta de pesquisa busca analisar se os trabalhos que compõem o portfólio identificaram comportamento caótico nos sistemas estudados, por meio das técnicas de análise dinâmica empregadas, bem como verificar se analisaram qual o efeito do caos no sistema. O gráfico 9 apresenta o resultado da quantificação quanto à identificação da ocorrência de caos nos artigos analisados, também, a quantificação dos artigos que analisaram o efeito do comportamento caótico na performance da reação.

Gráfico 9 – Quantificação análise de ocorrência e efeito do caos nos sistemas



Fonte: Autoria própria (2023)

De acordo com os dados do gráfico 9, menos da metade dos artigos do portfólio, 20 estudos ao todo (43,48%) identificaram a ocorrência de comportamento caótico. No entanto, apenas 7 deles (15, 22%) analisaram ou destacaram em seus estudos o efeito do caos nos sistemas analisados.

#### 4.4.2 Identificação das lacunas de pesquisa

As respostas das três primeiras perguntas de pesquisa possibilitaram responder à quarta e última pergunta, que visa a identificação de lacunas de pesquisa que este estudo pode contribuir para sanar. Ao analisar o portfólio compostos de 46 artigos, foram identificadas as seguintes lacunas.

**Lacuna 1:** Há carência de estudos recentes sobre o tema, pois a maior parte das publicações foram feitas há mais de uma década.

**Lacuna 2:** Há campo para a exploração da ordem fracionária, pois poucos estudos que abordaram esta técnica, e nenhum dos estudos consultados a aplicaram para a análise dinâmica dos sistemas analisados.

**Lacuna 3:** Mesmo que alguns estudos tenham identificado a ocorrência de comportamento caótico nos sistemas analisados, poucos verificaram quais são os efeitos deste comportamento no processo.

Portanto, com a aplicação dos métodos e técnicas escolhidos para a análise dinâmica e com os resultados obtidos, este estudo pode contribuir para sanar as lacunas identificadas.

Além de conduzir a análise dinâmica em ordem fracionária, o estudo aplicou o teste 0-1 na identificação do comportamento do sistema, uma técnica alternativa ao comumente utilizado Expoente de Lyapunov, contribuindo assim para validar os resultados desta técnica que têm emergido nos últimos anos na identificação de caos. Outro destaque é a verificação de como a alteração dos parâmetros influencia no comportamento do sistema e a proposição de um controlador, que se mostrou eficaz na transição do comportamento do sistema de caótico para periódico, uma vez que nesta região verificou-se que maior concentração do produto desejado é obtida.

Na figura 18, estão resumidas as principais contribuições da pesquisa para sanar as lacunas de pesquisa identificadas e outras informações que suportam a relevância do presente estudo para a literatura.

**Figura 18 – Contribuições e relevância do estudo para a literatura**



Fonte: Autoria própria (2023)

## 5 CONCLUSÃO

O presente estudo teve como objetivo conduzir a análise dinâmica de um biorreator isotérmico onde ocorre uma reação autocatalítica com mutação, bem como propor um controle para transitar o sistema de comportamento caótico para comportamento periódico. Para isso, foram aplicadas técnicas como a construção de diagramas de bifurcação, teste 0-1 e obtenção do valor do expoente de Lyapunov. Para o controle do sistema, foi proposto um controle do tipo SDRE. Com o intuito de verificar a influência da memória do sistema na dinâmica do biorreator, foi conduzida uma investigação utilizando ordem fracionária. Com o intuito de analisar as contribuições da literatura existente sobre o tema, foi utilizada a metodologia *Methodi Ordinatio* para a construção de um portfólio de artigos, ordenados de acordo com sua relevância.

O sistema objeto de estudo do presente foi um biorreator modelado como um CSTR, configurando um sistema denominado CSTBR. Para verificar os efeitos da memória de processo já realizados no comportamento do sistema, foi conduzida uma análise dinâmica em ordem fracionária, o que não foi observado em nenhum dos estudos consultados. Além de identificar os pontos de comportamento caótico do sistema, as análises indicaram como a ocorrência do caos pode impactar na concentração obtida do produto desejado. Verificou-se que, quando o sistema está sob efeito do comportamento caótico, menores concentrações de etanol são obtidas. Também, foi detectado que o parâmetro que mais influencia para o comportamento caótico é o coeficiente de mutação ( $\alpha$ ). Dessa forma, por meio dos métodos aplicados e os resultados obtidos, o presente estudo contribui para a literatura existente, fornecendo dados e informações atuais sobre o tema e contribuindo para sanar as lacunas de pesquisa relacionadas ao tema que foram identificadas na análise dos artigos do portfólio.

