

Modelagem Preditiva da Mosturação Cervejeira via Simulação Dinâmica em Python e AVEVA Process Simulation

Peralta G.E.^a, Gutiérrez J.^b, Belén F.^a, Farenzena S.^a, Spogis N.^c, Bispo H.^d

^aDepartamento de Química, INQUISUR-CONICET, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca-BA, Argentina

^bDepartamento de Ingeniería Eléctrica y Computadoras, ICIC-CONICET, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca-BA, Argentina

^cFaculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas-SP, Brasil

^dDepartamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande-PB, Brasil

*gastonperalta57@gmail.com

RESUMO

A mosturação cervejeira é um processo enzimático no qual a conversão do amido em açúcares fermentáveis determina a fermentabilidade do mosto e as características do produto final. Este trabalho apresenta a implementação e validação de um modelo matemático cinético que descreve a solubilização das enzimas, a desnaturação térmica, a gelatinização do amido e a cinética de sacarificação por múltiplas rotas reacionais. O modelo, composto por um sistema de 10 equações diferenciais ordinárias (EDOs), foi implementado em Python e no software AVEVA Process Simulation (APS), permitindo a validação cruzada entre ambas as plataformas. Os resultados reproduzem a evolução da atividade enzimática, a distribuição de carboidratos e o grau de polimerização. A estrutura proposta converte o projeto empírico da mosturação em uma metodologia preditiva baseada em modelos, abrindo novas possibilidades para a otimização, o controle e a digitalização das operações cervejeiras.

Palavras-chave: Mosturação cervejeira; Modelagem matemática; Simulação dinâmica; Hidrólise enzimática do amido.

1. Motivação

Os processos de transformação bioquímica costumam envolver um forte acoplamento entre a cinética de reação, os fenômenos de transporte e as condições de operação. A mosturação cervejeira constitui um exemplo representativo desses sistemas. A etapa de mosturação consiste em um processo bioquímico complexo no qual a atividade das enzimas amilolíticas controla a degradação do amido e determina o perfil final de açúcares fermentáveis do mosto cervejeiro [Parés Viader et al., 2021].

Sob a perspectiva da Engenharia de Sistemas de Processos, a mosturação pode ser interpretada como um reator batch (batelada) enzimático não isotérmico, regido por mecanismos cinéticos em competição. O comportamento da temperatura controla simultaneamente a ativação enzimática, a acessibilidade dos substratos e a desnaturação, gerando um comportamento dinâmico complexo.

A prática cervejeira industrial baseia-se tradicionalmente em programas de temperatura definidos empiricamente. No entanto, a crescente digitalização dos processos exige ferramentas preditivas capazes de vincular as políticas operacionais aos atributos do produto. A modelagem dinâmica fornece um caminho para esse objetivo ao transformar a experiência operacional em variáveis de projeto quantitativas [Ruarte et al., 2025]. A modelagem matemática da mosturação e sua simulação dinâmica permitem prever o comportamento do sistema sob diferentes perfis de temperatura, possibilitando a otimização do processo para prever a distribuição de açúcares fermentáveis e minimizar os tempos de processo.

O objetivo deste trabalho é implementar e validar um modelo cinético capaz de descrever a dinâmica bioquímica da mosturação, comparando os resultados obtidos em Python com simulações realizadas em APS.

2. Metodologia

2.1. Modelo matemático

O modelo desenvolvido concentra-se na cinética enzimática da hidrólise do amido. O sistema é descrito por um conjunto de 10 equações diferenciais ordinárias que representam a solubilização das enzimas α -amilase e β -amilase do grão para o mosto, a desnaturação térmica das enzimas em função da temperatura, a gelatinização do

amido que gera maltotriose e dextrinas, e a hidrólise das dextrinas que produz glicose, maltose e dextrinas limitantes [Koljonen et al., 1995].

A transferência de massa do grão para a fase líquida é modelada por meio de uma cinética de solubilização de primeira ordem, acoplada a uma desnaturação térmica irreversível descrita por relações de Arrhenius, o que permite calcular as taxas de reação em função da temperatura.

$$k = k_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (1)$$

As variáveis principais incluídas no modelo são: α -amilase dissolvida, α -amilase no grão, β -amilase dissolvida, β -amilase no grão, amido, dextrinas, glicose, maltose, maltotriose e dextrinas limitantes. A seguir, são descritas as 10 EDOs.

