10º **ENTEC – Encontro de Tecnologia: 28 de novembro a 3 de dezembro de 2016**

SIMULAÇÃO DE UM PROCESSO FERMENTATIVO EM UM BIORREATOR PERFEITAMENTE MISTURADO

Ana Carolina Borges Silva[1]; José Waldir de Sousa Filho[2]
[1] Universidade Federal de Uberlândia
[2] Universidade de Uberaba
carolina.borges87@gmail.com, josewaldir.engenharia@gmail.com

Resumo

Devido à crescente demanda de produtos originados da fermentação e a busca constante de melhorias neste processo, torna-se necessário a incorporação de inovações e tecnologias que aumentem a eficiência na produção e redução progressiva do tempo gasto na geração do produto e na quantidade de biomassa e substrato utilizados. Nesta pesquisa foi realizada uma simulação de um processo fermentativo em um reator bioquímico perfeitamente misturado, através da implementação do modelo matemático na ferramenta computacional *Maple 17*. O modelo matemático proposto foi encontrado através dos balanços materiais para a biomassa e substrato, considerando-se a cinética empregada pelos Modelos de Monod e de Inibição pelo substrato e os parâmetros previamente definidos. Foram realizadas comparações entre os modelos e as taxas de reação, e foram determinados os estados estacionários para três taxas de diluição diferentes, com valores baixo, médio e alto. Posteriormente foi feita a simulação dinâmica do processo, para os dois modelos, aplicando as taxas de diluição e os estados estacionários encontrados. Como resultado, observou-se que no Modelo de Inibição pelo Substrato, as concentrações de biomassa e de substrato convergiram para os estados estacionários nas duas condições iniciais determinadas, quando a taxa de diluição empregada foi de 0,30 h^{-1}. Para a taxa de 0,45 h^{-1} a conversão ocorreu somente para a segunda condição inicial. No Modelo de Monod, as concentrações convergiram para os estados estacionários somente quando empregada a taxa de diluição de 0,30 h^{-1}. Assim, o Modelo de Inibição pelo Substrato possui resultados mais satisfatórios para as condições estudadas neste trabalho.

Palavras-chave: Reator Bioquímico. Modelo de Monod e de Inibição pelo Substrato. Simulação de processos fermentativos.

1 Introdução

Recentemente, estão sendo estudadas novas tecnologias com a finalidade de aperfeiçoar os processos industriais existentes, além de desenvolver novos processos que permitam a minimização do consumo de energia e dos custos.

O processo de fermentação continua possui como principal característica o volume constante, pois sua alimentação de meio de cultura é continua a uma vazão constante e, assim o volume é mantido constante devido a retirada continua do caldo fermentado. Assim sendo, a manutenção do volume permite que o sistema atinja uma condição de estado estacionário, ou regime permanente, sendo esta condição na qual variáveis de estado, como a concentração, permanecem constantes durante o tempo de operação do sistema (FACCIOTTI, 2001).

Caracteriza-se um reator perfeitamente misturado aquele no qual a temperatura, a concentração ou a velocidade de reação do reator não dependem do tempo ou da posição. Consequentemente, a temperatura e a concentração são as mesmas na saída e em qualquer ponto do tanque (FACCIOTTI, 2001).

Devido a isso, o processo continuo traz vantagens relevantes em relação ao processo em batelada, em especial o aumento da produtividade, sendo que o controle do processo auxilia na manutenção da operação em estado estacionário, simulando as melhores condições para o processo escolhido.

Neste intuito, a modelagem matemática e simulação computacional de processos são importantes ferramentas que auxiliam o entendimento do funcionamento dos biorreatores, sendo bastante úteis no estudo de aumento de escala dos mesmos (FERREIRA, 2003).

O estudo de todos os fatores que podem causar interferências ou instabilidades no biorreator pode ser facilitado através da realização da modelagem através de simulações computacionais, permitindo a verificação do comportamento do reator em diferentes condições de operação.