Os resultados numéricos da análise paramétrica mostraram que o sistema é sensível a variações em todos os parâmetros, e tais variações podem levar o sistema a um comportamento caótico ou periódico. As simulações também mostraram que o sistema analisado representa um biorreator autoparamétrico, pois mesmo com condições iniciais próximas a zero, o sistema apresenta variações dinâmicas significativas para diferentes parâmetros. Verificou-se que este comportamento

resulta da dependência do sistema em relação ao parâmetro  $\delta$ , que representa a concentração do produto desejado na forma adimensional.

A análise dinâmica do sistema utilizando a ordem fracionária possibilitou a verificar a influência dos resíduos acumulados em processos já realizados, dessa forma, atuam como uma memória do sistema, influenciando os resultados futuros. Os resultados numéricos demonstraram que o sistema é suscetível a variações na ordem fracionária, com sensibilidade da ordem de  $10^{-2}$ .

Considerando a sensibilidade do sistema e a necessidade de manter a produção de etanol ( $x_2$ ) em níveis aceitáveis, o estudo propôs a implementação de um controle não linear no sistema. Os resultados numéricos confirmaram que o controle foi eficiente, mantendo o sistema em comportamento periódico, onde há maior produção de etanol. Os resultados mostraram que o menor valor de erro é obtido quando as três variáveis podem ser controladas. No entanto, em situações reais, é possível controlar apenas a variável da concentração de substrato ( $x_1$ ). Ainda assim, o controle foi eficiente para este caso, mantendo o sistema no comportamento desejado com 94,12% de precisão.

Este estudo contribuiu para a análise e entendimento do comportamento de sistemas complexos, como biorreatores, bem como apresentou um modelo de controle eficaz para conduzir o bioprocessamento de forma mais eficaz. Estes resultados contribuem para otimização de processos, e assim, melhorar a produção de etanol, um biocombustível renovável, menos poluente e com potencial para substituição dos combustíveis fósseis.

## REFERÊNCIAS

- ABASAEED, A. E. **Bifurcation and chaos for a mutating autocatalator in a CSTR.** 2000.
- ABASHAR, M. E. E. Some complex dynamic features of a bioethanol fermentor excited by sinusoidal perturbations. **Chemical Engineering Journal**, v. 172, n. 1, p. 386–398, 2011.
- ABASHAR, M. E. E. The influence of membrane excitations on bioethanol production in a forced fermentor. **Journal of King Saud University - Engineering Sciences**, v. 30, n. 4, p. 275–285, 2018.
- ABASHAR, M. E. E.; ELNASHAIE, S. S. E. H. Dynamic and chaotic behavior of periodically forced fermentors for bioethanol production. **Chemical Engineering Science**, v. 65, n. 16, p. 4894–4905, 2010.
- AHMAD, W.; ABDEL-JABBAR, N. **Modeling and Simulation of a Fractional Order Bioreactor System.** WORKSHOP ON FRACTIONAL DIFFERENTIATION AND ITS APPLICATIONS. Porto, Portugal, 2006.
- AHMED, W.; SARKAR, B. Management of next-generation energy using a triple bottom line approach under a supply chain framework. **Resources, Conservation and Recycling**, v. 150, p. 104431, 2019.
- AJBAR, A. Stabilization of chaotic behavior in a two-phase autocatalytic reactor. **Chaos, Solitons and Fractals**, v. 12, p. 903-918, 2001.
- AJBAR, A.; ALQAHTANI, R. T.; MUSA, S. S. Static and Dynamic Analysis of a Continuous Bioreactor Model for the Production of Biofuel from Refinery Wastewater Using *Rhodococcus opacus*. **Mathematics**, v. 10, n. 16, p. 2842, 2022.
- ALHUMAIZI, K. Chaotic behavior of an autocatalytic reaction with mutation. **Chaos, Solitons and Fractals**, v. 11, p. 1279-1286, 2000.
- ALHUMAIZI, K. I.; ABASAEED, A. E. On mutating autocatalytic reactions in a CSTR. I: multiplicity of steady states. **Chemical Engineering Science**, v. 55, 3919-3928, 2000.
- ALQAHTANI, R. T. *et al.* Stability and performance analysis of bioethanol production with delay and growth inhibition in a continuous bioreactor with recycle. **Processes**, v. 9, n. 3, p. 1–18, 2021.
- ALTIMARI, P. *et al.* Production of microalgae biomass in a continuous stirred bioreactor: Analysis of microalgae-bacteria competition mediated by nitrogen and organic carbon. **Chemical Engineering Science**, v. 260, p. 117826, 2022.
- ANP. Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis 2024.** Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/centrais-de->

conteudo/publicacoes/anuario-estatistico/anuario-estatistico-brasileiro-do-petroleo-gas-natural-e-biocombustiveis-2024#Secao4. Acesso em: 08 jun. 2024.

