

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM REATOR BIOLÓGICO OPERANDO EM BATELADA: EFEITOS DA VARIAÇÃO DE PARÂMETROS CINÉTICOS NOS PERFIS DE CONCENTRAÇÃO

Thiago Santos de Almeida Lopes¹; Camila Bonfim Miranda²; Isabella Vieira Santos³; Adriano Oliveira da Silva⁴; Weruska Brasileiro Ferreira⁵

¹*Universidade Estadual da Paraíba, Dept de Engenharia Sanitária e Ambiental – thiagosantos_al@outlook.com*

²*Universidade Estadual da Paraíba, Dept de Engenharia Sanitária e Ambiental – camilabonfimm@gmail.com*

³*Universidade Estadual da Paraíba, Dept de Engenharia Sanitária e Ambiental – isabellaa.santos@hotmail.com*

⁴*Universidade Estadual da Paraíba, Dept de Engenharia Sanitária e Ambiental – adriano_able@hotmail.com*

⁵*Universidade Estadual da Paraíba, Dept de Engenharia Sanitária e Ambiental – weruska.brasileiro@pq.cnpq.br*

RESUMO: Os reatores biológicos representam todo e qualquer local onde células e enzimas realizam a conversão de substrato em produtos e o seu estudo envolve o balanço de massa das diferentes espécies químicas e biológicas presentes. Na operação de biorreatores no modo descontínuo, todos os componentes são inseridos no biorreator no início do processo e não há retirada antes do término do ciclo completo de transformação. Como vantagem, a aplicação do uso em batelada apresenta maior segurança com relação a problemas de manutenção e condições de assepsia, além de grande flexibilidade de operação, o que o torna bastante interessante para diversos fins na área da Engenharia Sanitária e Ambiental, desde sua aplicação na depuração de esgotos sanitários até sua aplicação na obtenção de metabólitos para produção de biocombustíveis. Aliada as características dos biorreatores, a modelagem matemática surge como poderosa ferramenta para o estudo e entendimento do comportamento dos processos biológicos, permitindo a avaliação de mudanças, como alterações nos parâmetros operacionais, visando a otimização dos sistemas. Nesse sentido, este trabalho teve como objetivo realizar a modelagem e simulação de um reator biológico operando em batelada, analisando-se as variáveis de estado (células, substrato e produto) e os efeitos da variação de parâmetros cinéticos, que exerceram influência significativa nos perfis de concentração.

Palavras-chave: Modelagem matemática, Reatores biológicos, Reator em batelada, Perfis de concentração, Parâmetros cinéticos.

1. INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

Os reatores biológicos representam todo e qualquer local onde células e enzimas realizam a conversão de substrato em produtos e o seu estudo envolve o balanço de massa das diferentes espécies químicas e biológicas presentes, além da observação de aspectos importantes como a transferência de oxigênio, agitação e mistura, manutenção das condições de esterilidade e a manutenção da produtividade adequada (FILHO, 2006). Existem diversos tipos de reatores utilizados industrialmente, no entanto, neste trabalho, será abordado o reator biológico em batelada (ou descontínuo).

A operação de biorreatores no modo descontínuo é caracterizada pela alimentação de todo o meio de cultivo a uma determinada vazão não necessariamente constante, de modo que o biorreator tenha um período de enchimento rápido em relação à etapa de reação com volume constante, na qual se tem a ocorrência das transformações de interesse, definindo, assim, o tempo da batelada. Desta forma, as variáveis que caracterizam o estado do sistema (concentrações de células, de substrato e de produto) permanecem variáveis ao longo do período de operação do biorreator (RODRIGUES et al., 2006).

O esquema de um biorreator operando de modo descontínuo está apresentado na Figura 1, onde se admite que o biorreator seja isotérmico (com controle de temperatura por circulação de água na camisa), volume constante e perfeitamente agitado (composição interna homogênea).

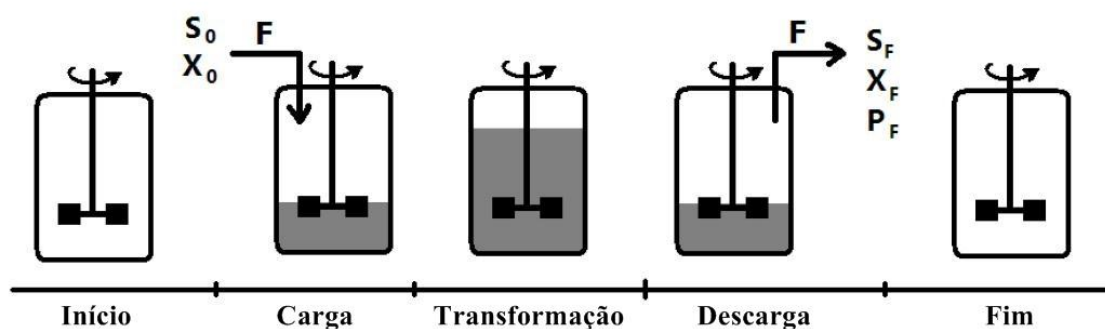


Figura 1 – Esquema de um biorreator descontínuo sem o reciclo de biomassa

De modo geral, todos os componentes são inseridos no biorreator no início do processo e não há retirada antes do término do ciclo completo de transformação. Como vantagem, a aplicação do uso em batelada apresenta maior segurança com relação a problemas de manutenção e condições de assepsia, uma vez que, após o término de cada batelada, pode-se fazer a esterilização do biorreator e os controles necessários no inóculo. Além disso, a operação em batelada apresenta grande flexibilidade de operação (JÚNIOR et al., 2015).

