

BMM5729 – Análise Sistêmica e Engenharia do Metabolismo

Tratamento de dados + balanços (C e redox)

Parte 3: Reconciliação de Dados

Rafael Nahat

2016

Aula passada – batelada alimentada

Massa de glicose consumida acumulada = $m_{S,out}$

t cultivo = 0 h:

$$m_{S,out} = 0$$

Até $t = 12$ h:

$$m_{S,out} = C(0) * V(0) - C(t) * V(t)$$

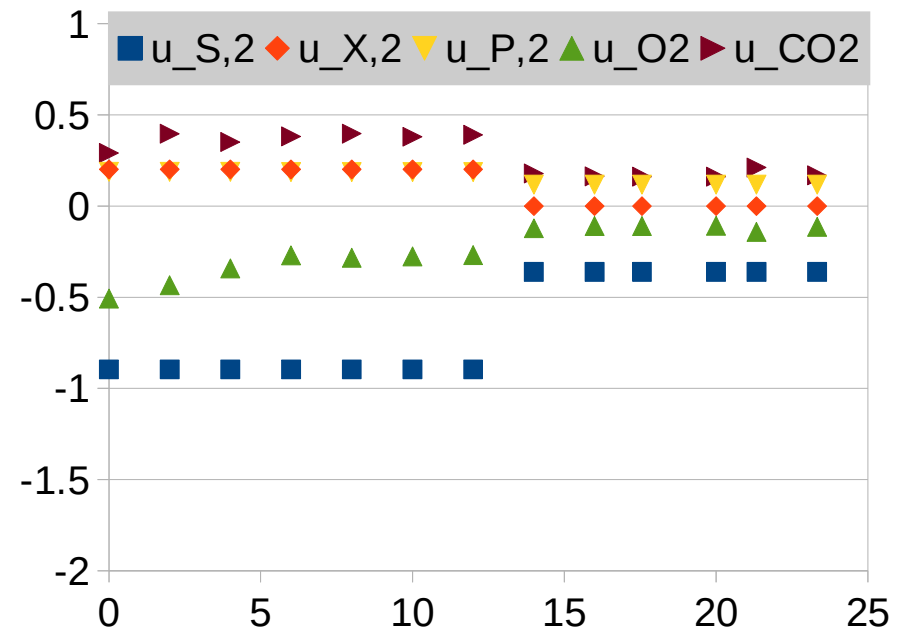
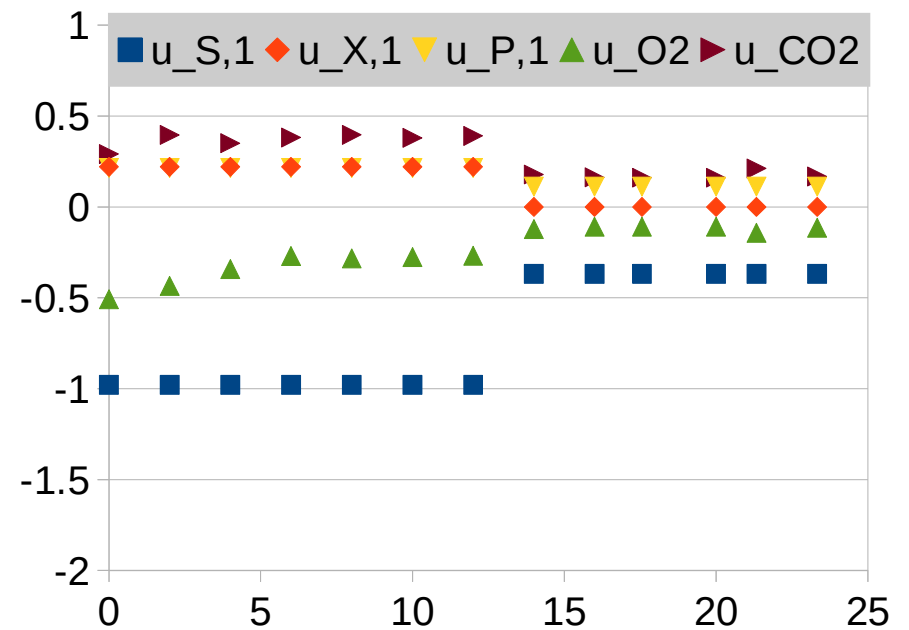
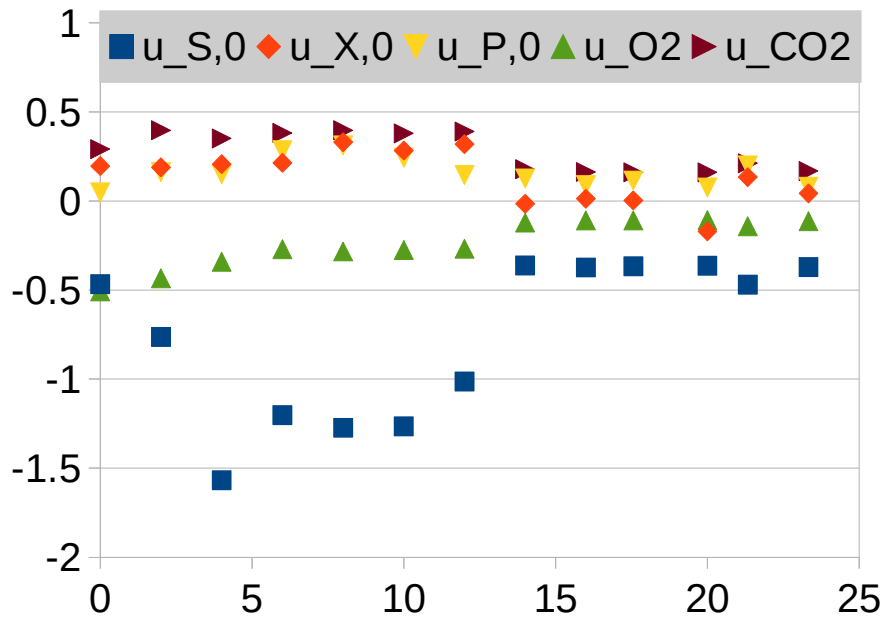
$t = 14$ h:

$$(33 / 60) * F * C_{S,in} + C(0) * V(0) - C(14) * V(14)$$

$t \geq 14$ h:

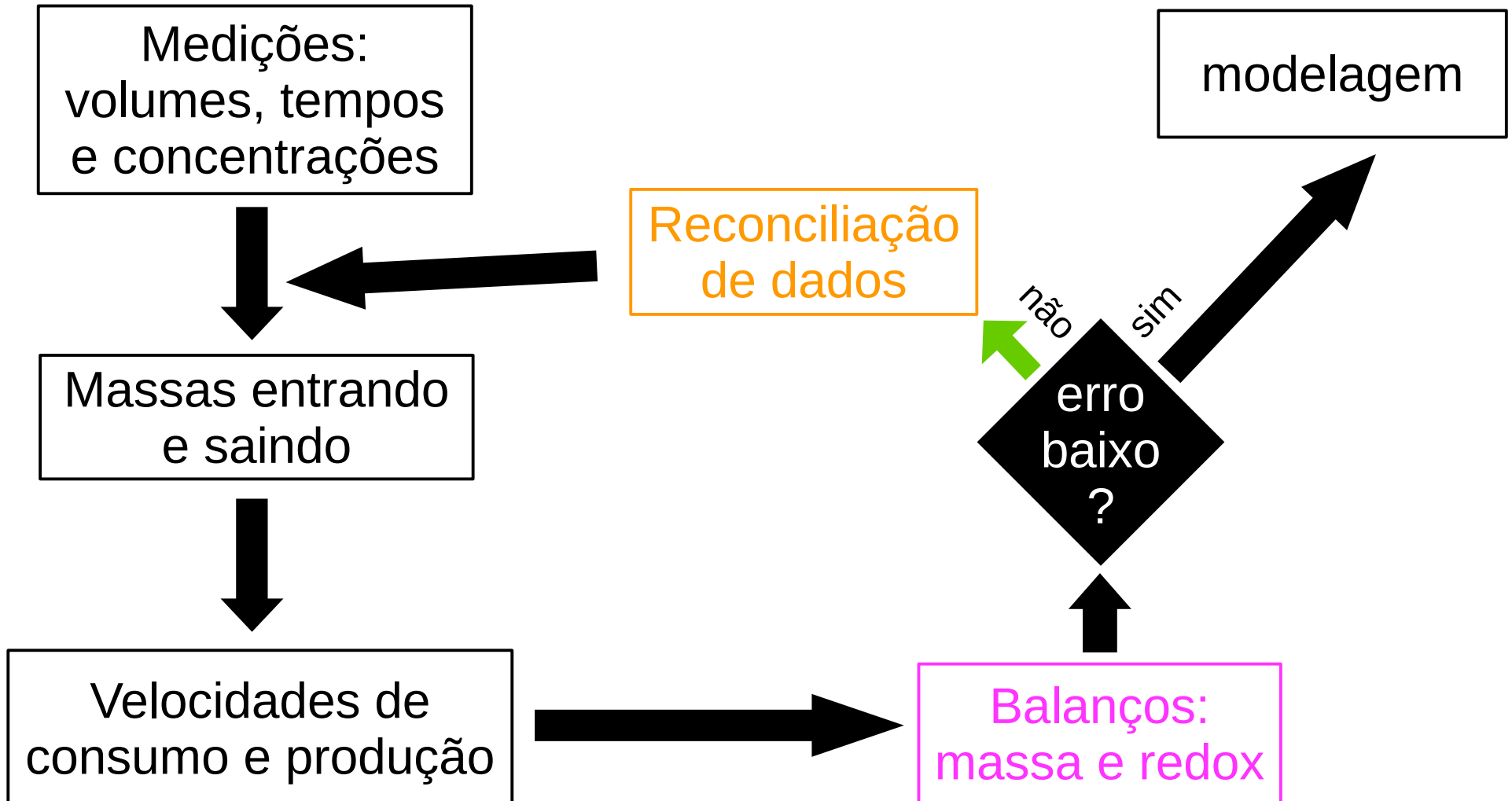
$$(t - 14 + 33/60) * F * C_{S,in} + C(0) * V(0) - C(t) * V(t)$$

Aula passada – batelada alimentada



Reconciliação de dados

Vamos **olhar para frente** para decidir **como proceder agora**



Reconciliação de dados

O que é reconciliação de dados?