ARANHA, A. C. R. *et al.* Mathematical modeling of the drying and oil extraction processes of passion fruit seeds using fractional calculus. **Journal of Chemical Technology and Biotechnology**, v. 99, n. 8, p. 1800–1809, 2024.

ARCADIA, C. E. *et al.* Leveraging autocatalytic reactions for chemical domain image classification. **Chemical Science**, v. 12, n. 15, p. 5464–5472, 2021.

ASHRAFUL, A. M. *et al.* Production and comparison of fuel properties, engine performance, and emission characteristics of biodiesel from various non-edible vegetable oils: A review. **Energy Conversion and Management**, v. 80, p. 202-228, 2014.

ASIF, M.; ALI, E.; AJBAR, A. On the existence of chaotic behaviour in pure and simple microbial competition: The role of contois kinetics. **The ANZIAM Journal**, v. 55, p. 162–174, 2013.

BANDYOPADHYAY, J. K.; RAVIKUMAR, V.; KULKARNI, B. D. Altering the Conversion/Selectivity Behavior for a CSTR Exhibiting Chaotic Dynamics. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 32, 2953-2959, 1993.

BERNARDINI, D.; LITAK, G. An overview of 0–1 test for chaos. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 38, n. 5, p. 1433–1450, 2016.

BIROL, I.; TEYMOUR, F.; KEENER, J. P. **Statics and dynamics of multiple cubic autocatalytic reactions. Physica D.**, v. 144, p. 279-297, 2000.

BRESSAN, D. C. *et al.* A note on SDRE control applied in the fermentation reactor. *Int Rev. Mech. Eng.*, v. 13, n. 10, p. 576–586, 2019.

BRASIL. Serviços e Informações do Brasil. **Governo oficializa ampliação da mistura de biodiesel no diesel vendido no país.** [Brasília]. 2023. Disponível em: <https://www.gov.br/pt-br/noticias/energia-minerais-e-combustiveis/2023/03/governo-oficializa-ampliacao-da-mistura-de-biodiesel-no-diesel-vendido-no-pais>. Acesso em: 14 jun. 2024.

BRASIL. Lei nº 13.576, de 26 de dezembro de 2017. Dispõe sobre a Política Nacional de Biocombustíveis (RenovaBio) e dá outras providências. *Diário Oficial da União: seção 1*, Brasília, DF, n. 247, p. 4, 27 dez. 2017. Disponível em: <https://pesquisa.in.gov.br/imprensa/jsp/visualiza/index.jsp?jornal=515&pagina=4&data=27/12/2017>. Acesso em: 14 jun. 2024.

BROWN, R.; CHUA, L. O. Clarifying chaos: Examples and counterexamples. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, v. 6, n. 2, p. 219-249, 1996.

CANABARRO, N. I. *et al.* Sustainability assessment of ethanol and biodiesel production in Argentina, Brazil, Colombia, and Guatemala. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 171, p. 113019, 2023.

CARRILLO-AHUMADA, J. *et al.* Analysis of open-loop and L2D controlled closed-loop behavior of the Cholette's bioreactor under different operating conditions. **ISA Transactions**, v. 101, p. 147–159, 2020.

CATTANI, M. *et al.* Deterministic chaos theory: Basic concepts. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 39, n. 1, 2017.

CHEN, Y. *et al.* Balance adjustment of power-line inspection robot using general type-2 fractional order fuzzy PID controller. **Symmetry**, v. 12, n. 3, p. 479, 2020.

CIESIELSKI, A.; GRZYWACZ, R. Nonlinear analysis of cybernetic model for aerobic growth of *Saccharomyces cerevisiae* in a continuous stirred tank bioreactor. Static bifurcations. **Biochemical Engineering Journal**, v. 146, p. 88–96, 2019.

DAMAYANTI, A.; BAHLOWAN, Z. A. S.; KUMORO, A. C. Modeling of bioethanol production through glucose fermentation using *Saccharomyces cerevisiae* immobilized on sodium alginate beads. **Cogent Engineering**, v. 9, n. 1, p. 2049438, 2022.

ENERGY INSTITUTE. Statistical Review of World Energy. Edição 73, 2024. 76 p. Disponível em: [https://www.energyinst.org/\\_\\_data/assets/pdf\\_file/0006/1542714/684\\_EI\\_Stat\\_Review\\_V16\\_DIGITAL.pdf](https://www.energyinst.org/__data/assets/pdf_file/0006/1542714/684_EI_Stat_Review_V16_DIGITAL.pdf). Acesso em: 04 jan. 2025.

