

XII-046 - APLICAÇÃO DO MODELO DE MONOD NA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE UM REATOR BIOLÓGICO OPERANDO EM BATELADA

Igor Souza Ogata⁽¹⁾

Graduando em Engenharia Sanitária Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba. Graduando em Engenharia Elétrica pela Universidade Federal de Campina Grande. Técnico em Eletroeletrônica pelo SENAI – Prof. Stênio Lopes.

Abílio José Procópio Queiroz

Graduando em Engenharia Sanitária Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba. Graduando em Engenharia Civil pela Universidade Federal de Campina Grande.

Narcísio Cabral de Araújo

Graduando em Engenharia Sanitária Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba.

Pablo Luiz Fernandes Guimarães

Graduando em Engenharia Sanitária Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba. Graduando em Engenharia Civil pela Universidade Federal de Campina Grande.

Edson Cassio de Araujo Gomes

Graduando em Engenharia Sanitária Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba.

Endereço⁽¹⁾: Rua Coronel João Figueiredo, 78 - Bodocongó – Campina Grande - Paraíba - CEP: 58430-180 - Brasil - Tel: +55 (83) 8750-3292 - Fax: +55 (83) 3321-0967 - e-mail: **igor_ogata@hotmail.com**.

RESUMO

A partir de um reator biológico operando em batelada com os seguintes parâmetros iniciais, $V = 10L$, $\mu_{max} = 0,5h^{-1}$, $K_s = 0,25g/L$, $Y_{xs} = 0,5$, $\alpha = 1,0$, $\beta = 0,5h^{-1}$, $C_{xo} = 2,0 g/L$, $C_{so} = 25,0 g/L$ e $C_{po} = 0,0 g/L$ foi modelado através da fórmula de velocidade do crescimento celular e concentração do substrato limitante proposta por Monod e a formação de produto proposta por Leudeking-Piret, a influência dos parâmetros cinéticos μ_{max} , K_s e das concentrações iniciais C_{xo} e C_{so} no desenvolvimento do reator quanto as suas concentrações de biomassa, substrato e produto, cada parâmetro analisado foi aumentado e diminuído 5 vezes seu valor inicial, percebendo-se que o μ_{max} é diretamente proporcional ao consumo de substrato e inversamente à geração de produto, o K_s não tem influência significativa sobre o desenvolvimento do reator, o C_{xo} ao crescer aumenta consigo o consumo de substrato e ao diminuir tem ação sobre a queda do consumo de substrato, sem nenhuma interferência na formação de produto e por fim o C_{so} é diretamente proporcional a biomassa e a geração de produto. O aplicativo usado para auxiliar na geração de dados foi o Scilab 5.2 através do método numérico de Rugen-Kutta.

PALAVRAS-CHAVE: Modelagem Ambiental, Reator em Batelada, Modelo de Monod.

INTRODUÇÃO

Um modelo pode ser definido como uma representação simplificada da realidade de um sistema ou de parte de um sistema. Segundo RODRIGUES (p. 1, 2006), a modelagem tem a finalidade de analisar determinados fenômenos diminuindo os custos de implantação e operação, otimizando os mesmos com menores riscos a segurança da população. Das diversas formas de modelagem temos a modelagem matemática de processos biológicos, que se define, de forma simplificada, como a modelagem computacional com aplicação de métodos numéricos ao balanço de massa de componentes de um biorreator (RODRIGUES p. 3, 2006).

Os processos biológicos são extremamente complexos. Graças a baixas concentrações e velocidades de reações no meio em estudo, complexidade da mistura reagente, capacidade das células de sintetizar seu próprio catalizador, conhecimento insuficiente dos fenômenos limitantes da reação e problemas de esterilidade, segurança e toxicidade (RODRIGUES p. 3-4, 2006), que comprometem a fidelidade com a qual a dinâmica é estudada. Aliado a tudo isto, existe ainda as limitações matemáticas, que imprimem idealidades as modelagens. Desta maneira, deve-se ter um equilíbrio entre as simplificações e complexidades do modelo, para que haja representatividade e facilidade no uso do modelo.