Encontrar novas estimativas para variáveis observadas usando relações conhecidas entre elas e os dados existentes

Exemplos:

- Montagem de genoma: sequências repetidas em fragmentos
- Processo químico: balanço de massa e energia
- Crescimento microbiano ilimitado: cinética exponencial

Reconciliação de dados

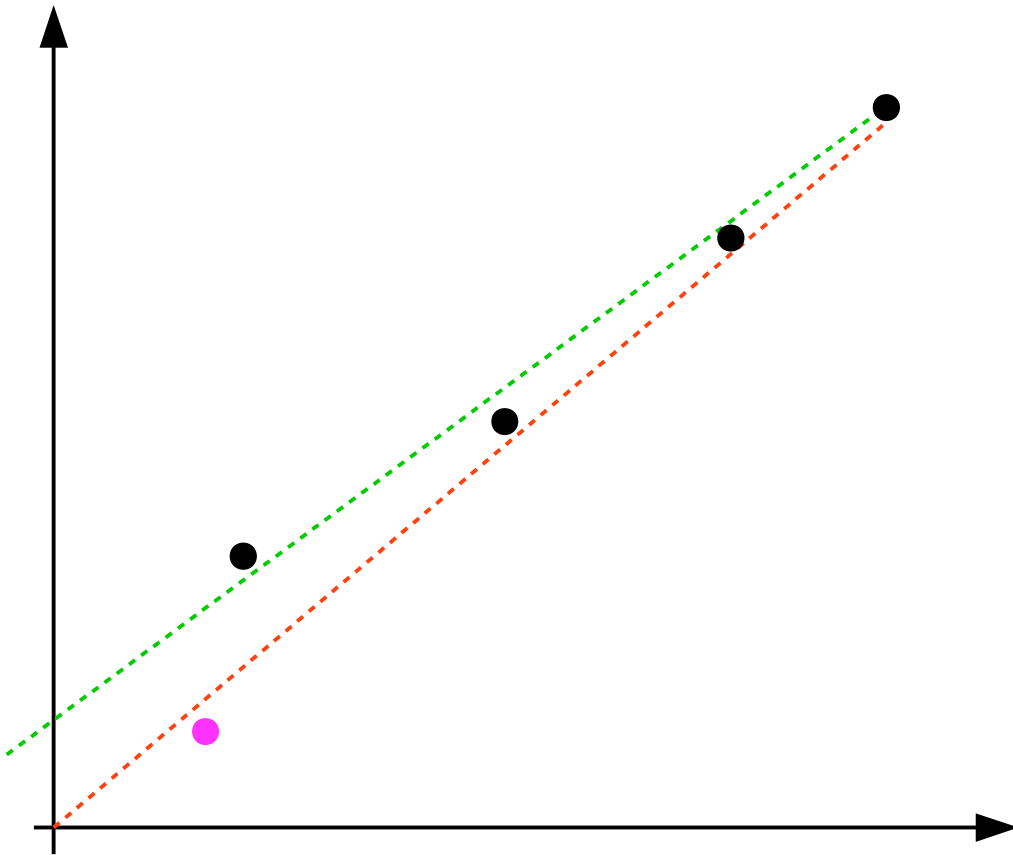
O que é reconciliação de dados?

Encontrar novas estimativas para variáveis observadas usando relações conhecidas entre elas e os dados existentes

- É sempre possível torturar os números até eles dizerem o que você quer. Mas aí ninguém acreditará neles!
- Por isso, as relações precisam ser fortes. A única exceção é quando a relação é uma hipótese a ser refutada

Reconciliação de dados

Exemplo de reconciliação com relação fraca:



As únicas informações sólidas que temos são:

- Passar pelo (0,0)
- O primeiro ponto não é confiável

=> podemos reconciliar para a reta verde refutando a seguinte hipótese:

“os erros sistemáticos desde as nossas medições até nossos cálculos são desprezíveis”

Reconciliação de dados

Exemplos de relações fortes num cultivo em biorreator:

- Balanço de massa
- Balanço redox (carga elétrica)
- Formato do gráfico $\mu = f(C_0/N_0, C_0/P_0, \dots)$ - múltipla-limitação
- Balanço de energia térmica (entalpia, fluxo de calor)
- Substratos não-esgotados não são limitantes
- Crescimento exponencial x crescimento limitado
- Num quimiostato, $\mu = D$

Reconciliação de dados

Balanço de massa (BM):

- Não dá para avaliar o BM total por causa da água
- Não dá para avaliar o BM de H, O ou qualquer elemento que não possua medidas de todas as entradas e saídas
- Num bioprocesso o mais conveniente é o BM de C:
 - Altas frações mássicas nas entradas e nas saídas
 - Os outros elementos são metabolizados em função do C
 - Muitos organismos usa o C como fonte de energia

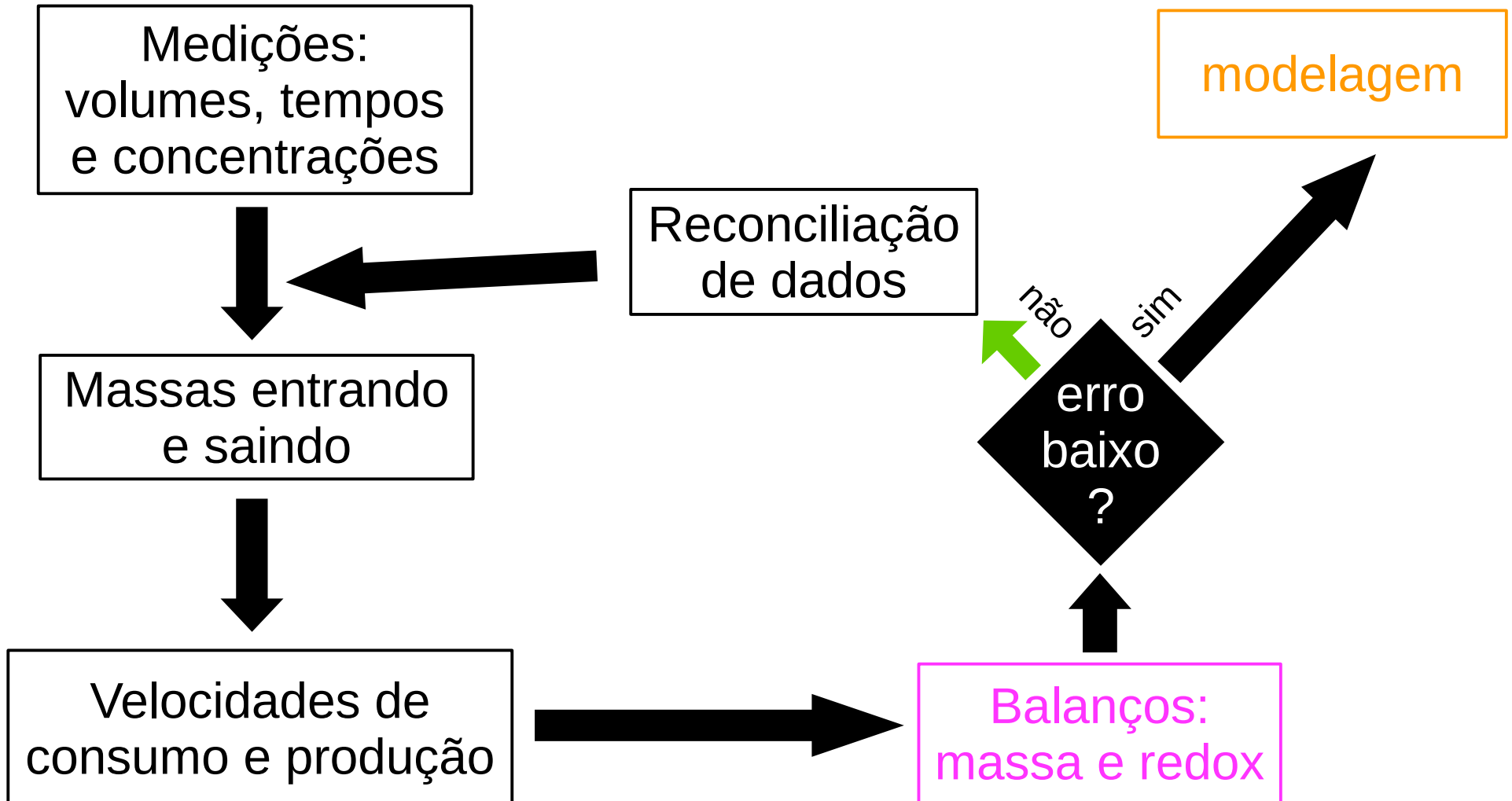
Reconciliação de dados

Balanço redox (BR):