ESTAKHROUIYEH, M. R.; VALI, M.; GHARAVEISI, A. Application of fractional order iterative learning controller for a type of batch bioreactor. **IET Control Theory and Applications**, v. 10, n. 12, p. 1374–1383, 2016.

FERNÁNDEZ, M. C. *et al.* State estimation and trajectory tracking control for a nonlinear and multivariable bioethanol production system. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 36, n. 1, p. 421–437, 2019.

FLORES-TLACUAHUAC, A.; BIEGLER, L. T. Optimization of fractional order dynamic chemical processing systems. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 53, n. 13, p. 5110–5127, 2014.

FONSECA, R. R. *et al.* A fuzzy-split range control system applied to a fermentation process. **Bioresource Technology**, v. 142, p. 475–482, 2013.

FORSTER, T. *et al.* Modeling of bioprocesses via MINLP-based symbolic regression of S-system formalisms. **Computers and Chemical Engineering**, v. 170, p. 108108, 2023.

FRANÇA, L. C. DE J. *et al.* Towards renewable energy projects under sustainable watersheds principles for forest biomass supply. **Biomass and Bioenergy**, v. 176, p. 106916, 2023.

- GADGIL, C. J.; KULKARNI, B. D. Autocatalysis in Biological Systems. **AIChE Journal**, v. 55, n. 3, p. 556–562, 2009.
- GALANICS, C.; SINTÁR, V.; SZALAI, I. Autocatalytic flow chemistry. **Scientific Reports**, v. 13, n. 1, p. 9211, 2023.
- GAN, W. S. Techniques in the application of chaos theory in signal and image processing. **Control and Dynamic Systems**, v. 77, p. 339-387, 1996.
- GARRAPPA, R. Numerical solution of fractional differential equations: A survey and a software tutorial. **Mathematics**, v. 6, n. 2, P. 16, 2018.
- GAYEN, D.; CHATTERJEE, R.; ROY, S. A review on environmental impacts of renewable energy for sustainable development. **International Journal of Environmental Science and Technology**, v. 21, p. 5285-5310, 2024.
- HAJAYA, M. G.; SHAQARIN, T. Multivariable advanced nonlinear controller for bioethanol production in a non-isothermal fermentation bioreactor. **Bioresource Technology**, v. 348, p. 126810, 2022.
- HO, P. Y.; CHUANG, G. S.; LI, H. Y. Computational multiple steady states for enzymic production of L-DOPA in an isothermal CSTR. **Process Biochemistry**, v. 40, n. 1, p. 469–478, 2005.
- KARAGOZ, P.; BILL, R. M.; OZKAN, M. Lignocellulosic ethanol production: Evaluation of new approaches, cell immobilization and reactor configurations. **Renewable Energy**, v. 143, p. 741-752, 2019.
- LADYMAN, J.; LAMBERT, J.; WIESNER, K. What is a complex system? **European Journal for Philosophy of Science**, v. 3, p. 33-67, 2013.
- LEE, S. J. *et al.* Re-utilization of waste glycerol for continuous production of bioethanol by immobilized *Enterobacter aerogenes*. **Journal of Cleaner Production**, v. 161, p. 757–764, 2017.
- LENBURY, Y.; SUKPRASONG, B.; NOVAPRATEEP, B. Bifurcation and Chaos in a Membrane Permeability Sensitive Model for a Continuous Bioreactor. **Maths. Comput. Modelling**, v. 24, n. 9, p. 37-48, 1996.
- LI, J. *et al.* Fuel ethanol production from starchy grain and other crops: An overview on feedstocks, affecting factors, and technical advances. **Renewable Energy**, v. 188, p. 223-239, 2022.
- LIU, R. *et al.* Mixed enzymes on sequential biofuel productivity in an anaerobic digestion system of molasses wastewater. **Journal of Coastal Research**, v. 104, n. sp1, p. 497–503, 2020.

LOPES FERRARI, A. *et al.* Mathematical modeling by fractional calculus applied to separation processes. **Separation and Purification Technology**, v. 337, p. 126310, 2024.

MAGNITSKII, N. A. Universal Bifurcation Chaos Theory and Its New Applications. **Mathematics**, v. 11, n. 11, p. 2536, 2023.

MOHAN, V. *et al.* A novel cascaded fractional fuzzy approach for control of fermentation process. **Bioresource Technology**, v. 357, p. 127377, 2022.