As unidades físicas em que ocorre a remoção de matéria orgânica biodegradável ou processamento dessa, através da ação de microrganismos (células vivas), são denominadas de reatores biológicos ou biorreatores. Nesses reatores, são introduzidas quantidades determinadas de substrato e de biomassa, e gerada alguma quantidade de produtos. Quanto à logística de funcionamento dos reatores encontramos o de batelada, batelada alimentada, contínuo com e sem recirculação de biomassa e o contínuo em série.

Um reator do tipo batelada possui, como principal característica, não permitir a introdução ou remoção de reagentes ou produtos no decorrer do processamento da reação, sendo todos os reagentes introduzidos de uma vez só através de aberturas no reator e descarregados, após o tempo de reação, também de uma só vez (VIEIRA p. 37, 2010).

O modelo de Monod dá uma relação matemática que descrevia o efeito do crescimento celular em relação à concentração de substrato limitante (RODRIGUES p. 45, 2006). Esse modelo é amplamente utilizado para determinação da cinética de processos biológicos, mesmo sem observar por total os processos bioquímicos que ocorrem paralelamente aos demais nas células. O modelo de Monod pode estar associado, parcialmente associado ou não associado às fórmulas de Leudeking-Piret, utilizando-as para analisar a geração de produto no reator.

Através das fórmulas matemáticas do modelo de Monod com formação de produto parcialmente associado pelas fórmulas de Leudeking-Piret, foi modelado um reator em batelada utilizando valores de volume (V), velocidade máxima de crescimento celular (μ_{max}), constante de Monod (K_s), relação do crescimento de biomassa e consumo de substrato (Y_{xs}), parâmetros cinéticos de formação de produto (α e β), concentração inicial de biomassa (C_{x0}), concentração inicial de substrato (C_{s0}) e concentração inicial de produto (C_{p0}). Com o objetivo de analisar o comportamento do reator modelado pelas fórmulas de Monod e também qual a influência da variação de alguns desses valores anteriormente citados.

METODOLOGIA

Para o desenvolvimento desse trabalho foram utilizados conhecimentos básicos de resolução de equações diferenciais ordinárias e o aplicativo Scilab 5.2, para desenvolvimento de um código para a resolução do problema, além de conhecimentos sobre reatores biológicos operando em batelada, do Modelo de Monod e de Leudeking-Piret para a modelagem.

Um reator hipotético operando em batelada foi desenvolvido a fim de se analisar o modelo de Monod nesse sistema. O reator em condições iniciais apresenta valores de: $V=10L$, $\mu_{max}=0,5h^{-1}$, $K_s=0,25g/L$, $Y_{xs}=0,5$, $\alpha=1,0$, $\beta=0,5h^{-1}$, $C_{x0}=2,0g/L$, $C_{s0}=25,0g/L$ e $C_{p0}=0,0g/L$.

As formulações matemáticas utilizadas para modelar as concentrações de biomassa, substrato e produto ao longo do tempo, são representadas pelas equações 1, 2 e 3, respectivamente e resolvidas através do método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

$$\frac{dC_x}{dt} = \mu_{max} \frac{C_s}{K_s + C_s} C_x \quad \text{Equação (1)}$$

$$\frac{dC_s}{dt} = -\frac{1}{Y_{xs}} \mu_{max} \frac{C_s}{K_s + C_s} C_x \quad \text{Equação (2)}$$

$$\frac{dC_p}{dt} = \left(\alpha \mu_{max} \frac{C_s}{K_s + C_s} + \beta \right) C_x \quad \text{Equação (3)}$$

Onde C_x , C_s e C_p são os valores de concentração de biomassa, substrato e produto, respectivamente a cada intervalo diferencial de tempo.

A partir daí, os valores de μ_{max} , K_s , C_{x0} e C_{s0} , foram variados cinco vezes para mais e cinco vezes para menos o seu valor inicial, a fim de analisar o desenvolvimento do reator com as mudanças dessas variáveis, em relação as concentrações de biomassa, substrato e produto, durante todo o tempo de batelada, gerando novos gráficos que serão comparados ao inicial na seção posterior. Apenas uma variável foi mudada por vez, permanecendo as outras em seu estado inicial, dando condições para que somente a variável em questão fosse estudada.

