

Determinação de Parâmetros em Modelos Matemáticos de Reatores Anaeróbios

Pedro Augusto Pereira Borges¹

Curso de Matemática, UFFS, Chapecó, SC

Vitor José Petry²

Curso de Matemática, UFFS, Chapecó, SC

Leandro Bassani³

Curso de Engenharia Ambiental, UFFS, Chapecó, SC

Janice Teresinha Reichert⁴

Curso de Matemática, UFFS, Chapecó, SC

Resumo. A redução da poluição das águas com esgoto depende dos esforços da pesquisa para melhorar a eficiência dos reatores anaeróbios. Nesse sentido, a modelagem matemática apresenta-se como uma alternativa de produzir resultados significativos, minimizando custos de investigação com protótipos. Neste trabalho investiga-se o termo de reação do modelo matemático para um reator de mistura completa. Foram elaboradas duas formulações, uma polinomial, outra exponencial e verificada a coerência com os dados experimentais de quatro reatores. O problema direto foi implementado numericamente pelos Métodos de Runge-Kutta com malha variável. Os parâmetros de ambas as formulações foram determinados com o Método de Procura em Rede. A formulação exponencial descreveu o comportamento da concentração mais adequadamente do que a formulação polinomial.

Palavras-chave. Reatores anaeróbios, modelagem de reatores, problemas inversos.

1 Introdução

O descarte de esgoto doméstico com tratamentos precários representa um dos principais fatores de contaminação do solo, lagoas, riachos, rios e oceanos, ocasionando problemas de saúde pública, tais como as infecções por doenças parasitárias e intestinais. O esforço para minimizar os danos desse descarte passa necessariamente pela pesquisa de métodos de tratamento de águas residuárias. A redução do tamanho das estações de tratamento e o custo do tratamento terciário, geram a necessidade de melhorar a eficiência dos reatores no tratamento de dejetos. O desenvolvimento de modelos matemáticos associados a resultados de experimentos em escala laboratorial é uma forma de obter dados sobre o funcionamento de reatores de diferentes tipos, determinar seus parâmetros e avaliar seu rendimento, com

¹pedro.borges@uffs.edu.br

²vitor.petry@uffs.edu.br

³leandrobassani@uffs.edu.br

⁴janice.reichert@uffs.edu.br

baixo custo e maior flexibilidade, em relação à construção de protótipos. O volume útil de matéria orgânica em reatores reais é variável durante os tempos de abastecimento e descarte. Evidentemente, a concentração é diferente em cada ponto do reator, principalmente no período de carregamento, pois a concentração da carga de entrada é, em geral, algumas vezes maior do que a concentração da massa no interior do reator. No entanto, terminado esse período, a concentração tende a tornar-se homogênea em todo o volume. Por essas razões, é uma simplificação razoável, considerar que a concentração da massa de esgoto é homogênea em qualquer instante. Essa hipótese é chamada de mistura completa. Os reatores anaeróbios são modelados com equações diferenciais ordinárias, cuja solução numérica torna-se mais indicada, em comparação com a analítica, devido às variações no volume, durante as etapas de abastecimento e descarte. Os parâmetros dessas equações têm significados físicos de interesse da engenharia sanitária, como por exemplo, aqueles envolvidos no termo de reação. O problema do presente trabalho consiste na investigação do termo de reação do modelo matemático para um reator de mistura completa. Foram elaboradas duas formulações (além do coeficiente constante) e verificada a coerência com os dados experimentais, sobre a variação da concentração de matéria orgânica (DQO), em reatores anaeróbios operados em batelada. O problema direto (PD) foi implementado numericamente pelos Métodos de Runge-Kutta com malha variável. Os parâmetros das formulações foram determinados com o Método de Procura em Rede (problema inverso (PI)).

2 Modelagem do funcionamento de reatores anaeróbios

Em um reator anaeróbio, o balanço de massa indica que a variação da massa por unidade de tempo é igual à variação da massa que entra no reator, menos a variação da massa que sai por reação (termo de reação) e/ou por retirada operacional, por unidade de tempo. A Figura 1 ilustra o funcionamento e as variáveis utilizadas na modelagem do reator de mistura completa.