MONTOYA, M. A. *et al.* Renewable and Non-renewable in the energy-emissions-climate nexus: Brazilian contributions to climate change via international trade. **Journal of Cleaner Production**, v. 312, p. 127700, 2021.

MÜLLER, C. *et al.* Challenges and opportunities for third-generation ethanol production: A critical review. **Engineering Microbiology**, v. 3, p. 100056, 2023.

MUMTAZ, M. *et al.* Application of nanomaterials for enhanced production of biodiesel, biooil, biogas, bioethanol, and biohydrogen via lignocellulosic biomass transformation. **Fuel**, v. 315, p. 122840, 2022.

MUNOZ-VÁZQUEZ, A. J.; MARTÍNEZ-REYES, F. Output feedback fractional integral sliding mode control of robotic manipulators. **Journal of Computational and Nonlinear Dynamics**, v. 14, n. 5, 2019.

MURATA, Y. *et al.* Potentials of multi-stress tolerant yeasts, *Saccharomyces cerevisiae* and *Pichia kudriavzevii* for fuel ethanol production from industrial cassava wastes. **Process Biochemistry**, v. 111, p. 305–314, 2021.

NATARAJAN, P.; MOGHADAM, R.; JAGANNATHAN, S. Online deep neural network-based feedback control of a Lutein bioprocess. **Journal of Process Control**, v. 98, p. 41–51, 2021.

NOVIA, N. *et al.* Recent advances in CFD modeling of bioethanol production processes. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 183, p. 113522, 2023.

NUANPENG, S. *et al.* Optimization Conditions for Ethanol Production from Sweet Sorghum Juice by Thermotolerant Yeast *Saccharomyces cerevisiae*: Using a Statistical Experimental Design. **Fermentation**, v. 9, n. 5, p. 450, 2023.

OCHOA, M. P. *et al.* Dynamic global sensitivity analysis in bioreactor networks for bioethanol production. **Bioresource Technology**, v. 200, p. 666–679, 2016.

OJEDA TORO, J. C. *et al.* A structured study on the dynamic bifurcation behavior of a continuous ethanol fermentor. **Chemical Engineering Science**, v. 243, p. 116777, 2021.

OLIVEIRA, L. S. B. L.; CRUZ, A. J. G. Techno-economic analysis and carbon intensity of sugarcane-corn flex plants in Brazil. **Bioresource Technology Reports**, v. 24, p. 101694, 2023.

PACHAURI, N.; RANI, A.; SINGH, V. Bioreactor temperature control using modified fractional order IMC-PID for ethanol production. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 122, p. 97–112, 2017.

PACHAURI, N.; SINGH, V.; RANI, A. Two degree of freedom PID based inferential control of continuous bioreactor for ethanol production. **ISA Transactions**, v. 68, p. 235–250, 2017.

PACHAURI, N.; SINGH, V.; RANI, A. Two Degrees-of-Freedom Fractional-Order Proportional-Integral-Derivative-Based Temperature Control of Fermentation Process. **Journal of Dynamic Systems, Measurement and Control, Transactions of the ASME**, v. 140, n. 7, p. 071006, 2018.

PAGANI, R. N. *et al.* Methodi Ordinatio 2.0: revisited under statistical estimation, and presenting FIndex and RankIn. **Quality and Quantity**, v. 57, n. 5, p. 4563–4602, 2022.

PAGANI, R. N.; KOVALESKI, J. L.; RESENDE, L. M. Methodi Ordinatio: a proposed methodology to select and rank relevant scientific papers encompassing the impact factor, number of citation, and year of publication. **Scientometrics**, v. 105, n. 3, p. 2109–2135, 2015.

PAINULY, A.; PUSHPAVANAM, S.; KIENLE, A. Steady state behavior of coupled nonlinear reactor-separator systems: Effect of different separators. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 44, n. 7, p. 2165–2173, 2005.

PAZ ASTUDILLO, I. C.; CARDONA ALZATE, C. A. Importance of stability study of continuous systems for ethanol production. **Journal of Biotechnology**, v. 15, p. 43–55, 2011.

PETRE, E.; SELIȘTEANU, D.; ROMAN, M. Advanced nonlinear control strategies for a fermentation bioreactor used for ethanol production. **Bioresource Technology**, v. 328, p. 124836, 2021.

PETSAGKOURAKIS, P. *et al.* Reinforcement learning for batch bioprocess optimization. **Computers and Chemical Engineering**, v. 133, p. 106649, 2020.

PICCIRILLO, V. *et al.* Characterizing the nonlinear behavior of a pseudoelastic oscillator via the wavelet transform. **Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science**, v. 230, n. 1, p. 120–132, 2016.

