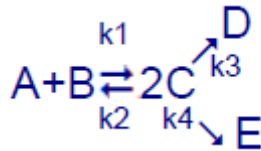


Modelagem e simulação de processos biotecnológicos
Equações e sistemas de equações diferenciais ordinárias/simulação e
otimização

Exemplos (1 e 2 gentilmente cedidos pelo prof. Félix Monteiro Pereira, EEL-USP):

1. Simulação e otimização de reator em batelada:

Considere que um reator industrial (em batelada) processe as seguintes reações:



Sendo inicialmente adicionados 1 kmol/m³ de A e 0,8 kmol/m³ de B, e considerando que a cinética das reações obedeça às seguintes equações:

$$\begin{aligned} r_1 &= k_1 * C_A * C_B \\ r_2 &= k_2 * C_C^2 \\ r_3 &= k_3 * C_C^2 \\ r_4 &= k_4 * C_C^2 \end{aligned}$$

Considerando as constantes cinéticas em m³/((kmol*h) iguais a: k₁=10; k₂=1; k₃=5 e k₄=10.

Para a otimização do processo, foi feita uma análise financeira. Nessa análise, obteve-se a seguinte relação entre custo (C em reais) e tempo de reação (em horas) no reator:

$$C = 100 * e^t$$

Através de uma análise de mercado, obteve-se a seguinte expressão relacionando o preço de

venda (PV em reais) em função da concentração do produto de interesse (no caso CE em kmol/m³)

$$PV = 1000 * CE$$

Portanto o lucro, é:

$$L = PV - C = 1000 * CE - 100 * e^t$$

a) plote as curvas CA, CB, CC, CD e CE em função do tempo(em horas) até o final da reação.

b) Estime o tempo economicamente ótimo de reação.

c) Em qual intervalo de concentração de E você poderá atender ao cliente sem ter prejuízo?

Justifique a sua resposta.

2. Crescimento Microbiano em Biorreator Batelada

Considere o crescimento de uma determinada bactéria em um biorreator batelada. Sendo a concentração inicial de microrganismos igual a X_0 e a de substrato S_0 , se considerarmos que apenas um substrato limite o crescimento, que a quantidade de substrato consumida para a manutenção celular e para a formação de produtos seja insignificante, e que não haja inibição ao crescimento celular, a velocidade específica de crescimento celular (μ_x) pode ser descrita pelo modelo de Monod:

$$\mu_x = r_x/X = \mu_{\text{máx}} \cdot S/(K_s + S) \quad (1)$$

onde:

r_x = velocidade de crescimento celular g/(L.h);

X = concentração de bactérias (g/L);

t = tempo (h);

S = concentração de substrato (g/L);

$\mu_{\text{máx}}$ = velocidade específica máxima de crescimento (h^{-1});

K_s = concentração de substrato quando $\mu_x = \mu_{\text{máx}}/2$ (g/L).

A velocidade específica de consumo de substrato (μ_s) é dada por:

$$\mu_s = r_s/X = (1/Y_{x/s}) \mu_x \quad (2)$$

onde:

$Y_{x/s}$ = conversão de substrato em células;

r_s = velocidade de consumo de substrato g/(L.h);

Considerando $X_0 = 0,5 \text{ g/L}$; $S_0 = 50 \text{ g/L}$; $\mu_{\text{máx}} = 0,5 \text{ h}^{-1}$; $K_s = 1 \text{ g/L}$; $Y_{x/s} = 0,5$ (grama de células/grama de substrato), plote o gráfico das concentrações de substrato e células (X e S) no reator, em função do tempo, até que todo o substrato seja consumido.

3. Um paraquedista de massa (m) 80 kg salta e, antes de abrir o paraquedas, deverá permanecer em queda livre por “ n ” metros. Sabendo-se que, neste caso, a equação que indica sua altura (posição vertical “ y ”) é a que segue, faça um gráfico de sua altura em função do tempo até o momento de abrir o paraquedas. Considere, neste exercício, “ n ” = 600m.

$$m \frac{d^2y}{dt^2} = -mg + \frac{4}{15} V^2$$

em que:

t é o tempo

g é a aceleração da gravidade (usar 9.81 m/s^2)

V é a velocidade do paraquedista.