

Identificação de parâmetros de um modelo dinâmico para biorreatores anaeróbicos

Walter Haselein⁽¹⁾

Camilla Poletto⁽²⁾

Odorico Konrad⁽³⁾

Diego Eckhard⁽⁴⁾

Resumo

Devido aos danos causados ao meio ambiente, órgãos ambientais têm criado regras cada vez mais rígidas para controlar a quantidade de toxinas e matéria orgânica que pode ser descartada. Outra preocupação mundial é a busca por fontes de energias com baixo impacto ambiental, enfatizando fontes renováveis. Dessa forma, é crescente a necessidade de avançarmos na associação entre desenvolvimento econômico e equilíbrio ecológico. O desenvolvimento de biorreatores tem exercido um papel muito importante nesses aspectos. Os biorreatores são equipamentos nos quais se consome matéria orgânica para gerar algum produto. Nos anaeróbicos, são utilizadas bactérias que, ao consumir tais matérias orgânicas como efluentes, conseguem produzir gás metano, que é uma boa fonte de energia, e fertilizante que é reutilizado na agricultura. Para realizar a otimização do processo de digestão anaeróbica e maximizar a produção de gás, é necessário conhecer os fenômenos envolvidos e suas relações. No estudo da dinâmica dos biorreatores, pode-se obter modelos matemáticos que utilizam equações diferenciais. Tais modelos são bastante úteis para realizar simulações computacionais que preveem o comportamento do sistema em diversas situações, visto que os experimentos práticos são muito demorados e custosos. Além disso, os modelos podem ser utilizados para estimação de estados e controle dos biorreatores. Neste trabalho, é desenvolvido um modelo matemático para a dinâmica de biorreatores e é realizada a implementação algorítmica do modelo. A identificação dos parâmetros do modelo é feita através do método de minimização do erro de simulação, o qual resolve um problema de otimização que minimiza o somatório do erro ao quadrado entre os dados do experimento e a simulação do sistema. Dados coletados de experimentos em biorreatores são utilizados para validar os modelos desenvolvidos.

Palavras-chave: Biorreatores, identificação, otimização

1 INTRODUÇÃO

O tratamento de resíduos com alta carga de matéria orgânica pode ser realizado utilizando biorreatores anaeróbicos. Estes biorreatores utilizam microrganismos para degradar os substratos e produzem dois produtos com alto valor de mercado: material fertilizante, que pode ser utilizado na agricultura; e gás metano, que pode ser utilizado para geração de energia elétrica ou como gás para motores à combustão. Dessa forma, esses equipamentos auxiliam na solução de dois problemas na sociedade moderna, o tratamento dos resíduos orgânicos e a geração de energia limpa.

Biorreatores anaeróbicos são equipamentos que utilizam microrganismos para degradar matéria orgânica como resíduos vegetais de atividades agropecuárias e efluentes urbanos [1]. O biorreator

¹Aluno de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, wmhaselein@gmail.com

²Aluna de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, camillapoletto@gmail.com

³Prof. Dr., Centro Universitário Univates, okonrad@univates.br

⁴Prof. Dr., Universidade Federal do Rio Grande do Sul, diegoeck@ufrgs.br

contém o *inóculo*, que é um meio com alta concentração de microorganismos, e o *substrato*, que é o meio fermentativo que fornece todos os nutrientes necessários aos microorganismos. Nos anaeróbicos, o crescimento das bactérias ocorre sem a presença de oxigênio, e apresenta diversas vantagens [1, 2]: tem grande capacidade de degradar substratos; geram gás metano e ainda produzem lodo residual que pode ser utilizado como material fertilizante na agricultura.

Modelos matemáticos de biorreatores são muito úteis para compreender seu funcionamento, otimizar sua produção e realizar o controle da fermentação. Diferentes modelos são descritos na literatura. Alguns são bastante simples [3] e outros muito complexos [4]. Observa-se que a complexidade depende muito da sua aplicação.

Para realizar otimização e controle, muitas vezes são utilizados modelos de baixa complexidade, resultados de um conjunto de 4 a 6 equações diferenciais [1, 2, 5, 6]. Esses modelos são capazes de descrever a produção do gás metano com relativa precisão, e são de fácil implementação computacional. A partir do balanço de massa e energia do biorreator, são obtidas equações diferenciais que descrevem o crescimento dos microrganismos, o consumo dos substratos e a geração dos produtos. Estas equações apresentam diversas constantes que descrevem as taxas de consumo e produção dos insumos e produtos. Estas constantes devem ser identificadas com precisão para que o modelo possa representar a dinâmica do reator.

