

## Modelagem e identificação de biorreatores anaeróbicos

William Cechin Guarienti<sup>1</sup>, Diego Eckhard<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Estudante de Engenharia de Controle e Automação, UFRGS, Porto Alegre, RS williamguarienti@gmail.com

<sup>2</sup>Professor do Departamento de Matemática Pura e Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, RS diegoeck@ufrgs.br

### Introdução

O objetivo deste projeto de pesquisa é obter modelos dinâmicos de biorreatores anaeróbicos, a fim de que seja possível prever o seu comportamento e otimizar a síntese de seus produtos. Os microorganismos presentes nos biorreatores devem degradar resíduos agroindustriais, convertendo-os em gás metano, que tem ampla utilização energética. Dessa forma, torna-se rentável o tratamento de rejeitos orgânicos, estimulando o seu correto emprego e descarte.



Figure 1: Biorreatores utilizados para a produção dos dados utilizados neste trabalho.

### Breve descrição do processo bioquímico e sua modelagem

A digestão anaeróbica de resíduos é um processo no qual microorganismos se desenvolvem a partir do metabolismo de matéria orgânica num ambiente livre de oxigênio, o que resulta na produção de gás metano (CH<sub>4</sub>). Esse processo envolve bactérias acidogênicas e metanogênicas, conforme ilustrado na figura 2.

