

MODELAGEM DA BIOCONVERSÃO DE GLICEROL EM 1,3- PROPANODIOL ATRAVÉS DE DERIVADAS FRACIONÁRIAS

**OXLEY, Estefani de Souza
CEZARO, Adriano de
esteffani_souza@yahoo.com.br**

**Evento: Encontro de Pós-Graduação
Área do conhecimento: Matemática, Probabilidade e Estatística**

Palavras-chave: Modelagem Matemática, Derivadas Fracionárias, Bio-conversão.

1 INTRODUÇÃO

A proposta do nosso trabalho consiste na modelagem do problema de conversão de glicerol em 1,3 – Propanodiol usando derivadas de ordem fracionária (Diethelm, 2010). Visto que essas derivadas possuem propriedades interessantes, como efeitos não locais, propriedades de memória etc, espera-se que estas forneçam uma descrição mais precisa da realidade do que os modelos utilizando o cálculo usual.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Na produção de biocombustíveis, cerca de 10% do volume é descartado em forma de glicerol. Dada a grande quantidade deste subproduto e as implicações ecológicas de seu descarte inadequado, recentemente, tem se investido um grande esforço científico e tecnológico para a transformação do glicerol em subprodutos com maior valor agregado. Um destes subprodutos é o 1,3 - Propanodiol (1,3 - PD), visto a quantidade de aplicações no segmento industrial (Wang, Ye, Feng et al., 2009).

Diferentemente de outras modelagens para o problema de bio-conversão de glicerol em 1,3 - PD (Wang, Ye, Feng et al., 2009), nossa proposta de trabalho consiste em fazer a modelagem utilizando derivadas de ordem fracionária (Diethelm, 2010).

3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

Nosso trabalho consiste em estudos referentes aos resultados de boa-colocação do modelo com derivadas de ordem fracionária. Em outras palavras, a existência, unicidade e dependência contínua dos dados iniciais para as soluções do sistema de EDO's de ordem fracionárias que modela o problema de conversão de glicerol em 1,3 – Propanodiol. Uma vez provada a boa colocação do problema, faremos uso de técnicas numéricas (métodos tipo séries de potências) para computar soluções do modelo para diferentes valores das derivadas (β). Finalmente, utilizaremos os resultados conhecidos na literatura para comparar com os resultados do modelo proposto.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

O modelo do balanço de biomassa, substrato e produto de culturas, resulta no seguinte sistema descrito logo abaixo:

$$\begin{cases} D^\beta x = f(t, x(t)), & t \in [0, T], \\ x(0) = \xi \end{cases}$$

onde $f(t, x(t)) = (f_1(t, x(t)), f_2(t, x(t)), f_3(t, x(t)), f_4(t, x(t)), f_5(t, x(t)))^T = (\mu x_1(t), -q_2 x_2(t), q_3 x_3(t), q_4 x_4(t), q_5 x_5(t))$ onde $x = (x_1(t), x_2(t), x_3(t), x_4(t), x_5(t))^T$ é o vetor que contém as concentrações de biomassa, glicerol, 1,3-PD, acetato e etanol no reator, no instante t , respectivamente. As condições iniciais do sistema são dadas por ξ . O vetor $u = (t_l; t_m)$ que é o tempo onde a população deixa o estado de latência e inicia o crescimento exponencial e o momento que μ atinge o seu maior índice. A taxa μ é o crescimento específico da população biológica, e q_2 é a taxa de consumo específica do substrato (glicerol) e q_j para $j = 3; 4; 5$ são as taxas específicas de formação dos subprodutos (1,3 - PD, acetato e etanol). As taxas específicas é q_j para $j = 3; 4; 5$; são definidas pelas seguintes expressões:

$$\mu = \mu_m \exp\left(\frac{-(t - t_m)^2}{2t_l^2}\right) \prod_{i=2}^5 \left(1 - \frac{x_i(t)}{x^*}\right)$$
$$q_2 = m_2 + \frac{\mu}{Y_2}$$
$$q_i = m_i + \mu Y_i, \quad i = 3, 4, 5.$$

Para o caso de $\beta = 1$ (derivadas de ordem clássica), este modelo já foi bem estudado (Wang, Ye, Feng et al., 2009).

Diferentemente dos modelos conhecidos na literatura, que são dados por sistema de EDO's com derivadas inteiras, nossa proposta utiliza derivadas de ordem fracionária para representar as variações na dinâmica do modelo. Por isso espera-se encontrar resultados que representem de maneira fidedigna os resultados observados na prática, haja visto que as derivadas de ordem fracionária possuem propriedades interessantes, como efeitos de memória, efeitos não locais, etc.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

No presente trabalho esperamos concluirmos que o modelo encontrado sirva como guia teórico/computacional para a determinação de quantidades de biomassa e bio - reagentes (condições iniciais do sistema) para a obtenção, de maneira ótima, do máximo de subprodutos de interesse (1,3 - Propanoidiol).

REFERÊNCIAS

DIETHELM, Kai The analysis of fractional differential equations: An application-oriented exposition - using differential operators of caputo type, vol. 2004, Springer Science & Business Media, 2010.

WANG, Lei , YE Jianxiong, FENG , Enmin et al. An improved model for multistage simulation of glycerol fermentation in batch culture and its parameter identification, Nonlinear Analysis: Hybrid Systems 3 (2009), no. 4, 455-462.