- Restrição adicional para os metabólitos diretamente relacionados à obtenção de energia do metabolismo
- Em grande parte dos casos pode ser calculado com as mesmas medições já usadas para o BM de C
- Verificação de consistência mais para frente (modelagem):
 - Composição da biomassa
 - Restrições termodinâmicas
 - Energia de manutenção

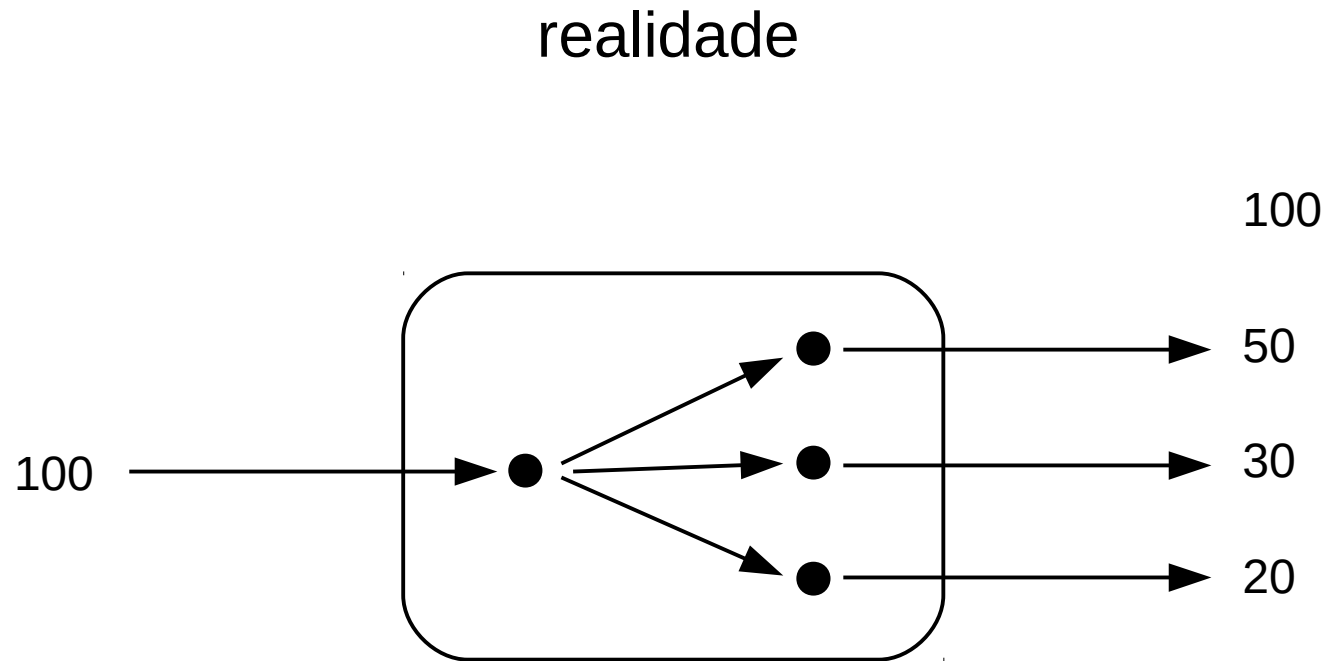
Reconciliação de dados

Vamos **olhar para frente** para decidir **como proceder agora**



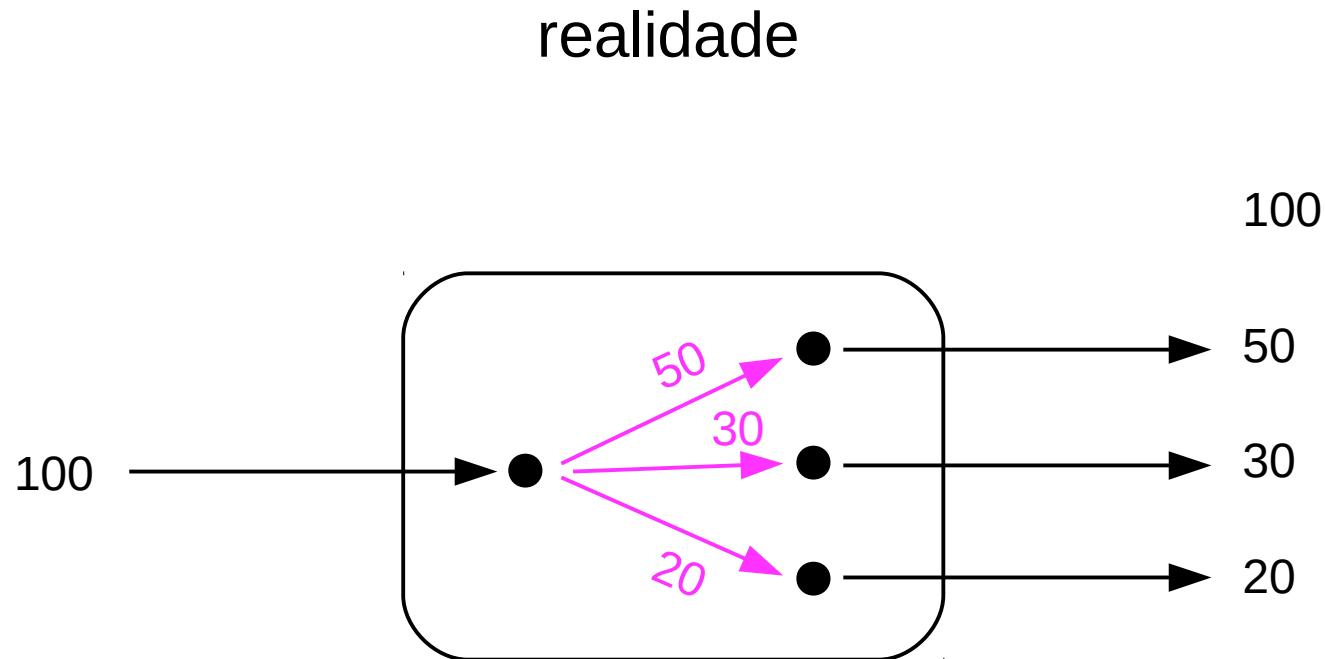
Balanço de massa de carbono

Importância do balanço de massa de carbono para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:



Balanço de massa de carbono

Importância do balanço de massa de carbono para determinar **distribuições de fluxos** que expliquem os dados experimentais:



Balanço de massa de carbono

Importância do balanço de massa de carbono para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

realidade

Erro: saiu mais que entrou

reconc.

100

120

100 100

50

60

40 60

30

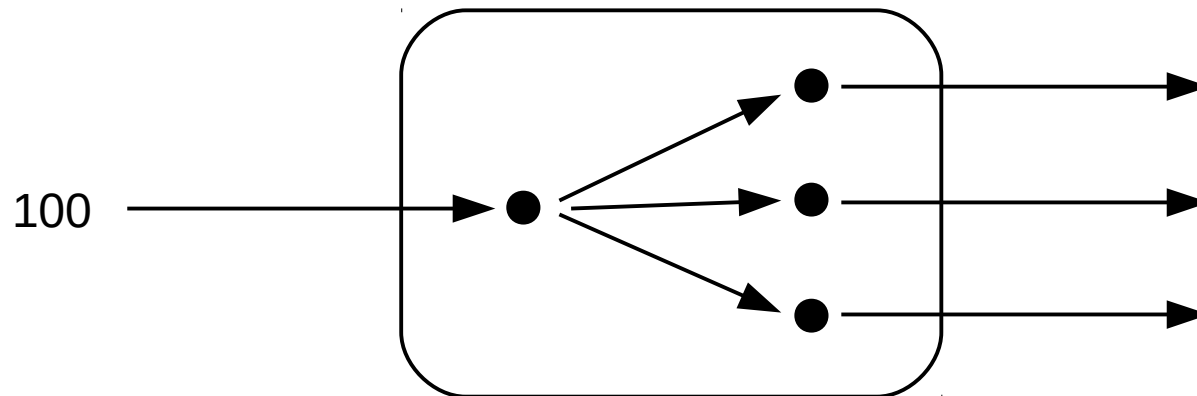
35

35 35

20

25

25 5



Balanço de massa de carbono

Importância do balanço de massa de carbono para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

realidade

Erro: entrou mais que saiu

reconc.