PRASAD, S. *et al.* Review on biofuel production: Sustainable development scenario, environment, and climate change perspectives – A sustainable approach. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 12, p. 111996, 2024.

QU, C. *et al.* Enhanced ethanol production from lignocellulosic hydrolysates by *Thermoanaerobacterium aotearoense* SCUT27/ $\Delta$ argR<sub>1864</sub> with improved

lignocellulose-derived inhibitors tolerance. **Renewable Energy**, v. 173, p. 652–661, 2021.

RASOULIAN, S.; SHAHROKHI, M. Control of a Chemical Reactor with Chaotic Dynamics. **Iran. J. Chem. Chem. Eng.**, v. 29, n. 4, 2010.

RASTOGI, M.; SHRIVASTAVA, S. Recent advances in second generation bioethanol production: An insight to pretreatment, saccharification and fermentation processes. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 80, p. 330-340, 2017.

RIAL, R. C. Biofuels versus climate change: Exploring potentials and challenges in the energy transition. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 196, p. 114369, 2024.

RIBEIRO, G. F.; BRAGHINI JUNIOR, A. The global energy matrix and use of agricultural residues for bioenergy production: A review with inspiring insights that aim to contribute to deliver solutions for society and industrial sectors through suggestions for future research. **Waste Management and Research**, v. 41, n. 8, p. 1283-1304, 2023.

RITCHIE, H.; ROSADO, P. Energy Mix: Explore global data on where our energy comes from, and how this is changing. **Our Word in Data [Oline Resource]**. Disponível em: <https://ourworldindata.org/energy-mix#article-citation>. Acesso em: 06 jun. 2024.

ROBAK, K.; BALCEREK, M. Review of second generation bioethanol production from residual biomass. **Food Technology and Biotechnology**, v. 56, n. 2, p. 174-187, 2018.

SCHUSTER, P. What is special about autocatalysis? **Monatshefte fur Chemie-Chemical Monthly**, v. 150, p. 763-775, 2019.

SENE, N. Analysis of a fractional-order chaotic system in the context of the Caputo fractional derivative via bifurcation and Lyapunov exponents. **Journal of King Saud University - Science**, v. 33, p. 101275, 2021.

SILVA, C. DA *et al.* Fractional calculus as a generalized kinetic model for biochemical methane potential tests. **Bioresource Technology**, v. 396, 1 mar. 2024.

SINGH, A. P. *et al.* Modeling and Control of Robotic Manipulators: A Fractional Calculus Point of View. **Arabian Journal for Science and Engineering**, v. 46, n. 10, p. 9541–9552, 1 out. 2021.

SOLÍS-PÉREZ, J. E.; GÓMEZ-AGUILAR, J. F.; ATANGANA, A. Novel numerical method for solving variable-order fractional differential equations with power, exponential and Mittag-Leffler laws. **Chaos, Solitons and Fractals**, v. 114, p. 175–185, 2018.

SRIPUTORN, B. *et al.* Very high gravity ethanol fermentation from sweet sorghum stem juice using a stirred tank bioreactor coupled with a column bioreactor. **Journal of Biotechnology**, v. 332, p. 1–10, 2021.

SUN, X. *et al.* Enhanced ethanol production from syngas by *Clostridium ragsdalei* in continuous stirred tank reactor using medium with poultry litter biochar. **Applied Energy**, v. 236, p. 1269–1279, 2019.

TATARA, E. *et al.* Measuring complexity in reactor networks with cubic autocatalytic reactions. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 44, n. 8, p. 2781–2791, 2005.

TIAN, J. *et al.* Global low-carbon energy transition in the post-COVID-19 era. **Applied Energy**, v. 307, p. 118205, 2022.

TIBURCIO, R. S.; MACÊDO, T. R. DE; PEREIRA NETO, A. M. Brazilian Biofuels Policy (RenovaBio): Overview and generation of decarbonization credits by biodiesel production facilities. **Energy for Sustainable Development**, v. 77, p. 101334, 2023.

TUSSET, A. M. *et al.* On suppression of chaotic motion of a nonlinear MEMS oscillator. **Nonlinear Dynamics**, v. 99, n. 1, p. 537–557, 2020.

TUSSET, A. M. *et al.* Dynamic Analysis and Control for a Bioreactor in Fractional Order. **Symmetry**, v. 14, n. 8, p. 1609, 2022.

TUSSET, A. M. *et al.* Dynamic Analysis and Control of a Financial System with Chaotic Behavior Including Fractional Order. **Fractal and Fractional**, v. 7, n. 7, p. 535, 2023a.