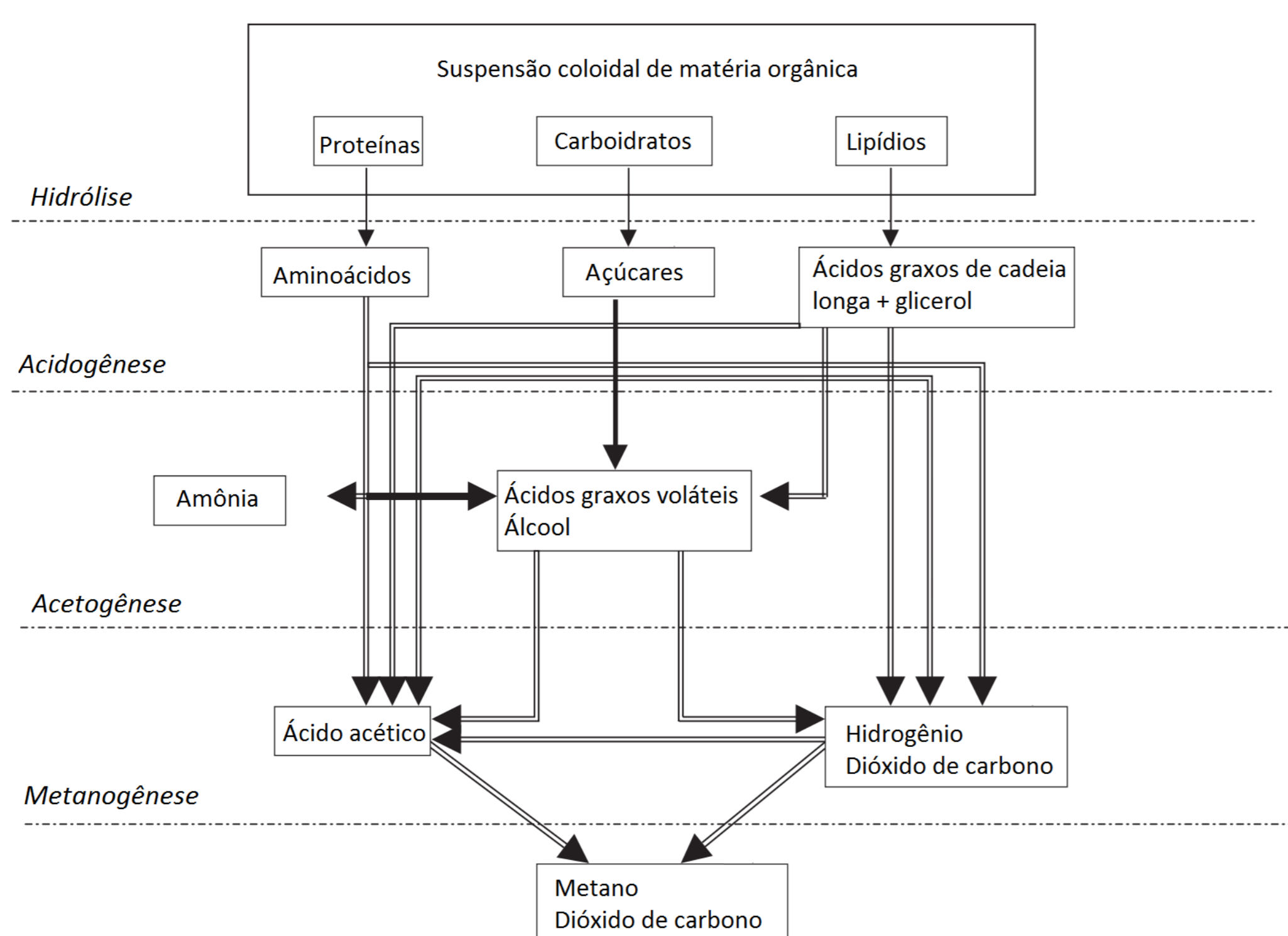


Figure 2: Representação simplificada do processo de degradação anaeróbica [1].

É importante notar que tais microorganismos interagem simbioticamente, de forma que a manutenção da produção de metano depende da existência das duas populações em corretas proporções e de fluxos de substrato e energia adequados. O acúmulo de ácidos graxos voláteis, por exemplo, resulta no decréscimo do pH, impedindo a ocorrência da metanogênese [1].

### Desenvolvimento matemático

Neste trabalho, foi utilizado um modelo de baixa complexidade, composto de quatro estados, que permite a estimação da produção de gás metano produzido no biorreator. Admite-se que o único fator limitante para o crescimento dos microorganismos é a disponibilidade de alimento (substrato) e que as demais condições (temperatura, PH, toxicidade) são mantidas ideais.

Os quatro estados do modelo são descritos por:

$$\dot{x}_1(t) = [v_1(S_1(t)) - \alpha D]x_1(t) \quad (1)$$

$$\dot{x}_2(t) = [v_2(S_2(t)) - \alpha D]x_2(t) \quad (2)$$

$$\dot{S}_1(t) = D(S_1^m - S_1(t)) - k_1 v_1(S_1(t))x_1(t) \quad (3)$$

$$\dot{S}_2(t) = D(S_2^m - S_2(t)) + k_2 v_1(S_1(t))x_1(t) - k_3 v_2(S_2(t))x_2(t) \quad (4)$$

Sendo que  $v_1(t)$  e  $v_2(t)$  são funções que determinam a não-linearidade do problema e são expressas pela lei de Monod, conforme é expresso a seguir:

$$v_i = \mu_i \frac{S_i(t)}{K_{S_i} + S_i(t)} \quad i = 1, 2 \quad (5)$$

e a saída é a taxa de fluxo de gás metano  $q_m(t)$ :

$$q_m(t) = k_6 v_2(S_2(t))x_2(t) \quad (6)$$

A seguir, elucidamos o significado dos parâmetros do modelo:

- $x_1(t)$ : concentração de bactérias acidogênicas [mg/L];
- $x_2(t)$ : concentração de bactérias metanogênicas [mg/L];
- $S_1(t)$ : concentração da demanda química de oxigênio (COD) [mg/L];
- $S_2(t)$ : concentração dos ácidos graxos voláteis (VFA) [mmol/L];
- $S_1^m$ : concentrações de COD dos influentes;
- $S_2^m$ : concentrações de VFA dos influentes;
- $D$ : taxa de diluição dos influentes;
- $\alpha, k_1, k_2, k_3, k_6, \mu_1, K_{S_1}, \mu_2, K_{S_2}$ : coeficientes (constantes) determinados experimentalmente;

### Identificação dos parâmetros do modelo

Para este trabalho, dispôs-se de dados de um reator do tipo *batelada*, isto é, um reator no qual tanto o inóculo quanto o substrato são inseridos apenas no início do processo. Dessa forma, temos que  $D = 0$  e o parâmetro  $\alpha$  é irrelevante. O problema consiste, pois, na identificação das demais constantes a partir de dados referentes a saída  $q_M(t)$ , coletados de um experimento com um intervalo de amostragem  $T$  fixado.

Podemos enunciar esse problema da seguinte forma:

Minimize  $J(\theta) \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (q_M(kT) - \hat{q}_M(kT, \theta))^2$ , onde  $\theta \equiv [\mu_1, K_{S_1}, \mu_2, K_{S_2}, k_1, k_2, k_3, k_6]$ ,  $\hat{q}_M(kT, \theta)$  é a saída do modelo do biorreator, assumindo que os valores das constantes são aquelas do vetor  $\theta$ , e  $N$  é o número de amostras disponíveis.

