

Análise do uso de modelos discretizados para identificação de modelos de biorreatores anaeróbicos

Diego Eckhard¹

Departamento de Matemática Pura e Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, RS

Lucíola Campestrini²

Departamento de Sistemas Elétricos de Automação e Energia, UFRGS, Porto Alegre, RS

Resumo. Este trabalho apresenta uma análise comparativa do uso de modelos discretos na identificação de modelos de biorreatores anaeróbicos. Dado um biorreator descrito por um modelo em tempo contínuo, não-linear de quatro estados, compara-se a identificação de um modelo contínuo com a identificação de versões em tempo discreto deste modelo.

Palavras-chave. Biorreatores, Identificação não-linear, Métodos de discretização, Otimização, Custo Computacional

1 Introdução

O tratamento de resíduos orgânicos por biorreatores anaeróbicos desempenha um papel importante no contexto de desenvolvimento sustentável, pois alia o tratamento de efluentes à produção de biogás, que pode ser utilizado como fonte renovável de energia. Biorreatores anaeróbicos conseguem degradar diversos tipos de matéria orgânica como resíduos vegetais e animais comumente encontrados nas indústrias alimentícias [3]. As bactérias presentes no biorreator convertem a matéria orgânica em gás metano, que pode ser utilizado como gás veicular ou como combustível para geração de energia elétrica. Desta forma, torna-se essencial a obtenção de modelos dinâmicos que representem estes processos para concepção, operação e otimização dos biorreatores, o que justifica a larga quantidade de estudos nesta área nas últimas décadas [3, 4, 8].

Diferentes modelos dinâmicos dos biorreatores podem ser desenvolvidos, desde modelos simples [1] até bastante complexos [2], os quais representam algumas ou várias reações físico-químicas e biológicas. Contudo, vê-se na literatura grande aceitação por modelos de baixa complexidade, como o modelo de quatro estados utilizado em [9]. Estes modelos conseguem descrever com bastante precisão a produção de gás metano pelos biorreatores e permitem a realização de diferentes análises sobre o comportamento do biorreator. Além disso, modelos de baixa complexidade são preferíveis por demandarem menor custo computacional, facilitando análises numéricas de simulação, predição e controle.

A estrutura dos modelos dinâmicos normalmente é concebida a partir do balanço de massa e energia do sistema. O modelo é descrito então como um conjunto de equações diferenciais parametrizado por constantes que descrevem características específicas de cada biorreator. Estes parâmetros determinam a velocidade das reações, as taxas de crescimento das bactérias, as taxas

¹diegoeck@ufrgs.br

²luciola@ece.ufrgs.br

de conversão de substratos e por fim a eficiência do biorreator. É de suma importância conhecer o modelo específico de cada biorreator para controlar e otimizar a produção de gás metano.

A identificação dos parâmetros do modelo do biorreator normalmente é feita comparando a simulação do modelo com dados coletados de experimentos realizados no biorreator. Nestes experimentos são coletados dados do biorreator com intervalo fixo de tempo, usualmente na escala de horas. Na literatura vê-se que é usual utilizar modelos em tempo contínuo para representar o biorreator [3, 6, 7]. Neste trabalho analisa-se a qualidade de modelos que descrevem as dinâmicas em tempo discreto. Além disso, compara-se os algoritmos utilizados na solução dos problemas de otimização, que resultam nos parâmetros do biorreator. Serão comparados algoritmos diretos (que não utilizam informação sobre o gradiente), amplamente utilizados na literatura, com algoritmos indiretos (que utilizam a informação do gradiente). Uma tabela resumo dos diferentes algoritmos aplicados em diferentes trabalhos é apresentada em [7].

2 Modelo de um biorreator

Um modelo largamente aceito na descrição dinâmica dos biorreatores anaeróbicos é composto por quatro estados e uma saída [9]. Os estados são descritos por

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = [v_1(S_1(t)) - \alpha D]x_1(t) \\ \dot{x}_2(t) = [v_2(S_2(t)) - \alpha D]x_2(t) \\ \dot{S}_1(t) = D(S_1^{in}(t) - S_1(t)) - k_1 v_1(S_1(t))x_1(t) \\ \dot{S}_2(t) = D(S_2^{in}(t) - S_2(t)) + k_2 v_1(S_1(t))x_1(t) - k_3 v_2(S_2(t))x_2(t), \end{cases} \quad (1)$$

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.