100

80

100 100

50

50

62 50

30

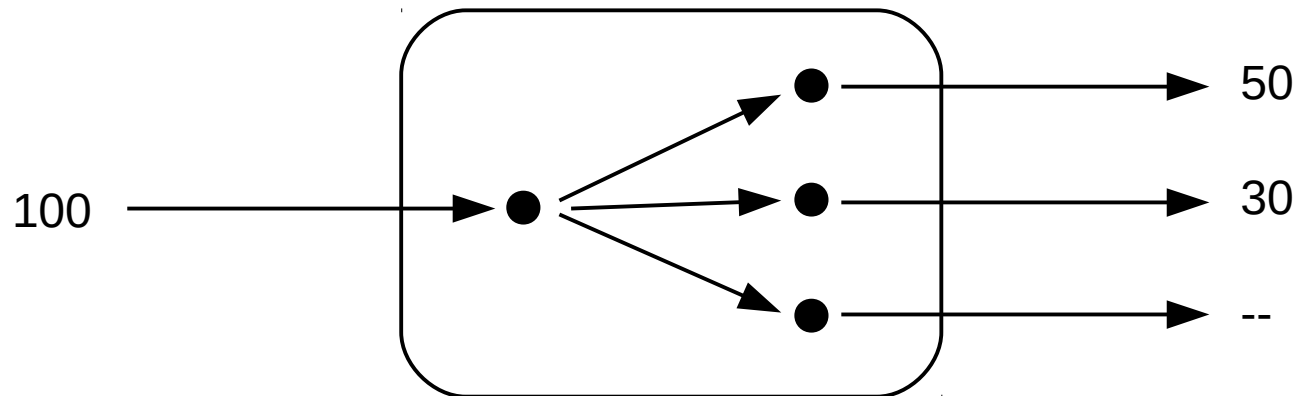
30

38 30

20

--

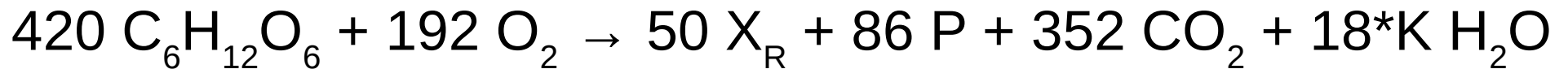
-- 20



Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):

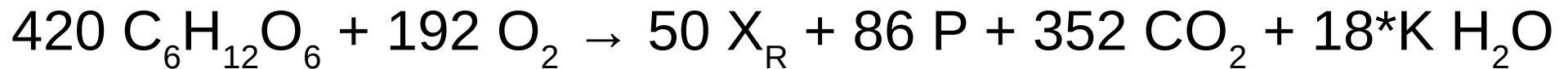


- Massas molares (g/mol): C = 12; O = 16; H = 1
- P é $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$
- Hipótese: X_R tem 48%wt de carbono

Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):



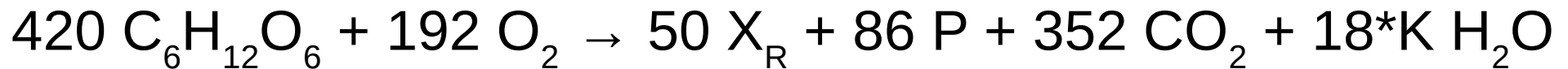
- Massas molares (g/mol): C = 12; O = 16; H = 1
- P é $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$
- Hipótese: X_R tem 48%wt de carbono

$$\begin{aligned} \text{BM de C: } 420 \cdot 0.4 &= 50 \cdot 0.48 + 4 \cdot 12 / 86 \cdot 86 + 12 / 44 \cdot 352 \\ 168 &= 24 + 48 + 96 \rightarrow \text{OK} \end{aligned}$$

Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):



- Massas molares (g/mol): C = 12; O = 16; H = 1
- P é $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2 \rightarrow \text{NOX médio do C} = -0.5$
- Hipótese: X_R tem 48%wt de carbono

BM de C: OK

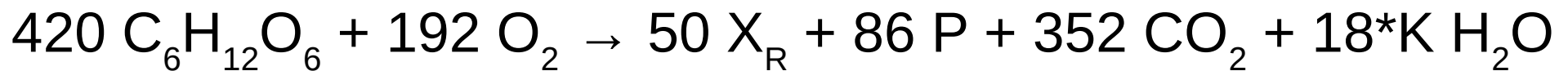
$$\text{BR: } 352/44 \cdot (4 - 0) = 192/32 \cdot 4 + 86/86 \cdot 4 \cdot 0.5 + 0.48 \cdot 50/12 \cdot Z$$

$Z = 3 \text{ e}^-$ foram para cada C da biomassa $\rightarrow \text{NOX do C é } -3$

Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):



- Massas molares (g/mol): C = 12; O = 16; H = 1
- Hipótese: X_R tem 48%wt de carbono

BM de C: OK

BR: o NOX médio do C na X_R é -3

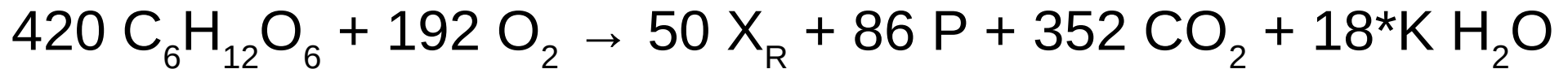
$$\text{BM de H: } 420/180 \cdot 12 = n_{\text{H},\text{XR}} + 86/86 \cdot 6 + 2 \cdot K$$

$$\begin{aligned} \text{BM de O: } 420/180 \cdot 6 + 192/16 = & (50 \cdot (1 - 0.48) - n_{\text{H},\text{XR}} \cdot 1)/16 + \\ & + 86/86 \cdot 2 + 352/44 \cdot 2 + K \end{aligned}$$

Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):



- Massas molares (g/mol): C = 12; O = 16; H = 1
- Hipótese: X_R tem 48%wt de carbono

BM de C: OK

BR: o NOX médio do C na X_R é -3

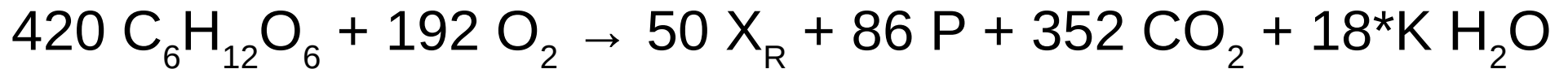
BM de H: $28 = n_{\text{H},\text{XR}} + 6 + 2 \cdot K$

BM de O: $26 = (26 - n_{\text{H},\text{XR}})/16 + 18 + K$

Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):



- Massas molares (g/mol): C = 12; O = 16; H = 1
- Hipótese: X_R tem 48%wt de carbono

BM de C: OK

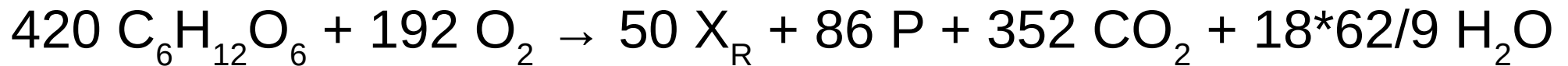
BR: o NOX médio do C na X_R é -3

$$K = 62/9 ; n_{\text{H},\text{XR}} = 74/9$$

Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):



- Massas molares (g/mol): C = 12; O = 16; H = 1
- Hipótese: X_R tem 48%wt de carbono

BM de C: OK

BR: o NOX médio do C na X_R é -3

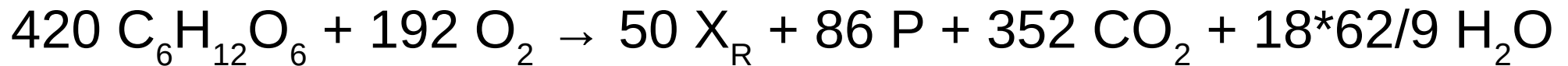
$$n_{\text{H},\text{XR}} = 74/9 \rightarrow n_{\text{O},\text{XR}} = (50 - 24 - 74/9 \cdot 1)/16 = 10/9$$

Fórmula mínima de XR: $\text{CH}_{74/18}\text{O}_{10/18} \rightarrow$ NOX do C é -3

Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):



- Massas molares (g/mol): C = 12; O = 16; H = 1
- Hipótese: X_R tem 48%wt de carbono

BM de C: OK

BR e BM's de H e O: X_R é $\text{CH}_{74/18}\text{O}_{10/18} \approx \text{CH}_{4.1}\text{O}_{1.1}$

Em massa, X_R é 48% C, 16.44% H e 35.56% O

Balanço redox

Importância do balanço redox para determinar distribuições de fluxos que expliquem os dados experimentais:

Reação global equivalente (em g):



- Pelo balanço redox já obtivemos que o NOX do C na XR é -3
- Se $|\text{NOX}| \geq 3$ algo provavelmente está errado (aqui no caso é não termos considerado o nitrogênio, que é abundante na X_R)
- É um critério a mais para fazer reconciliação, além do BM

PERGUNTA SURPRESA

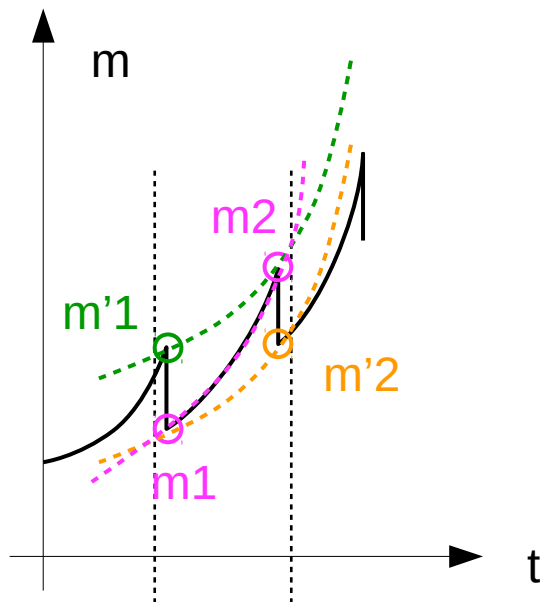
Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



