



## Simulação do processo de produção de biogás a partir de palha de trigo

### Simulation of the biogas production process from wheat straw

Ana Beatriz de Oliveira Pagotto<sup>1</sup>, Gracielle Johann<sup>2</sup>

#### RESUMO

Na área de energias renováveis o biogás vem se estabelecendo de forma consistente em diversas regiões do Brasil. Entretanto, o uso de substratos de origem agroindustriais ainda está sendo estudado e analisado de forma que sua aplicação em larga escala seja viabilizada. Alguns recursos para esses estudos é a modelagem e simulação de processos, em que utilizando ferramentas computacionais é possível testar diferentes hipóteses, baseando-se em trabalhos anteriores. No projeto em questão, para a simulação, foi escolhido um artigo que utilizou como substrato principal a palha de trigo, um material lignocelulósico, onde a chamada digestão anaeróbia, característica do processo de produção de biogás, passa a ser chamada de bioaugmentada. Foram analisadas e simuladas quatro variáveis: a concentração de substrato, de metano gasoso, metano solúvel e hidrogênio solúvel. As equações diferenciais ordinárias (EDOs) do artigo, que obtiveram através de balanços de massa, foram utilizadas no *software* Maple, para obtenção de gráficos que expressassem o comportamento dessas variáveis.

**PALAVRAS-CHAVE:** digestão anaeróbia; EDOs; lignocelulósicos.

#### ABSTRACT

In the area of renewable energy, biogas has been consistently established in many regions of Brazil. However, the use of substrates of agro-industrial origin is still being studied and analyzed so that their large-scale application is made viable. Some resources for these studies are process modeling and simulation, in which using computational tools it is possible to test different hypotheses, based on previous work. In the project in question, for the simulation, an article that used wheat straw was chosen, a lignocellulosic material as the main substrate, where the so-called anaerobic digestion, characteristic of the biogas production process, is now called bioaugmented. Four variables were analyzed and simulated: the concentration of substrate, gaseous methane, soluble methane and soluble hydrogen. The ordinary differential equations (ODEs) from the article, which were obtained through mass balances, were used in the Maple software to obtain graphs that expressed the behavior of these variables.

**KEYWORDS:** anaerobic digestion; ODEs; lignocellulosic.

## INTRODUÇÃO

A modelagem e simulação de processos em conjunto permitem a análise, modificação e construção de processos produtivos sem necessidade de alterações em sistemas operantes. A simulação, através de ferramentas computacionais, simula fenômenos para coletar dados e calcular parâmetros (SCHULTZ *et al*, 2014).

A utilização dessas ferramentas na área de produção de biogás tem sido muito difundida, como em Menacho *et al*, 2023 que utilizaram a modelagem e simulação para analisar a produção de biogás a partir de resíduos alimentares, e em Okan *et al*, 2023 para comparar diferentes combinações de tratamento de águas residuais em termos de produção de biogás e produção de lodo. Algumas dessas aplicações são para comparação

<sup>1</sup> Discente no curso de Engenharia de Bioprocessos e Biotecnologia. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Dois Vizinhos, Paraná, Brasil. E-mail: anapagotto@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 9087553096279857.

<sup>2</sup> Docente no curso de Engenharia de Bioprocessos e Biotecnologia. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Dois Vizinhos, Paraná, Brasil. E-mail: graciellej@utfpr.edu.br. ID Lattes: 0042481312764501.



de diferentes sistemas de tratamento, testes em pequena escala de diferentes substratos e aumento da eficiência de sistemas produtivos.

Na área de energias renováveis o biogás já é uma realidade muito importante, bem aplicada e estabelecida, entretanto sua utilização como uma tecnologia limpa ainda está em desenvolvimento (SOUZA; OLIVEIRA; ALVES, 2019). A implantação da digestão anaeróbia a partir de resíduos agroindustriais vem sendo apresentada em pesquisas e estudada de forma a potencializar sua utilização em larga escala. Alguns exemplos são Tolessa *et al*, 2023, que fizeram a simulação de um estudo de caso de codigestão de resíduos agroindustriais e Lok *et al*, 2020, que estudaram o uso de efluentes de fábrica de óleo de palma para a produção de biogás.

O objetivo deste estudo foi a simulação e reprodução de um artigo relacionado à produção de biogás utilizando digestão anaeróbia bioaumentada, e a comparação qualitativa com os resultados do trabalho da literatura.

