# Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

## Um Modelo Matemático para Produção de Biohidrogênio

Felipe Teles<sup>1</sup>

Helenice Florentino<sup>2</sup>

Departamento de Bioestatística, Instituto de Biociências de Botucatu, UNESP, 18618-689 São Paulo, Brasil.

Marianna Cerasuolo<sup>3</sup>

Departamento de Matemática, Universidade de Portsmouth, PO1 3HF Portsmouth, Inglaterra UK.

## 1 Introdução

Este trabalho visa determinar um modelo matemático com o intuito de entender e descrever a dinâmica das bactérias, produtos e substratos no processo de Fermentação Escura (FE) para produção de biohidrogênio, assim como estudar as propriedades deste modelo à luz da teoria de estabilidade, de forma a confirmar sua representatividade perante o processo real. O biohidrogênio é o único biocombustível conhecido na atualidade que não se encontra quimicamente ligado aos átomos de carbono e, consequentemente, ao reagir com o oxigênio na reação de combustão, libera apenas vapor d'água e calor, o que permite classificar este recurso como uma fonte renovável e limpa de energia. Além disto, este biogás é altamente compressível, de baixa densidade e possui alto poder calorífico, muito maior quando comparado às fontes tradicionais de energia, como a gasolina e o etanol [2]. Ele pode ser gerado na presença ou ausência de fontes luminosas e associado a vários tipos de substratos orgânicos, como resíduos de indústrias de processamento vegetal e anumal [3]. No caso da FE, a matéria orgânica inserida no biorreator é convertida em ácidos orgânicos, biohidrogênio e outros subprodutos, na ausência de fonte luminosa. Isto confere ao bioprocesso baixo custo operacional e permite a geração de biogás através do tratamento de resíduos orgânicos [3]. Um dos grandes desafios atuais na produção de biohidrogênio é tornar a FE comerciável, pois grande parte do volume deste gás ainda é gerado em laboratórios de pesquisa. Para isto, é preciso conhecer propriedades, automatizar, controlar e otimizar o processo, de forma que a conversão de resíduos em fontes limpas de energia seja eficiente. Neste contexto, este trabalho tem muito a contribuir.

#### 2 Modelo matemático

O foco principal deste trabalho é a modelagem matemática do processo FE. O modelo matemático foi desenvolvido considerando o balanço global de fluxo mássico [1], sob um volume de controle de um biorreator que opera em batelada, para as espécies bioquímicas

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>felipe.teles@unesp.br

 $<sup>^2</sup> helenice. silva@unesp.br\\$ 

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>marianna.cerasuolo@port.ac.uk

2

substrato, bactérias e produtos, a cada instante t. A variação da massa em um sistema pode ser entendida como a diferença entre os fluxos de entrada e saída de massa por suas fronteiras, adicionada à diferença entre a massa gerada e a consumida no interior do volume de controle. A FE pode ser descrita por uma sequência de reações químicas mediadas por bactérias de três diferentes tipos: hidrolíticas  $(X_1)$ , acidogênicas  $(X_2)$  e acetogênicas  $(X_3)$ . O processo fermentativo inicia-se com a degradação de um substrato  $S_1$ , de origem orgânica, por  $X_1$ , gerando diversos compostos, como a glicose  $(S_2)$ , a qual é convertida em ácidos carboxílicos, como o propiônico  $(S_3)$  e o acético  $(P_1)$ , entre outros, pela ação de  $X_2$ , cogerando gás carbônico  $(P_2)$  e biohidrogênio  $(P_3)$ .  $S_3$  pode ser convertido por  $X_3$  em ácido butírico ou acético, gerando também  $P_2$  e  $P_3$ . Apesar de ambos ácidos poderem ser convertidos em biohidrogênio, neste trabalho considerou-se a rota metabólica do acetato, uma vez que seu rendimento é o dobro da via do butirato [3]. Utilizando esta sequência de reações químicas descritas, foi proposto o desenvolvimento e análise de um modelo matemático para descrever a dinâmica da FE de resíduos industriais orgânicos através de um conjunto de equações diferenciais ordinárias. Tal metodologia será apresentada e discutida durante o evento. As propriedades algébricas estudadas analiticamente e as simulações computacionais realizadas permitiram inferir que o modelo tem grande potencial para descrever a FE e, por conseguinte, mostrou que esta metodologia pode auxiliar no planejamento, entendimento e operação da FE para produção de biohidrogênio com bons rendimentos e baixo impacto ambiental.

### Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Os autores agradecem também aos órgãos de fomento: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq (302454/2016-0), PROPE-PROPG/UNESP, Fundação ao para o Desenvolvimento da UNESP - FUNDUNESP e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP pelo apoio financeiro.

#### Referências

- [1] O. Bernard. Mass balance modelling of bioprocesses, *Mathematical Control Theory*, ICTP Lecture Notes, pages 769-812, 2002.
- [2] E. Omar, A. R. Haitam and B. FREDE. Renewable energy sources: Current status, future prospects and their enabling technology, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 30:748–764, 2014.
- [3] B. B. Romão, F. R. X. Batista, J. S. Ferreira, H. C. B. Costa, M. M. Resende and V. L. Cardoso. Biohydrogen Production Through Dark Fermentation by a Microbial Consortium Using Whey Permeate as Substrate, Applied Biochemistry and Biotechnology, 172:3670--3685, 2014.