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:

$$r_1 = k_1 * C_A * C_B$$

 $r_2 = k_2 * C_C^2$
 $r_3 = k_3 * C_C^2$
 $r_4 = k_4 * C_C^2$

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 X0 e a de substrato S0, 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 (µx) pode ser descrita pelo modelo de Monod:

```
\mu x = rx/X = \mu m \acute{a} x * S/(ks + S) (1)
```

onde:

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

X= concentração de bactérias (g/L);

t=tempo (h);

S=concentração de substrato (g/L);

µmáx=velocidade específica máxima de crescimento (h⁻¹);

ks=concentração de substrato quando µx=µmáx/2 (g/L).

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

 $\mu s = rs/X = (1/Yx/s) \mu x (2)$

onde:

Yx/s= conversão de substrato em células;

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

Considerando $X_0=0.5g/L$; $S_0=50g/L$; μ máx=0.5h⁻¹; ks=1g/L; Yx/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 d²y/dt²=-mg+4/15 * V²
em que:
t é o tempo
g é a aceleração da gravidade (usar 9.81 m/s²)
V é a velocidade do paraquedista.
```