$$\frac{d\beta\text{Amilase}_{\text{grão}}}{dt} = -H_{\beta} \cdot \frac{\text{Massa Malte}}{\text{Volume Malte}} \cdot (\beta\text{Amilase}_{\text{grão}} - \beta\text{Amilase}) \quad (2)$$

$$\frac{d\beta\text{Amilase}}{dt} = H_{\beta} \cdot \frac{\text{Massa Malte}}{\text{Volume Mostura}} \cdot (\beta\text{Amilase}_{\text{grão}} - \beta\text{Amilase}) - (K_{\beta} \cdot \beta\text{Amilase}) \quad (3)$$

$$\frac{d\alpha\text{Amilase}_{\text{grão}}}{dt} = -H_{\alpha} \cdot \frac{\text{Massa Malte}}{\text{Volume Malte}} \cdot (\alpha\text{Amilase}_{\text{grão}} - \alpha\text{Amilase}) \quad (4)$$

$$\frac{d\alpha\text{Amilase}}{dt} = H_{\alpha} \cdot \frac{\text{Massa Malte}}{\text{Volume Mostura}} \cdot (\alpha\text{Amilase}_{\text{grão}} - \alpha\text{Amilase}) - (K_{\alpha} \cdot \alpha\text{Amilase}) \quad (5)$$

$$\frac{d\text{Amido}}{dt} = -\alpha\text{Amilase} \cdot (\text{Amido} - (u \cdot \text{Amido})) \cdot \left(\left(\frac{27}{28} \cdot A_{g_{\text{mlt}}} \right) + A_{g_{\text{dex}}} \right) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\text{Dextrinas}}{dt} = & (\alpha\text{Amilase} \cdot (\text{Amido} - (u \cdot \text{Amido})) \cdot A_{g_{\text{dex}}}) \\ & - (\beta\text{Amilase} \cdot \text{Dextrinas}) \cdot \left[\frac{9}{10} \cdot B_{gl} + \frac{18}{19} \cdot \left(\frac{B_{\text{mal}}}{K_m + \text{Dextrinas}} \right) + B_{l_{\text{dex}}} \right] \end{aligned} \quad (7)$$

$$\frac{d\text{Glicose}}{dt} = B_{gl} \cdot \beta\text{Amilase} \cdot \text{Dextrinas} \quad (8)$$

$$\frac{d\text{Maltose}}{dt} = \frac{B_{\text{mal}} \cdot \beta\text{Amilase} \cdot \text{Dextrinas}}{K_m + \text{Dextrinas}} \quad (9)$$

$$\frac{d\text{Maltotriose}}{dt} = A_{g_{\text{mlt}}} \cdot \alpha\text{Amilase} \cdot (\text{Amido} - (u \cdot \text{Amido})) \quad (10)$$

$$\frac{d\text{Dextrinas Limitantes}}{dt} = B_{l_{\text{dex}}} \cdot \beta\text{Amilase} \cdot \text{Dextrinas} \quad (11)$$

As Tabelas 1 e 2 resumem os parâmetros cinéticos e as condições iniciais do processo, respectivamente.

Tabela 1. Referências dos parâmetros cinéticos utilizados.

	Descrição	Valor	Unidade
R	Constante universal dos gases ideais	8.314	$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$
H_{α}	Coefficiente de solubilização da α -amilase	9.72E-05	min^{-1}
H_{β}	Coefficiente de solubilização da β -amilase	7.57E-05	min^{-1}
$K_{\alpha 0}$	Pré-exponencial da constante de desnaturação térmica da α -amilase	3.86E+34	min^{-1}
$K_{\beta 0}$	Pré-exponencial da constante de desnaturação térmica da β -amilase	9.46E+67	min^{-1}
E_{α}	Energia de ativação da α -amilase	2.377E+05	$J \cdot mol^{-1}$
E_{β}	Energia de ativação da β -amilase	4.439E+05	$J \cdot mol^{-1}$
Massa Malte	Massa de malte	67.64	Kg
Volume Malte	Volume de malte	44.37	L
Volume Mostura	Volume de mostura	200	L
K_m	Constante de Michaelis-Menten para hidrólise de dextrinas	2.8	$g \cdot L^{-1}$

Tabela 2. Referências das condições iniciais do processo.