Para obtermos numericamente  $\hat{q}_M(kT, \theta)$ , devemos discretizar as equações diferenciais, utilizando os algoritmos de Runge-Kutta. A estimação iterativa dos valores do vetor de parâmetros  $\theta$  é obtida utilizando algoritmos como o *simplex Nelder-Mead* e o *Trust-Region-Reflective*. Note que o custo computacional e a qualidade do resultado depende diretamente da discretização e do algoritmo utilizado para estimação do vetor de parâmetros  $\theta$ . Estudos desenvolvidos no nosso grupo de pesquisa mostraram que a implementação em Matlab do algoritmo Trust-Region-Reflective (função *lsqnonlin*) proporciona menor custo computacional e uma melhor qualidade de resultados.

### Resultados

Apresentamos, abaixo, uma comparação entre os resultados gerados pela simulação numérica do modelo e dados reais de dois biorreatores do tipo *batelada*, que foram alimentados com concentrações iniciais de substrato e microorganismos idênticas. Estes dados foram fornecidos pelo Laboratório de Biorreatores da UNIVATES.

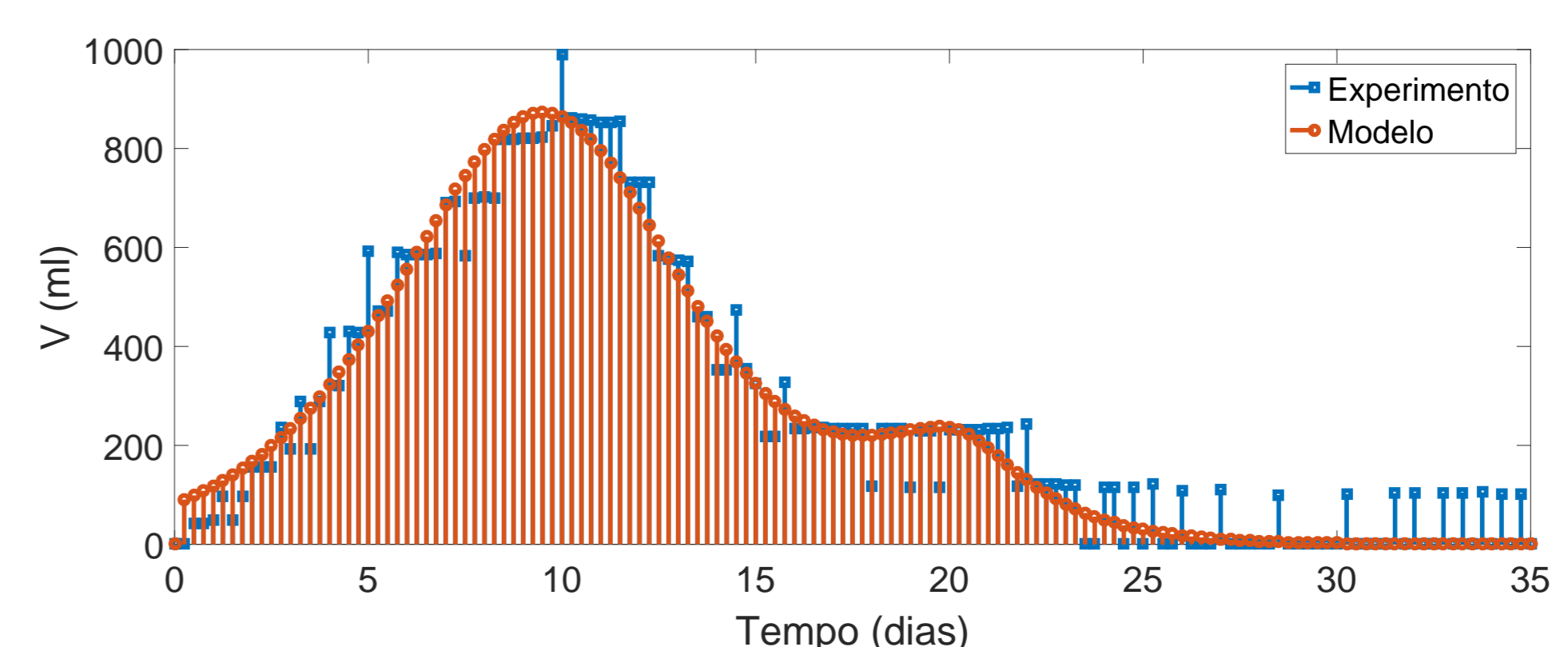


Figure 3: Comparação entre a simulação numérica do modelo do biorreator e os dados reais.