Massas de X_R corretas: $m1$ e $m2$

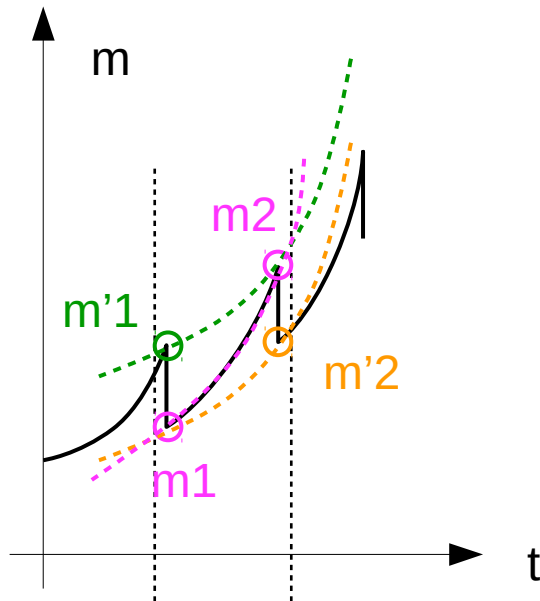
Volumes antes da amostragem: uma massa errada $m'1$ e uma certa $m2$

Volumes depois da amostragem: uma massa certa $m1$ e uma errada $m'2$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



Alíquota (2%) = α

$$\frac{m2}{m1} = e^{\mu_{certo} \cdot \Delta t}$$

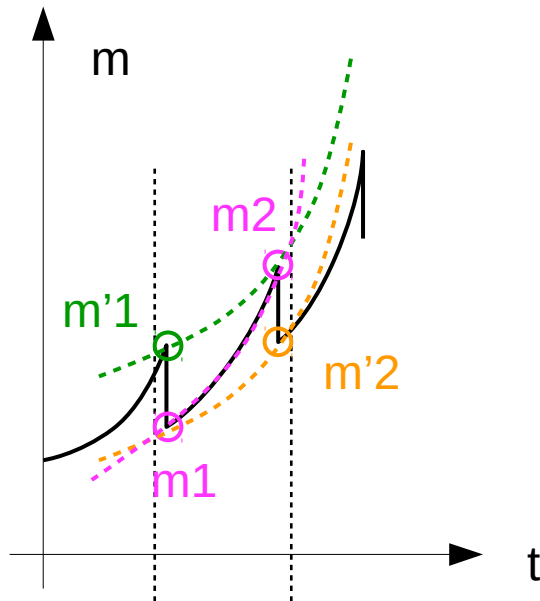
$$m'1 = m1 / (1 - \alpha) \rightarrow$$
$$m2/m'1 = (1 - \alpha) * m2/m1$$

$$m'2 = (1 - \alpha) * m2 \rightarrow$$
$$m'2 / m1 = (1 - \alpha) * m2/m1$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



Alíquota (2%) = α

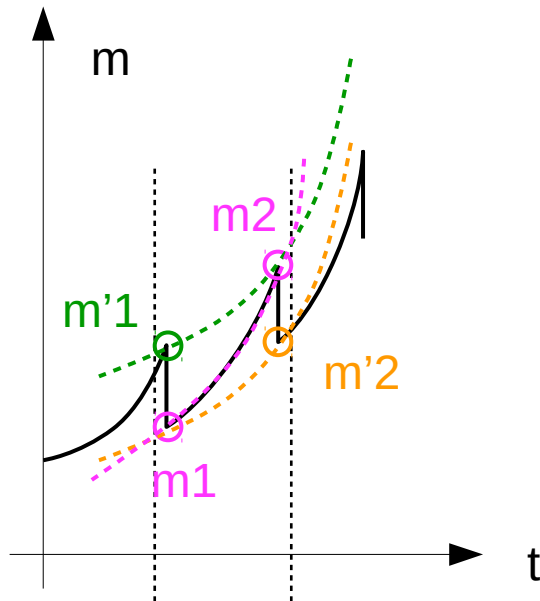
$$\frac{m2}{m1} = e^{\mu_{certo} \cdot \Delta t}$$

$$(1 - \alpha) \cdot \frac{m2}{m1} = e^{\mu_{errado} \cdot \Delta t}$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



Alíquota (2%) = α ; $\Delta t = 1$ h

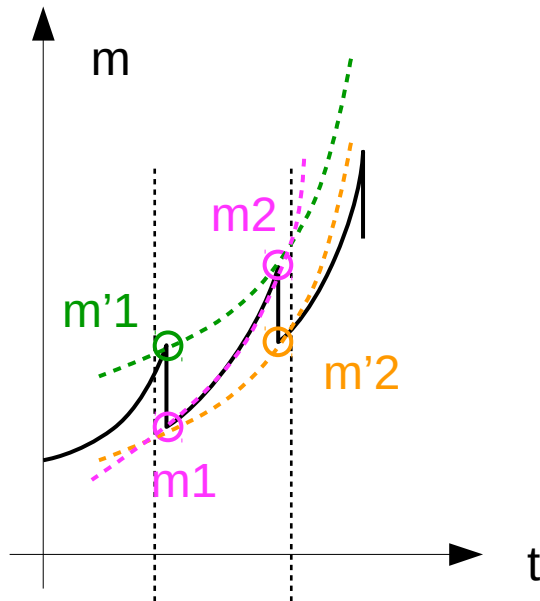
$$\frac{m_2}{m_1} = e^{\mu_{\text{certo}}}$$

$$(1 - \alpha) \cdot \frac{m_2}{m_1} = e^{\mu_{\text{errado}}}$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



Alíquota (2%) = α ; $\Delta t = 1$ h

$$\frac{m_2}{m_1} = e^{\mu_{\text{certo}}}$$

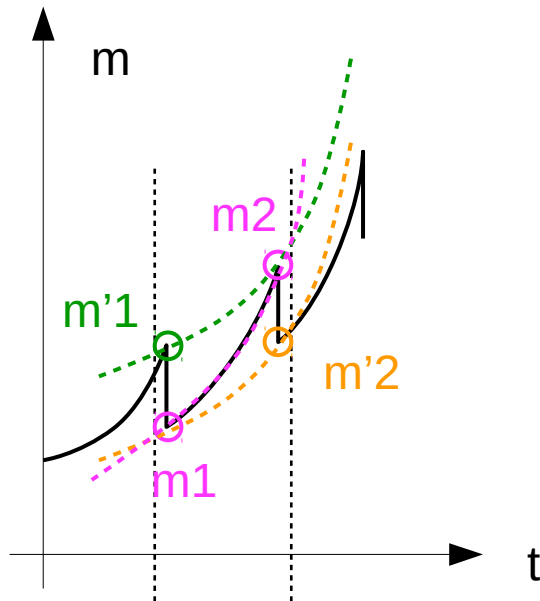
$$(1 - \alpha) \cdot \frac{m_2}{m_1} = e^{\mu_{\text{errado}}}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{1 - \alpha} = e^{\mu_{\text{certo}} - \mu_{\text{errado}}}$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



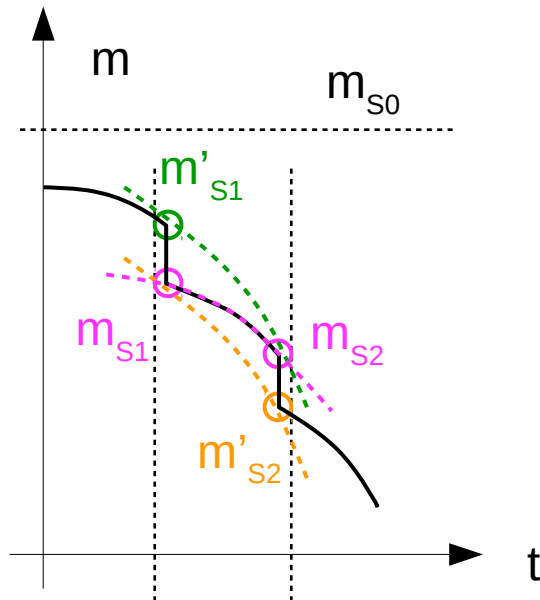
Alíquota (2%) = α ; $\Delta t = 1$ h

$$\frac{1}{1-\alpha} = e^{\mu_{\text{certo}} - \mu_{\text{errado}}} \quad \longrightarrow \quad \ln\left(\frac{1}{1-\alpha}\right) = \mu_{\text{certo}} - \mu_{\text{errado}}$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



Já temos o μ_{XR} , agora vamos estimar o μ_{glicose} do mesmo jeito, comparando certo e errado

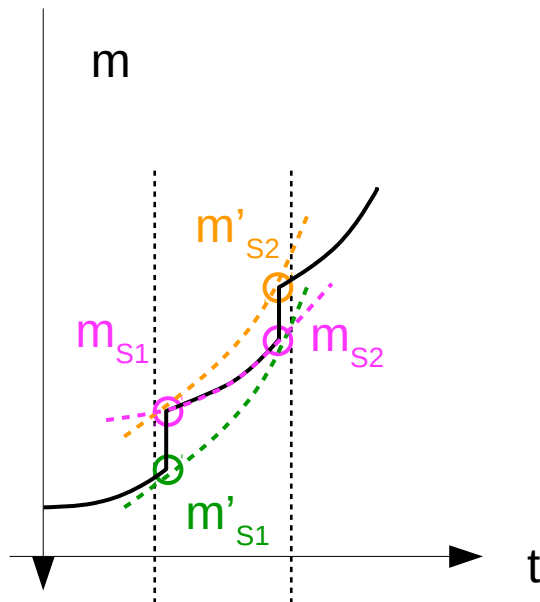
O $\mu_{\text{glicose}} = k_1 * \mu_{XR}$, e o gráfico de glicose consumida é simplesmente a massa inicial de glicose MENOS o gráfico ao lado