Como desvantagens, a operação descontínua pode levar a baixos rendimentos e/ou produtividades, quando o substrato é adicionado de uma só vez no início do processo, pois este pode exercer efeitos de inibição, repressão ou desviar o metabolismo celular a produtos que não interessam. Além disso, este tipo de operação apresenta tempos mortos, tais como tempo de carga e descarga e período correspondente à lavagem e esterilização do biorreator (JÚNIOR et al., 2015).

O reator em batelada pode ser utilizado para diversos fins na área da Engenharia Sanitária e Ambiental, desde sua aplicação para a depuração de esgotos sanitários (realizando-se de modo sequencial as diversas operações unitárias do tratamento) até sua aplicação na produção de biocombustíveis (utilizando-se como matéria-prima os produtos formados no metabolismo de microrganismos específicos, desenvolvidos no reator). No entanto, é inviável testar

experimentalmente todas as possíveis condições operacionais e escalas dos processos em análise, para determinar as condições economicamente ótimas do sistema. Desse modo, a modelagem matemática surge como poderosa ferramenta para o estudo e entendimento do comportamento dos processos biológicos, pois permite representar através de equações matemáticas as transformações bioquímicas que ocorrem nos mesmos.

O objetivo principal da modelagem matemática e simulação, como ferramenta do desenvolvimento tecnológico de processos biológicos, é prever o comportamento dinâmico e estacionário do processo, inclusive em condições não testadas empiricamente, possibilitando a determinação das condições operacionais economicamente ótimas do sistema, auxiliando no projeto de algoritmos de controle, no qual o modelo matemático formulado passa a ser parte integrante do processo (RODRIGUES et al., 2006).

A modelagem matemática também permite avaliar mudanças nos processos biológicos (como alterações nos parâmetros operacionais) visando sua otimização. Nesse sentido, este trabalho teve como objetivo realizar a modelagem e simulação de um reator biológico operando em batelada, analisando-se as variáveis de estado (células, substrato e produto) e a influência da variação de parâmetros cinéticos nos perfis de concentração.

2. METODOLOGIA

Para a realização do estudo, inicialmente foram obtidos os balanços materiais de biomassa, substrato e produto para o reator operando em batelada. Sabendo-se que a forma generalizada para o balanço material é Acúmulo = (Entrada + Geração) – (Saída + Consumo), obtiveram-se as equações apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 – Equações de estado do biorreator operando de modo descontínuo

Equações de estado	Biomassa	Substrato	Produto
Balanço material ¹	$\frac{d(C_X \cdot V)}{dt} = v_X \cdot V$	$-\frac{dC_S}{dt} = \mu_S \cdot C_X$	$\frac{dC_P}{dt} = v_P$
Velocidades específicas	$\mu = \mu_X = \frac{v_X}{C_X}$	$\mu_S = \frac{\mu_X}{Y_{X/S}}$	$\mu_P = \frac{v_P}{C_X}$
Balanço material ²	$\frac{dC_X}{dt} = \mu_X \cdot C_X$	$-\frac{dC_S}{dt} = \frac{1}{Y_{X/S}} \cdot \mu$	$\frac{dC_P}{dt} = \mu_P \cdot C_X$
Produtividade / Demanda volumétrica	$Pr_X = \frac{C_X - C_{X0}}{t_{Processo}}$	$De_S = \frac{C_{S0} - C_S}{t_{Processo}}$	$Pr_P = \frac{C_P - C_{P0}}{t_{Processo}}$
Produção / Demanda total	$Prod_X = Pr_X \cdot V$	$Dem_S = De_S \cdot V$	$Prod_P = Pr_P \cdot V$

Onde o balanço material² foi obtido colocando-se o balanço material¹ em função das velocidades específicas. A Tabela 2 apresenta o significado de todos os termos utilizados na realização desses balanços.

Tabela 2 – Significados dos termos utilizados nas equações de estado do biorreator

Símbolo	Significado	Unidade
V	Volume de meio no biorreator	L
C_X	Concentração de biomassa	g-X/L
C_{X0}	Concentração inicial de biomassa	g-X/L
C_S	Concentração de substrato limitante	g-S/L
C_{S0}	Concentração inicial de substrato limitante	g-S/L
C_P	Concentração de produto genérico	g-P/L
C_{P0}	Concentração inicial de produto genérico	g-P/L
v_X	Velocidade de crescimento celular	g-X/L.h
v_P	Velocidade de produção de produto genérico	g-P/L.h
μ_X	Velocidade específica de crescimento celular	g-X/g-X.h ou h ⁻¹
μ_S	Velocidade específica de consumo de substrato	g-S/g-X.h ou h ⁻¹
μ_P	Velocidade específica de produção de produto genérico	g-P/g-X.h ou h ⁻¹
Y_{X/S}	Fator de conversão de substrato à biomassa	g-X/g-S
dC_X/dt	Taxa de acúmulo de biomassa	g-X/L.h
dC_S/dt	Taxa de acúmulo de substrato	g-S/L.h
dC_P/dt	Taxa de acúmulo de produto	g-P/L.h
Pr_X	Produtividade celular ou de biomassa	g-X/L.h
De_S	Demanda volumétrica de substrato	g-S/L.h
Pr_P	Produtividade de produto genérico	g-P/L.h
Prod_X	Produção celular de biomassa	g-X/h
Dem_S	Demanda total de substrato	g-S/h
Prod_P	Produção de produto genérico	g-P/h
t_{Processo}	Tempo de processo resultante da soma entre o tempo de batelada e o tempo de parada	h

Por se tratar de um problema de valor inicial, para a resolução do modelo do biorreator operado em batelada precisou-se conhecer os valores iniciais das variáveis de estado, ou seja, C_{X0}, C_{S0} e C_{P0}.