TUSSET, A. M. *et al.* Dynamic Analysis and Piezoelectric Energy Harvesting from a Nonideal Portal Frame System including Nonlinear Energy Sink Effect. **Actuators**, v. 12, n. 7, p. 298, 2023b.

UNTERBERGER, J.; NGHE, P. Stoichiometric and dynamical autocatalysis for diluted chemical reaction networks. **Journal of Mathematical Biology**, v. 85, n. 26, p. 1-46, 2022.

VAIDYANATHAN, S. Adaptive Control of a Chemical Chaotic Reactor. **International Journal of PharmTech Research**, v. 8, n. 3, p. 377-382.

VEDOVATTO, F. *et al.* Production of biofuels from soybean straw and hull hydrolysates obtained by subcritical water hydrolysis. **Bioresource Technology**, v. 328, p. 124837, 2021.

VILLAFUERTE-SEGURA, R. *et al.* Mathematical model with time-delay and delayed controller for a bioreactor. **Mathematical Methods in the Applied Sciences**, v. 46, n. 1, p. 248–266, 2023.

VUČUROVIĆ, D. *et al.* Bioethanol Production from Spent Sugar Beet Pulp—Process Modeling and Cost Analysis. **Fermentation**, v. 8, n. 3, p. 114, 2022.

WANG, S.-J.; ZHONG, J.-J. **Chapter 6. Bioreactor Engineering**. 2007.

ZANARDI, M. S.; COSTA JUNIOR, E. F. Tecnologia e perspectiva da produção de etanol no Brasil. **Revista Liberato**, v. 17, n. 27, p. 20–34, 2016.

ZHANG, N.; SEIDER, W. D.; CHEN, B. Bifurcation control of high-dimensional nonlinear chemical processes using an extended washout-filter algorithm. **Computers and Chemical Engineering**, v. 84, p. 458–481, 2016.

ZHONG, J. J. Recent advances in bioreactor engineering. **Korean Journal of Chemical Engineering**, v. 27, n. 4, p. 1035–1041, 2010.

**APÊNDICE A – PORTIFÓLIO ORDENADO DE ARTIGOS**

**Quadro 3 – Classificação InOrdinatio do portfólio de artigos**  
(continua)

<b>Autores</b>	<b>Artigo</b>	<b>InOrdinatio</b>
Kashyap, A.M., Gurumoorthy, A.V. and Subramaniam, P.	Symmetric and asymmetric coupled autocatalytic reactions in an isothermal CSTR	193,40
Gray, P. and Scott, S.	Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor. Oscillations and instabilities in the system $A + 2B \rightarrow 3B; B \rightarrow C$	179,82
Silva, C.D., Peces, M., Jaques, A., Muñoz, J., Dosta, J. and Astals, S.	Fractional calculus as a generalized kinetic model for biochemical methane potential tests	174,00
Gray, P. and Scott, S.	Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor. Isolates and other forms of multistability	160,41
Rao, A.S. and Chidambaram, M.	Analytical design of modified Smith predictor in a two-degrees-of-freedom control scheme for second order unstable processes with time delay	115,75
Martínez-Guerra, R., Flores-Flores, J.P. and Govea-Vargas, A.	A globally Mittag-Leffler bounded high-gain observer for systems with unknown dynamics and noisy measurements	110,56
Flores-Tlacuahuac, A. and Biegler, L.T.	Optimization of Fractional Order Dynamic Chemical Processing Systems	101,29
Vaidyanathan, S.	Adaptive control of a chemical chaotic reactor	89,73
Paz Astudillo, I.C. and Cardona Alzate, C.A.	Importance of stability study of continuous systems for ethanol production	86,32
Ciesielski, A. and Grzywacz, R.	Nonlinear analysis of cybernetic model for aerobic growth of <i>Saccharomyces cerevisiae</i> in a continuous stirred tank bioreactor. Static bifurcations	77,74
Ajbar, A.	Stabilization of chaotic behavior in a two-phase autocatalytic reactor	77,12
Abashar, M. and Elnashaie, S.	Dynamic and chaotic behavior of periodically forced fermentors for bioethanol production	75,73
Vaidyanathan, S.	A novel chemical chaotic reactor system and its output regulation via integral sliding mode control	75,33
Alhumaizi, K.	Chaotic behavior of an autocatalytic reaction with mutation	74,38
Pachauri, N., Singh, V. and Rani, A.	Two Degrees-of-Freedom Fractional-Order Proportional-Integral-Derivative-Based Temperature Control of Fermentation Process	64,83
Kevrekidis, I., Schmidt, L. and Aris, R.	Some common features of periodically forced reacting systems	60,64
Alhumaizi, K. and Abasaeed, A.	On mutating autocatalytic reactions in a CSTR. I: multiplicity of steady states	55,50