A curva de glicose consumida será também uma exponencial, espelhando horizontalmente o gráfico ao lado

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



$$\frac{m_{s2}}{m_{s1}} = e^{k_1 \cdot \mu_{certo} \cdot \Delta t}$$

Massa “consumida” pela amostra = $\alpha * m_{antes}$

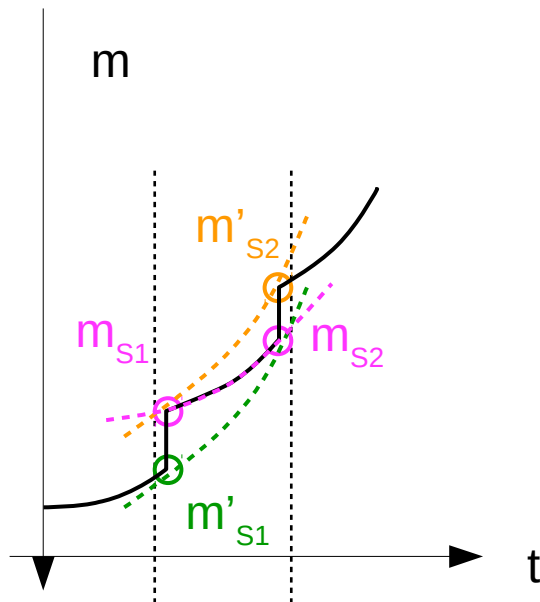
$$m_{s1} - m'_{s1} = \alpha * m'_{s1} \rightarrow m_{s1} = (1 + \alpha) * m'_{s1}$$

$$m'_{s2} - m_{s2} = \alpha * m_{s2} \rightarrow m'_{s2} = (1 + \alpha) * m_{s2}$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



$$\frac{m_{S2}}{m_{S1}} = e^{k_1 \cdot \mu_{certo} \cdot \Delta t}$$

Massa “consumida” pela amostra = $\alpha * m_{antes}$

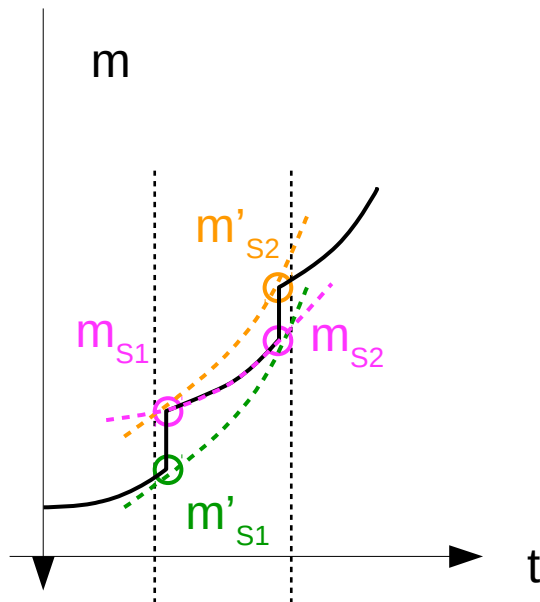
$$m_{S1} = (1 + \alpha) * m'_{S1} \rightarrow m_{S2}/m'_{S1} = (1 + \alpha) * m_{S2}/m_{S1}$$

$$m'_{S2} = (1 + \alpha) * m_{S2} \rightarrow m'_{S2}/m_{S1} = (1 + \alpha) * m_{S2}/m_{S1}$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



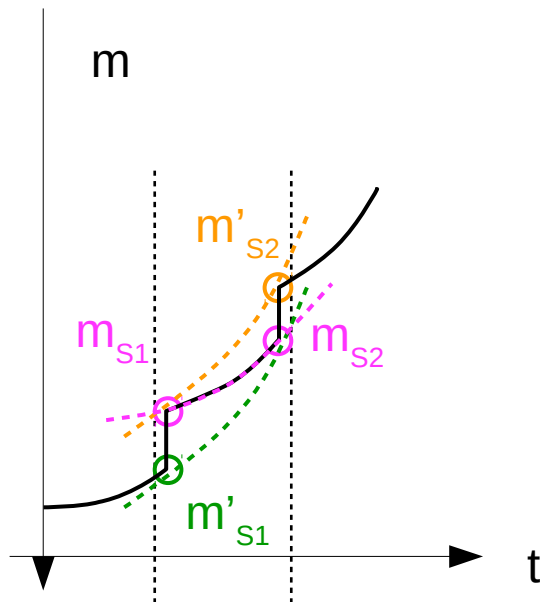
$$\frac{m_{s2}}{m_{s1}} = e^{k_1 \cdot \mu_{certo} \cdot \Delta t}$$

$$(1 + \alpha) \cdot \frac{m_{s2}}{m_{s1}} = e^{k_1 \cdot \mu_{errado} \cdot \Delta t}$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?



Alíquota (2%) = α ; $\Delta t = 1$ h

$$\frac{m_{s2}}{m_{s1}} = e^{k_1 \cdot \mu_{certo} \cdot \Delta t}$$

$$\frac{m_{s2}}{m_{s1}} = e^{k_1 \cdot \mu_{errado} \cdot \Delta t} \quad \longrightarrow \quad \ln\left(\frac{1}{1+\alpha}\right) = k_1 \cdot (\mu_{certo} - \mu_{errado})$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?

Agora os gases: O_2 não entra no BM de carbono e μ_{CO_2} não é afetado pela amostragem na fase líquida. Então $\mu_{CO_2} = k_2 * \mu_{certo}$ com ou sem amostragem

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?

Usando as frações mássicas f_1 , f_2 e 0.5 (glicose, CO_2 e X_R) + equações anteriores:

$$\ln\left(\frac{1}{1+\alpha}\right) = k_1 \cdot (\mu_{certo} - \mu_{errado}) \qquad \ln\left(\frac{1}{1-\alpha}\right) = \mu_{certo} - \mu_{errado}$$

$$\epsilon' = k_1 \cdot \mu_{errado} \cdot f_1 - \mu_{errado} \cdot 0.5 - k_2 \cdot \mu_{certo} \cdot f_2 - 1$$

$$\epsilon = k_1 \cdot \mu_{certo} \cdot f_1 - \mu_{certo} \cdot 0.5 - k_2 \cdot \mu_{certo} \cdot f_2 - 1$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?

Usando as frações mássicas f_1 , f_2 e 0.5 (glicose, CO_2 e X_R) + equações anteriores:

$$\epsilon' = [k_1 \cdot \mu_{certo} + \ln(1 + \alpha)] \cdot f_1 - [\mu_{certo} + \ln(1 - \alpha)] \cdot 0.5 - k_2 \cdot \mu_{certo} \cdot f_2 - 1$$

$$\epsilon' = \epsilon + \ln(1 + \alpha) \cdot f_1 - \ln(1 - \alpha) \cdot 0.5$$

$$\epsilon = k_1 \cdot \mu_{certo} \cdot f_1 - \mu_{certo} \cdot 0.5 - k_2 \cdot \mu_{certo} \cdot f_2 - 1$$

PERGUNTA SURPRESA

Suponha um cultivo em batelada em fase exponencial, com tempo de duplicação de 2 h e amostragem a cada 1 h com uma alíquota de 2% do volume no reator. Há apenas consumo de glicose e O_2 e formação de X_R (50%wt de carbono) e CO_2 .

Qual é o erro absoluto introduzido no balanço de massa de carbono ao desconsiderar os volumes retirados nas amostras?

OBS: o erro era entrada menos saída, logo esse desvio positivo é entrada maior ou saída menor. Nos “ajuste 1” e “ajuste 2” da planilha de exercícios de batelada alimentada, esse desvio de 0.018 representa entre 22% e 85% dos erros!

