



MODELAGEM DA PRODUÇÃO DE ÁCIDO SUCCÍNICO POR VIA FERMENTATIVA

Rafaela Geanfrancesco Tannuri, Aline Carvalho da Costa
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA – UNICAMP



Palavras-chave: ácido succínico – fermentação - Plackett-Burman – modelagem

rafatannuri@gmail.com – Tel.: (19) 8838-6757

Introdução

O ácido succínico é um ácido dicarboxílico de quatro carbonos utilizado como precursor de inúmeros produtos. Atualmente é produzido principalmente por via química usando gás liquefeito de petróleo, um processo caro e que apresenta vários problemas de poluição. A produção de ácido succínico por via fermentativa ainda não é economicamente competitiva com a via química. Para viabilizar este processo, muitos estudos ainda são necessários, visando à otimização de todos os passos.

O objetivo principal deste trabalho é o estudo da modelagem matemática do processo de fermentação de ácido succínico.

Metodologia

Um modelo não estruturado disponível na literatura [1] foi simulado e comparado com os dados experimentais apresentados no mesmo artigo. Uma revisão da literatura foi realizada para avaliar outros modelos disponíveis.

Posteriormente, uma metodologia baseada em planejamentos fatoriais de Plackett-Burman foi utilizada para identificação dos parâmetros cinéticos que mais influenciam o comportamento dinâmico das variáveis de processo. Uma vez que os parâmetros mais importantes foram determinados, eles foram reestimados usando um algoritmo Quasi-Newton.

Modelo Matemático

No processo de produção de ácido succínico tem-se quatro produtos formados. As taxas cinéticas usadas neste trabalho são apresentadas nas Equações 1 a 4 [1]:

$$r_{SA} = \alpha_{SA}r_X + \beta_{SA}X \quad (1)$$

$$r_{AA} = \alpha_{AA}r_X + \beta_{AA}X \quad (2)$$

$$r_{FA} = \alpha_{FA}r_X + \beta_{FA}X \quad (3)$$

$$r_{LA} = \alpha_{LA}r_X + \beta_{LA}X \quad (4)$$

onde r_{SA} , r_{AA} , r_{FA} e r_{LA} representam as taxas de formação dos ácidos succínico, acético, fórmico e láctico. A taxa de formação de biomassa, r_X , é dada pelas Equações 5 e 6:

$$r_X = \left[\frac{\mu_m S}{(S + K_S + (S^2/K_I))} \times \left(1 - \frac{P}{P_{CRIT}} \right)^i \right] X \quad \text{quando } P < P_{CRIT} \quad (5)$$

$$r_X = -K_d X \quad \text{quando } P \geq P_{CRIT} \quad (6)$$

Planejamentos Fatoriais de Plackett-Burman Reestimação dos Parâmetros Cinéticos

Os planejamentos de Plackett e Burman são planejamentos ortogonais saturados para casos em que $k+1$ é um múltiplo de quatro.

Neste trabalho tal planejamento foi aplicado para determinar quais os parâmetros cinéticos do modelo têm maior influência nos perfis das variáveis de estado. A estimação simultânea destes parâmetros é feita através de um algoritmo de otimização Quasi-Newton. A otimização é realizada pela minimização da Equação 7, onde θ é o vetor de parâmetros significativos. A subrotina DBCONF do IMSL Fortran foi usada com este propósito.

$$E(\theta) = \sum_{n=1}^{np} \left[\frac{(X_n - X_{e,n})^2}{X_{e,max}^2} + \frac{(S_n - S_{e,n})^2}{S_{e,max}^2} + \frac{(P_n - P_{e,n})^2}{P_{e,max}^2} \right] \quad (7)$$

Resultados e Discussão

■ A implementação do modelo de Song et al. [1] em Fortran forneceu gráficos de concentração de biomassa, substrato e ácido succínico (g/L), para diferentes condições iniciais, versus tempo (h), os quais foram comparados com os dados obtidos experimentalmente. As curvas apresentaram comportamento semelhante.

■ Através do planejamento de Plackett-Burman obteve-se tabelas de efeito para as variáveis: concentração de ácido succínico, biomassa e tempo. Para 95% de confiança selecionou-se os seguintes parâmetros cinéticos mais influentes: μ_m , Y_{AS} , Y_X , β_{AA} , K_S , P_{CRIT} , Y_{AA} .

■ Os efeitos foram analisados, ainda, de forma gráfica, **Figura 1**.