Com relação à cinética de formação do produto, admitiram-se três formas: associada ao crescimento, não associada ao crescimento e parcialmente associada ao crescimento, como apresentado na Tabela 3.

Tabelas 3 – Cinéticas de formação de produto no biorreator operando em batelada

Cinética de formação de produto	Associada ao crescimento	Não associada ao crescimento	Parcialmente associada ao crescimento
Velocidade específica de produção	$\mu_P = \alpha + \mu$	$\mu_P = \beta$	$\mu_P = \alpha \cdot \mu + \beta$

Onde α e β são constantes cinéticas (adimensional e g-P/g-X.h ou h⁻¹).

Após a obtenção dos balanços materiais de biomassa, substrato e produto para o reator operando em batelada, e da cinética de formação de produto associada, não associada e parcialmente associada ao crescimento, admitiu-se o modelo proposto por Monod, como apresentado na Tabela 4, para obtenção dos perfis de C_X , C_S e C_P . Em seguida, utilizou-se o método de Euler para resolução das equações, uma vez que o modelo cinético de Monod é caracterizado matematicamente como não-linear. A aplicação do método de Euler encontra-se na Tabela 5.

Tabela 4 – Balanços materiais das variáveis de estado admitindo-se o modelo de Monod

Modelo de Monod	Variáveis de estado	Balanços admitindo Monod
	Biomassa	$\frac{dC_X}{dt} = \mu_{max} \cdot \frac{C_S}{K_S + C_S} \cdot C_X$
	Substrato	$-\frac{dC_S}{dt} = \mu_{max} \cdot \frac{C_S}{K_S + C_S} \cdot \frac{1}{Y_{X/S}} \cdot C_X$
$\mu = \mu_{max} \cdot \frac{C_S}{K_S + C_S}$	Produto (associado ao crescimento)	$\frac{dC_P}{dt} = \left(\alpha + \mu_{max} \cdot \frac{C_S}{K_S + C_S} \right) \cdot C_X$
	Produto (não associado)	$\frac{dC_P}{dt} = \beta \cdot C_X$
	Produto (parcialmente associado)	$\frac{dC_P}{dt} = \left(\alpha \cdot \mu_{max} \cdot \frac{C_S}{K_S + C_S} + \beta \right) \cdot C_X$

Onde μ_{max} corresponde à velocidade específica máxima de crescimento (g-X/g-X.h ou h⁻¹) e K_S é uma constante cinética (g-S/L) que representa a afinidade do organismo para o nutriente, uma vez que corresponde à concentração do substrato limitante para a qual a velocidade específica de crescimento é a metade do seu valor máximo (SCHMIDELL et al., 2001).

Os valores de μ_{max} e K_S dependem do organismo, do substrato limitante, do meio de cultivo e de fatores como temperatura e pH (METCALF & EDDY, 2015).

Tabela 5 – Perfis de concentração das variáveis de estado aplicando-se o Método de Euler

Variáveis de estado	Perfis de concentração (através do Método de Euler)
Biomassa	$C_X^{i+1} = \Delta t. \left(\mu_{max} \cdot \frac{C_S^i}{K_S + C_S^i} \cdot C_X^i \right) + C_X^i$
Substrato	$C_S^{i+1} = - \left[\Delta t. \left(\mu_{max} \cdot \frac{C_S^i}{K_S + C_S^i} \cdot \frac{1}{Y_{X/S}} \cdot C_X^i \right) \right] + C_S^i$
Produto (associado ao crescimento)	$C_P^{i+1} = \Delta t. \left[\left(\alpha + \mu_{max} \cdot \frac{C_S^i}{K_S + C_S^i} \right) \cdot C_X^i \right] + C_P^i$
Produto (não associado)	$C_P^{i+1} = \Delta t. (\beta \cdot C_X^i) + C_P^i$
Produto (parcialmente associado)	$C_P^{i+1} = \Delta t. \left[\left(\alpha \cdot \mu_{max} \cdot \frac{C_S^i}{K_S + C_S^i} + \beta \right) \cdot C_X^i \right] + C_P^i$

Admitiu-se também o modelo de crescimento celular proposto por Monod com consumo de substrato devido à manutenção das células e decaimento da biomassa devido à lise celular, pois a consideração destes dois fenômenos permite uma avaliação mais realista do comportamento do sistema. A Tabela 6 apresenta os perfis de concentração de C_X e C_S com consideração de decaimento celular e consumo de substrato para a manutenção celular.

Tabela 6 – Perfis de concentração considerando-se o decaimento e a manutenção celular

Variáveis de estado	Balanços materiais (equações de estado)	Perfis de concentração (através do Método de Euler)
Biomassa	$\frac{dC_X}{dt} = (\mu - K_D) \cdot C_X$	$C_X^{i+1} = \Delta t. \left[\left(\mu_{max} \cdot \frac{C_S^i}{K_S + C_S^i} - K_D \right) \cdot C_X^i \right] + C_X^i$
Substrato	$-\frac{dC_S}{dt} = \left(\frac{1}{Y_G} \cdot \mu + m_S \right) \cdot C_X$	$C_S^{i+1} = - \left\{ \Delta t. \left[\left(\frac{1}{Y_G} \cdot \mu_{max} \cdot \frac{C_S^i}{K_S + C_S^i} + m_S \right) \cdot C_X^i \right] \right\} + C_S^i$

Onde K_D é a velocidade específica de decaimento da biomassa ($g-X/g-X.h$ ou h^{-1}), Y_G é o fator de conversão utilizado especificamente de substrato a células ($g-X/g-S$) e m_S é a velocidade específica de manutenção celular ($g-S/g-X.h$ ou h^{-1}).