O comportamento não-linear do processo é dado através de duas taxas de crescimento específicas para bactérias, $v_1(S_1(t))$ e $v_2(S_2(t))$, expressas pela lei de Monod

$$v_1(S_1(t)) = \mu_{m1} \frac{S_1(t)}{K_{S1} + S_1(t)}, \quad v_2(S_2(t)) = \mu_{m2} \frac{S_2(t)}{K_{S2} + S_2(t)}, \quad (2)$$

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 $S_2(t)$. A saída do modelo é a taxa de fluxo de gás metano $q_M(t)$, a qual é dada por $q_M(t) = k_6 v_2(S_2(t))x_2(t)$.

Este modelo pode representar tanto biorreatores contínuos, como semi-contínuos e reatores do tipo batelada. Em um reator do tipo *batelada*, tanto substrato como inóculo são inseridos no biorreator apenas no início do processo, sendo considerados condições iniciais dos estados relativos aos substratos e às concentrações de bactéria, respectivamente. Portanto, o sistema não

possui entrada ($S_1^{in}(t) = S_2^{in}(t) = 0$ e $D = 0$) e o modelo (1) é reduzido a

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = v_1(S_1(t))x_1(t) \\ \dot{x}_2(t) = v_2(S_2(t))x_2(t) \\ \dot{S}_1(t) = -k_1v_1(S_1(t))x_1(t) \\ \dot{S}_2(t) = k_2v_1(S_1(t))x_1(t) - k_3v_2(S_2(t))x_2(t). \end{cases} \quad (3)$$

Dado que as condições iniciais dos quatro estados sejam conhecidas, é possível identificar todos os parâmetros deste modelo a partir de dados de experimentos que coletam apenas informações sobre a saída do biorreator [5]. Neste trabalho vamos analisar a identificação destes parâmetros utilizando o modelo em tempo contínuo (3) e modelos discretos obtidos pela discretização de tal modelo.

3 Discretização do modelo

O modelo em *tempo contínuo* (3) descreve a dinâmica do sistema em qualquer instante de tempo. Já um modelo em *tempo discreto* descreve a dinâmica do sistema apenas em instantes de tempo pré-estabelecidos, e igualmente espaçados no tempo, com período de amostragem T . Nesta seção são apresentadas três técnicas para obter um modelo em tempo discreto a partir do modelo (3). Considere genericamente o modelo contínuo no tempo:

$$\frac{dx(t)}{dt} = f_1(x(t), t), \quad (4)$$

onde $x(t)$ é o estado do modelo e $f_1(x(t), t)$ é a função que descreve a dinâmica do sistema. O modelo discretizado será descrito por

$$x(t + T) = f_2(x(t), t), \quad (5)$$

onde o estado é definido apenas nos instantes de tempo múltiplos de T . A vantagem do modelo contínuo é que tal modelo descreve a dinâmica em qualquer instante de tempo, enquanto que o modelo discreto apenas descreve a dinâmica em instantes de tempo específicos. Entretanto, a simulação do modelo em tempo contínuo gera uma carga computacional muitas vezes bastante maior que seu equivalente discreto, justamente porque o modelo discreto necessita calcular a resposta em apenas alguns instantes de tempo. Neste trabalho modelos contínuos e discretos são comparados quanto à precisão do modelo e à carga computacional gerada nas simulações.

Existem diferentes métodos para discretizar um modelo, onde cada método utiliza uma técnica diferente para obter o modelo no formato de equações de diferenças. Por isso, três técnicas bastante utilizadas na discretização de modelos são descritas: Método de Euler, Runge-Kutta de segunda ordem e Runge-Kutta de quarta ordem.

O método de Euler é aquele em que $f_2(x(t), t) = x(t) + T f_1(x(t), t)$. O erro de truncamento local desta aproximação é da ordem do tamanho do passo $O(T)$. Quando este for pequeno, o erro será pequeno, mas a medida que T cresce, a solução da aproximação se distancia da solução analítica. Neste trabalho denota-se o modelo do biorreator discretizado pelo método de Euler por $ode1$.

No método de Runge-Kutta de segunda ordem $f_2(x(t), t) = x(t) + \frac{T}{2}c_1 + \frac{T}{2}c_2$, onde $c_1 = f_1(x(t), t)$ e $c_2 = f_1(x(t) + Tc_1, t + T)$. O erro de truncamento local da discretização é da ordem

$O(T^2)$, isto é, menor que o erro obtido usando a discretização por Euler. O modelo do biorreator discretizado pelo método de Runge-Kutta 2 será denotado ode2.