A identificação dos parâmetros é feita a partir de dados coletados de experimentos. Encontra-se na literatura muitos trabalhos que utilizam dados em regime permanente para obter os parâmetros do modelo [1]. Esta abordagem é conservadora, pois despreza toda a dinâmica presente no conjunto de dados. Os trabalhos [7, 8] apresentam a identificação de um biorreator batelada utilizando dados transitórios. Neste trabalho é proposta a identificação dos parâmetros de um biorreator com fermentação semicontínua utilizando dados dinâmicos. Os parâmetros são obtidos a partir da solução de um problema de otimização que compara a resposta do modelo obtido com os dados do experimento. Nesta proposta é otimizada uma função custo composta, que considera tanto a vazão instantânea de gás como a produção total de gás no experimento. Dados experimentais são utilizados na solução do problema de otimização resultando em um modelo matemático que descreve a produção de gás pelo biorreator.

O artigo é organizado da seguinte forma. Na Seção 2 são descritos os biorreatores anaeróbicos e os tipos de fermentação. A seção 3 descreve o modelo matemático descrito por equações diferenciais. Na seção 4 é descrita a técnica utilizada para obter os parâmetros de modelo matemático, enquanto que a seção 5 apresenta o experimento realizado a o modelo obtido através dos dados. A conclusão é dada na seção 6.

2 BIORREADORES ANAERÓBICOS

Há três famílias de bactérias atuantes na dinâmica dos biorreatores anaeróbicos: acidogênicas, acetogênicas e metanogênicas. As bactérias acidogênicas são responsáveis por consumir a matéria orgânica e convertê-la em ácidos graxos. A seguir, as acetogênicas transformam os ácidos graxos em acetato. Por fim, as bactérias acidogênicas consomem os ácidos graxos e produzem gás metano.

Os biorreatores anaeróbicos podem ser caracterizados de acordo com o modo que os microrganismos são cultivados [9]. Assim, podemos distinguir três principais tipos de biorreatores: batelada (ou fermentação descontínua), semibatelada (ou fermentação semicontínua) e contínuo (ou de fermentação contínua).

2.1 Tipo Batelada (Fermentação descontínua)

Nesse modo de operação, todo o substrato é introduzido no início da reação. Não há acréscimo nem remoção do material orgânico durante o procedimento. Esse modo é atrativo do ponto de vista industrial, visto que são poucos os recursos necessários para sua implementação. Além disso, o risco de contaminação é pequeno, o que garante maior pureza no cultivo. Outra vantagem é a capacidade de identificar os materiais envolvidos no processo, uma vez que as condições de controle são mais simples [9].

Por outro lado, esse modelo apresenta algumas desvantagens. Uma delas é a pouca capacidade de otimização na ação das bactérias. Ademais, a inserção do substrato apenas no início do processo causa efeitos de inibição do crescimento dos microrganismos que o consomem, tornando o procedimento mais lento e limitando a carga inicial de matéria orgânica.

2.2 Tipo semibatelada (Fermentação semicontínua)

Esse modo de operação difere do anterior pelos sucessivos acréscimos de substrato no biorreator. As adições ocorrem quando o processo de fermentação finaliza, e são repetidas enquanto o sistema não apresentar queda na produtividade. Esse modelo torna possível eliminar os problemas de inibição associados ao biorreator do tipo batelada fazendo com que as taxas de crescimento dos microrganismos se aproximem do seu valor máximo e aumentem a produtividade.

2.3 Tipo contínuo (Fermentação contínua)

Realizado na maioria dos casos em reatores de volume constante, os biorreatores do tipo contínuo agem em um estado em que o fluxo de saída equivale ao de entrada. Em outras palavras, à medida que o substrato é inserido continuamente no sistema, há retirada contínua do produto fermentado. Trabalhando nessa condição estacionária, o processo evita qualquer fenômeno de inibição devido aos efeitos de diluição, o que aumenta sua produtividade. Essa dinâmica também exige menor necessidade de mão-de-obra e possibilita o estudo das características do crescimento dos microrganismos atuantes no processo, além de técnicas de otimização para o sistema. Além do mais, permite produções significantes em biorreatores de menor escala.