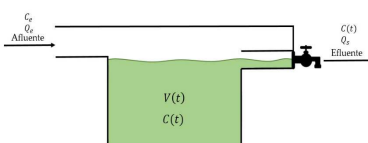


Figura 1: Esquema físico do reator anaeróbio.

Com essas considerações, pode-se escrever a equação de balanço de massa na forma de uma equação diferencial ordinária de 1ª ordem, como a equação (1), [3],

$$\frac{d}{dt}(VC) = Q_e C_e - rV - Q_s C \quad (1)$$

com $C(0) = C_0$ (concentração inicial), onde C é a concentração do elemento a controlar no reator (mg/l), V é o volume útil do reator (l), Q_e é a vazão de entrada (l/h), r é a

taxa de reação ($mg/l.h$), Q_s é a vazão de saída (l/h), C_e é a concentração de entrada do elemento (mg/l) e $t(h)$ é o tempo.

As funções C e V são ambas dependentes do tempo, porém sem dependência uma da outra. A variação de volume foi obtida usando as condições operacionais em três estágios (ver Tabela 1), para quatro reatores, conforme o experimento de [1], no qual o abastecimento é feito em batelada. Foi utilizado esgoto sintético com demanda química de oxigênio (DQO) de $400mg/l$ para abastecimento. O volume útil de todos os reatores é de $10l$, enquanto que o mínimo é de $4l$. A vazão de entrada Q_e (efluente) é constante até t_1 e nula até t_f (tempo final). O descarte de líquido (efluente) também é feito em batelada, com vazão nula até um tempo t_2 e vazão Q_s constante até t_f , sem descarte do lodo. Entre os tempos t_1 e t_2 , o volume é constante, $V_u = 10l$. Essas condições operacionais são apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1: Condições operacionais dos reatores

$$V_0 = 4l, t_1 = 0, 25h, t_2 = 11, 5h, t_f = 12h, V_u = 10l$$

Estágios	Tempo (h)	$Q_e(l/h)$	$Q_s(l/h)$	$V(l)$
I	$0 \leq t \leq t_1$	24	0	$V(t) = V_0 + Q_e t$
II	$t_1 \leq t \leq t_2$	0	0	$V(t) = V_u$
III	$t_2 \leq t \leq t_f$	0	12	$V(t) = V_u - Q_s(t - t_2)$

3 Formulações para a taxa de reação r

O termo de reação da Equação (1) tem sido considerado na literatura [3] predominante como de 1ª ordem, ou seja, proporcional à concentração presente (r constante). Essa hipótese, no entanto, não descreve adequadamente o comportamento da concentração, principalmente na segunda metade do ciclo, indicando que a concentração tende a zero, quando os dados mostram que há resíduo. A taxa de reação depende basicamente da espécie e quantidade de bactérias presentes no esgoto, a qual depende da relação morte-reprodução, que é função do pH, da disponibilidade de alimento e da temperatura.

Os dados experimentais indicam que a taxa de reação é maior na primeira metade do ciclo, tendendo a zero na outra metade. Pode-se explicar esse comportamento, considerando que as bactérias tendem a se alimentar e reproduzir com taxas maiores em ambientes com alta disponibilidade de matéria orgânica, do que em ambientes sem alimentos. Além disso, admite-se a ocorrência de reações de ordem 0, 1 e 2, simultaneamente [3] o que reforça a dependência da taxa de reação em função da concentração de matéria orgânica.

O modelo de mistura completa, descrito pela Equação (1) não considera o pH, nem a temperatura, mas considera a disponibilidade de alimento, expressa como DQO. A análise geométrica dos dados experimentais sugere uma forte influência da DQO em r , reforçando a tese de que essa taxa não seja constante. Neste trabalho foram testadas duas hipóteses para a taxa de reação variável, r :

H_1 Função polinomial: Supõe a existência de reações de ordens 0, 1 e 2, e que a taxa de reação é proporcional a soma dessas reações; H_2 Função exponencial: Supõe que a taxa varia proporcionalmente à concentração presente (reação de 1ª ordem) porém com um parâmetro variável exponencialmente com o tempo.

