

### Simulação Numérica de Modelos para Biorreatores Anaeróbicos

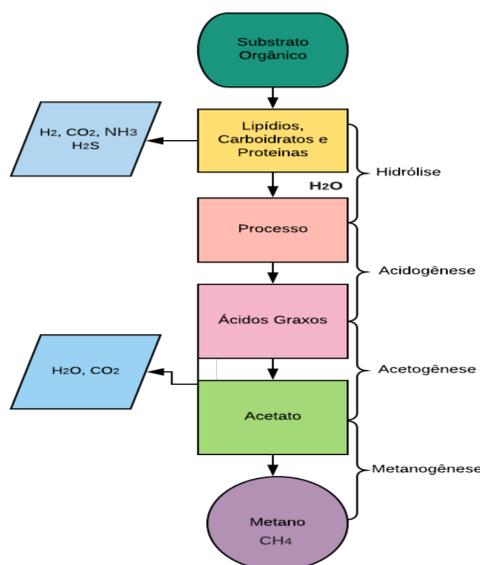
Autora: Gabriela Teixeira da Silva  
Orientador: Prof. Dr. Diego Eckhard

#### Objetivos

- Apresentar métodos numéricos para a solução de um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) que modela um biorreator anaeróbico.
- Resolver o sistema pelos Métodos de Euler e de Runge-Kutta;
- Estudar o comportamento do biorreator.

#### O que são Biorreatores?

Um biorreator é um sistema biológico que, através do consumo de substrato orgânico, sintetiza diferentes produtos, dependendo da matéria-prima utilizada. Os reatores de interesse do nosso estudo podem realizar digestão, por um processo anaeróbico, de resíduos urbanos, lixo gerado na produção agrícola e efluentes industriais. Operam no modo semi-batelada, podendo ser alimentados de acordo com a disposição de matéria orgânica ou da necessidade de biogás, que é o produto final.



#### Modelo do Biorreator

Nosso modelo descreve o crescimento de bactérias "tipo 1" que consomem substrato alimentado ao reator, produzindo ácidos graxos voláteis, que são consumidos por bactérias "tipo 2" e convertidos em volume de gás metano sintetizado de acordo com a quantidade de matéria adicionada ao sistema. o processo, porém, é não-linear. O sistema dá-se por:

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = v_1(S_1(t))x_1(t) \\ \dot{x}_2(t) = v_2(S_2(t))x_2(t) \\ \dot{S}_1(t) = -k_1v_1(S_1(t))x_1(t) \\ \dot{S}_2(t) = k_2v_1(S_1(t))x_1(t) + k_3v_2(S_2(t))x_2(t) \end{cases}$$

Com:

$$v_1(S_1(t)) = \mu_1 \frac{S_1(t)}{K_{S1} + S_1}$$

$$v_2(S_2(t)) = \mu_2 \frac{S_2(t)}{K_{S2} + S_2}$$

Onde:

- $x_1(t), x_2(t)$  concentração de bactérias do tipo 1 e do tipo 2, respectivamente (mg/L)
- $S_1(t)$  concentração do substrato orgânico (mg/L)
- $S_2(t)$  concentração de ácidos graxos voláteis (mmol/L)
- $k_1$  coeficiente de degradação do substrato orgânico (mgCOD/mg $x_1$ )
- $k_2$  coeficiente de produção de ácidos graxos (mgVFA/mg $x_1$ )
- $k_3$  coeficiente de consumo de ácidos graxos (mgVFA/mg $x_2$ )
- $v_1, v_2$  taxa de crescimento das bactérias acidogênicas e metanogênicas ( $dia^{-1}$ )
- $\mu_1, \mu_2$  taxa de crescimento das bactérias acidogênicas e  $K_{S1}, K_{S2}$

#### Soluções Numéricas para Equações Diferenciais Ordinárias

##### Problemas de Valor Inicial

Consistem em encontrar uma dentre as infinitas soluções de uma EDO que satisfaça determinada condição, ou seja:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

#### Solução Analítica versus Método Numérico

Muitos problemas são difíceis ou até impossíveis de serem resolvidos por métodos convencionais, então o campo da **Análise Numérica** estuda algoritmos que facilitem a resolução dos mesmos, controlando o erro, que é a diferença entre o resultado numérico e a solução analítica.

#### Método de Euler

Da definição de derivada temos que:

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y(t+h) - y(t)}{h} = f(t, y(t))$$

Isolando  $y(t+h)$ :

$$y(t+h) = y(t) + h * f(t, y(t))$$

que é o conhecido como o **Método de Euler Explícito**, estimando o valor da função no ponto  $t+h$  pelo valor no ponto  $t$ , definindo os próximos pontos a partir do valor inicial do problema, a uma distância  $h$  os separando.

#### Método de Runge-Kutta

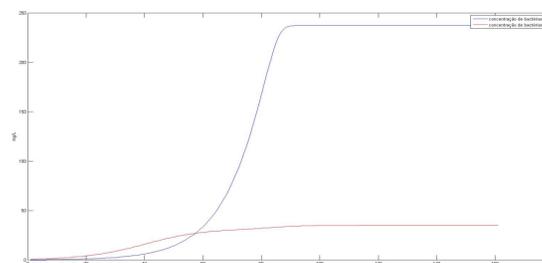
Substitui a inclinação da função  $f$  por uma média ponderada das inclinações ao longo do intervalo entre  $x$  e  $x+1$ , de modo que o ponto  $y_{n+1}$  é calculado da seguinte maneira:

$$y_{n+1} = y_n + h(w_1k_1 + w_2k_2 + \dots + w_mk_m)$$

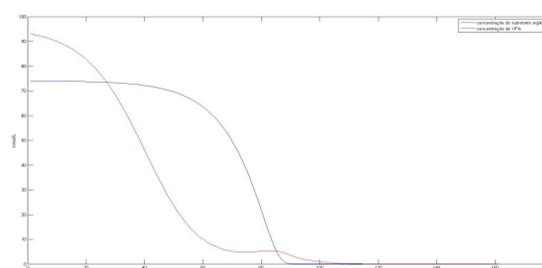
Com  $(w_1k_1 + w_2k_2 + \dots + w_mk_m)$  sendo essa média e

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_k, y_k) \\ k_2 &= f(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}k_1) \\ k_3 &= f(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}k_2) \\ k_4 &= f(x_k + h, y_k + hk_3) \end{aligned}$$

#### Resultados



Estimativa do crescimento das bactérias x1 e x2



Estimativa das concentrações de substrato e de ácidos graxos voláteis

#### Referências

- 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.
- W. Haselein, C. Poleto, O. Konrad, and D. Eckhard. Identificação de parâmetros de um modelo dinâmico para biorreatores anaeróbicos. In *7ª Conferência Internacional de Materiais e Processos para Energias Renováveis*, pages 1-7, Porto Alegre, 2016.
- W. M. Haselein. Identificação de modelos dinâmicos para biorreatores anaeróbicos. Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2017. URL <http://hdl.handle.net/10183/163928>.