

# LOT2022 - Modelagem e Simulação de Processos Biotecnológicos

## Modeling and Simulation of Biotechnological Processes

Créditos-aula: 3

Créditos-trabalho: 0

Carga horária: 45 h

Ativação: 01/01/2025

Departamento: Biotecnologia

Curso (semestre ideal): EB (8)

### Objetivos

Introdução à modelagem e simulação de bioprocessos; Estudo de problemas ligados à indústria de bioprocessos envolvendo o desenvolvimento e a resolução de modelos fenomenológicos: programas computacionais e equações algébricas; Modelagem matemática e simulação de processos fermentativos; Desenvolvimento e resolução de modelos: equações diferenciais; Ajuste de parâmetros e otimização de bioprocessos; Aplicação de simuladores de processos em biotecnologia.

*Introduction to modeling and simulation of bioprocesses; Study of issues related to the bioprocess industry involving the development and resolution of phenomenological models: computational programs and algebraic equations; Mathematical modeling and simulation of fermentative processes; Development and resolution of models: differential equations; Parameter fitting and optimization of bioprocesses; Application of process simulation tools in biotechnology.*

### Docente(s) Responsável(eis)

Proporcionar a compreensão e o desenvolvimento de competências e habilidades necessárias para a análise e simulação de processos biotecnológicos através do desenvolvimento e resolução de modelos matemáticos fenomenológicos. Serão ainda apresentadas e discutidas ferramentas computacionais aplicadas à resolução de modelos matemáticos e à simulação de processos, enfatizando o uso destas em problemas de engenharia bioquímica.

1. Introdução à modelagem e simulação de bioprocessos 1.1. Definição de modelo matemático 1.2. Conceituação de variáveis dependentes e independentes de um sistema 1.3. Definição de volume de controle 2. Estudo de problemas ligados à indústria de bioprocessos envolvendo o desenvolvimento e a resolução de modelos fenomenológicos: programas computacionais e equações algébricas 2.1 Problemas envolvendo sistemas de equações lineares 2.2 Problemas envolvendo equações e sistemas de equações não lineares 3. Modelagem matemática e simulação de processos fermentativos 3.1. Objetivos 3.2. Diferenças entre processos químicos e fermentativos 3.3. Interações entre a população microbiana e o meio de cultura 3.4. Formulação e classificação de modelos matemáticos de processos fermentativos 3.5. Modelos cinéticos de crescimento celular, consumo de substrato e formação de produtos em processos fermentativos 3.6. Modelagem de processo fermentativo em biorreatores. 4. Desenvolvimento e resolução de modelos: equações diferenciais 5. Ajuste de parâmetros e otimização de bioprocessos 6. Aplicação de simuladores de processos em biotecnologia. 6.1. Pacotes computacionais de simulação de processos: aspectos gerais, classificação e aplicação 6.2. Síntese e análise de

processos 6.3. Desenvolvimento de fluxogramas de simulação: conceitos e limitações, convergência. 6.4. Exemplos de aplicação

### Programa resumido

A avaliação do aprendizado será feita pela aplicação de duas provas escritas, e através de trabalhos desenvolvidos pelos discentes (estes poderão incluir estudos dirigidos, análises de artigos, resolução de problemas práticos, entre outros).

*Provide understanding and the development of competencies and skills necessary for the analysis and simulation of biotechnological processes through the development and resolution of phenomenological mathematical models. Computational tools applied to the resolution of mathematical models and the simulation of processes will also be presented and discussed, emphasizing their use in biochemical engineering problems.*

### Programa

A nota final (NF) será composta pelas médias M1 e M2, calculadas conforme segue:

$$M1 = P1 + a1 \times T1$$

$$M2 = P2 + a2 \times T2$$

Em que:

-P1 e P2 são as notas da primeira e da segunda prova escrita, respectivamente (notas de zero a dez).

-T1 e T2 são as notas médias dos trabalhos (notas de zero a dez) realizados antes da primeira e da segunda prova escrita, respectivamente.

-a1 e a2 são os fatores multiplicadores das notas médias dos trabalhos, a serem definidos pelo docente antes do início de cada turma com base nas atividades específicas a serem propostas. Os valores serão  $\geq 0,1$ , sendo informados aos alunos no início do semestre.