Já o Método de Runge-Kutta de quarta ordem é aquele em que $f_2(x(t), t) = x(t) + \frac{T}{6}(c_1 + 2c_2 + 2c_3 + c_4)$, onde $c_1 = f(x(t), t)$, $c_2 = f(x(t) + Tc_1/2, t + T/2)$, $c_3 = f(x(t) + Tc_2/2, t + T/2)$ e $c_4 = f(x(t) + Tc_3, t + 1)$. Quando se utiliza o método de Runge-Kutta de quarta ordem, o erro de truncamento local é da ordem $O(T^4)$. O modelo do biorreator discretizado usando este método será denotado ode4.

Entre os três métodos o método de Euler é o mais simples dos três e portanto é o método que gera menor custo computacional para realizar as simulações. Entretanto, o método de Euler é entre os três aquele que gera maior erro nas simulações. Já o Método de Runge-Kutta 4 é o método mais complicado e que gera maior custo computacional, mas também gera o menor erro nas simulações. O método de Runge-Kutta 2 possui um custo computacional intermediário e um erro de simulação também intermediário quando comparado com o Método de Euler e Runge-Kutta 4.

4 Identificação dos parâmetros

A identificação dos parâmetros consiste em uma técnica para estimar os parâmetros do biorreator $\mu_{m1}, K_{S1}, \mu_{m2}, K_{S2}, k_1, k_2, k_3, k_6$ a partir de dados coletados de um experimento. O modelo do biorreator é parametrizado por um vetor $\theta = [\mu_{m1} \ K_{S1} \ \mu_{m2} \ K_{S2} \ k_1 \ k_2 \ k_3 \ k_6]^T$ e portanto a saída do modelo do biorreator é descrita por $\hat{q}_M(t, \theta)$ onde evidencia-se a dependência do modelo nos parâmetros θ .

Considera-se que está disponível um conjunto de dados experimentais de saída do biorreator $q_M(t)$ (volume de CH_4) coletados com intervalo de amostragem T constante. Estes dados serão utilizados para estimar os parâmetros do biorreator a partir do seguinte problema de otimização:

$$\hat{\theta}_N = \arg \min_{\theta} J(\theta), \quad \text{onde} \quad J(\theta) \triangleq \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (q_M(kT) - \hat{q}_M(kT, \theta))^2. \quad (6)$$

Uma vez que a função $J(\theta)$ não é convexa, um algoritmo de otimização para resolver o problema acima deve ser utilizado. Observa-se na literatura que dois algoritmos são amplamente utilizados para resolver o problema de otimização acima no contexto de identificação de parâmetros de modelos de biorreatores. O primeiro algoritmo utilizado é o método simplex Nelder-Mead implementado no Matlab pela função `fminsearch`. Este método é direto e não utiliza a informação do gradiente da função para procurar pela solução. O segundo algoritmo utilizado é o Trust-Region-Reflective, implementado no Matlab pela função `lsqnonlin`. Este algoritmo utiliza informação sobre o gradiente e Hessiana da função para procurar pela solução.

5 Resultados

A fim de analisar a aplicação dos diferentes algoritmos de identificação nos diferentes modelos, considera-se que o sistema que se deseja identificar é dado por (3), onde os parâmetros reais são

$$\theta_0 = [0.42912 \ 13.065 \ 2.6493 \ 571.27 \ 0.31204 \ 0.062776 \ 3.1473 \ 278.62]^T, \quad (7)$$

e as condições iniciais dos estados são dadas por $x(0) = [0.2 \ 0.8 \ 74 \ 93]^T$. Para os modelos discretizados, utiliza-se como período de amostragem $T = 1/3$ dia durante 40 dias, totalizando 120 amostras.

O objetivo deste trabalho é analisar os custos/benefícios de se utilizar modelos de diferentes complexidades na identificação de biorreatores. A complexidade tratada é aquela inserida pelo método de discretização. Esta análise é feita tanto em função do valor do custo obtido na identificação, ou seja, quão bom é o modelo identificado, como no custo computacional, ou seja, quanto tempo o algoritmo leva para realizar a identificação. Além disso, dois algoritmos diferentes são usados, através da aplicação das funções `fminsearch` e `lsqnonlin`.