Em contrapartida, pode-se notar algumas desvantagens na utilização desse modelo. Dentre elas, podemos destacar o alto custo para sua implementação, que pode inviabilizar o uso deste tipo de sistema em escala industrial. Outro aspecto relevante é a maior chance de contaminação, uma vez que a entrada contínua de substrato requer um sistema que opere necessariamente em circuito aberto.

Neste trabalho, será abordada a produção de gás metano de um biorreator anaeróbico do tipo semibatelada, focando na identificação dos parâmetros envolvidos nessa dinâmica a partir de modelos matemáticos.

3 MODELO MATEMÁTICO

Na literatura, encontra-se diversos modelos que descrevem os processos envolvidos em um biorreator anaeróbico. Tais modelos podem ser mais simples ou mais complexos. Porém, os de maior complexidade não são indicados para o controle dos processos, visto que possuem grande quantidade de parâmetros, o que inviabiliza a realização de simulações computacionais. Sendo assim, é mais interessante tratar com os mais simplificados, mas que ainda descrevam de maneira eficiente a dinâmica que ocorre em um biorreator.

Um modelo de grande aceitação na literatura é descrito por um sistema de quatro equações diferenciais não-lineares. Neste modelo, se descarta a existência de bactérias acetogênicas, pois estas possuem dinâmicas muito rápidas.

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = [\nu_1(S_1(t)) - \alpha D]x_1(t) \\ \dot{x}_2(t) = [\nu_2(S_2(t)) - \alpha D]x_2(t) \\ \dot{S}_1(t) = D(S_1^{in}(t) - S_1(t)) - k_1\nu_1(S_1(t))x_1(t) \\ \dot{S}_2(t) = D(S_2^{in}(t) - S_2(t)) + k_2\nu_1(S_1(t))x_1(t) - k_3\nu_2(S_2(t))x_2(t), \end{cases} \quad (1)$$

onde $x_1(t)$ (mg/L) é a concentração de bactéria acidogênica, $x_2(t)$ (mg/L) é a concentração de bactéria metanogênica, $S_1(t)$ (mg/L) é a concentração da demanda química de oxigênio (COD), $S_2(t)$ (mmol/L) é a concentração dos ácidos graxos voláteis (VFA), $S_1^{in}(t)$ (mg/L) e $S_2^{in}(t)$ (mmol/L) são as concentrações dos influentes $S_1(t)$ e $S_2(t)$ respectivamente, $0 < \alpha \leq 1$ é um parâmetro proporcional determinado experimentalmente, D (dia⁻¹) é a taxa de diluição dos influentes, k_1 (mg COD/mg x_1) é

o coeficiente de degradação de COD, k_2 (mmol VFA/mg x_1) é o coeficiente de produção de ácidos graxos voláteis e k_3 (mmol VFA/mg x_2) é o coeficiente de consumo de ácidos graxos voláteis.

A não linearidade do sistema se dá pelas taxas de crescimento das bactérias, representadas por $\nu_1(S_1(t))$ e $\nu_2(S_2(t))$, que são expressas pela função de Monod:

$$\nu_1(S_1(t)) = \mu_{m1} \frac{S_1(t)}{K_{S1} + S_1(t)} \quad (2)$$

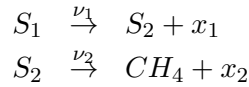
$$\nu_2(S_2(t)) = \mu_{m2} \frac{S_2(t)}{K_{S2} + S_2(t)} \quad (3)$$

onde μ_{m1} (dia^{-1}) é a taxa de crescimento máxima da biomassa acidogênica, μ_{m2} (dia^{-1}) é a taxa de crescimento máxima da biomassa metanogênica, K_{S1} (mg/L) é o parâmetro de saturação associado a $S_1(t)$ e K_{S2} (mmol/L) é o parâmetro de saturação associado a $S_2(t)$.

Assim, pode-se avaliar a quantidade de gás metano produzida pelo biorreator pela equação:

$$q_M(k) = k_6 \nu_2(S_2(k)) x_2(k). \quad (4)$$

Este modelo considera que ocorrem as seguintes reações no biorreator:



ou seja, as bactérias acidogênicas consomem S_1 e formam S_2 ao mesmo tempo que se reproduzem, com taxa de reação ν_1 . Já as bactérias metanogênicas consomem S_2 e formam CH_4 enquanto se reproduzem, com taxa de reação ν_2 .