RESULTADOS

Foi gerado um gráfico que representa o reator em suas condições iniciais (figura 1), assim como esperado de um reator em batelada, o substrato é consumido até o zero a medida que a biomassa e o produto cresce, contudo o produto cresce indefinidamente mesmo quando a biomassa estagna e o substrato acaba, isso ocorre porque a formulação parcialmente associada de Leudeking-Piret tem uma variável independente da concentração de substrato, e mesmo que este último seja zero, ele continua a crescer mudando apenas seu ângulo de inclinação, desta forma será considerada a geração de produto até o momento em que o substrato seja zero.

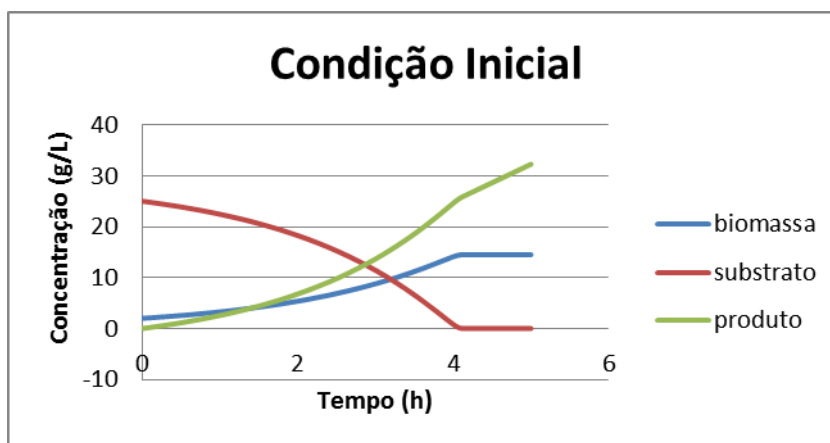


Figura 1 – Valores de Biomassa, Substrato e Produto, na Condição Inicial do reator.

Inicialmente os valores de μ_{max} foram os primeiros a serem variados, à medida que ele aumenta, mais rápido o substrato é consumido totalmente tendo uma mesma concentração de biomassa e uma menor de produtos, analogamente à medida que ele diminui mais demorado é o consumo total de substrato, e muito mais produto é produzido apesar da quantidade de biomassa continuar a mesma do processo inicial, ver na figura 2.

Esse fenômeno pode ser explicado, pois o μ_{max} influencia apenas no desenvolvimento exponencial do reator, que no modelo de Monod vai até o consumo total do substrato, logo se o tempo de crescimento exponencial diminuiu o tempo de consumo do substrato também diminui e vice-versa, assim como a formação de produto é maior quanto maior for o tempo de crescimento exponencial, pois pelo modelo de Leudeking-Piret o produto gerado sofre influência de uma variável dependente do substrato por mais tempo.