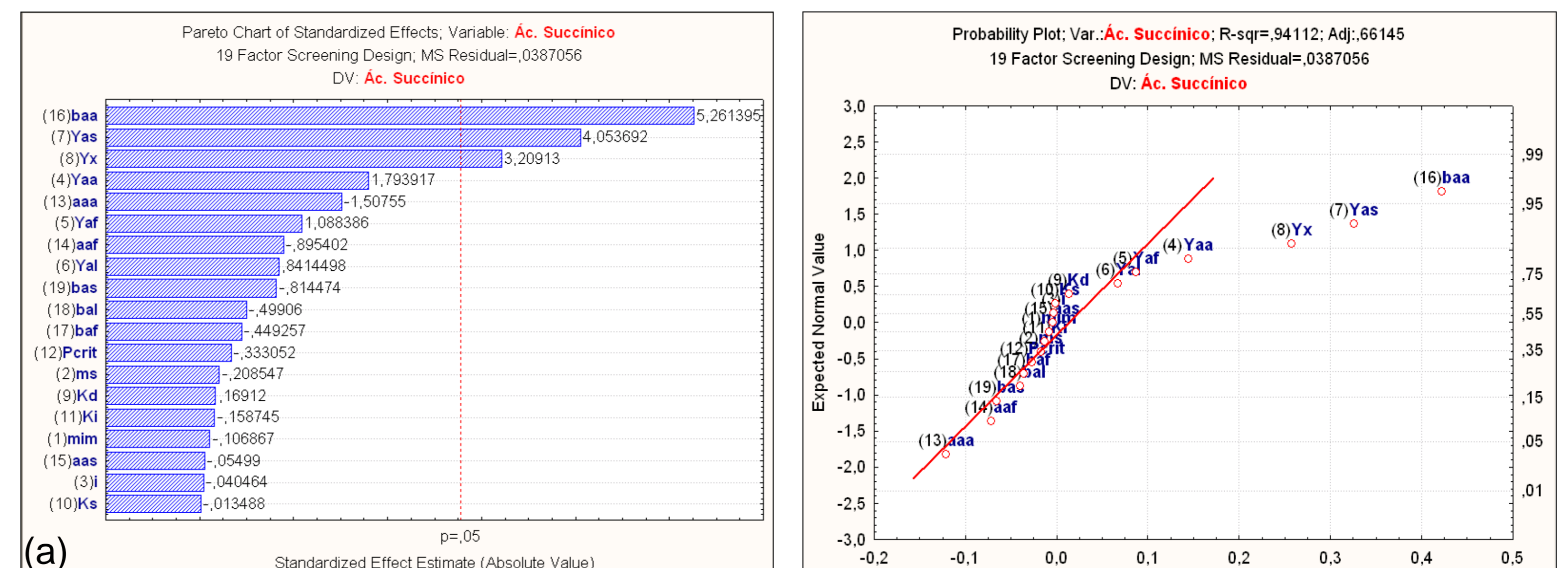


Figura 1. (a) Gráfico Pareto e (b) Gráfico Normal de Probabilidade, ambos para a variável ácido succínico.

■ As simulações empregando a otimização por SQP resultaram em perfis, como os apresentados na **Figura 2**.

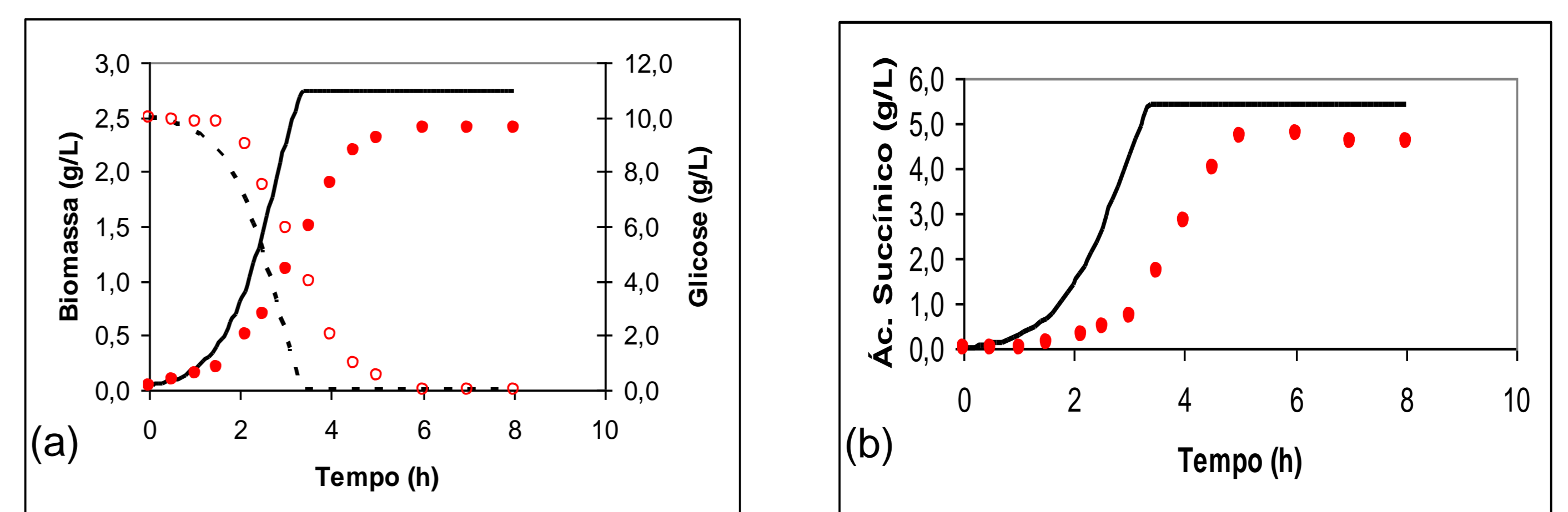


Figura 2. (a) Perfil de tempo versus biomassa e glicose obtidos por simulação do modelo, utilizando-se os dados reestimados (linha contínua – biomassa, tracejada - glicose) e obtidos experimentalmente por Song et al. (círculo vermelho cheio – biomassa, vazio - glicose) e (b) perfil de tempo versus ácido succínico obtido por simulação do modelo (linha contínua) e obtidos experimentalmente (círculo vermelho cheio).

■ A estimação dos parâmetros do modelo foi dificultada pelo elevado número de variáveis e alta não linearidade.

Conclusão

● Os resultados da simulação do modelo mostraram-se satisfatórios e de acordo com os dados experimentais apresentados na literatura.

● O uso do planejamento fatorial de Plackett-Burman mostrou-se ser um método rápido e simples.

● A otimização aplicada ao modelo é um problema de difícil solução devido à presença de equações diferenciais e ao elevado número de variáveis, o que dificulta a convergência.

Referência Bibliográfica

[1] SONG, H., JANG, S.H., PARK, J.M., LEE, S.Y., Biochemical Engineering Journal, 40 (2008), 107–115,