	Descrição	Valor inicial	Unidade
α Amilase _{grão}	α -amilase presente no grão de malte	1588000	$U \cdot Kg^{-1}$
α Amilase	α -amilase dissolvida no mosto	0	$U \cdot L^{-1}$
β Amilase _{grão}	β -amilase presente no grão de malte	4840000	$U \cdot Kg^{-1}$
β Amilase	β -amilase dissolvida no mosto	0	$U \cdot L^{-1}$
Amido	Concentração de amido disponível para sacarificação	448.4	$g \cdot Kg^{-1}$
Dextrinas	Concentração de dextrinas	82.4	$g \cdot Kg^{-1}$
Glicose	Concentração de glicose produzida	20.4	$g \cdot Kg^{-1}$
Maltose	Concentração de maltose produzida	41.2	$g \cdot Kg^{-1}$
Maltotriose	Concentração de maltotriose produzida	0	$g \cdot Kg^{-1}$
Dextrinas Limitantes	Concentração de dextrinas limitantes (não fermentáveis)	0	$g \cdot Kg^{-1}$
U	Fração de amido não gelatinizado	1	-
Ag_{mlt}	Constante de formação de maltotriose catalisada pela α -amilase	6.42E+09	min^{-1}
Ag_{dex}	Constante de formação de dextrinas catalisada pela α -amilase	3.77E+10	min^{-1}
B_{gl}	Constante de formação de glicose catalisada pela β -amilase	1.62E+40	min^{-1}
B_{mal}	Constante de formação de maltose catalisada pela β -amilase	1.05E+42	min^{-1}
B_{ldex}	Constante de formação de dextrinas limitantes catalisada pela β -amilase	1.09E+41	min^{-1}

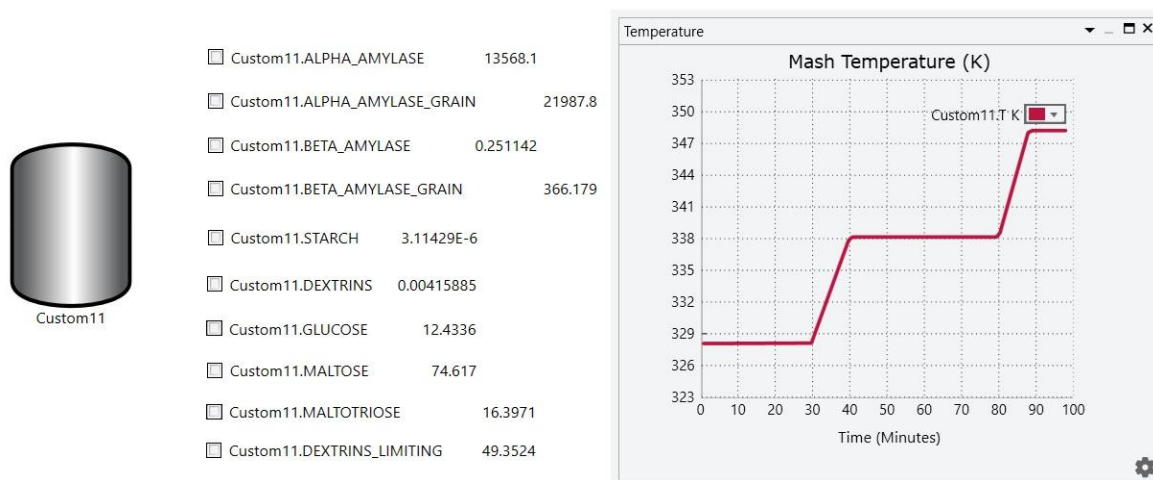
2.2. Implementação computacional

O modelo dinâmico desenvolvido foi implementado computacionalmente dentro de um ambiente de simulação de processos no APS, por meio da criação de um tanque customizado que representa a tina de mosturação cervejeira. O equipamento foi configurado como um reator batch dinâmico, permitindo reproduzir o comportamento transitório característico da etapa de mosturação. Nesta unidade personalizada, foram definidos explicitamente todos os parâmetros físicos, variáveis de estado e equações diferenciais que descrevem o sistema. Dessa forma, o modelo matemático foi integrado diretamente ao simulador, constituindo uma representação dinâmica do processo real. Uma vez construído o reator virtual, utilizou-se a ferramenta de análise de “Scenarios” disponível no APS para gerar diferentes condições operacionais associadas a distintas rampas de temperatura de mosturação. Cada cenário corresponde a uma trajetória térmica específica aplicada como variável manipulada do processo. A execução independente dos diferentes cenários permitiu simular a evolução temporal do sistema e analisar o comportamento dinâmico de todas as variáveis de interesse.