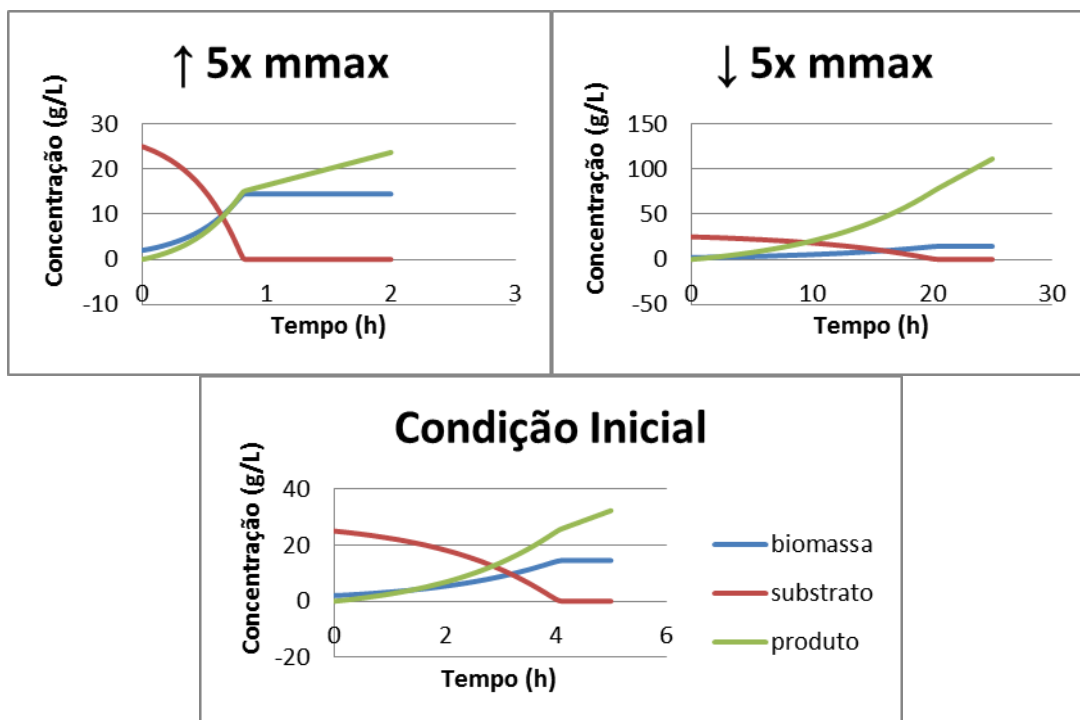


Figura 2 – Comparação da Condição Inicial com a Variação do μ_{max} .

Quanto ao K_s , as variações inferiores não causam impactos no desenvolvimento do reator, apesar de que variações superiores causam um aumento de tempo insignificante no consumo completo de substrato com basicamente os mesmos valores de concentração de produto e biomassa (figura 3).

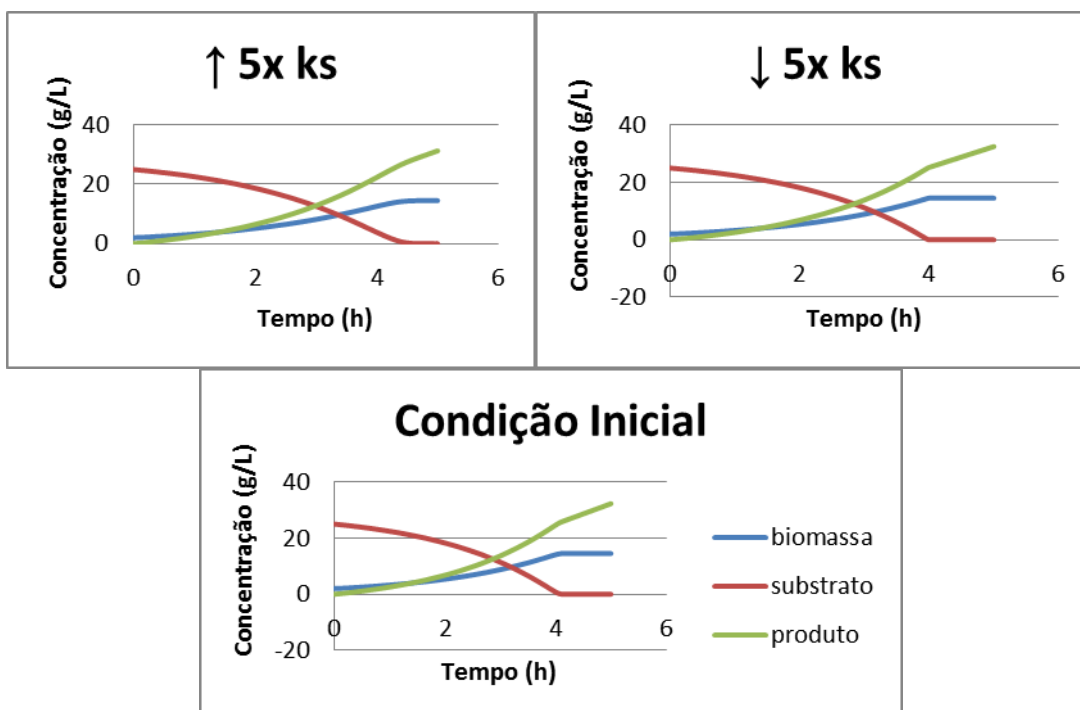


Figura 3 - Comparação da Condição Inicial com a Variação do K_s .

Na figura 4, analisam-se os valores de variação de C_{xo} , ao aumentar cinco vezes seu valor o tempo de consumo do substrato diminui muito rápido e a formação de produtos é a mesma, e ao diminuir cinco vezes o valor da biomassa o tempo de consumo total de substrato é maior e a geração de produtos é a mesma do caso inicial.