Após a obtenção de todos os perfis de concentração, analisou-se a influência da variação de parâmetros cinéticos nos mesmos, onde se estudaram os efeitos que a velocidade específica máxima de crescimento, a constante cinética K_S e as velocidades específicas de decaimento de biomassa e de manutenção celular exerceram sobre as concentrações de biomassa, assim como os efeitos que as constantes cinéticas α e β exerceram sobre as concentrações de produto.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A Figura 2 apresenta os perfis de C_X , C_S , C_P , X_S , v_X , μ_X , v_P , μ_P , Pr_X e Pr_P , admitindo os modelos cinéticos de Monod e de formação de produto associada, não associada e parcialmente associada ao crescimento, em função do tempo de batelada de um biorreator operado de modo descontínuo.

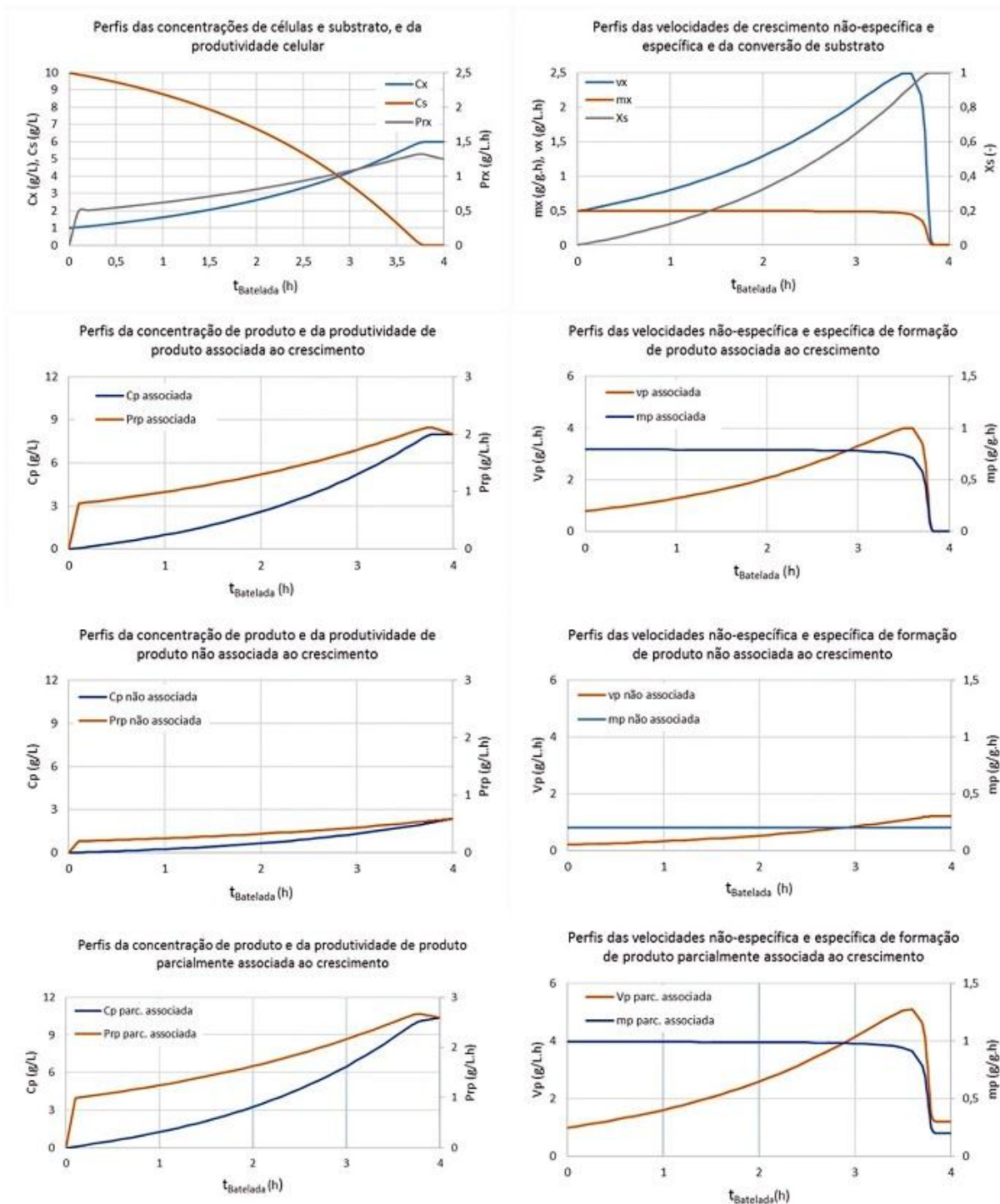


Figura 2 – Perfis de C_X , C_S , C_P , X_S , v_X , μ_X , v_P , μ_P , Pr_X e Pr_P para um biorreator em batelada

Os gráficos ilustrados na Figura 2, e os demais a seguir, foram obtidos utilizando como base os dados apresentados na Tabela 7.

Tabela 7 – Dados relacionados às variáveis de estado do biorreator operado em batelada

μ_{\max}	K_S	$Y_{X/S}$	C_{X0}	C_{S0}	C_{P0}	V	α	β
$0,5 \text{ h}^{-1}$	$0,1 \text{ g/L}$	$0,5$	$1,0 \text{ g/L}$	10 g/L	0 g/L	5 L	$1,6$	$0,2 \text{ h}^{-1}$

A Figura 3 apresenta os perfis de C_X , C_S , X_S , v_X , μ_X e Pr_X , admitindo o modelo cinético de Monod com considerações de decaimento e manutenção celular, em função do tempo de batelada de um biorreator operado de modo descontínuo.

