

Modelagem Matemática em Problemas de Bioconversão

PERES, Luciano Medina (autor)
DE CEZARO, Adriano (orientador)
Imperes@bol.com.br

Evento: Encontro de Pós-Graduação
Área do conhecimento: Ciências Exatas e da Terra
Sub-Área do conhecimento: Interdisciplinar

Palavras-chave: Bioconversão, Modelagem, Problemas Inversos.

1 INTRODUÇÃO

Quando nos referimos a bioconversão, informalmente estamos dizendo, que o metabolismo de uma célula é um conjunto de reações bioquímicas, onde concentrações moleculares de substratos são convertidas em concentrações moleculares de produtos, em função do tempo. Dado o elevado custo relacionado a coleta de dados, validação e obtenção de resultados em experimentos *in vivo* (*in vitro*), muita atenção tem sido dada para a construção de modelos matemáticos (em geral governados por equações diferenciais) para descrever os fenômenos observados. Dada a complexidade dos fenômenos de interesse, uma modelagem útil do problema gera desafios envolvem uma interação entre a teoria e prática (matemáticos, biólogos, especialistas em processos industriais) (ENGL, FLAMM, *et al.*, 2009).

O objetivo principal da modelagem e simulação numérica, como ferramenta do desenvolvimento tecnológico de processos fermentativos, 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, sem a necessidade da realização de testes experimentais, os quais demandam tempo e dinheiro, auxiliando na implementação de projetos e ajuste de algoritmos de controle. Neste processo a modelagem matemática desempenha um papel fundamental (BONOMI e SCHMIDELL, 2001).

Na formulação de um modelo matemático devemos escolher as variáveis consideradas relevantes para o fenômeno biológico em estudo e as leis que serão regidas por estas variáveis. Portanto, algumas propriedades são naturalmente exigidas de um sistema matemático que representa um fenômeno.

O foco deste trabalho é estudar o problema de identificação de parâmetros em um sistema de EDO's que modela a bioconversão de glicerol (um subproduto abundante na produção de biocombustíveis). Do ponto de vista prático, o de processos fermentativo (bioconversão) é de grande importância industrial, pois produz (de maneira limpa, barata, etc) produtos mais valiosos, como o 1,3-Propanodiol (SILVA, CONTIERO, *et al.*, 2014). Por outro lado, do ponto de vista teórico e de modelagem, faz-se necessário estimar (calibrar) o conjunto de parâmetros que aparecem no modelo, a partir de medidas feitas de forma indireta. Assim, o problema de interesse torna-se um Problema Inverso (PI) (ENGL, FLAMM, *et al.*, 2009).

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Neste trabalho concentraremos a nossa atenção para os balanços de massa da biomassa consumida e de produtos formados em um processo fermentativo em um reator tipo batelada (WANG, XIU, *et al.*, 2012), que pode ser formulado como um Problema de Valor Inicial (PVI):

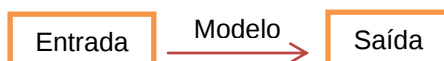
$$\dot{x}(t) = f(t, x(t)); \quad x(0) = x_0$$

onde $f(t, x(t)) = (\mu x_1, -q_2 x_2, q_3 x_3, q_4 x_4, q_5 x_5)$, e $x_i, i = 1, \dots, 5$ é vetor que descreve as concentrações da biomassa, substrato e produtos no reator no tempo “t”. As condições iniciais são dadas por “ x_0 ”. A taxa “ μ ” define o crescimento específico da população biológica, e “ q_2 ” é a taxa de consumo específica do substrato e $q_j, j = 3, 4, 5$ são as taxas específicas de formação dos subprodutos.

Utilizaremos resultados conhecidos em Equações Diferenciais Ordinárias (EDO) para análise matemática do problema.

3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

Vamos apresentar o seguinte esquema para apresentar os problemas direto e inverso:



O problema direto é quando conhecemos as condições iniciais (entrada), o operador e seus parâmetros (modelo) e assim teremos condições de resolver o PVI.

No problema inverso (identificação) conhecemos as condições iniciais (entrada), e as medidas do sistema (saída) solução do PVI, desejamos encontrar um conjunto de parâmetros que relacionam satisfatoriamente as relações entre a entrada e a saída. Ou ainda o problema inverso (reconstrução) conhecemos o operador e seus parâmetros (modelo), e as medidas do sistema (saída) desejamos reconstruir as condições iniciais do sistema.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

Considerando o problema inverso, o nosso objetivo é estudar técnicas que possibilitem estimar estes parâmetros, que é conhecido na literatura como um problema de identificação.

Assim, a obtenção de soluções estáveis e convergentes para o problema está sujeita a utilização de alguma técnica (método de regularização) apropriada.

As técnicas de resolução de problemas inversos são chamadas de Métodos de Regularização, isto é, consiste em tentar limitar, na solução, o efeito do aumento do ruído proveniente dos dados, por meio de uma alteração nas condições do problema.

O que podemos apresentar de resultados é que o modelo proposto para o problema direto é bem-posto no sentido de Hadamard, isto é, atende as condições de existência, unicidade e dependência contínua dos dados.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O uso de métodos matemáticos na biologia é um assunto em expansão. Isto justifica o estudo das propriedades matemáticas de modelos que descrevam sistemas desta natureza, e assim possibilitar a simulação numérica de parâmetros e condições operações destes sistemas.

REFERÊNCIAS

BONOMI, A.; SCHMIDELL, W. Modelagem Matemática E Simulação De Processos Fermentativos. In: _____ **Biotecnologia Industrial**. São Paulo: Edgard Blucher Ltda, v. 2, 2001. Cap. 7, p. 123-178.

ENGL, W. H. et al. Inverse Problems In Systems Biology. **Inverse Problems**, n. 25, p. 51 páginas, 2009.

SILVA, G. P. et al. 1,3-Propanodiol: Produção, Aplicações E Potencial Biotecnológico. **Química Nova**, v. 3, n. 37, p. 527-534, 2014.

WANG, L. et al. Modeling And Parameter Idetinfication For Multistage Simulation Of Microbial Bioconversion In Batch Culture. **Journal biomathematics**, v. 4, n. 5, p. 1250034, 12 páginas, 2012.