4 IDENTIFICAÇÃO DOS PARÂMETROS

A partir do modelo matemático descrito na seção anterior, é possível obter uma versão que represente o tipo semibatelada. Para isso, anula-se o valor do parâmetro D . Além disso, pode-se acrescentar taxas de mortalidade proporcionais às concentrações das bactérias, estimadas com base nos experimentos realizados. Dessa forma, chega-se ao seguinte sistema:

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = \nu_1(S_1(t))x_1(t) - c_1x_1 \\ \dot{x}_2(t) = \nu_2(S_2(t))x_2(t) - c_2x_2 \\ \dot{S}_1(t) = -k_1\nu_1(S_1(t))x_1(t) \\ \dot{S}_2(t) = k_2\nu_1(S_1(t))x_1(t) - k_3\nu_2(S_2(t))x_2(t), \end{cases} \quad (5)$$

onde c_1 e c_2 são as taxas de mortalidade diretamente proporcionais às concentrações das bactérias acidogênicas e metanogênicas, respectivamente.

A identificação do sistema consiste em estimar o valor dos parâmetros envolvidos no modelo dinâmico, utilizando dados coletados em um experimento prático de um biorreator anaeróbico. Podemos expressar o conjunto de parâmetros através de um vetor

$$v = [\mu_{m1} \quad K_{S1} \quad \mu_{m2} \quad K_{S2} \quad k_1 \quad k_2 \quad k_3 \quad k_6 \quad c_1 \quad c_2]^T.$$

Para identificar os parâmetros do modelo utilizando os dados coletados experimentalmente, realizou-se o problema de otimização:

$$\begin{aligned} \hat{v}_N &= \arg \min_v J_1(v) + J_2(v), \quad \text{onde} \\ J_1(v) &\triangleq \sum_{t=1}^N (q_0(t) - \hat{q}_M(t, v))^2 \\ J_2(v) &\triangleq \sum_{k=1}^N \left(\sum_{t=1}^k q_0(t) - \sum_{t=1}^k \hat{q}_M(t, v) \right)^2. \end{aligned}$$

Esse método determina os parâmetros que minimizam a soma de duas funções ($J_1(v)$ e $J_2(v)$). A primeira função descreve o somatório do erro ao quadrado entre a vazão de gás medida no experimento e a vazão de gás obtida no modelo. Já a segunda função minimiza o somatório do erro ao quadrado entre a quantidade de gás que saiu do experimento até o instante k (integral da vazão do experimento) e a quantidade de gás que sai do modelo até o instante k (integral da vazão do modelo). A função $J_1(v)$ faz com que a vazão do modelo seja similar à vazão medida no experimento. Contudo, modelos obtidos utilizando apenas a função $J_1(v)$ tendem a ter baixa precisão ao descrever a quantidade total de gás produzida pelo biorreator. Já a função $J_2(v)$ torna a produção total do modelo similar à produção do biorreator, e a soma das duas funções produz modelos que são bons tanto para prever a produção instantânea do modelo quanto a produção total.

Visto que o problema de otimização não é convexo, pode-se utilizar um algoritmo de otimização para solucionar o problema acima. O método simplex Nelder-Mead, implementado no Matlab pela função *fminsearch*, apresentou-se como alternativa viável para esta tarefa. Essa técnica está entre as mais populares, pois consegue associar bons resultados à simplicidade do algoritmo.

5 EXPERIMENTOS

O conjunto de dados coletados para identificação dos parâmetros do modelo foi obtido através de experimentos realizados em estufa, com biorreatores de 1 litro, no Centro Universitário UNIVATES, localizado na cidade de Lajeado-RS. A Figura 1 apresenta uma foto dos biorreatores e a Figura 2 apresenta os sensores utilizados para medir a vazão de gás.



Figura 1: Biorreatores de bancada com 1 litro.