## MATERIAIS E MÉTODOS

Para a realização da simulação foi escolhido o artigo intitulado “A simplified model to simulate bioaugmented anaerobic digestion of lignocellulosic biomass: Biogas production efficiency related to microbiological data”, desenvolvido por Ferraro *et al*, 2019 (DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.07.051>), para que fosse realizado sua reprodução. Para a realização da digestão anaeróbia bioaumentada (DAB) dos autores foram utilizados 0,475 g de palha de trigo, como substrato lignocelulósico, 5 mL de inóculos de fungos ruminais anaeróbios, 5 mL de bactérias fermentadoras produtoras de hidrogênio e 12,5 mL inóculos metanogênicos. O reator utilizado pelos autores para a realização de testes da DAB foi do tipo Pyrex de 120 mL.

## SIMULAÇÃO NUMÉRICA

A simulação numérica realizada neste estudo utilizou os modelos matemáticos e dados de parâmetros dos testes promovidos no artigo escolhido, com o objetivo de obter gráficos que expressassem o comportamento de suas variáveis.

O *software* escolhido para o desenvolvimento da simulação numérica foi o Maple®, versão de 2020, disponível nas máquinas do Laboratório de Computação Aplicada da UTFPR-DV.

O modelo matemático é composto por equações diferenciais ordinárias (EDOs) de primeira ordem, obtidas a partir de balanços de massa por Ferraro *et al*, 2019. Sendo elas utilizadas para análise do comportamento da concentração de substrato, metano gasoso, metano solúvel e hidrogênio solúvel, ordenadas de forma respectiva nas seguintes equações:

$$\frac{dC}{dt} = -k_d * C_0 \quad (1)$$

$$\frac{dM}{dt} = k_{L,M} * (M - 64 * k_M * p_M) * \frac{V_L}{V_G} \quad (2)$$

$$\frac{dS_M}{dt} = (1 - \alpha) * k_d * C + (1 - Y_H) * k_{m,H} * \frac{S_H}{k_s + S_H} * X_H - k_{L,M} * (M - 64 * k_M * p_m) * \frac{V_L}{V_G} \quad (3)$$

$$\frac{dS_H}{dt} = \alpha * k_d * C + (1 - Y_H) * k_{m,H} * \frac{S_H}{k_s + S_H} * X_H - k_{L,H} * (S_H - 16 * k_H * p_H) * \frac{V_L}{V_G} \quad (4)$$

Para a resolução do sistema de equações descritas foram fornecidos os valores dos parâmetros necessários na simulação, sendo eles:  $k_d$  ( $dia^{-1}$ ) a constante de degradação do substrato;  $C_0$  ( $g/L$ ) a concentração de substrato inicialmente;  $k_{L,M}$  ( $dia^{-1}$ ) a constante de transferência do gás metano;  $k_M$  ( $M/atm$ ) a constante de Henry para o metano;  $p_m$  ( $atm$ ) a pressão parcial do metano;  $V_L$  ( $L$ ) o volume da fase líquida;  $V_G$  ( $L$ ) o volume da fase gasosa;  $\alpha$  (*adimensional*) o coeficiente de partição entre hidrólise e o processo de matanogênese;  $Y_H$  ( $g/g$ ) o rendimento de biomassa;  $k_{m,H}$  ( $dia^{-1}$ ) a taxa de absorção específica máxima Monod de biomassa hidrogenotrófica;  $k_s$  ( $g/L$ ) a constante de semi-saturação de hidrogênio;  $X_H$  ( $g/L$ ) a concentração da biomassa hidrogenotrófica;  $k_{L,H}$  ( $dia^{-1}$ ) a constante de transferência de gás hidrogênio;  $k_H$  ( $M/atm$ ) a constante de Henry para o hidrogênio;  $p_H$  ( $atm$ ) a pressão parcial do hidrogênio.

Considerando que no início do processo não existe a formação de metano gasoso, metano solúvel e hidrogênio solúvel foi-se designado o valor de zero para suas condições iniciais, enquanto o substrato teve como concentração inicial 9,16 g/L.