**Quadro 3 – Classificação InOrdinatio do portfólio de artigos**

(continua)

<b>Autores</b>	<b>Artigo</b>	<b>InOrdinatio</b>
Lynch, D.T.	Chaotic behavior of reaction systems: mixed cubic and quadratic autocatalysis	54,41
Lynch, D.T.	Chaotic behavior of reaction systems: parallel cubic autocatalators	53,92
Tatara, E., Birol, I., Teymour, F. and Çinar, A.	Static and dynamic behavior of autocatalytic replicators in reactor networks	52,95
Tatara, E., Birol, I., Çinar, A. and Teymour, F.	Measuring complexity in reactor networks with cubic autocatalytic reactions	52,80
Kumar, J. and Nath, S.	Analysis of autocatalytic reactions with Michaelis-Menten kinetics in an isothermal continuous stirred tank reactor	52,58
Abashar, M. and Judd, M.	Synchronization of chaotic nonlinear oscillators: Study of two coupled CSTRs	52,08
Painuly, A., Pushpavanam, S. and Kienle, A.	Steady state behavior of coupled nonlinear reactor-separator systems: Effect of different separators	46,80
Fox, R.	Micromixing effects in the nicolis-puhl reaction: numerical bifurcation and stability analysis of the IEM model	43,32
Kay, S., Scott, S. and Tomlin, A.	Quadratic autocatalysis in a non-isothermal CSTR	42,60
Moindr, A., Krajičev, M., Markog, J. and Jelemensky, L.	Use of bifurcation analysis for identification of a safe CSTR operability	42,38
Lyberatos, G., Kuszta, B. and Bailey, J.	Versal matrix families, normal forms and higher order bifurcations in dynamic chemical systems	38,95
Lin, K.	Multiplicity, stability and dynamics for isothermal autocatalytic reactions in CSTR	37,74
Kim, S.H. and Hlavacek, V.	On the detailed dynamics of coupled continuous stirred tank reactors	36,44
Bandyopadhyay, J., Ravikumar, V. and Kulkarni, B.	Altering the Conversion/Selectivity Behavior for a CSTR Exhibiting Chaotic Dynamics	34,37
Birol, I. and Teymour, F.	Statics and dynamics of multiple cubic autocatalytic reactions	26,42
Horak, J., Jiracek, F. and Krausova, L.	Experimental study of the behaviour of an isothermal continuous stirred tank reactor in the course of an autocatalytic reaction	22,03
Cho, S.-M., Ko, B.-S. and Rhee, H.-K.	Application of singularity theory to a non-isothermal CSTR with an autocatalytic reaction	21,01
Gray, P. and Scott, S.	Sustained oscillations and other exotic patterns of behavior in isothermal reactions	20,55

**Quadro 3 – Classificação InOrdinatio do portfólio de artigos****(conclusão)**

<b>Autores</b>	<b>Artigo</b>	<b>InOrdinatio</b>
Horváth, D., Petrov, V., Scott, S.K. and Showalter, K.	Instabilities in propagating reaction-diffusion fronts	13,62
Rasoulían, S., Shahrokhi, M. and Salarieh, H.	Chaos Control in a Non-Isothermal Autocatalytic Chemical Reactor	9,93
Echi, N.	GLOBAL MITTAG-LEFFLER OUTPUT FEEDBACK STABILIZATION FOR NONLINEAR FRACTIONAL-ORDER SYSTEM WITH KNOWN GROWTH RATE	7,89
Shabnam, R., Mohammad, S. and Hassan, S.	Control of a chemical reactor with chaotic dynamics	7,46
Saeedizadeh, F., Pariz, N. and Hosseini, S.A.	High-order sliding mode control of a bioreactor model through non-commensurate fractional equations	4,83
Niu, H., Zhang, Q., Yang, C. and Bai, F.	Variable structure control for three-variable autocatalytic reaction	-7,58
Chen, G.K.C., Fan, L. and Erickson, L.	On the merits of partial fluid mixing in the biochemical reactor system	-11,81
Kim, S.H. and Hlavacek, V.	Qualitative Properties of Autocatalytic Reactions Occurring in a Flow System	-13,85
Abasaeed, A.	Bifurcation and chaos for a mutating autocatalator in a CSTR	-21,10
Ajbar, A. and Ibrahim, G.	Periodic and nonperiodic oscillatory behavior in a model for activated sludge reactors	-23,56
Lenbury, Y., Sukprasong, B. and Novaprateep, B.	Bifurcation and chaos in a membrane permeability sensitive model for a continuous bioreactor	-29,20

**Fonte: Autoria propria (2023)**