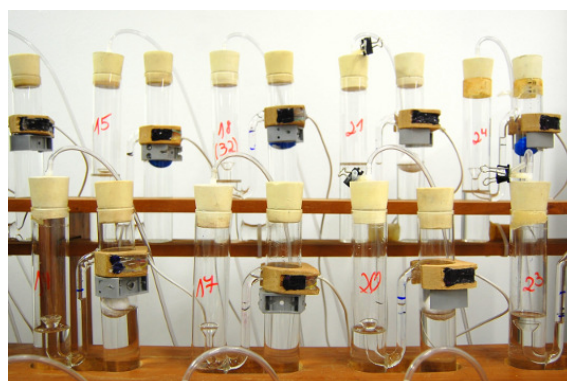


Figura 2: Coletores usados para medição da vazão biogás.

Nesses experimentos, foram colhidas 196 amostras, em um intervalo de 8 horas. A cada 7 dias, aproximadamente, foi adicionada uma quantidade constante de substrato no biorreator, e o número de amostras entre cada adição pode ser descrito pelo vetor $N = [29 \ 27 \ 28 \ 29 \ 27 \ 28 \ 21]$, no qual cada elemento refere-se à quantidade de amostras coletadas após cada inserção. As condições

iniciais dos estados do modelo são dadas por $x_0 = [0,3 \ 0,7 \ 1 \ 0]^T$.

O vetor de parâmetros iniciais v_0 foi obtido através de simulações computacionais, nas quais se supôs valores para cada coordenada a fim de aproximar o comportamento da representação gráfica do modelo ao do experimento prático. Dessa forma, admitiu-se o vetor

$$v_0 = [0,21912 \ 9,2 \ 4,4493 \ 80,25 \ 45,604 \ 60,406 \ 31,1473 \ 83,86 \ 0,01 \ 0,04].$$

A partir disso, realizou-se a otimização do modelo, que apresentou os seguintes valores para os parâmetros de v :

$$v = [7,1149 \ 182,0993 \ 76,7578 \ 695,9345 \ 21,0108 \ 47,5656 \ 103,5743 \ 158,5423 \ 0,0003 \ 0,0042]$$

As Figuras 3 e 4 apresentam uma comparação entre o comportamento do sistema simulado com dados reais e com os parâmetros identificados pelo algoritmo de otimização.

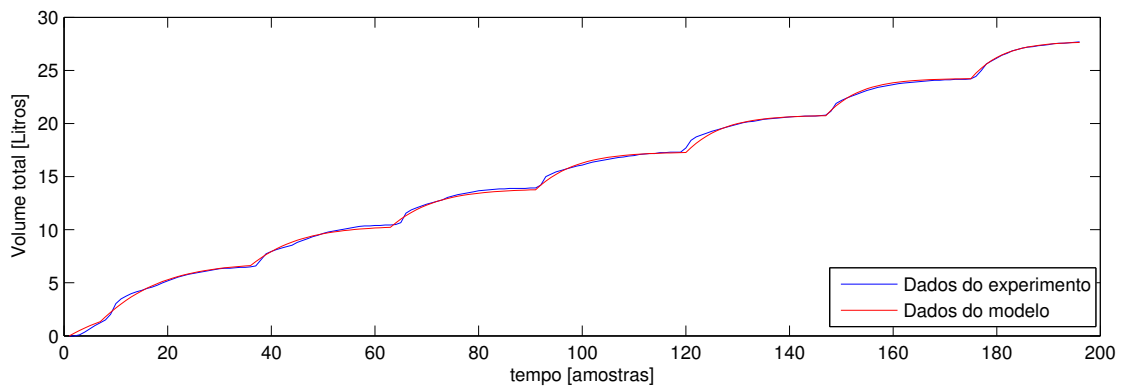


Figura 3: Comparação entre o volume total de gás do experimento e o estimado pelo modelo.