Em todos os casos, os valores máximos para M1 e M2 serão “dez”, sendo desconsideradas pontuações superiores.

O cálculo de NF será feito conforme segue:

$$NF = (M1 + M2) / 2$$

Serão aprovados os alunos que obtiverem NF maior ou igual 5,0.

#### 1. Introduction to modeling and simulation of bioprocesses

##### 1.1. Definition of mathematical model

##### 1.2. Conceptualization of dependent and independent variables of a system

##### 1.3. Definition of control volume

*Study of issues related to the bioprocess industry involving the development and resolution of phenomenological models: computational programs and algebraic equations*

##### 2.1 Problems involving systems of linear equations

##### 2.2 Problems involving equations and systems of nonlinear equations

#### Mathematical modeling and simulation of fermentative processes

##### 3.1. Objectives

##### 3.2. Differences between chemical and fermentative processes

##### 3.3. Interactions between microbial population and culture medium

##### 3.4. Formulation and classification of mathematical models of fermentative processes

##### 3.5. Kinetic models of cell growth, substrate consumption, and product formation in fermentative

*processes*

*3.6. Modeling of fermentative process in bioreactors.*

*Development and resolution of models: differential equations*

*Parameter fitting and optimization of bioprocesses*

*Application of process simulation tools in biotechnology*

*6.1. Computational packages for process simulation: general aspects, classification, and application*

*6.2. Synthesis and analysis of processes*

*6.3. Development of simulation flowcharts: concepts and limitations, convergence.*

*6.4. Application examples*

## **Avaliação**

**Método:** Será oferecido um programa de recuperação, sendo este avaliado por uma prova escrita final (PR). A média de recuperação (MR) será calculada conforme segue:

$$MR = (NF + PR) / 2$$

Serão aprovados os alunos que obtiverem MR maior ou igual a 5,0.

**Critério:** ALTERTHUM, F.; SCHMIDELL, W.; LIMA, U. A.; MORAES, M. O. (Org.).

Biotecnologia Industrial. Volume 2: Engenharia Bioquímica. 2ª Edição. São Paulo: Blucher, 2021. p. 37-52. ISBN 978-65-5506-019-5 (e-Book); 978-65-5506-018-8 (Impresso).

BARRETO, L. S. Iniciação ao Scilab. 2 ed. Costa de Caparica, Portugal: Ebook, 2011. Disponível na internet: <http://www.mat.ufrgs.br/~guidi/grad/MAT01169/SciLivro2.pdf> Consulta em 2 de fevereiro de 2024.

CUTLIP, M. B.; SHACHAM, M. Problem solving in chemical and biochemical engineering with POLYMAT™, Excel, and MATLAB™. 2 ed. Boston, MA: Pearson Education, Inc., 2007. ISBN 978-0-13-148204-3.

DIMIAN, A.C.; BILDEA, C. S.; KISS, A. A. Integrated Design and Simulation of Chemical Processes. Amsterdam, The Netherlands: Elsevier Science B.V., 2014, 863 p. ISBN 978-0-444-62700-1

KRIJNEN, W. P. WIT, E. C. Computational and Statistical Methods for Chemical Engineering. Chapman and Hall/CRC, 1st edition, 2022, 398 p. ISBN: 978-1032013244.

NAGAR, S. Introduction to Scilab: For Engineers and Scientists. New York, USA: Apress, 2017, 208 p. ISBN: 978-1484231913

PINTO, J. C.; LAGE, P. L. C. Métodos numéricos em problemas de engenharia química. Rio de Janeiro, RJ: E-papers serviços Editoriais Ltda., 2001. ISBN 85-87922-11-4.

SEIDER, W.D.; SEADER, J.D.; LEWIN, D.R.; WIDAGDO, S. Product and process design principles. Synthesis, analysis, and Evaluation. 3 ed. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2008, 728p. ISBN-13: 978-0470-04895-5.

**Norma de recuperação:** 6007846 - Júlio César dos Santos

## **Bibliografia**

5817181 - Valdeir Arantes

## **Requisitos**

LOB1056 - Introdução aos Métodos Numéricos e Computacionais (Requisito fraco)

LOQ4086 - Operações Unitárias II (Requisito fraco)