Este trabalho tem por objetivo, simular um processo fermentativo em um reator bioquímico perfeitamente misturado e propor um modelo matemático que melhor descreva o comportamento do biorreator. Pretende-se também realizar a simulação dinâmica do processo através da implementação dos modelos matemáticos encontrados na ferramenta computacional *Maple 17*.

2 Materiais e Métodos

Utilizou-se parâmetros para o modelo de *Monod* e também para o modelo de inibição pelo substrato, sendo os valores baseados em um processo fermentativo de produção de etanol descrito por *Bequette* (1998) e descriminados na tabela abaixo:

Tabela 1 – Parâmetros do Modelo de Monod e do Modelo de Inibição pelo Substrato

	Modelo de Monod	**Modelo de Inibição pelo Substrato**
$\mu_{máx}$	0,53 h^{-1}	0,53 h^{-1}
K_m	0,12 g/L	0,12 g/L
K_1	-----	0,45 L/g
γ	0,4	0,40
X_{2f}	4,0 g/L	4,0 g/L

Fonte: *Bequette, 1998*

Através da realização dos balanços de massa, foram definidos os modelos matemáticos descritos abaixo pelas equações (1) e (2) para a biomassa e para o substrato, respectivamente.

$$\frac{d_{X_1}}{d_t} = X_1(\mu - D) \quad (1)$$

$$\frac{d_{X_2}}{d_t} = D\left(X_{2f} - X_2\right) + \mu\frac{X_1}{\gamma} \quad (2)$$

Posteriormente foi feita a simulação do processo fermentativo, utilizando a simulação estática, pois esta diz respeito a sistemas que estão operando em regime permanente, ou seja, que independem do tempo.

3 Resultados

Inicialmente foi realizada uma comparação entre os modelos e também entre as taxas de reação para baixas e altas concentrações de substrato (X_2) e posteriormente calculados os estados estacionários de ambos os modelos matemáticos para três taxas de diluição distintas, sendo empregada a ferramenta "*solve*". Logo após, foi realizada a simulação dinâmica do processo

utilizando o modelo de Monod e o modelo de inibição pelo substrato, sendo o cálculo feito para as três taxas de diluição.

Foram estabelecidos os pontos críticos e os estados estacionários, considerando três taxas de diluição distintas: uma média com valor de 0,30 h^{-1}, uma baixa com valor de 0,15 h^{-1} e uma alta com valor de 0,45h^{-1}, para ambos os modelos. Abaixo são demonstrados os gráficos para as taxas que atingiram os estados estacionários nos dois modelos propostos.

Figura 1: Modelo de Monod: Comparação entre as Concentrações de Biomassa para cada Condição Inicial e seu Estado Estacionário para D = 0,30 h^{-1}

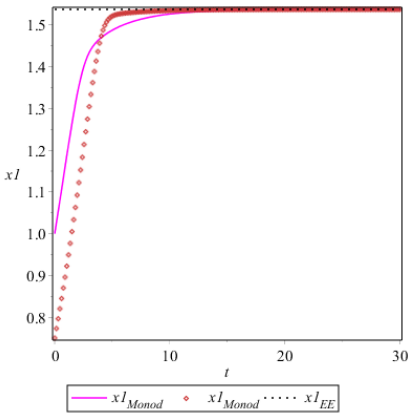
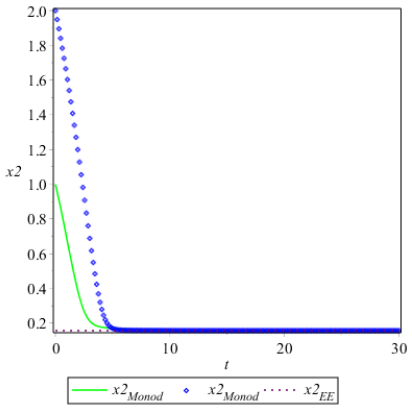


Figura 2: Modelo de Monod: Comparação entre as Concentrações de Substrato para cada Condição Inicial e seu Estado Estacionário para D = 0,30 h^{-1}



Assim sendo, após a análise dos gráficos descritos acima, foi possível observar que, para ambas as condições iniciais aqui consideradas na simulação com o Modelo de Monod, as concentrações de células (X_1) e de substrato (X_2), atingiram os valores de estado estacionário (x1ee = 1,5373913043 x2ee = 0,1565217391), sendo estabelecido o mesmo tempo para todas as situações acima descritas.