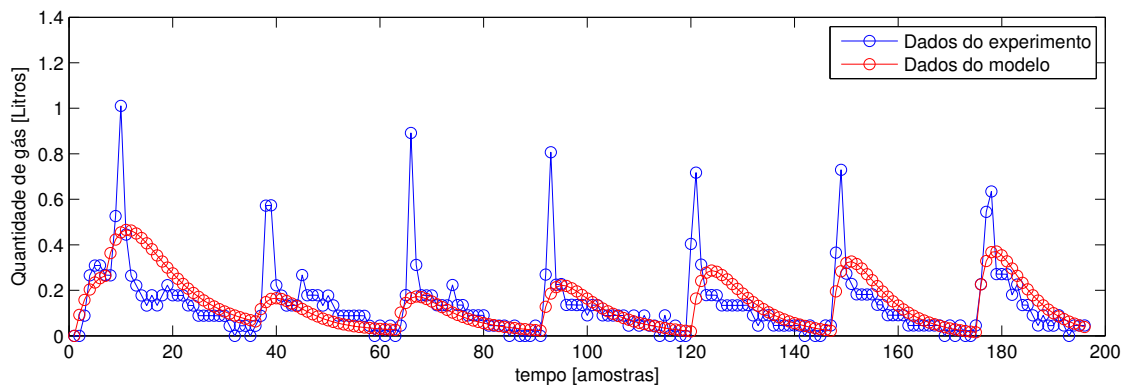


Figura 4: Comparação entre a vazão de gás do experimento e a vazão do modelo.

Observa-se no gráfico da Figura 3 que o comportamento do volume obtido pela identificação dos parâmetros assemelha-se ao comportamento real do biorreator. Assim, é possível prever o volume total de gás que será produzido no final da operação. Já na Figura 4, percebe-se os intervalos em que há aumento ou queda na produção, bem como os períodos nos quais se encontram os picos de geração de gás. A simulação apresentou um erro médio de 212ml por amostra na função J_1 e um erro médio de 12ml por amostra na função J_2 .

6 CONCLUSÃO

Este trabalho apresentou a identificação de parâmetros de um modelo dinâmico para um biorreator anaeróbico semibatelada. A estrutura do modelo foi obtida utilizando balanço de massa que considera

a existência de dois grupos de bactérias e de dois substratos. A identificação dos parâmetros se deu através da resolução de um problema de otimização com função custo composta, que contempla tanto a vazão de gás instantânea como a produção total de gás. Dados de experimentos foram utilizados para resolução do problema de otimização resultando em um modelo matemático que consegue descrever com precisão a produção de gás metano pelo biorreator.

Referências

- [1] O Bernard, Z Hadj-Sadok, D Dochain, A Genovesi, and J P Steyer. Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process. *Biotechnology and Bioengineering*, 75(4):424–38, 2001.
- [2] R. Antonelli, J. Harmand, J.-P. Steyer, and A. Astolfi. Set-point regulation of an anaerobic digestion process with bounded output feedback. *Control Systems Technology, IEEE Transactions on*, 11(4):495 – 504, July 2003. ISSN 1063-6536. doi: 10.1109/TCST.2003.813376.
- [3] J. F. Andrews. Dynamic models and control strategies for wastewater treatment processes. *Water Research*, 8(5):261 – 289, 1974. ISSN 0043-1354. doi: 10.1016/0043-1354(74)90090-6.
- [4] D.J. Batstone, J. Keller, I. Angelidaki, S.V. Kalyuzhnyi, S.G. Pavlostathis, A. Rozzi, W.T.M. Sanders, H. Siegrist, and V.A. Vavilin. The IWA anaerobic digestion model no 1 (ADM1). *Water Science and Technology*, 45(10):65–73, 2002.
- [5] Finn Haugen, Rune Bakke, and Bernt Lie. State estimation and model-based control of a pilot anaerobic digestion reactor. *Journal of Control Science and Engineering*, ID 572621, 2014. ISSN 0043-1354. doi: 10.1016/0043-1354(74)90090-6.
- [6] A. Donoso-Bravo, J. Mailier, C. Aceves-Lara, C. Martin, J. Rodriguez, and A. Vade Wouwer. Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: A review. *Water Research*, 45(17):5347 – 5364, 2011. ISSN 0043-1354. doi: 10.1016/j.watres.2011.08.059.
- [7] L. Campestrini, D. Eckhard, O. Konrad, and A. S. Bazanella. Identificação não-linear de um biorreator através da minimização do erro de predição. In *XIX Congresso Brasileiro de Automática*, pages 3066–3072, Campina Grande, 2012. SBA.
- [8] L. Campestrini, D. Eckhard, R. Rui, and A. S. Bazanella. Identifiability analysis and prediction error identification of anaerobic batch bioreactors. *Journal of Control, Automation and Electrical Systems*, 25(4):438–447, 2014. ISSN 2195–3880. doi: 10.1007/s40313-014-0129-3.
- [9] Denis Dochain. *Automatic Control of Bioprocess*. Wiley, Hoboken, NJ, USA, 2008.