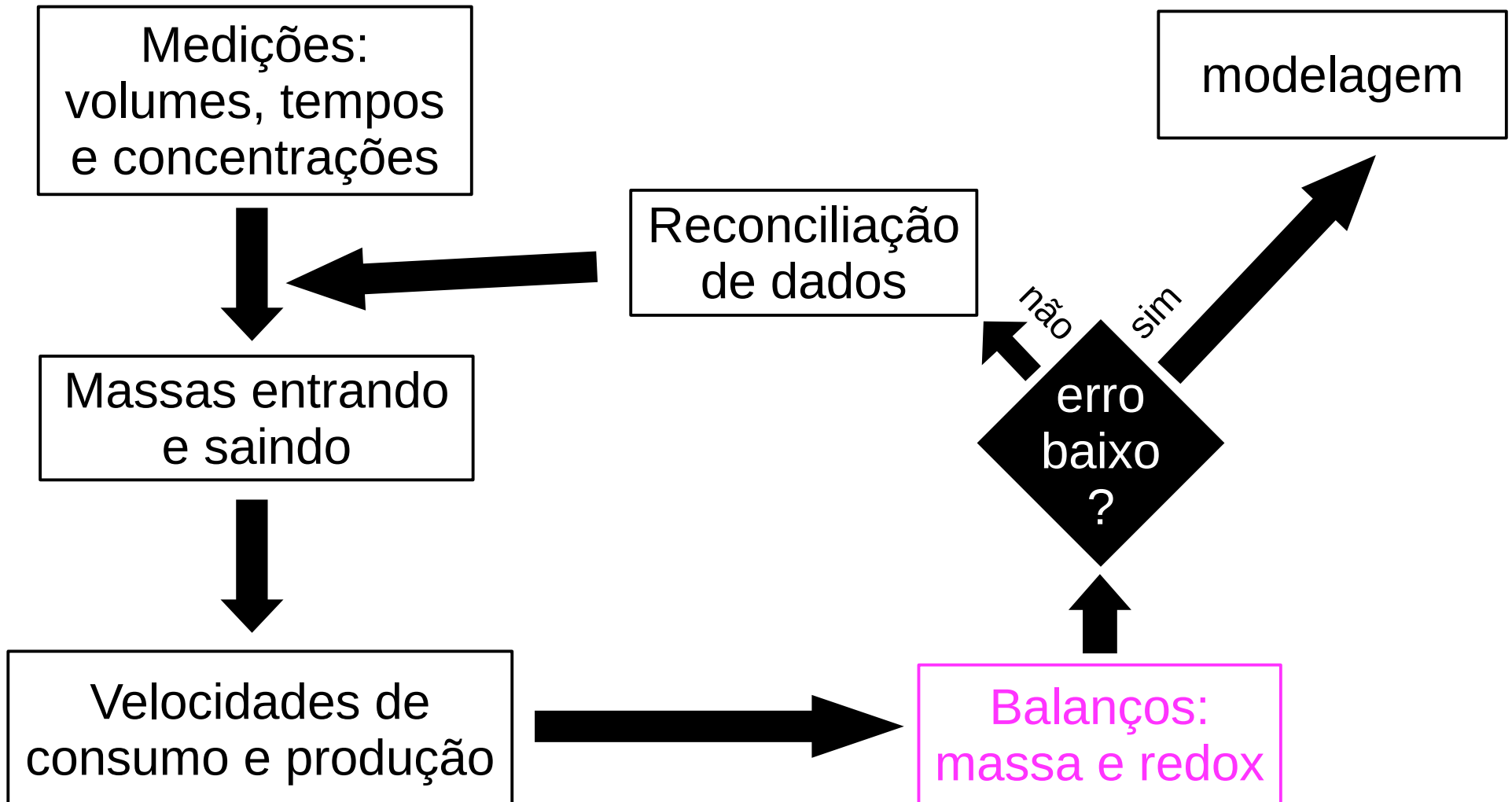
$$\epsilon' = [k_1 \cdot \mu_{certo} + \ln(1 + \alpha)] \cdot f_1 - [\mu_{certo} + \ln(1 - \alpha)] \cdot 0.5 - k_2 \cdot \mu_{certo} \cdot f_2 - 1$$

$$\epsilon' = \epsilon + \ln(1 + \alpha) \cdot f_1 - \ln(1 - \alpha) \cdot 0.5$$

$$\epsilon' - \epsilon = \ln(1 + \alpha) \cdot f_1 - \ln(1 - \alpha) \cdot 0.5 = +0.018 \text{ h}^{-1}$$

Reconciliação de dados

Voltando para os balanços



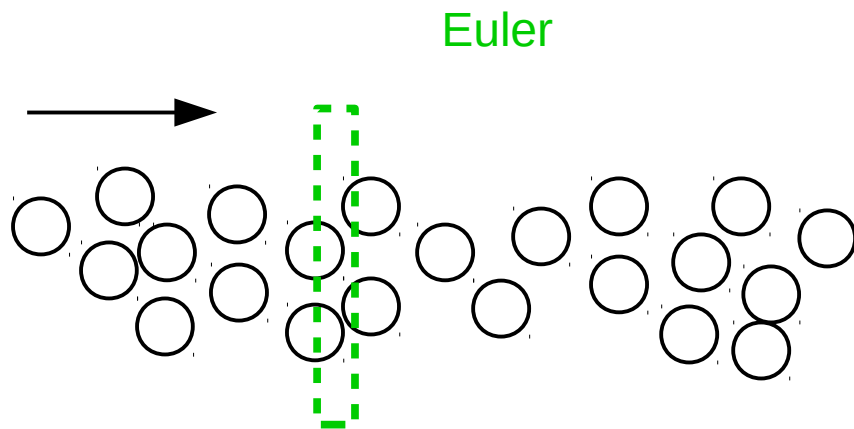
Balanço de massa de carbono

$$\begin{array}{rcl} E & = & q_+ - q_- \\ \text{erro} & = & \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{saindo} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{entrando} \end{array} \right) \end{array}$$

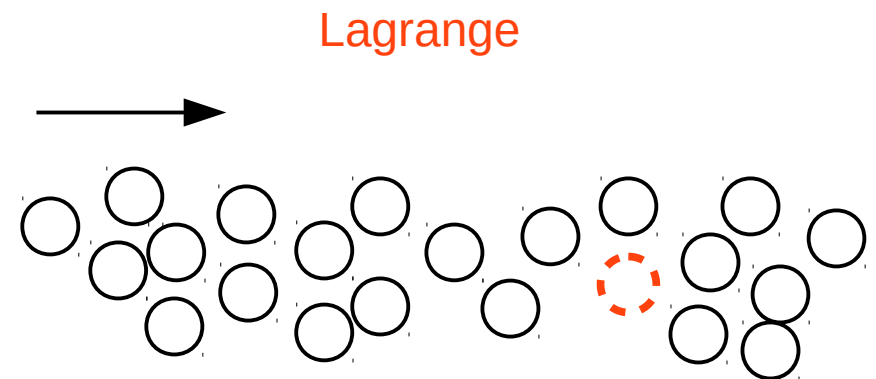
Balanço de massa de carbono

$$\begin{aligned} E &= q_+ - q_- \\ \text{erro} &= \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{saindo} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{entrando} \end{array} \right) \end{aligned}$$

Podemos calcular esses erros segundo 2 pontos de vista:



radar da auto-estrada

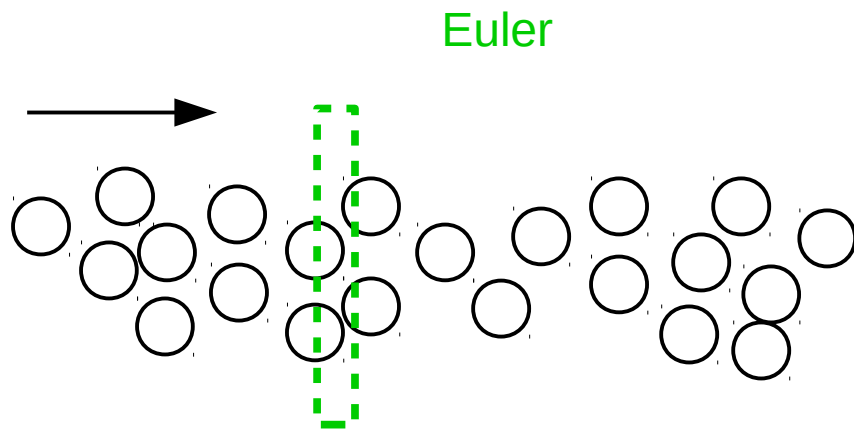


velocímetro de 1 carro

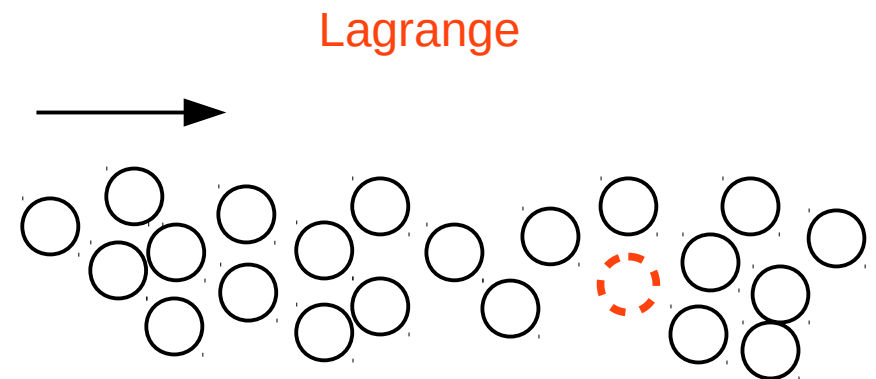
Balanço de massa de carbono

$$\begin{aligned} E &= q_+ - q_- \\ \text{erro} &= \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{saindo} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{entrando} \end{array} \right) \end{aligned}$$

Podemos calcular esses erros segundo 2 pontos de vista:



radar da auto-estrada



velocímetro de 1 carro

Perguntas: qual dos 2 pontos de vista é mais vantajoso para comparar com uma distribuição de fluxos e por quê? Quando o outro é mais vantajoso e por quê?