Esse efeito ocorre graças aos microrganismos que em abundância vão se alimentar rapidamente do substrato e no caso de haver menor biomassa, irá demorar mais para consumir o substrato porque há menos indivíduos para se alimentar dela e haverá a mesma quantidade de produto no caso inicial, pois a formação dele depende da quantidade de substrato e da velocidade de reação e não da biomassa existente no reator.

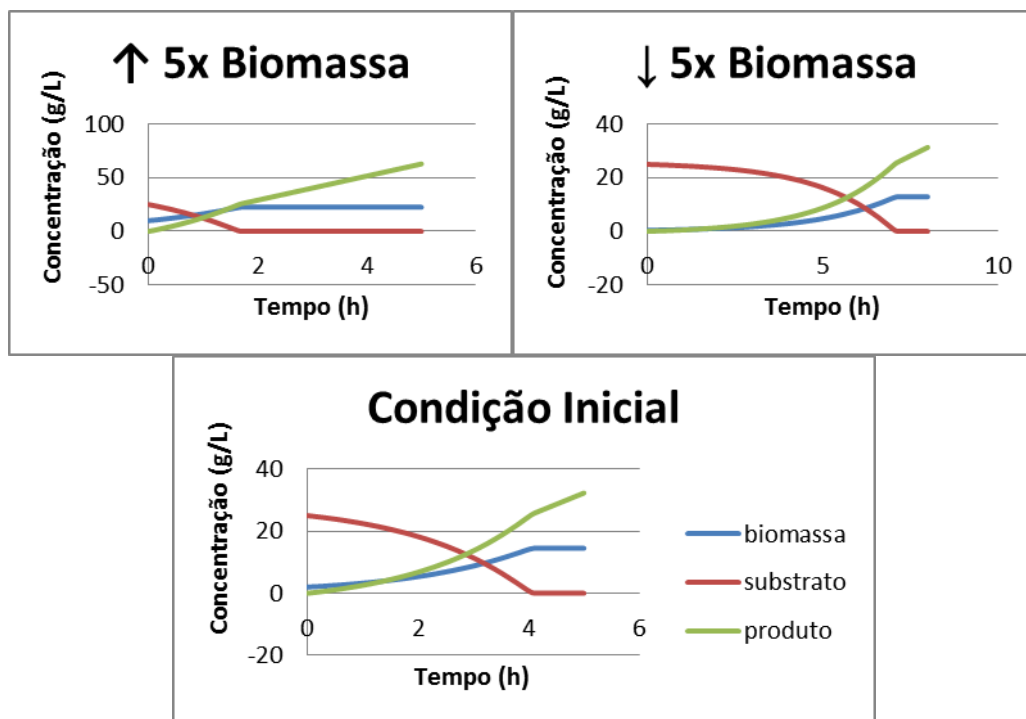


Figura 4 - Comparação da Condição Inicial com a Variação do Biomassa.

Por fim analisando os valores de variação de C_{so} , vemos que conforme o substrato aumenta também aumenta o tempo para que ele seja consumido totalmente, e a concentração de produto cresce juntamente com a biomassa, já diminuindo a concentração de substrato inicial o tempo para que ele seja consumido diminui assim como a geração de produto e biomassa, ver figura 5.

A biomassa, o produto e o tempo de consumo de substrato são diretamente proporcionais a concentração de substrato, já que se existe mais alimento, mais microrganismos podem coexistir em um sistema e mais produtos são gerados, da mesma forma quanto menos alimento for ofertado menos indivíduos haverão e menos se gera os produtos. Também quanto mais substrato houver maior será o tempo para que ele seja consumido, mesmo existindo mais microrganismos no reator.