Figura 3: Modelo de Inibição pelo Substrato para CI1: Comparação entre a Concentração de Biomassa (X_1) e de Substrato (X_2) e seu Estado Estacionário para D = 0,30 h^{-1}

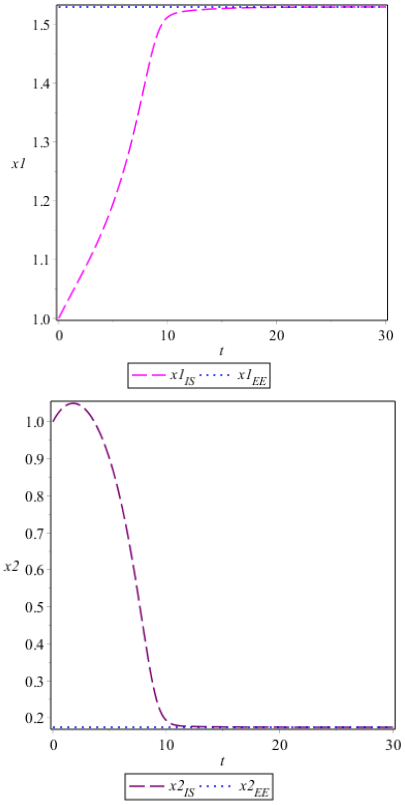
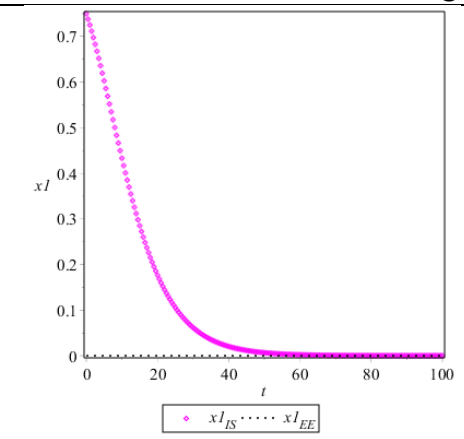
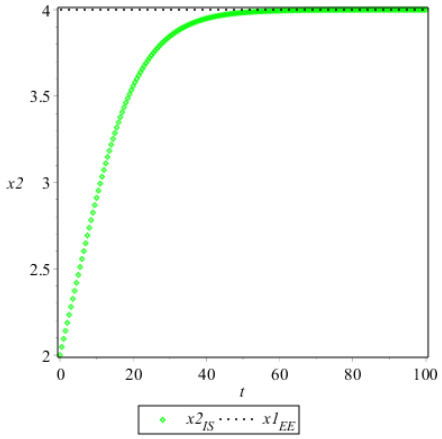


Figura 4: Modelo de Inibição pelo Substrato para CI2: Comparação entre a Concentração de Biomassa (X_1) e de Substrato (X_2) e seu Estado Estacionário para D = 0,30 h^{-1}





Foi possível notar, através da simulação para o Modelo de Inibição pelo Substrato com a condição inicial [x1(0) = 0.75 e x2(0) = 2], que a condição de estado estacionário atingida foi x1ee = 0, x2ee = 4. De acordo com Bequette (1998), para esta faixa de ponto crítico, a solução encontrada é estável para o Modelo de Inibição pelo Substrato.

4 Discussão

Após a realização dos cálculos para os estados estacionários para cada ponto crítico determinado, é possível observar que quando operado a baixas taxas de diluição, o modelo de inibição pelo substrato se comporta como o modelo de *Monod*. Em taxas de diluição médias, para qualquer condição inicial, a convergência se dará para um dos dois estados estacionários estáveis. O comportamento do modelo de inibição pelo substrato será bastante diferente do modelo de Monod.