As formulações dessas hipóteses, substituídas na Equação (1) são apresentadas pelas Equações (2) e (3), respectivamente:

$$\frac{d}{dt}(VC) = Q_e C_e - (aC^2 + bC + c)V - Q_s C \quad (2)$$

Onde $a(l/mg.h)$, $b(1/h)$ e $c(mg/h.l)$ são parâmetros reais positivos relativos às reações de ordem 2, 1 e 0, respectivamente e

$$\frac{d}{dt}(VC) = Q_e C_e - (Ae^{-bt^c} V + Q_s)C \quad (3)$$

Onde $A(1/h)$, $b(1/h)$ e c (adimensional) são parâmetros reais positivos.

4 Resolução numérica e problema inverso (PI)

A equação diferencial do modelo (Equações 2 e 3) é de primeira ordem, cujo domínio tem três estágios conforme descrito na Tabela 1, cada um com funções diferentes para $V(t)$, fato que apresenta algumas dificuldades para a implantação de soluções analíticas. A escolha de um método numérico de resolução com mínimo custo computacional é importante, visto que a solução será utilizada no Problema Inverso (PI). A função $C(t)$ apresenta forte crescimento no estágio I e abrupta mudança dessa tendência ao passar para o estágio II, exigindo malhas refinadas nos primeiros instantes do domínio. Os métodos numéricos que usam derivadas têm problemas com funções dessa natureza, pois utilizam dados de iterações anteriores, para calcular os valores das iterações seguintes. A resolução numérica das Equações (2) e (3) foi implementada pelo Método de Runge-Kutta de ordens 1 (equivalente ao Método de Euler), 2 (Runge Kutta melhorado e modificado), 3 e 4, com $h = \Delta t$ constante ou variável, para identificar um método e malha com menor tempo de execução computacional. Essa análise aponta o Método de Euler com malha variável de 150 intervalos como o mais indicado dentre os métodos pesquisados, considerando a precisão e o tempo de execução. A determinação dos parâmetros das Equações (2) e (3) pode ser obtida com a solução do PI pelos Métodos de Newton, Levenberg-Marquardt, Algoritmos Genéticos e outros. Neste trabalho, foi obtida pelo Método de Procura em Rede (MPR), devido à simplicidade do algoritmo e ausência de problemas de convergência. O referido método consiste no seguinte algoritmo, adaptado para a determinação de dois parâmetros:

1. Estimar intervalos de existência de solução com os parâmetros $p_1 = [p_{1min}, p_{1max}]$ e $p_2 = [p_{2min}, p_{2max}]$.
2. Dividir cada intervalo em n partes, com $n + 1$ pontos, obtendo dois vetores $\mathbf{P}_1(i)$ para $i = 1, 2, \dots, n + 1$ e $\mathbf{P}_2(j)$, para $j = 1, 2, \dots, n + 1$.

3. Calcular $C(t)$ com a Equação (3), usando o par $x = (p_1(i), p_2(j))$ como parâmetros; Calcular $d_k = |C(t_k) - C_e(t_k)|$, $k = 1, 2, \dots, m$, onde C_e representa a concentração obtida por dados experimentais e m é número de dados experimentais;
4. Incrementar j e executar os passos 3 e 4, até $j = n$. Incrementar i , e executar os passos 3 a 5, até $j = n$. Se $i = n$, voltar para o passo 7.
5. Identificar o menor E_{ij} e o par $(p_1(i), p_2(j))$ correspondente, entre os $(n+1)^2$ valores calculados.

5 Resultados e discussões

Nesta seção são comentadas a análise da variação de r , as aplicações dos métodos numéricos e a eficiência do modelo na descrição do comportamento da DQO nos reatores.

5.1 Sobre a regularidade do termo de reação

A Tabela 2 apresenta os parâmetros obtidos com o MPR para os dois modelos e os quatro reatores. O parâmetro a do modelo polinomial foi claramente dominante sobre os parâmetros b e c , pois apenas a sua variação (refinamento da solução do PI) determinava melhoramento do R^2 , independente da variação de b e c . O MPR indica o sentido da variação do parâmetro na direção do valor ótimo, que para os coeficientes b e c tende a zero. Isso não significa que reações de ordem 0 e 1 não ocorram. Significa apenas que o parâmetro a é dominante sobre os demais, reduzindo o termo de reação da hipótese $H1$ a: $r = aC^2$.