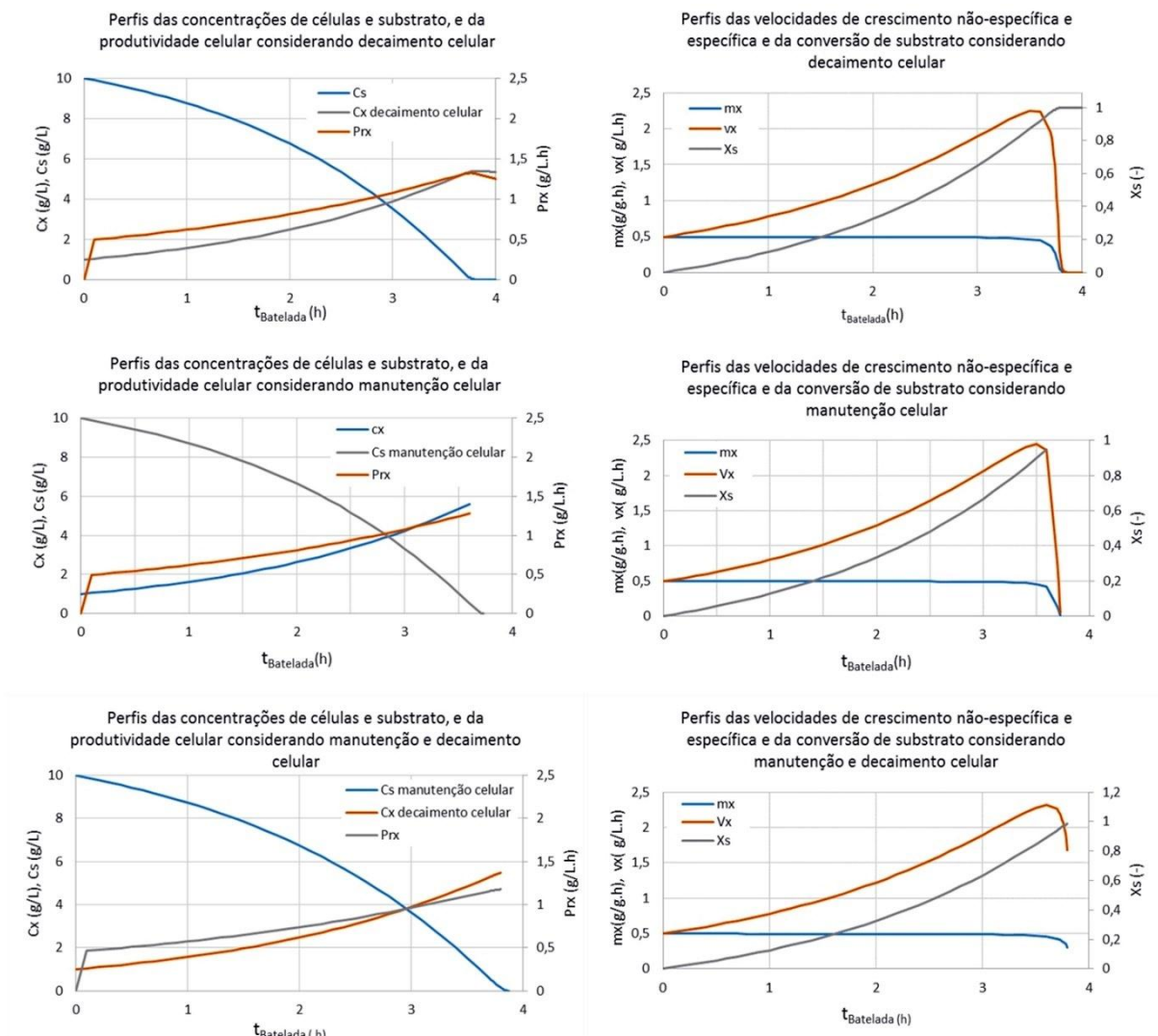


Figura 3 – Perfis de C_X , C_S , X_S , v_X , μ_X e Pr_X para um biorreator em batelada, com considerações de decaimento e manutenção celular ($k_D = m_S = 0,03 \text{ h}^{-1}$ e $Y_G = 0,5$)

A Figura 4 apresenta os perfis de C_P , v_P , μ_P e Pr_P admitindo os modelos cinéticos de Monod e de formação de produto associada, não associada e parcialmente associada ao crescimento, com considerações de decaimento e manutenção celular, em função do tempo de batelada de um biorreator operado de modo descontínuo.