Balanço de massa de carbono

$$\begin{aligned} E &= q_+ - q_- \\ \text{erro} &= \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{saindo} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{entrando} \end{array} \right) \end{aligned}$$

Frações mássicas de carbono

$$\begin{aligned} E_{\text{lagrange}} &= \left(v_P \cdot f_{C,P} + v_X \cdot f_{C,X} + v_{CO_2} \cdot f_{C,CO_2} \right) - \left(v_S \cdot f_{C,S} + v_{O_2} \cdot f_{C,O_2} \right) \\ E_{\text{lagrange}} &= \left(\mu_P \cdot f_{C,P} + \mu_X \cdot f_{C,X} + \mu_{CO_2} \cdot f_{C,CO_2} \right) - \left(\mu_S \cdot f_{C,S} + \mu_{O_2} \cdot f_{C,O_2} \right) \end{aligned}$$

Balanço de massa de carbono

$$\begin{aligned} E &= q_+ - q_- \\ \text{erro} &= \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{saindo} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{entrando} \end{array} \right) \end{aligned}$$

Frações mássicas de carbono

$$\begin{aligned} E_{\text{lagrange}} &= \left(v_P \cdot f_{C,P} + v_X \cdot f_{C,X} + v_{CO_2} \cdot f_{C,CO_2} \right) - \left(v_S \cdot f_{C,S} + v_{O_2} \cdot f_{C,O_2} \right) \\ E_{\text{lagrange}} &= \left(\mu_P \cdot f_{C,P} + \mu_X \cdot f_{C,X} + \mu_{CO_2} \cdot f_{C,CO_2} \right) - \left(\mu_S \cdot f_{C,S} + \mu_{O_2} \cdot f_{C,O_2} \right) \end{aligned}$$

$$\overline{v}_A = v_A \cdot f_{C,A}$$

$$\overline{\mu}_A = \mu_A \cdot f_{C,A}$$

Balanço de massa de carbono

$$\begin{aligned}
 E &= q_+ - q_- \\
 \text{erro} &= \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{saindo} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{entrando} \end{array} \right)
 \end{aligned}
 \qquad
 \begin{aligned}
 \overline{v}_A &= v_A \cdot f_{C,A} \\
 \overline{\mu}_A &= \mu_A \cdot f_{C,A}
 \end{aligned}$$

Frações mássicas de carbono

$$\begin{aligned}
 E_{\text{lagrange}} &= \left(\overline{v}_P + \overline{v}_X + \overline{v}_{\text{CO}_2} \right) - \left(\overline{v}_S + \overline{v}_{\text{O}_2} \right) \\
 E_{\text{lagrange}} &= \left(\overline{\mu}_P + \overline{\mu}_X + \overline{\mu}_{\text{CO}_2} \right) - \left(\overline{\mu}_S + \overline{\mu}_{\text{O}_2} \right)
 \end{aligned}$$

Balanço de massa de carbono

$$\begin{aligned}
 E &= q_+ - q_- \\
 \text{erro} &= \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{saindo} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{carbono} \\ \text{entrando} \end{array} \right)
 \end{aligned}
 \qquad
 \begin{aligned}
 \overline{v}_A &= v_A \cdot f_{C,A} \\
 \overline{\mu}_A &= \mu_A \cdot f_{C,A}
 \end{aligned}$$

Frações mássicas de carbono

$$\begin{aligned}
 E_{\text{lagrange}} &= \left(\overline{v}_P + \overline{v}_X + \overline{v}_{\text{CO}_2} \right) - \left(\overline{v}_S + \overline{v}_{\text{O}_2} \right) \\
 E_{\text{lagrange}} &= \left(\overline{\mu}_P + \overline{\mu}_X + \overline{\mu}_{\text{CO}_2} \right) - \left(\overline{\mu}_S + \overline{\mu}_{\text{O}_2} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E_{\text{euler}} &= + \left(\overline{v}_{P,\text{out}} + \overline{v}_{X,\text{out}} + \overline{v}_{\text{CO}_2,\text{out}} + \overline{v}_{S,\text{out}} + \overline{v}_{\text{O}_2,\text{out}} \right) \\
 &- \left(\overline{v}_{P,\text{in}} + \overline{v}_{X,\text{in}} + \overline{v}_{\text{CO}_2,\text{in}} + \overline{v}_{S,\text{in}} + \overline{v}_{\text{O}_2,\text{in}} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E_{\text{euler}} &= + \left(\overline{\mu}_{P,\text{out}} + \overline{\mu}_{X,\text{out}} + \overline{\mu}_{\text{CO}_2,\text{out}} + \overline{\mu}_{S,\text{out}} + \overline{\mu}_{\text{O}_2,\text{out}} \right) \\
 &- \left(\overline{\mu}_{P,\text{in}} + \overline{\mu}_{X,\text{in}} + \overline{\mu}_{\text{CO}_2,\text{in}} + \overline{\mu}_{S,\text{in}} + \overline{\mu}_{\text{O}_2,\text{in}} \right)
 \end{aligned}$$

Balanço de massa de carbono

Exercício 1: compare as expressões dos erros do balanço de massa em termos de v e de μ .

a) Para Euler e para Lagrange, é mais vantajoso calcular os erros em termos de v ou de μ ?

b) Qual o significado físico de E_{Euler} em termos de μ e de E_{Lagrange} em termos de v ?

$$\begin{aligned} E_{\text{lagrange}} &= \left(\overline{V_P} + \overline{V_X} + \overline{V_{CO_2}} \right) - \left(\overline{V_S} + \overline{V_{O_2}} \right) \\ E_{\text{lagrange}} &= \left(\overline{\mu_P} + \overline{\mu_X} + \overline{\mu_{CO_2}} \right) - \left(\overline{\mu_S} + \overline{\mu_{O_2}} \right) \end{aligned}$$

$$E_{\text{euler}} = \begin{aligned} &+ \left(\overline{V_{P,\text{out}}} + \overline{V_{X,\text{out}}} + \overline{V_{CO_2,\text{out}}} + \overline{V_{S,\text{out}}} + \overline{V_{O_2,\text{out}}} \right) \\ &- \left(\overline{V_{P,\text{in}}} + \overline{V_{X,\text{in}}} + \overline{V_{CO_2,\text{in}}} + \overline{V_{S,\text{in}}} + \overline{V_{O_2,\text{in}}} \right) \end{aligned}$$

$$E_{\text{euler}} = \begin{aligned} &+ \left(\overline{\mu_{P,\text{out}}} + \overline{\mu_{X,\text{out}}} + \overline{\mu_{CO_2,\text{out}}} + \overline{\mu_{S,\text{out}}} + \overline{\mu_{O_2,\text{out}}} \right) \\ &- \left(\overline{\mu_{P,\text{in}}} + \overline{\mu_{X,\text{in}}} + \overline{\mu_{CO_2,\text{in}}} + \overline{\mu_{S,\text{in}}} + \overline{\mu_{O_2,\text{in}}} \right) \end{aligned}$$

Balanço de massa de carbono

Exercício 2: na aba “batelada_alimentada_tratado”:

a) calcule os E_{lagrange} (μ 's) para todos os métodos de cálculo (ponto-a-ponto e ajustes) em cada instante de tempo

$$E_{\text{lagrange}} = (\overline{\mu_P} + \overline{\mu_X} + \overline{\mu_{\text{CO}_2}}) - (\overline{\mu_S} + \overline{\mu_{\text{O}_2}})$$

b) preencha as colunas “Lagrange / ($u_S * f_{C,S}$)” usando os E_{lagrange} do item a

c) plote 2 gráficos:

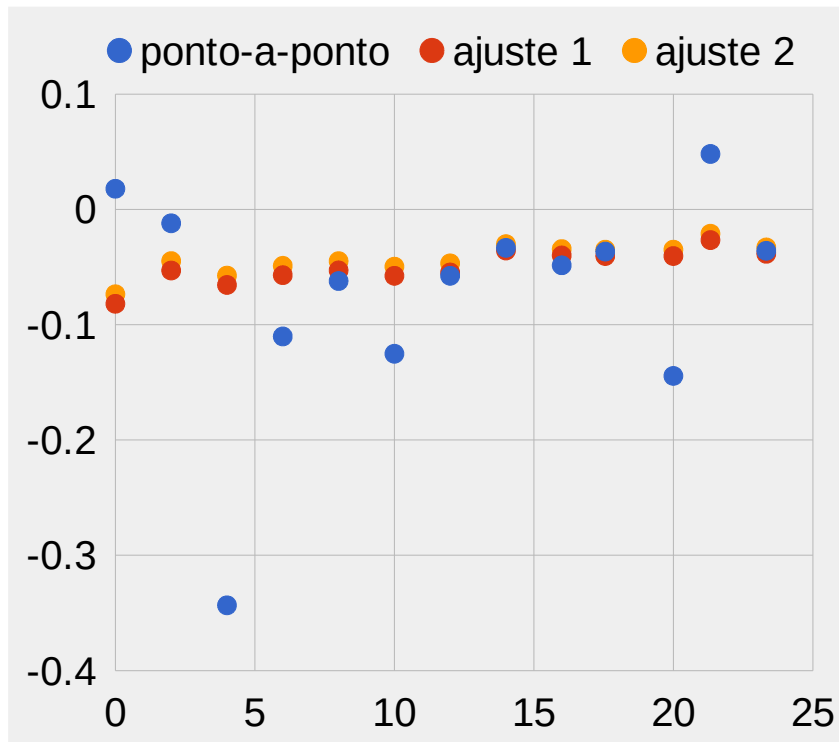
I) E_{lagrange} em função do tempo

II) $E_{\text{lagrange}} / (u_S * f_{C,S})$ em função do tempo

Responda: qual dos 2 é mais adequado para avaliar o viés dos métodos de cálculo e por quê?

Balanço de massa de carbono

E_{lagrange}



$E_{\text{lagrange}} / (u_S * f_{C,S})$