3. Resultados e discussão

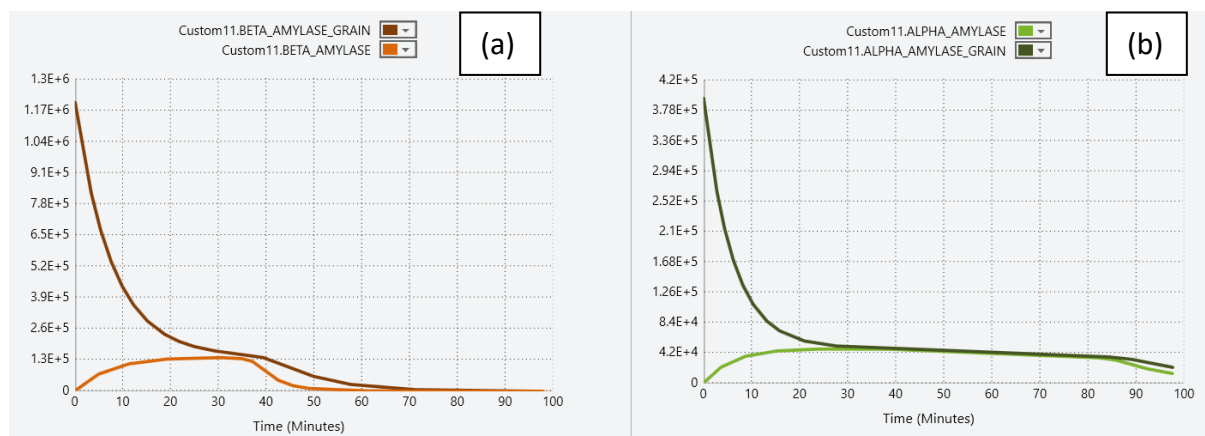
Nesta seção, apresentam-se os resultados e perfis obtidos. A Figura 1 mostra o APS Canvas monitorando as principais variáveis do processo juntamente com a rampa de temperatura correspondente a um determinado cenário. A distribuição de α -amilase e β -amilase também é apresentada na Figura 2, e as concentrações de açúcar obtidas e o grau de polimerização na Figura 3.

Figura 1. Canvas e rampa de temperatura utilizada durante a simulação no APS.



O perfil térmico aplicado governa simultaneamente a solubilização enzimática, a gelatinização do amido e a estabilidade térmica das enzimas, gerando uma dinâmica altamente acoplada entre fenômenos físico-químicos e bioquímicos. A rampa aplicada estabelece um tempo total de mosturação de 98 minutos e temperaturas entre 328 K e 348 K.

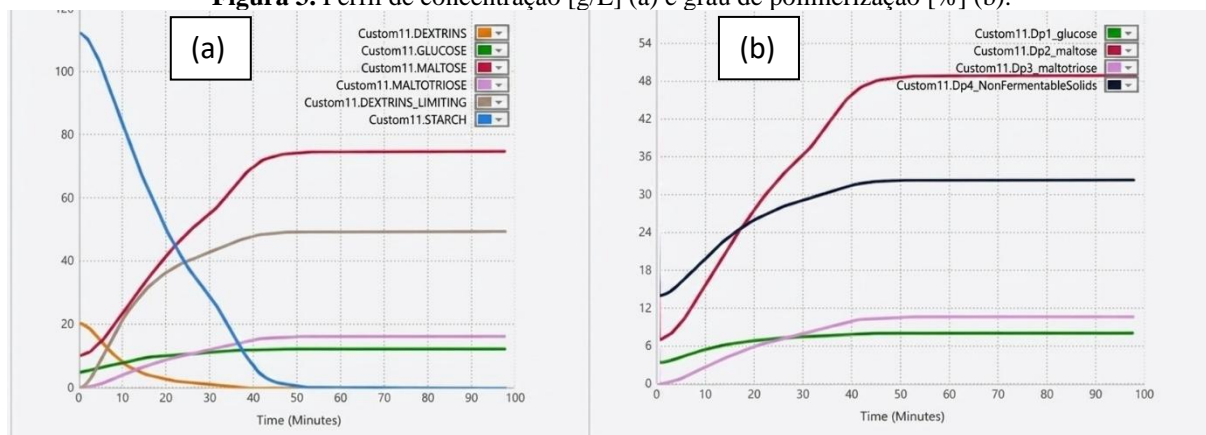
Figura 2. Distribuição [U/L] de β -amilase (a) e α -amilase (b).



A Figura 2 apresenta a evolução temporal das concentrações de α -amilase e β -amilase durante o processo de mosturação, tanto no grão quanto no mosto. Inicialmente, ambas as enzimas encontram-se principalmente no grão, de onde são transferidas gradualmente para o mosto por meio do processo de solubilização. A α -amilase no grão diminui rapidamente nos primeiros minutos à medida que se solubiliza no mosto, atingindo um máximo de concentração na fase líquida por volta dos 30 minutos. Posteriormente, a atividade enzimática no mosto diminui devido à desnaturação térmica irreversível causada pelo aumento progressivo da temperatura. Um comportamento semelhante é observado para a β -amilase, embora sua transferência a partir do grão seja mais lenta. Este

comportamento reflete o compromisso cinético entre a ativação térmica das enzimas (que favorece a hidrólise do amido) e sua desnaturação irreversível (que limita a conversão do substrato). A gestão apropriada deste balanço térmico explica por que diferentes perfis de temperatura de mosturação produzem mostos com composições e fermentabilidades distintas.