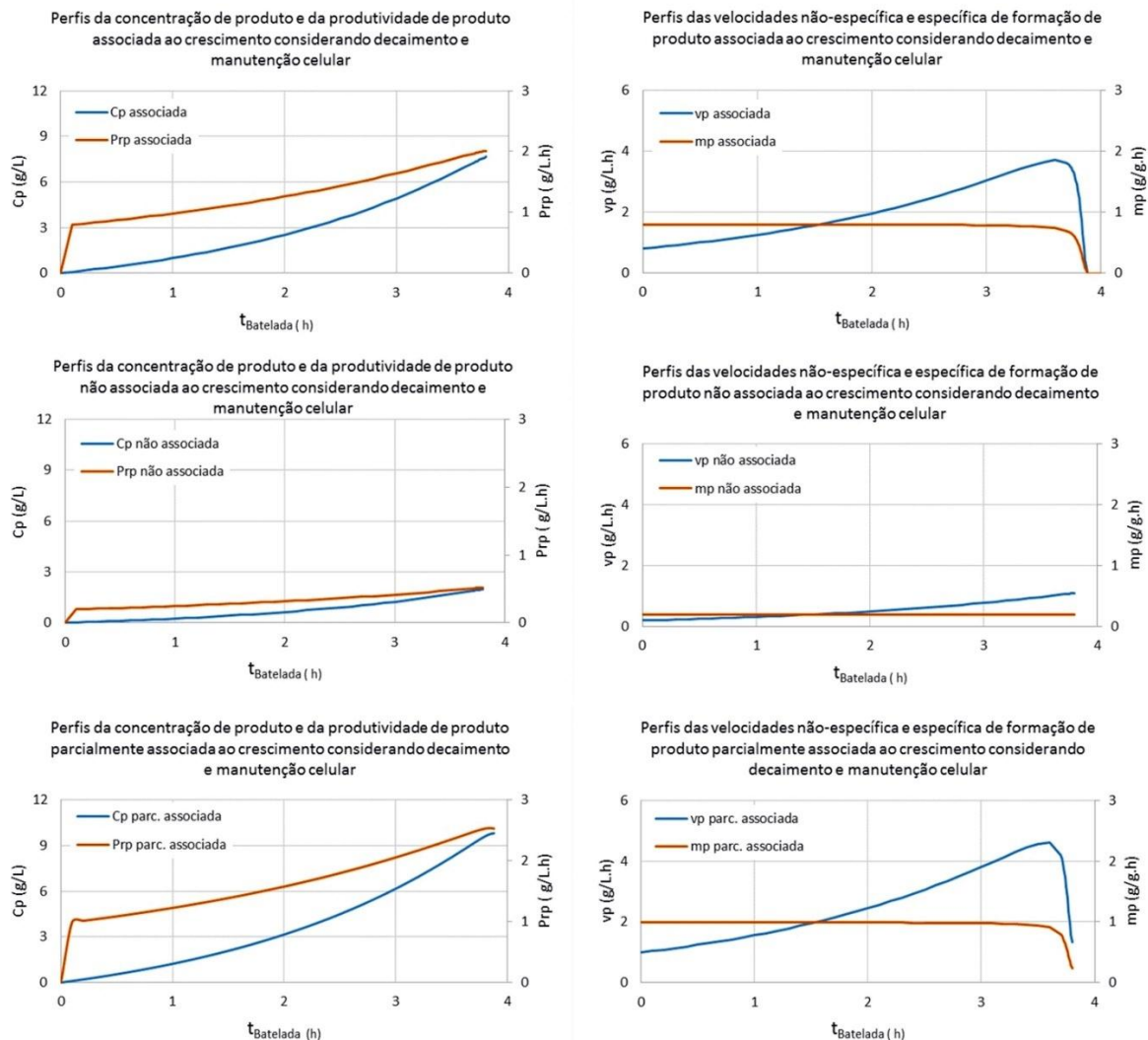


Figura 4 – Perfis de C_P , v_P , μ_P e Pr_P para um biorreator em batelada, com considerações de decaimento e manutenção celular ($k_D = m_S = 0,03 \text{ h}^{-1}$ e $Y_G = 0,5$)

Na Figura 5 está ilustrado o comportamento de C_x , C_s e C_p modificando-se a velocidade específica máxima de crescimento (μ_{max}). Observaram-se grandes variações no desempenho das concentrações de biomassa, substrato e produto, onde uma maior velocidade específica máxima de crescimento acarretou em um maior consumo de substrato (já que a célula utiliza o mesmo para se desenvolver) e maiores desenvolvimento de biomassa e formação de produto.

O comportamento das concentrações de biomassa, substrato e produto, com a variação da constante cinética K_s , também está representado na Figura 5. Com a análise dos dados foi possível perceber que os perfis das concentrações de biomassa e de produto não apresentaram mudanças significativas com as variações da constante cinética, no intervalo de 0,05 a 0,15 g/L. No entanto, percebeu-se que quanto maior o valor de K_s , maior o tempo de duração do substrato.