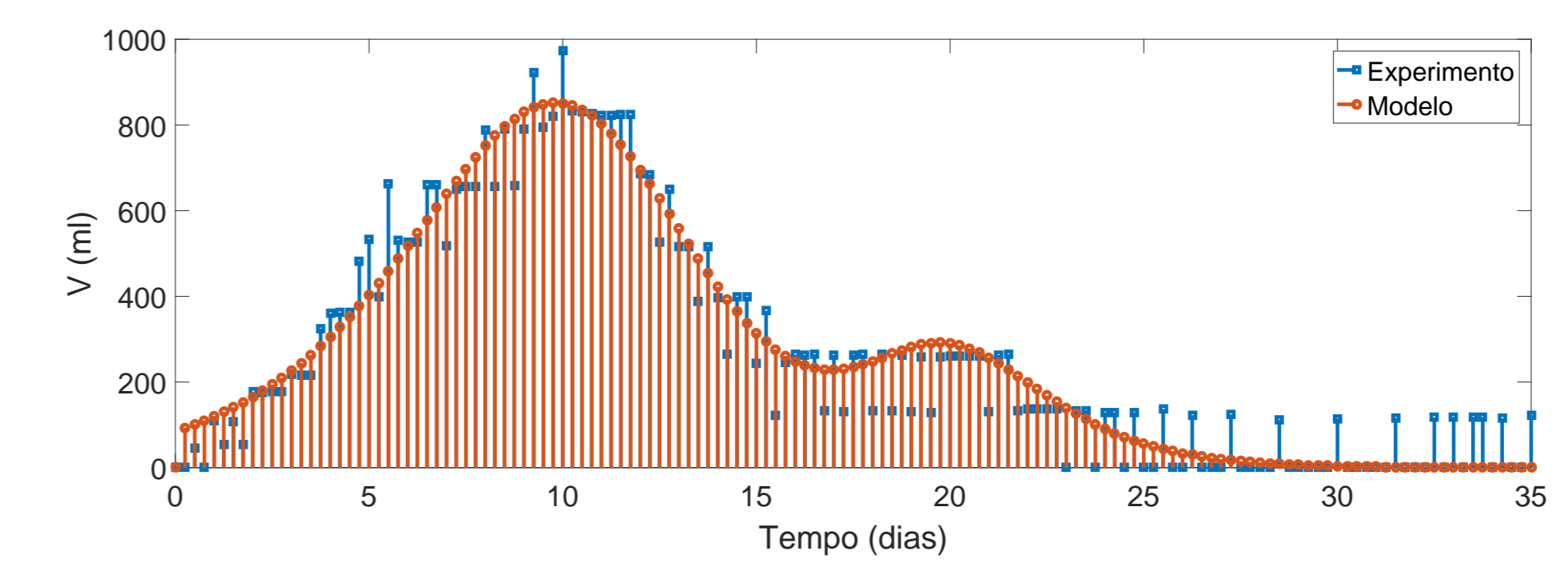


Figure 4: Comparação entre a simulação numérica do modelo do biorreator e os dados reais.

### Conclusões

Os resultados demonstram que o modelo de quatro estados utilizado é adequado ao processo que se deseja modelar. Dessa forma, poderemos utilizar esse modelo para projetarmos o controle de um processo baseado na inserção de matéria orgânica, com o intuito de maximizar a produção de gás metano.

### Referências

- [1] TZD De Mes, AJM Stams, JH Reith, and G Zeeman. Methane production by anaerobic digestion of wastewater and solid wastes. *Bio-methane & Bio-hydrogen*, pages 58–102, 2003.
- [2] Diego Eckhard. Ferramentas para melhoria da convergência dos métodos de identificação por erro de predição. 2012.
- [3] Amos Gilat and Vish Subramaniam. *Métodos numéricos para engenheiros e cientistas: uma introdução com aplicações usando o MATLAB*. Bookman Editora, 2009.
- [4] Ely Carlos Alvarenga, Pedro Alem Sobrinho, Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, et al. Fundamentos teóricos dos reatores biológicos e sua aplicação ao tratamento de águas residuárias. *Revista DAE*, 37(113):53–61, 1977.