Os algoritmos de identificação necessitam de um valor inicial para os parâmetros que se deseja identificar, o qual foi atribuído como sendo 20% acima do valor correto para todos os parâmetros. Para os dois algoritmos testados, foram identificados o modelo contínuo (denotado `ode45`) e os modelos discretizados pelos três métodos propostos no trabalho. Os parâmetros obtidos são apresentados na Tabela 1. Note que os parâmetros obtidos usando a função `lsqnonlin` e `ode45` são exatamente iguais a θ_0 (veja (7)), o que não acontece nos outros casos. No caso da função `fminsearch`, mesmo quando o modelo a ser identificado é o modelo contínuo, o algoritmo não é capaz de chegar ao mínimo da função. No caso dos modelos discretos, as duas funções chegam aos mesmos parâmetros considerando cada modelo, e os parâmetros obtidos com `ode4` já se aproximam bastante do valor real dos parâmetros.

Tabela 1: Parâmetros obtidos utilizando os diferentes algoritmos de otimização e os diferentes modelos (contínuo e discretizados).

Otm	Discr	$\hat{\theta}_1$	$\hat{\theta}_2$	$\hat{\theta}_3$	$\hat{\theta}_4$	$\hat{\theta}_5$	$\hat{\theta}_6$	$\hat{\theta}_7$	$\hat{\theta}_8$
<i>fminsearch</i>	ode45	0.40785	11.8138	2.6116	561.9843	0.39496	0.08048	3.1547	278.7515
	ode1	0.55157	22.7703	36.7215	8517.587	0.18584	0.036416	2.9164	259.3908
	ode2	0.41122	11.829	2.5854	554.9127	0.37735	0.076992	3.1616	278.9895
	ode4	0.42893	13.0667	2.6477	570.7571	0.31308	0.063028	3.1466	278.5
<i>lsqnonlin</i>	ode45	0.42912	13.065	2.6493	571.27	0.31204	0.062776	3.1473	278.62
	ode1	0.55157	22.7702	36.721	8517.4789	0.18584	0.036416	2.9164	259.3909
	ode2	0.41122	11.829	2.5854	554.9129	0.37735	0.076992	3.1616	278.9895
	ode4	0.42893	13.0667	2.6477	570.7571	0.31308	0.063028	3.1466	278.5

Para avaliar quantitativamente a qualidade das estimativas apresentadas na Tabela 1, são calculados, para todos os casos, diferentes custos:

- o custo computacional, dado pelo tempo (em segundos) que os algoritmos levam para estimar os parâmetros, o qual é representado na Tabela 2 por T_c . Os resultados foram obtidos em um computador MacBook Pro intel core i5, 2.5 GHz, 8 GB RAM, usando MATLAB R12b;
- o custo $J_{cont}(\hat{\theta}_N)$ (6), calculado considerando que $q_M(t, \hat{\theta}_N)$ seja a saída do modelo *contínuo*, estimada com os parâmetros identificados;
- o custo $J_{disc}(\hat{\theta}_N)$ (6), calculado considerando que $q_M(t, \hat{\theta}_N)$ seja a saída do modelo *discreto*, estimada com os parâmetros identificados.

Estes custos são apresentados na Tabela 2, a partir dos quais algumas análises podem ser feitas. Primeiramente, percebe-se que o algoritmo implementado pela função `lsqnonlin` é mais eficiente que o algoritmo implementado pela função `fminsearch`: os tempos computacionais são significativamente inferiores quando usamos `lsqnonlin`. Além disso, a identificação de um modelo

Tabela 2: Comparação de custos e tempo computacional para os diferentes algoritmos de otimização e diferentes modelos (contínuo e discretizados).

Otimização	Discretização	$J_{cont}(\hat{\theta}_N)$	$J_{disc}(\hat{\theta}_N)$	T_c (s)
fminsearch	ode45	0.0484	–	51.98
	ode1	549.99	0.0711	12.42
	ode2	1.2984	0.0216	20.62
	ode4	0.0070	4.5591×10^{-4}	23.48
lsqnonlin	ode45	3.7552×10^{-22}	–	0.95
	ode1	549.99	0.0711	0.39
	ode2	1.2984	0.0216	0.53
	ode4	0.0070	4.5591×10^{-4}	0.67

contínuo resultou em custo praticamente zero quando utilizado lsqnonlin, diferente do resultado da aplicação de fminsearch, que parece ter encerrado a otimização antes de atingir o mínimo. Quanto aos modelos discretizados, percebe-se que ambos métodos de otimização resultaram nos

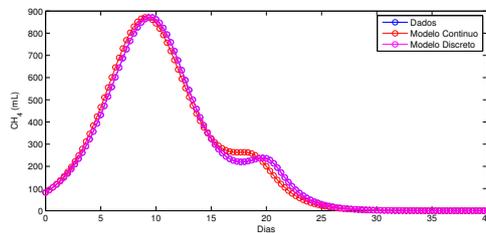


Figura 1: Comparação das respostas do sistema real, do modelo contínuo cujos parâmetros foram estimados usando um modelo ode1 e do próprio modelo discretizado por Euler .