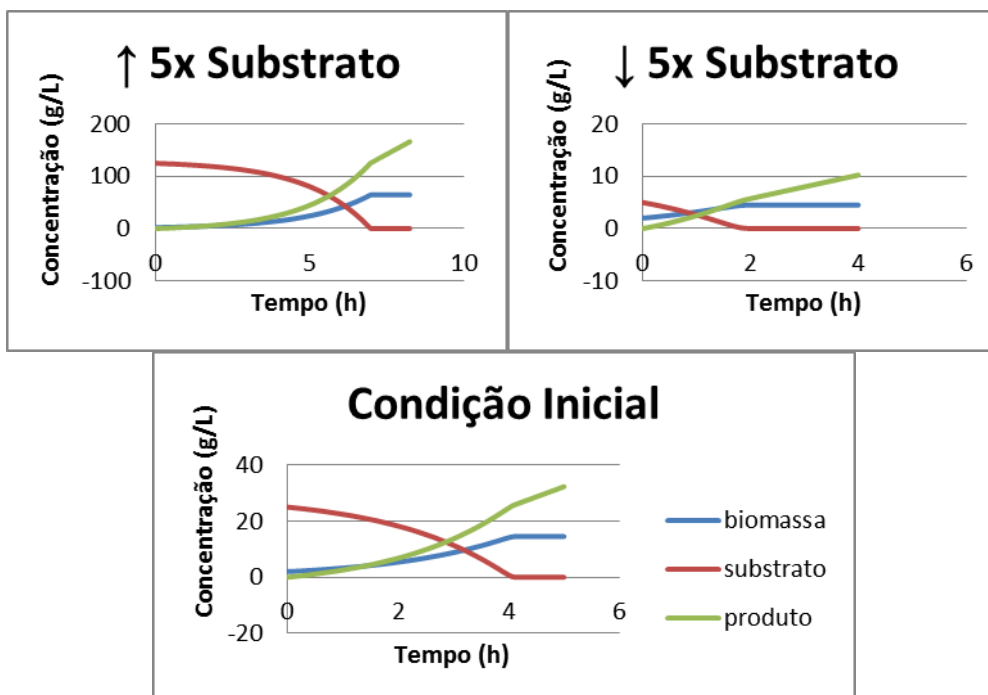


Figura 5 - Comparação da Condição Inicial com a Variação do Substrato.

CONCLUSÃO

Em todas as situações o substrato foi totalmente consumido, o que pode ser resultado das simplificações inerentes ao modelo de Monod.

De todas as situações analisadas a que foi mais favorável ao consumo de substrato foi o aumento de 5 vezes no μ_{max} , diminuindo em 5 vezes o tempo de consumo total do mesmo, enquanto que a menos favorável foi a diminuição de 5 vezes no μ_{max} , que aumentou também em 5 vezes o tempo de consumo do substrato, logo fica claro que o fator que tem maior influência no consumo de substrato é a velocidade máxima de crescimento celular.

Já quanto a maior formação de produto, os valores cinco vezes maior de substrato inicial apresentou significativo aumento na geração de produtos, mostrando que o substrato é diretamente responsável pela formação de produto, uma vez que identicamente a diminuição do mesmo foi à situação mais desfavorável para aumentar a concentração de produto. A variação para baixo do μ_{max} foi também eficiente na formação de produto, graças ao modelo de Leudeking-Piret gerar mais produtos quanto maior for o tempo de crescimento exponencial, contudo a formação de produto pode não esta diretamente relacionada com os valores de μ_{max} , podendo esse resultado ser uma limitação dos modelos adotados.

No que se refere a produzir biomassa, a situação onde se aumentou a concentração inicial da mesma em cinco vezes foi a melhor, todavia, se o objetivo for produzir a biomassa a partir de uma concentração menor da mesma a melhor situação é onde se aumenta a concentração de substrato inicial em cinco vezes e a menos favorável é quando se diminui a concentração de substrato inicial em cinco vezes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. RODRIGUES, J. A. D.; RATUSZNEI, S. M.; DAMASCENO, L. H. S.. **Análise de Processos Biológicos**. Programa de Pós-Graduação em Engenharia. Área de Concentração Hidráulica e Saneamento. São Carlos: 2006.
2. VIEIRA, F. F. **Modelagem Matemática em Sistemas Ambientais – Modelagem de Processos Biológicos**. Notas de Aula Fernando Fernandes Vieira. Paraíba: Universidade Estadual da Paraíba, Departamento de Engenharia Sanitária Ambiental, 2010.
3. VIEIRA, F. F. **Modelagem Matemática em Sistemas Ambientais – unidade 1: Introdução**. Notas de Aula Fernando Fernandes Vieira. Paraíba: Universidade Estadual da Paraíba, Departamento de Engenharia Sanitária Ambiental, 2010.