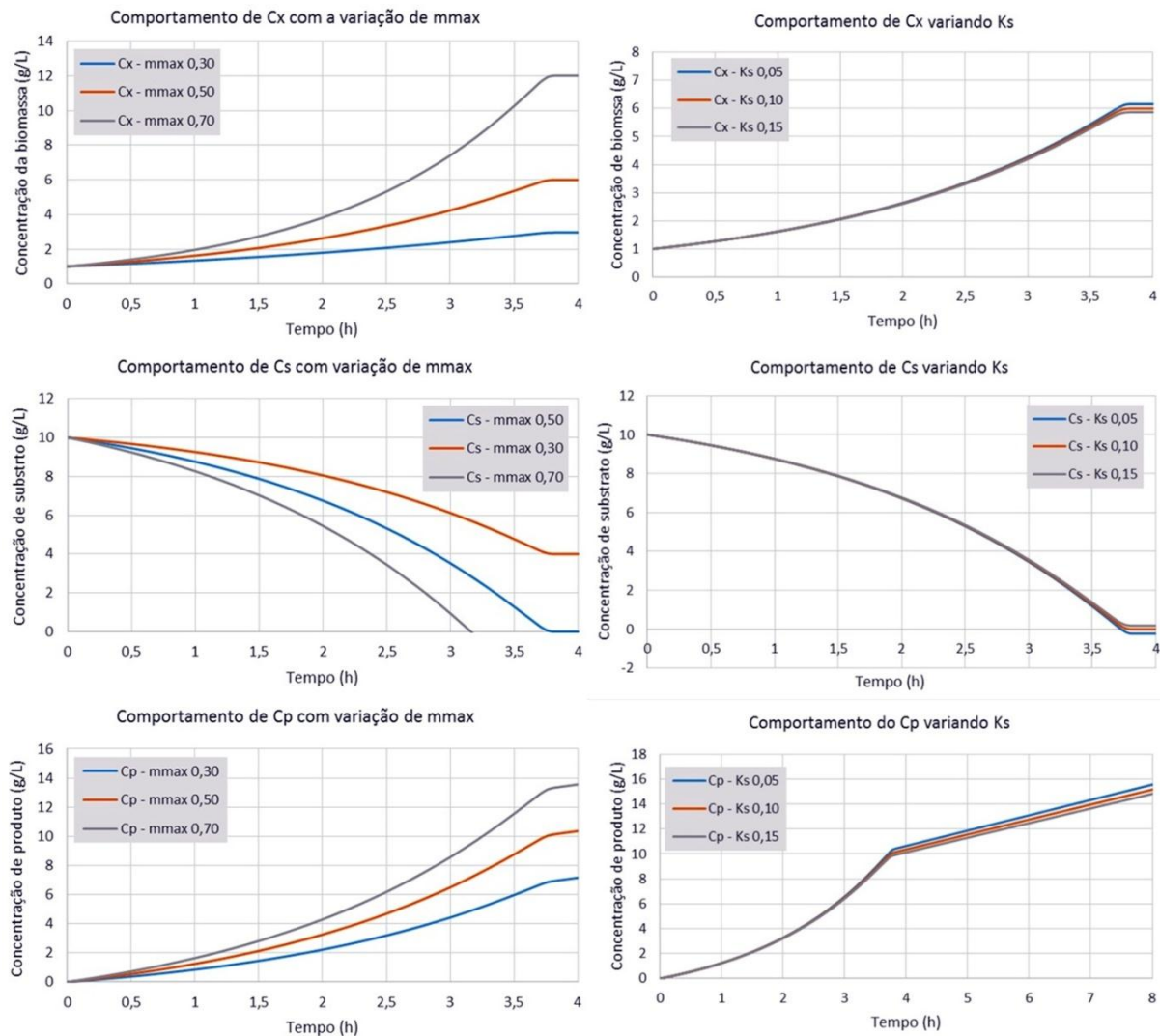


Figura 5 – Efeitos da variação de μ_{\max} e K_s nos perfis de C_x , C_s e C_p

A Figura 6 apresenta o comportamento do perfil de concentração de biomassa com relação à velocidade específica de manutenção celular (m_s), com consideração do decaimento e da manutenção celular. Observou-se que a variação de m_s ($0,01$ a $0,05 \text{ h}^{-1}$) não causou influência no perfil de C_x , porém, o seu aumento ocasionou maior consumo de substrato.

Analisando-se o comportamento de C_x com relação à velocidade específica de decaimento da biomassa (k_D), também ilustrado na Figura 6, com consideração do decaimento e da manutenção celular, percebeu-se que quanto maior o valor de k_D , menor a concentração de biomassa. Metcalf e Eddy (2015) explicaram que a velocidade específica de decaimento da biomassa inclui a perda de massa celular (devido à oxidação de produtos armazenados internamente para produzir energia para a manutenção celular), a morte de células e a predação por organismos locados em posições mais altas na cadeia alimentar.

A Figura 7 ilustra o comportamento dos perfis das concentrações de produto genérico, com a variação das constantes cinéticas que caracterizam sua geração (α e β), de forma parcialmente associada ao crescimento celular. Foi observado que aumentos de α e β influenciaram diretamente nos perfis de C_p , ocasionando também aumento das concentrações, conforme já esperado, uma vez que α e β são termos da velocidade específica de produção do produto genérico.

