

## Trabajo Práctico: Modelos

### Ejercicio 1:

Para los siguiente procesos:

(I) Respiración de la levadura *Saccharomyces cerevisiae*:



donde  $S$  es la FCE,  $N$  es la FN,  $C$  es el oxígeno disuelto y  $X$  la biomasa.

(II) Producción bacteriana de bioplástico PHB (*polihidroxibutirato*)



donde  $S$  es la FCE,  $N$  es la FN,  $X$  la biomasa y  $P$  es el PHB. En este caso hay producción asociada al crecimiento y producción no asociada al crecimiento.

(III) Digestión anaeróbica



donde  $S_1$  es la materia orgánica (COD),  $S_2$  son ácidos grasos,  $X_1$  son las bacterias acidogénicas y  $X_2$  las bacterias metanogénicas.

- Tomando como variables de estado a las concentraciones de cada compuesto, obtener las ecuaciones diferenciales de cada proceso y su expresión matricial. Considerar caudales de alimentación y de extracción de medio no nulos. Considere concentraciones de alimentación no nulas, excepto para la biomasa.
- Para los dos primeros procesos, encontrar las ecuaciones tomando como variables de estado a las masas de cada compuesto. Considerar operación Fed-Batch (caudal de entrada no nulo, caudal de salida nulo).

**Ejercicio 2:** Para el modelo del proceso I:

- Simule la operación batch. Verifique el crecimiento exponencial y el correspondiente decremento de la FCE. Verifique también si  $\mu(t)$  es constante y máxima.
- Simule la operación batch con  $n(0) = 1 \text{ g/l}$ . ¿Qué puede decir de la validez del modelo en esta condición?
- Simule la operación fed-batch con  $F_{in} = cte$ . Verifique el crecimiento lineal y que no haya acumulación de sustrato. Compare  $X(t)$  con  $x(t)$ . ¿Qué valores toma  $\mu(t)$ ?
- Simule la operación continua, evaluando diversos valores de  $D$ . Verifique si los puntos de equilibrio alcanzados son los predichos con el modelo.

Considere el siguiente modelo cinético:

$$r_x = \mu(s)x \longrightarrow \mu(s) = \mu_{max} \frac{s}{K_s + s}, \quad (4)$$

y los parámetros listados en la Tabla 1

Parámetros			Condiciones iniciales batch		
$k_1$	1/0.45	[g/g]	$x(0)$	1	[g/l]
$k_2$	0.108	[g/g]	$s(0)$	50	[g/l]
$k_3$	1.34	[g/g]	$n(0)$	10	[g/l]
$s_{in}$	50	[g/l]			
$n_{in}$	5	[g/l]			
$\mu_{max}$	0.5	[h <sup>-1</sup> ]			
$K_s$	0.5	[g/l]			

Tabla 1: Parámetros proceso I

### Ejercicio 3:

Para el modelo del proceso II:

- Simule la operación batch y verifique los perfiles temporales de los estados, en particular el crecimiento. ¿Cómo es la formación de producto? ¿Es  $\mu(t)$  constante y máximo?
- Simule la operación fed-batch a partir del momento en que  $n(t) = 0 \text{ g/l}$ . Verifique que no se produzca crecimiento, pero si producto. ¿Por qué el producto no se genera exponencialmente?
- Simular la operación continua, evaluando diversos valores de  $D$ . Utilice  $n_{in} = 5 \text{ g/l}$  ¿Existen condiciones iniciales que hacen que el sistema sea inestable?

Utilice los modelos cinéticos:

$$r_x = \mu(s, n)x \longrightarrow \mu(s, n) = \mu_{max} \frac{s}{K_s + s + \frac{s^2}{K_{is}}} \frac{n}{K_n + n}$$

$$r_p = q_p(s, n)x \longrightarrow q_p(s, n) = q_{p_{max}} \frac{s}{K_{ps} + s + \frac{s^2}{K_{ips}}} \frac{K_{ipn}}{K_{ipn} + n}$$

y los parámetros de la Tabla 2.

Parámetros			Parámetros			Condiciones iniciales batch		
$k_{S1}$	1/0.48	[g/g]	$\mu_{max}$	0.46	[1/h]	$x(0)$	1	[g/l]
$k_{S2}$	1/0.3	[g/g]	$K_s$	1.2	[g/l]	$s(0)$	50	[g/l]
$k_N$	1/8.9	[g/g]	$K_{is}$	16.728	[g/l]	$n(0)$	5	[g/l]
$k_{P1}$	0.0657	[g/l]	$K_n$	0.254	[g/l]	$p(0)$	0	[g/l]
$s_{in}$	25	[g/l]	$K_{in}$	1.5	[g/l]			
$n_{in}$	0	[g/l]	$q_{p_{max}}$	0.126	[1/h]			
			$K_{ps}$	4.1	[g/l]			
			$K_{ips}$	80	[g/l]			
			$K_{ipn}$	0.262	[g/l]			

Tabla 2: Parámetros proceso II

Tener en cuenta que para un modelo Haldane la tasa específica óptima se da para una concentración de  $\sqrt{K_s K_i}$ .

### Ejercicio 4:

Para el modelo del proceso III, simular la operación continua:

- (a) Utilice diversos valores de  $D$  ( $D \ll 0,74\text{h}^{-1}$ ,  $D > 0,74\text{h}^{-1}$ , etc.). Verifique la supervivencia de ambas especies de microorganismos.
- (b) Verifique el efecto cualitativo de  $D$  sobre las concentraciones de estado estacionario de todos los estados, sin que se produzca wash-out de microorganismos.

Utilice los modelos cinéticos:

$$r_1 = \mu_1(s_1)x_1 \longrightarrow \mu_1(s_1) = \mu_{1max} \frac{s_1}{K_{s1} + s_1}$$
$$r_2 = \mu_2(s_2)x_2 \longrightarrow \mu_2(s_2) = \mu_{2max} \frac{s_2}{K_{s2} + s_2 + \frac{s_2^2}{K_{i2}}}$$

y los parámetros de la Tabla 3

Parámetros			Parámetros			Condiciones iniciales batch		
$k_1$	42.14	$\text{gg}^{-1}$	$\mu_{1max}$	1.2	$\text{d}^{-1}$	$x_1(0)$	1	$\text{gL}^{-1}$
$k_2$	116.5	$\text{mmolg}^{-1}$	$K_{s1}$	7.1	$\text{gL}^{-1}$	$x_2(0)$	0.1	$\text{gL}^{-1}$
$k_3$	268	$\text{mmolg}^{-1}$	$\mu_{2max}$	0.74	$\text{d}^{-1}$	$s_1(0)$	2	$\text{gL}^{-1}$
			$K_{s2}$	9.28	$\text{mmolL}^{-1}$	$s_2(0)$	4	$\text{mmolL}^{-1}$
$s_{1in}$	10	$\text{gL}^{-1}$	$K_{i2}$	256	$\text{mmolL}^{-1}$			
$s_{2in}$	100	$\text{mmolL}^{-1}$						

Tabla 3: Parámetros proceso III