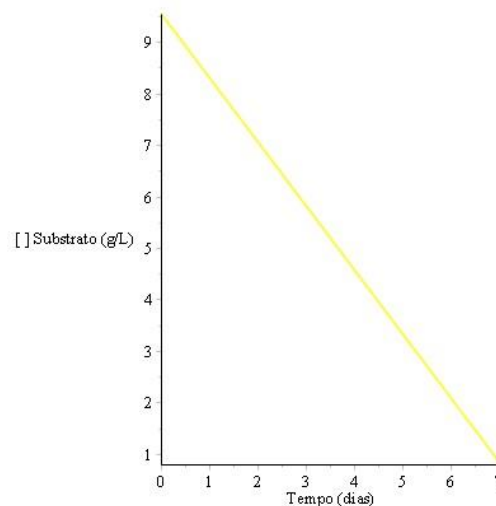
Após a indicação das equações, parâmetros e condições iniciais o sistema foi resolvido utilizando o método numérico iterativo padrão do *software*.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Na indicação dos parâmetros, os volumes de líquido e gás foram sendo ajustados até que as concentrações encontradas estivessem dentro do padrão de comportamento indicado pelas EDOs e de acordo com a digestão anaeróbia. Gráficos para cada uma das concentrações das variáveis foram obtidas até o tempo de sete dias de funcionamento do biorreator, sendo o tempo do artigo original.

Na Figura 1 temos o gráfico da concentração de substrato, em que a partir de sua concentração inicial foi sendo consumido de forma linear até atingir esgotamento total no último dia.

Figura 1 – Concentração de substrato

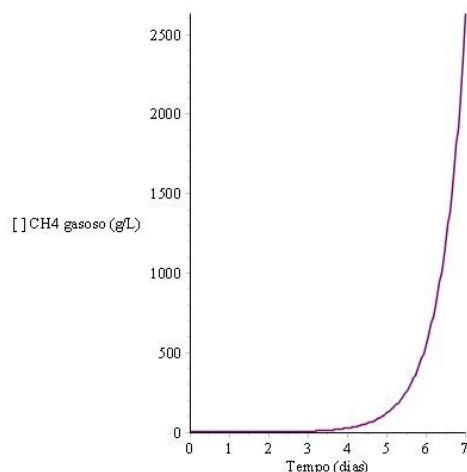


Fonte: Elaborado pelos autores (2023).



Ao observarmos a Figura 2, contendo o gráfico da concentração de metano gasoso, é possível notar que a partir do quarto dia existe uma produção significativa desse gás, sendo considerado um comportamento apropriado já que boa parte do substrato já havia sido consumido. Entretanto, no sexto dia do processo houve uma estabilização dessa produção, deixando de ser viável para as condições estabelecidas o prolongamento da análise.

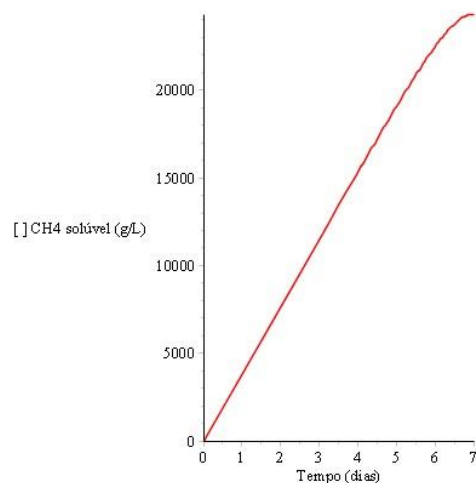
Figura 2 – Concentração de metano gasoso



Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

O gráfico da concentração de metano solúvel, contido na Figura 3, apresenta algumas inconsistências, como por exemplo, por ser uma molécula com momento de dipolo igual a zero, ou seja, apolar, são pouco solúveis em solventes polares como a água (MARTINS; LOPES; ANDRADE, 2013). Considerando essa baixa solubilidade os valores apresentados mostram inconsistência por possuírem uma grandeza numérica muito acima das concentrações de outras variáveis analisadas, como a concentração de hidrogênio solúvel.

Figura 3 – Concentração de metano solúvel

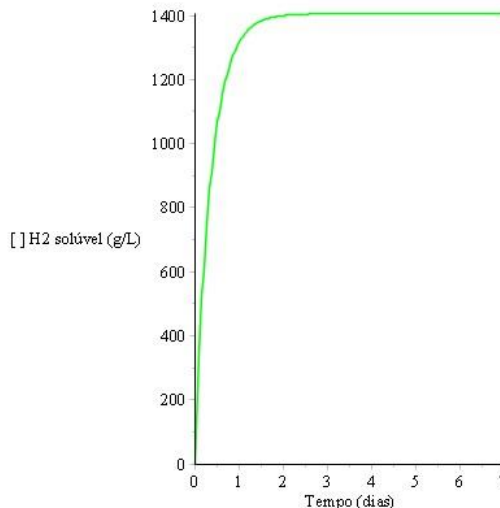


Fonte: Elaborado pelos autores (2023).