Figura 3. Perfil de concentração [g/L] (a) e grau de polimerização [%] (b).



Os resultados mostrados na Figura 3a evidenciam a conversão gradual do amido em açúcares fermentáveis e dextrinas. O amido diminui rapidamente nos primeiros 30 minutos devido à ação hidrolítica da α -amilase, enquanto simultaneamente ocorre um aumento nas concentrações de maltose e maltotriose. As dextrinas apresentam um comportamento dinâmico: são produtos intermediários da degradação do amido pela α -amilase que diminuem à medida que são hidrolizadas pela β -amilase em açúcares de menor peso molecular. A glicose e as dextrinas limitantes mantêm-se em concentrações baixas e relativamente constantes ao longo do processo. A Figura 3b mostra a distribuição do grau de polimerização, onde se observa que os açúcares fermentáveis (DP1-DP3) aumentam progressivamente, assim como ocorre com a fração não fermentável (DP4). Esta evolução confirma a sacarificação sequencial característica da mosturação: a α -amilase gera inicialmente fragmentos de cadeia média que, posteriormente, são convertidos pela β -amilase em açúcares fermentáveis de baixo peso molecular. O perfil de temperatura empregado atua como variável de projeto que determina a distribuição final de carboidratos e, portanto, a fermentabilidade do mosto.

A comparação entre os resultados obtidos em Python e aqueles gerados no APS mostrou coincidência qualitativa e quantitativa nas tendências dinâmicas, validando tanto o modelo matemático quanto sua implementação computacional. Em conjunto, os resultados demonstram que a abordagem baseada em modelagem dinâmica permite transformar o projeto tradicional da mosturação em uma ferramenta preditiva orientada à otimização do processo.

4. Conclusões

Neste trabalho, foi desenvolvido e implementado um modelo matemático dinâmico capaz de descrever a etapa de mosturação cervejeira por meio da integração de fenômenos de transferência, cinética enzimática e efeitos térmicos. O modelo foi resolvido numericamente em Python e, posteriormente, implementado no AVEVA Process Simulation por meio de um reator batch customizado, permitindo sua validação cruzada em um ambiente industrial de simulação de processos.

Os resultados obtidos demonstram que o perfil de temperatura constitui a principal variável de projeto da mosturação, controlando simultaneamente a disponibilidade enzimática, a degradação do amido e a distribuição final de açúcares fermentáveis e não fermentáveis. A concordância entre ambas as plataformas computacionais confirma a robustez do modelo e sua capacidade preditiva.

A abordagem proposta representa um avanço em direção à digitalização do processo cervejeiro, substituindo metodologias empíricas por ferramentas de engenharia baseadas em modelos dinâmicos. Isso abre a possibilidade de utilizar simulação avançada para otimização energética, redução de tempos operacionais e projeto racional de perfis de mosturação orientados a propriedades específicas do produto final.

Como perspectivas futuras, propõe-se a integração do modelo com estratégias de controle avançado, bem como seu acoplamento com modelos de fermentação e maturação para desenvolver um modelo completo do processo cervejeiro.

Agradecimentos: G. Peralta e S. Farenzena agradecem à Universidad Nacional del Sur (UNS). J. Gutiérrez e F. Belén agradecem ao Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET, Argentina). F. Belén também agradece ao CiMol-CNPq. H. Bispo agradece à Universidade Federal de Campina Grande (UFCG).

Referências

- Koljonen, T., Hämäläinen, J. J., Sjöholm, K., & Pietilä, K. (1995). A model for the prediction of fermentable sugar concentrations during mashing. *Journal of food engineering*, 26(3), 329-350.
- Parés Viader, R., Yde, M. S. H., Hartvig, J. W., Pagenstecher, M., Carlsen, J. B., Christensen, T. B., & Andersen, M. L. (2021). Optimization of beer brewing by monitoring α -amylase and β -amylase activities during mashing. *Beverages*, 7(1), 13.
- Ruarte, P. J., Leiva Alaniz, M. J., Vergara, S. C., Groff, M. C., Pantano, M. N., Mestre, M. V., ... & Maturano, Y. P. (2025). Mathematical Modeling for Fermentation Systems: A Case Study in Probiotic Beer Production. *Fermentation*, 11(4), 184.



Realização:

