

UM MODELO MATEMÁTICO EM BIOLOGIA :OBTENÇÃO DE ETANOL A PARTIR DA
FERMENTAÇÃO DA GLICOSE E SACAROSE

P.M. JANNUZZI (bolsista i.c.- FAPESP)

R.C. BASSANEZI (orientador-IMECC/UNICAMP)

A) OBJETIVOS

O objetivo de nosso trabalho foi propor um modelo matemático para representar o processo de fermentação alcoólica, realizado por certos tipos de bactérias mergulhadas em soluções de glicose ou sacarose, estabelecendo uma relação entre as principais variáveis envolvidas (concentração de bactérias, quantidade de etanol produzido, quantidade de açúcar consumido e o tempo) e fazer uma análise qualitativa dos resultados obtidos.

B) INTRODUÇÃO

Resumidamente, a fermentação alcoólica é um conjunto de reações químicas que ocorrem no interior das bactérias, transformando um carboidrato em álcool.

Como experiência observada, foi introduzido certo tipo de bactéria em solução açucarada com glicose ou sacarose. Durante algumas horas (tempo que pode variar conforme a temperatura, substrato usado, tipo de bactéria introduzida) o corpo bacteriano mergulhado fica em período de adaptação ao novo meio (solução açucarada), quando praticamente não se alimenta e nem se multiplica. Depois dessa fase de latência, as bactérias começam a se alimentar do açúcar e expelir o produto formado pela fermentação (o Etanol). Paralelamente, o número de bactérias vai aumentando através de sucessivas divisões celulares.

À medida que o alimento vai escasseando e a concentração de etanol aumentando, a velocidade de crescimento do corpo bacteriano vai diminuindo, até que a população de bactéri-

as atinja seu ponto máximo. Após algum tempo, sem alimento, o número de indivíduos cai muito rapidamente.

C) MODELO

Em nosso trabalho nos preocupamos em estudar o processo de fermentação até o tempo onde a concentração de bactérias se tornava máximo, e em relacionar 4 variáveis principais : tempo, concentração de substrato, de etanol e de bactérias.

Em uma primeira etapa, de posse de tabelas de dados experimentais elaboradas na Faculdade de Tecnologia de Alimentos da UNICAMP, procuramos encontrar uma relação entre a concentração de bactérias e o tempo decorrido desde a introdução destas na solução com glicose ou sacarose.

O Modelo Global para Dinâmica Populacional de uma Espécie Isolada, proposto por L.C. Paraíba (1983), se mostrou muito bom para representar essa relação entre tempo e quantidade de bactérias.

A equação, tirada do Modelo Global, é :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = (x-x_1)(x-x_2)w(x) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases}$$

$$\text{com } 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq x_L$$

$$w(x) \neq 0, \forall x \in [0, x_L], \text{ CONTÍNUA}$$

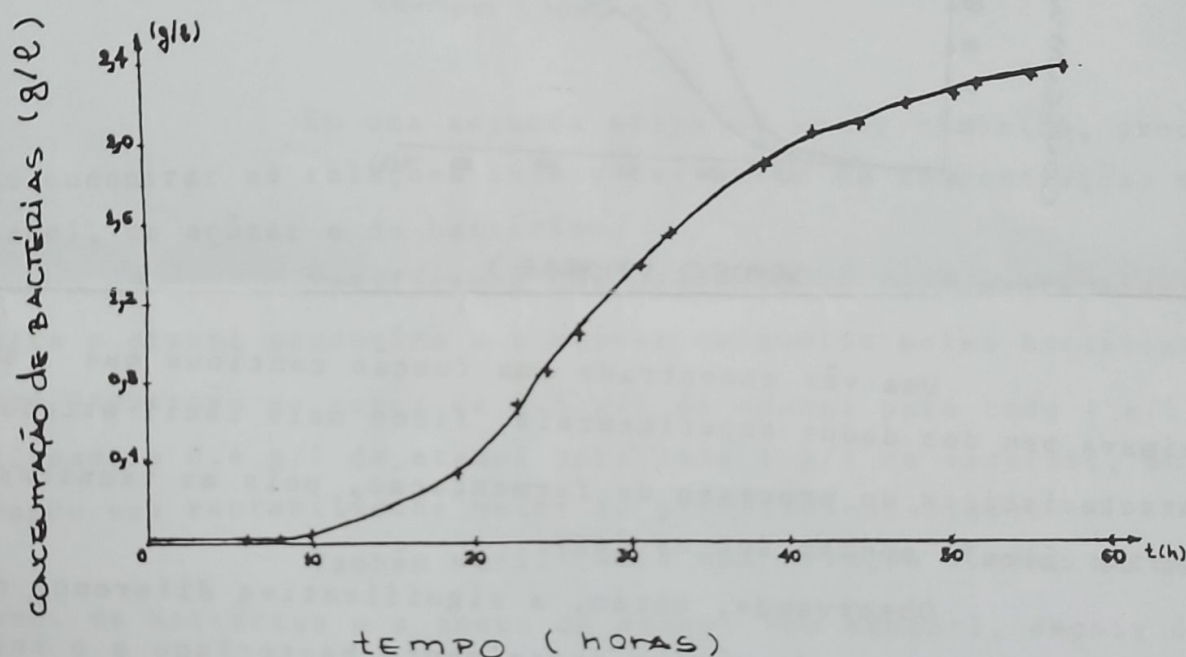
Resolvendo esta equação diferencial, sob certas condições, temos a solução :

$$x(t) = \frac{x_2(y_0 - x_1) + x_1(x_2 - y_0)e^{(x_2 - x_1)p(t)}}{(y_0 - x_1) + (x_2 - y_0)e^{(x_2 - x_1)p(t)}}$$

$$\text{onde } p(t) = a_3(t-t_0)^3 + a_2(t-t_0)^2 + a_1(t-t_0)$$

Para o cálculo dos parâmetros envolvidos, o autor oferece uma técnica computacional bem elaborada, empregando o método de Nelder-Mead para minimização de funções, método de penalização e método dos mínimos quadrados.

No gráfico abaixo podemos ver a proximidade da curva solução do modelo global com os dados experimentais (o gráfico e os parâmetros mostrados se referem ao experimento de bactérias mergulhadas em solução de 20% de glicose).



$$x_1 = 0,99340758$$

$$x_2 = 200,89999$$

$$t_0 = 11$$

$$y_0 = 1,4$$

$$a_1 = -1,93523 \times 10^{-3}$$

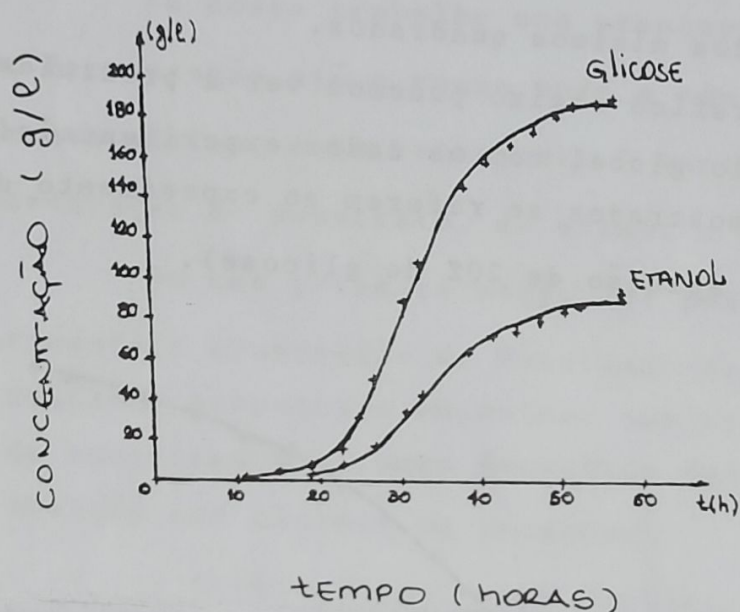
$$a_2 = 2,64105 \times 10^{-5}$$

$$a_3 = -1,18701 \times 10^{-7}$$

Extendemos o Modelo Global para representar as relações de quantidade de etanol produzido X tempo e quantidade de substrato consumido X tempo, também com bons resultados.

Aplicamos também os modelos clássicos de dinâmica populacional e de crescimento microbiano (Verhulst, Monod, T. Kono- mais recente) e comparamos os resultados.

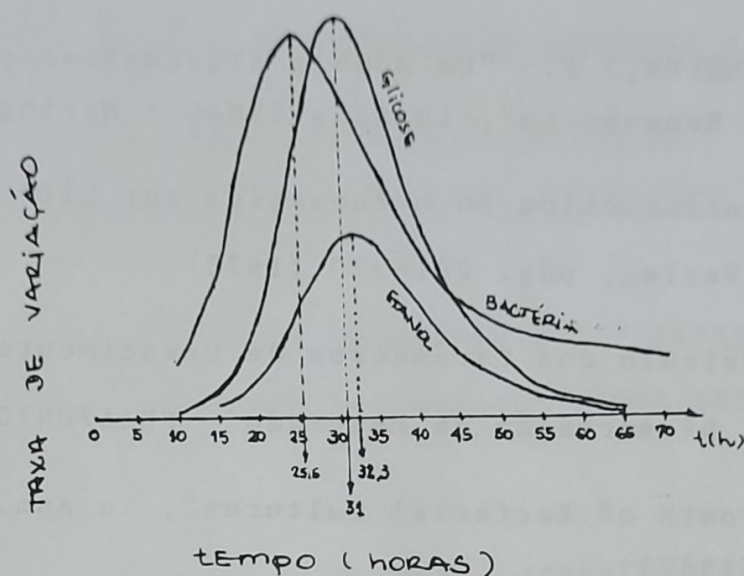
Gráfico representando a conc. de etanol produzido e a conc. de substrato consumido em função do tempo (para o experimento de glicose a 20%) :



Uma vez encontrada uma função contínua que se aproximava bem dos dados experimentais, ficou mais fácil estudar as características do processo de fermentação, pois as técnicas usuais do cálculo podiam ser usadas.

Observamos, então, a significativa diferença de tempo entre o instante de máximo crescimento bacteriano e o instante de máxima produção de etanol (ou de máximo consumo de açúcar, pois estes dois últimos ocorrem em instantes bem próximos).

No gráfico abaixo, podemos ver a variação das taxas de crescimento microbiano, de produção de etanol e de consumo de substrato das curvas desenhadas anteriormente (20% de glicose) :



Em uma segunda etapa de nosso trabalho, procuramos encontrar as relações existentes entre as concentrações de etanol, de açúcar e de bactérias.

Verificamos uma dependência fortemente linear entre o etanol produzido e o açúcar consumido pelas bactérias, numa proporção de cerca de 0.5 g/l de etanol para cada 1 g/l de glicose, e 0.4 g/l de etanol para cada 1 g/l de sacarose, mostrando uma rentabilidade maior do primeiro substrato.

Também verificamos uma relação linear entre a conc. de bactérias e a conc. de etanol (ou açúcar), depois do período de latência das bactérias.

g : CONCENTRAÇÃO DE GLICOSE (20%)

$$b = 0,014g + 0,247$$

e : CONCENTRAÇÃO DE ETANOL

$$b = 0,025e + 0,46$$

b : CONCENTRAÇÃO DE BACTÉRIAS

A importância destas relações está na possibilidade de podermos conhecer a quantidade de bactérias na solução em qualquer instante, sabendo a concentração de etanol ou do substrato presente, cujas medições experimentais são, em geral, mais fáceis de se fazer que a primeira.

D) BIBLIOGRAFIA

BASSANEZI, R.C. e MEYER, J.F.- "Um Modelo Alternativo para Exploração de Recursos Renováveis", in Atas SBMAC - Maringá (1980)

BATSCHLET, E.- "Introduction to Mathematics for Life Scientists", Springer-Verlag, pág. 281-320 (1973)

DALL'OCA, S.R.- "Cálculo dos Parâmetros de Crescimento Microbiano pelo Computador", Dissertação de Mestrado - FEAA/UNICAMP (1978)

MONOD, J.- "The Growth of Bacterial Cultures", in Ann. Rev. Microbiology, 3, 371 (1949)

PARAÍBA, L.C.- "Um Modelo Global em Dinâmica Populacional de uma Espécie Isolada", Dissertação de Mestrado - IMECC/UNICAMP (1983)

KONO, T.- "Kinetics of Microbial Cell Growth", in Biotechnology and Bioengineering, vol. X, I. 2, pág. 105-131 (1968)