Dependendo das condições iniciais, o reator convergirá para uma condição de alta conversão ou então para uma condição de lavagem (“washout”). Se for desejado operar na condição de estado estacionário instável, será necessário utilizar um controle “feedback”.

À altas taxas de diluição, ambos os modelos possuem somente uma solução com significado, sendo esta a condição de lavagem. O escoamento é muito alto e o tempo de residência é muito baixo, e tais características não permitem que ocorra crescimento celular. Quanto maior for a taxa de diluição aplicada, maior será a probabilidade dos modelos de Monod e de Inibição pelo Substrato apresentarem um único estado estacionário. Tal estado é conhecido como “feasible” e é correspondente à condição de “washout”.

Ao final da realização das simulações dinâmicas para as três faixas de taxa de diluição, notou-se que para a taxa de diluição baixa, na condição inicial 1, as duas concentrações convergem para outro estado estacionário, distinto daquele encontrado, enquanto que para a segunda condição inicial, ambas as concentrações não atingem os estados estacionários. Para uma taxa de diluição alta, somente para a segunda condição inicial, as concentrações de biomassa e substrato convergiram para o estado estacionário desejado.

Para uma taxa de diluição média, o comportamento desejado foi descrito em ambas as condições iniciais propostas, para as concentrações de biomassa e de substrato.

5 Conclusão

Através dos resultados obtidos foi possível concluir que as hipóteses de que o reator é perfeitamente misturado e de que o volume reacional constante, consideradas para o processo descrito neste trabalho, facilitaram a implementação dos modelos matemáticos

no software utilizado, tornando-os como verdadeiros.

O modelo de Monod, escolhido para esta pesquisa, possui a mesma forma da isoterma de adsorção de Langmuir e da taxa de reação padrão para reações catalisadas por enzimas com um único substrato, o que acaba caracterizando a cinética de Michaelis – Menten e promovendo uma simplificação nos modelos matemáticos que foram desenvolvidos.

Os modelos trabalhados, de Monod e de Inibição pelo Substrato apresentaram bons resultados, sendo que a comparação entre suas taxas de reação (r) demonstram que para altas concentrações de substrato, seu valor depende somente da concentração da biomassa o que comprova que nestes casos o modelo de torna de ordem zero, ou seja, a taxa de crescimento especifica alcança seu ponto máximo. Em contrapartida, se a concentração de substrato é baixa, a taxa de reação (r), depende de ambas as concentrações e o modelo se torna de primeira ordem.

O cálculo dos estados estacionários demonstrou que para altas taxas de diluição, torna-se mais fácil atingir pontos críticos que não possuem sentido físico, demandando maior esforço computacional e também cuidados excessivos com a alimentação e com o volume do reator.

Nas simulações dinâmicas realizadas para ambos os modelos, recomenda-se para o Modelo de Monod que o reator opere sob uma taxa de diluição média, pois somente neste caso as concentrações conseguem convergir para os estados estacionários encontrados.

Para o Modelo de Inibição do Substrato, os estados estacionários são atingidos em três casos diferentes. O primeiro é para a taxa de diluição média, na qual ambas as concentrações convergem para os estados estacionários encontrados, nas duas condições iniciais propostas. Além disso, para a taxa de diluição alta, as concentrações de biomassa e substrato conseguem convergir para o estado estacionário na segunda condição inicial proposta.

Com isso, aconselha-se para este estudo, que o reator seja operado com uma taxa de diluição média e sob o Modelo de Inibição pelo Substrato.

Referências

BEQUETTE, B.W. **Process Dynamics: Modeling, Analysis and Simulations**. Prentice Hall PTR, 1998.

FACCIOTTI, M. C. R. **Fermentação Contínua**. In: Schmidell *et al*. (Coord). Biotecnologia Industrial: Engenharia Bioquímica. São Paulo: Edgar Blücher, p. 223-236, 2001.

FERREIRA, R. M. **Modelagem e Simulação de Biorreatores tipo Torre Operando com Leveduras Auto Imobilizáveis para a Produção de Etanol**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas - SP, 2003.