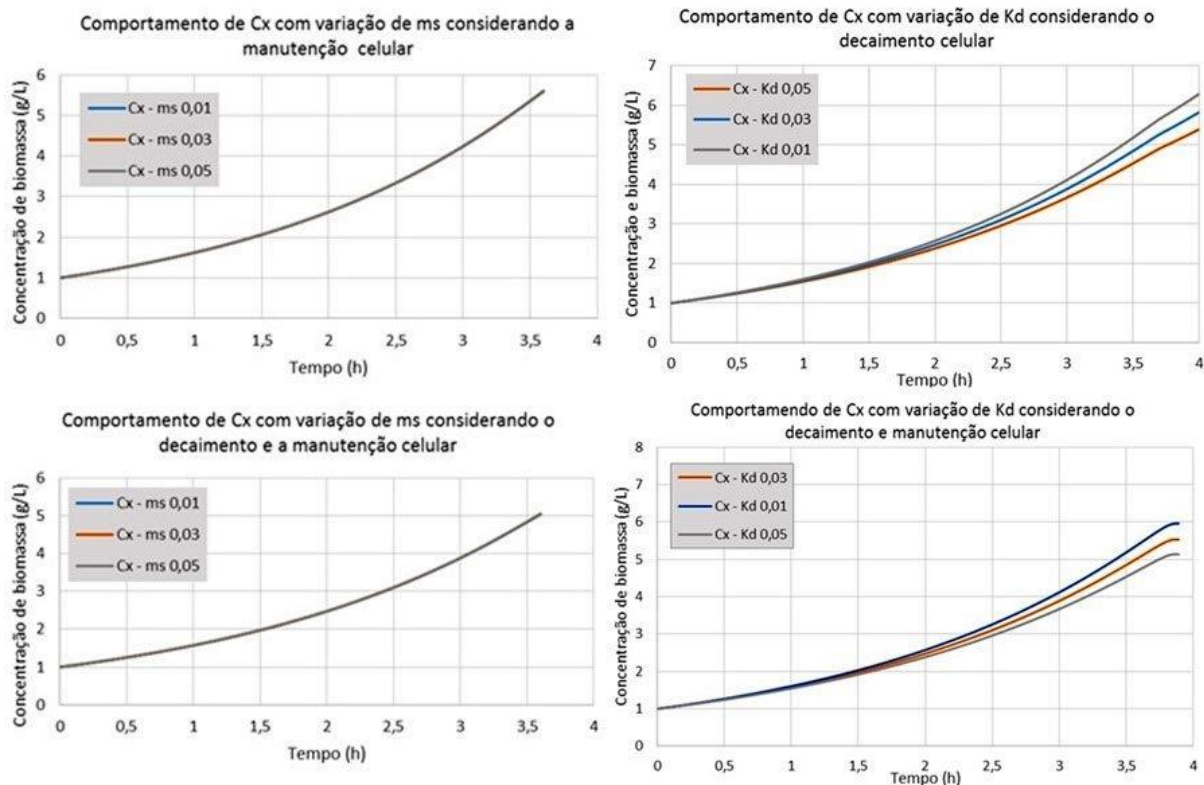


Figura 6 – Efeitos da variação de m_s e K_D no perfil de concentração de biomassa

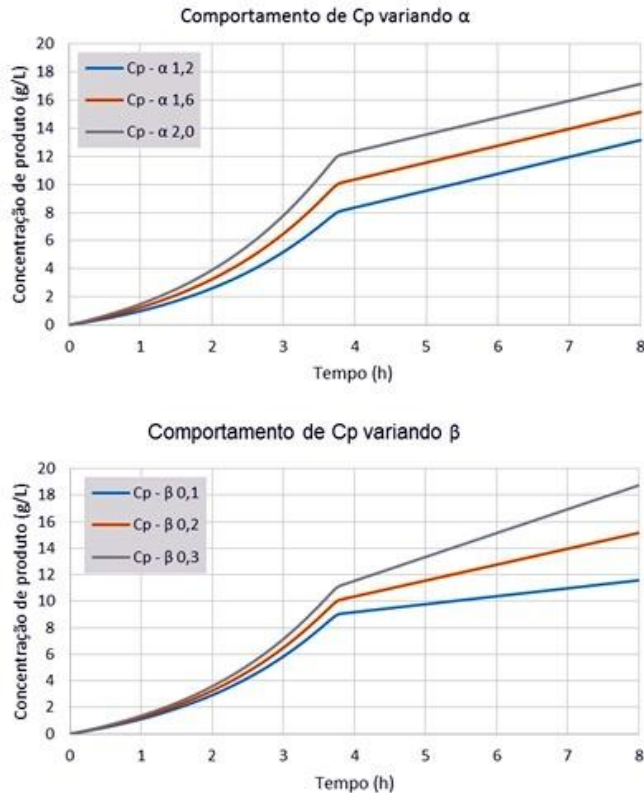


Figura 7 – Efeitos da variação de α e β nos perfis de concentração do produto

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Conhecendo-se as particularidades dos processos biológicos num biorreator operando em modo batelada e reconhecendo-se a importância da modelagem matemática como ferramenta que possibilita o estudo e o entendimento desses processos, visando aplicações na área da Engenharia Sanitária e Ambiental, pôde-se concluir que:

- As variáveis de estado (biomassa, substrato e produto) estão intimamente ligadas aos parâmetros cinéticos μ_{\max} , K_S , m_S , k_D , α e β ;
- A velocidade específica máxima de crescimento μ_{\max} está diretamente ligada à produção de biomassa e produto, assim como ao consumo de substrato;
- A constante cinética K_S , no intervalo de 0,05 a 0,15 g/L, não influenciou de forma significativa os perfis de concentração de biomassa e produto, no entanto, percebeu-se que seu aumento ocasionou uma maior duração do substrato no biorreator;
- Variações no valor de m_S dentro do intervalo de 0,01 a 0,05 h⁻¹ não causaram efeitos sobre os perfis de C_X e C_P , no entanto, quanto maior o seu valor, maior foi o consumo de substrato devido à manutenção celular;
- Com relação ao comportamento de C_X , o aumento de k_D resultou em menores concentrações de biomassa, devido ao decaimento celular;
- As variações de α e β influenciaram diretamente nos perfis de C_P , uma vez que são termos da velocidade específica de produção do produto genérico.

5. REFERÊNCIAS

FILHO, Ubirajara Coutinho. Reatores Biológicos. Universidade Federal de Uberlândia, 2006. Disponível em: <<http://www.ebah.com.br/content/ABAAAARH4AL/reatores-biologicos>>. Acesso em 7 de Maio de 2016.

JÚNIOR, Adalício Uzêda Antunes et al. Aplicação de ferramenta computacional para monitoramento do comportamento de um processo químico. **Blucher Chemistry Proceedings**, v. 3, n. 1, p. 1008-1018, 2015.

METCALF, Leonard; EDDY, Harrison P. **Tratamento de Efluentes e Recuperação de Recursos**. McGraw Hill Brasil, 2015.

RODRIGUES, José Alberto Domingues; RATUSZNEI, Suzana Maria; DAMASCENO, Leonardo Henrique Soares. Análise de Processos Biológicos. 2006. Disponível em: <<https://www.dropbox.com/s/rs7la3mzb7gn1xz/SHS%205731%20-%20Apostila%20-%20Vers%C3%A3o%202.0.PDF?dl=0>>. Acesso em 7 de Maio de 2016.

SCHMIDELL, Willibaldo et al. Biotecnologia industrial. **São Paulo**, v. 3, 2001.