Considerando a utilização no substrato de bactérias fermentadoras produtoras de hidrogênio, a Figura 4, que representa o gráfico da concentração de hidrogênio solúvel, apresenta uma rápida produção desse componente, em que a partir do segundo dia já alcança seu nível de saturação. Uma das possibilidades dessa ocorrência é devido ao volume de ocupação ser pequeno, e parte desse hidrogênio ser consumido por microrganismos responsáveis pela digestão anaeróbia.

Figura 4 – Concentração de hidrogênio solúvel



Fonte: Elaborado pelos autores (2023).

Os gráficos obtidos através da simulação, não foram os utilizados pelos autores do artigo reproduzido, pois seu objetivo principal era que essas EDOs descrevessem os principais fenômenos do processo para obter a simulação da produção cumulativa de metano, expressa em NmL, enquanto a simulação do trabalho em questão teve como ponto principal a obtenção dos gráficos das variáveis para análise de seu comportamento.

## CONCLUSÃO

A reprodução e simulação do artigo foi um tanto desafiador em vários sentidos. Existiam parâmetros não citados diretamente, alguns tiveram de ser adaptados às condições de processo, como no caso dos volumes, e suas unidades de medida apresentadas em gráficos eram diferentes das utilizadas nos balanços de massa.

Os dados obtidos nessa simulação podem ser comparados a outros modelos de digestão anaeróbia padrão, ou então bioaugmentada (DAB), podendo ser adaptado a outros parâmetros e condições de processo, considerando que não há muitos dados na literatura da DAB.

## Agradecimentos

Agradeço o apoio da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, *campus* Dois Vizinhos, através do espaço de trabalho cedido e da disponibilização do *software* utilizado, ao meu colega Gabriel Ferreira pelo suporte e minha orientadora Prof. Dra. Gracielle Johann.



## Conflito de interesse

Não há conflito de interesse.

## REFERÊNCIAS

FERRARO, Alberto *et al*; A simplified model to simulate bioaugmented anaerobic digestion of lignocellulosic biomass: Biogas production efficiency related to microbiological data. **Science of the Total Environment**. v. 691, p. 885-895, 2019.

MARTINS, Cláudia Rocha; LOPES, Wilson Araújo; ANDRADE, Jailson Bittencourt. SOLUBILIDADE DAS SUBSTÂNCIAS ORGÂNICAS. **Quim. Nova**, v. 36, p. 1248-1255, 2013.

MENACHO, Walter Anaya *et al*. Modelling and analysis for biogas production process simulation of food waste using Aspen Plus. **Fuel**, v. 39, 2022.

OKAN, Bora *et al*. Model-based comparison of biological wastewater and sludge treatment combinations for nutrient removal, sludge and biogas production. **Journal of Water Process Engineering**, v. 55, 2023.

SCHULTZ, Guilhermina *et al*. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS REATORES QUÍMICOS BR E PFR NO EMSO E GNU OCTAVE. **ENCICLOPÉDIA BIOSFERA**, Centro Científico Conhecer. Goiânia, v.10, p. 3736-3742, 2014.

SOUZA, Luana Pereira; OLIVEIRA, Lígia Gomes; ALVES, Helton Jose. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA PRODUÇÃO DE BIOGÁS A PARTIR DA VINHAÇA EM UMA USINA SUCROENERGÉTICA. **IBEAS - Instituto Brasileiro de Estudos Ambientais**, 2º Congresso Sul-Americano de Resíduos Sólidos e Sustentabilidade. Foz do Iguaçu, 2019.

TOLESSA, Amsalu *et al*. Probabilistic simulation of biogas production from anaerobic co-digestion using Anaerobic Digestion Model No. 1: A case study on agricultural residue. **Biochemical Engineering Journal**, v. 192, 2023.

LOK, Xiwen *et al*. Simulation and optimisation of full-scale palm oil mill effluent (POME) treatment plant with biogas production. **Journal of Water Process Engineering**, v. 38, 2020.