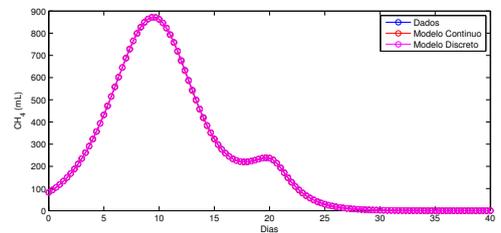


Figura 2: Comparação das respostas do sistema real, do modelo contínuo cujos parâmetros foram estimados usando um modelo ode2 e do próprio modelo discretizado por Runge-Kutta 2.

mesmos custos, a diferença ficando apenas no tempo computacional. Além disso, quanto maior a ordem utilizada para a discretização da derivada, menores os custos J calculados, e maiores custos computacionais T_c . Nota-se um custo $J_{cont}(\hat{\theta}_N)$ elevado para a discretização ode1, o que significa que os parâmetros identificados com o modelo discretizado por Euler não se aproximam dos parâmetros do modelo contínuo. Por outro lado, o custo $J_{disc}(\hat{\theta}_N)$ de ode1 apresenta um valor bastante inferior, o que significa que o modelo discreto, mesmo com os parâmetros “incorretos”, é apropriado para simular a saída do sistema. Esses resultados podem ser visualizados na Figura 1, na qual a simulação do modelo discreto sobrepõe a saída do sistema real.

A mesma análise pode ser feita para o caso da discretização ode2. Note que o custo $J_{cont}(\hat{\theta}_N)$ já é bastante inferior que o mesmo calculado para ode1, o que significa que os parâmetros identificados são mais próximos dos parâmetros reais. Além disso, o custo $J_{disc}(\hat{\theta}_N)$ para ode2 é ainda menor, mostrando que este modelo discreto simula ainda melhor a saída do sistema. Esses resultados são apresentados na Figura 2. Visualmente, não há diferenças entre os gráficos, indicando que a discretização de segunda ordem é adequada para simular a saída do sistema com um modelo discreto ou mesmo com um modelo contínuo construído a partir dos parâmetros obtidos pela identificação do modelo discreto. Porém, nota-se um aumento computacional em relação ao método de Euler. Conclusões similares podem ser obtidas com os dados relativos à utilização de ode4, com diminuição dos custos de identificação e aumento do custo computacional.

6 Conclusões

Neste trabalho, o efeito de identificar modelos contínuos ou discretizados de biorreatores anaeróbicos foi analisada. A partir dos resultados obtidos, pode-se dizer que a função `lsqnonlin`, baseada no cálculo do gradiente, é preferível em relação à função `fminsearch`, onde a qualidade dos resultados obtidos é igual ou melhor, e o tempo computacional é consideravelmente menor. Além disso, se o objetivo da identificação são os valores dos parâmetros em si, então recomenda-se identificar um modelo contínuo ou discretizado de alta ordem. Por outro lado, se o objetivo for a obtenção de um modelo para simulação e/ou controle, recomenda-se discretizá-lo usando o método de Euler e usar este modelo discreto para a simulação e/ou controle. O custo calculado em relação à resposta deste modelo é pequeno, e o custo computacional é significativamente menor que o obtido com outros modelos. Além disso, o modelo obtido é mais simples que os modelos discretizados por Runge-Kutta.

Referências

- [1] J. F. Andrews. Dynamic models and control strategies for wastewater treatment processes. *Water Research*, 8(5):261 – 289, 1974.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] Ph. Bogaerts and A. Vande Wouwer. Parameter identification for state estimation-application to bioprocess software sensors. *Chemical Engineering Science*, 59:2465–2476, January 2004.
- [5] 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.
- [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.
- [7] A. Donoso-Bravo, J. Mailier, G. Ruiz-Filippi, and A. Vande Wouwer. Identification in an anaerobic batch system: global sensitivity analysis, multi-start strategy and optimization criterion selection. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, 36(1):35–43, 2013.
- [8] J.E. Haag, A. Vande Wouwer, and I. Queinnec. Macroscopic modelling and identification of an anaerobic waste treatment process. *Chemical Engineering Science*, 58(19):4307 – 4316, 2003.
- [9] F. Haugen, R. Bakke, and B. Lie. State estimation and model-based control of a pilot anaerobic digestion reactor. *Journal of Control Science and Engineering*, ID 572621, 2014.