Tabela 2: Parâmetros de $r(t)$, para os reatores R1, R2, R3 e R4

Reator	R1	R2	R3	R4
		Modelo Polinomial (Equação (2))		
a	0,0019	0,0058	0,00498	0,0058
b	0,00001	0,00001	0,00001	0,00001
c	0,00001	0,00001	0,00001	0,00001
R^2	0,431	0,2951	0,573	0,804
		Modelo Exponencial (Equação (3))		
A	4,16	11,6	34,78	12,8
b	2,42	3,1	4,17	3,10
c	0,29	0,38	0,212	0,275
R^2	0,648	0,829	0,803	0,932

Os parâmetros do modelo exponencial são significativos na conformação da curva de DBO. Pequenas variações de cada um dos três, significam alterações substanciais no posicionamento da curva e conseqüentemente no coeficiente de determinação R^2 . Uma se-

melhança entre os parâmetros de R2 e R4 pode ser observada, apenas devido aos valores semelhantes de DQO, mesmo que a distribuição ao longo do tempo seja bastante diferente.

Os valores de R^2 foram em geral, baixos para as duas hipóteses. Apenas o método exponencial no R4 apresentou valor maior do que 0,9, o que é comum tratando-se de experimentos com coleta de dados manuais, provavelmente devido a: (1) A dispersão dos dados experimentais principalmente no fim do estágio I e início do II. Nesse intervalo de tempo se encontram as maiores diferenças entre as curvas geradas pelo modelo e os dados experimentais, como pode ser observado na Figura 2. Como as medidas foram realizadas na saída do reator, provavelmente a massa de entrada com alta concentração, ainda não estivesse misturada com a massa de baixa concentração, presente no interior do reator. No modelo de mistura completa não há gradientes de concentração internos; (2) Erros de medida podem justificar as irregularidades das medidas no 2º estágio, principalmente nos reatores R2 e R3; (3) A dificuldade em modelar o gradiente ascendente do estágio I e a estabilização do II foi maior no modelo polinomial do que no exponencial, como mostram as Figuras 2. O modelo exponencial, modelou adequadamente a tendência de estabilização do estágio II, em todos os reatores. O coeficiente de determinação desse método é bem maior do que do método polinomial, evidenciando que aquele método, apesar de justificado empiricamente, é o mais adequado, dentre os métodos pesquisados, para modelar o funcionamento do reator.

5.2 Sobre os métodos numéricos

O algoritmo MPR utilizou o Método de Euler aplicado em uma malha variável de 150 pontos para a solução do problema direto, mostrou-se eficiente na determinação dos parâmetros do problema, com tempo de execução médio de 7 s, para 10 partições em cada parâmetro. Execuções seguidas, com refinamento do intervalo de procura, foram utilizadas para encontrar conjuntos de parâmetros, em que mesmo mínimas variações (na ordem de 10^{-2} , consideradas suficientes para o problema), não melhoravam o coeficiente de determinação. Outras soluções com o mesmo R^2 , ou até superior, podem ser geradas, pois trata-se de um método sub-ótimo.

6 Considerações finais

O modelo exponencial mostrou-se mais adequado que o polinomial para a descrição dos dados experimentais, principalmente porque é sensível na descrição do forte gradiente da fase inicial do estágio II e a tendência de estabilização da concentração, na segunda metade do ciclo. A solução obtida pelo MPR é sub-ótima, visto que podem existir soluções do PI fora do intervalo de procura, ou ainda aquelas obtidas com novos refinamentos. Para problemas cuja ordem de grandeza dos parâmetros seja conhecida, esse método pode dar resultados suficientemente precisos. Como o número de execuções do PD depende do número de divisões e do de parâmetros, tem-se n^p execuções (sem os refinamentos), tornando o método pouco competitivo, relativamente ao desempenho computacional. No entanto, o método é apropriado para a solução desse problema, devido a sua simplicidade de implementação computacional, inexistência de problemas de convergência e cálculo de

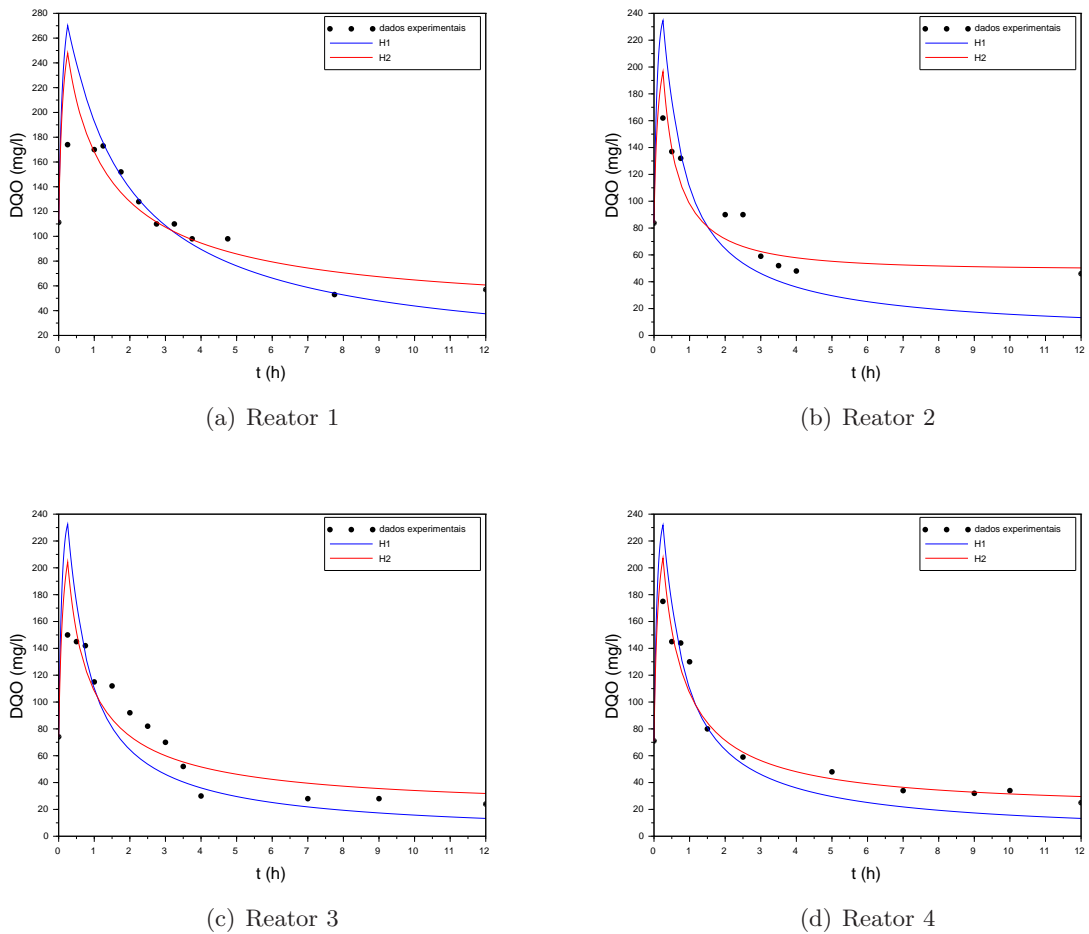


Figura 2: Variação da DQO para as duas hipóteses, nos quatro reatores.

derivadas. A simulação do funcionamento de reatores dispostos em série, cada um com um tipo de tratamento, é a direção dos próximos trabalhos.

Referências

- [1] F.S. Pescador, Tratamento de esgoto doméstico em reatores sequenciais em batelada (RSBAn). Dissertação de mestrado. Programa de Pós-Graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental, IPH-UFRGS. Porto Alegre: 2001.
- [2] A.J. Silva Neto, F.D. Moura Neto. *Problemas Inversos: conceitos fundamentais e aplicações*. Ed. UERJ, Rio de Janeiro, 2005.
- [3] M. Von Sperling. *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos*. Ed. UFMG, Minas Gerais, 1996.