



Proposta de modelo matemático de uma fase para processos de digestão anaeróbia na produção de biogás

Proposal of a single-phase mathematical model for anaerobic digestion processes in biogas production

Yuri Claro Costa Carvalho¹, Matheus Belchior Ramires², Fabiano Bisinella Scheufele³, Jones Erni Schmitz⁴

RESUMO

Considerando a crescente importância da digestão anaeróbia tanto para a gestão de resíduos quanto para a produção de bioenergia, neste estudo acadêmico propõe-se um modelo matemático simplificado para descrever o processo de digestão anaeróbia, condensando as complexas reações em um mecanismo simplificado, reduzindo a quantidade de variáveis e parâmetros em relação a outros modelos existentes. Por meio da definição de três variáveis principais: concentração de substrato (S), biomassa (X) e biogás (P), de equações de balanço de massa e de otimização de parâmetros usando dados experimentais da literatura, o modelo codificado em linguagem Python conseguiu replicar satisfatoriamente o comportamento experimental, embora tenha gerado um valor elevado para a constante de saturação de Monod (K_s), o que demonstra que o efeito de descrever várias reações em cadeia em um mecanismo simplificado de transformação acelera a taxa de reação global. Assim, o modelo proposto foi efetivo em representar um sistema em batelada, obtendo valores de R^2 entre 0,93 e 0,99, embora sejam necessários estudos com diferentes condições experimentais de forma a aumentar a robustez e capacidade preditiva do modelo.

PALAVRAS-CHAVE: Bioenergia; digestão anaeróbia; modelagem matemática.

ABSTRACT

Considering the increasing importance of anaerobic digestion for both waste management and bioenergy production, this academic study proposes a simplified mathematical model to describe the anaerobic digestion process. The model condenses the complex reaction into a single reaction, reducing the number of variables and parameters compared to existing models. Through the definition of three main variables: concentration of substrate, biomass, and biogas, as well as mass balance equations and parameter optimization using experimental data from the literature, the model coded in Python language was able to satisfactorily replicate the observed behavior. However, it generated a high value for the Monod saturation constant (K_s), indicating that describing multiple chain reactions as a single transformation reaction accelerates the overall reaction rate. Thus, the proposed model was effective in representing a batch system, although further studies with different experimental conditions are needed to enhance the model's robustness and predictivity capacity.

KEYWORDS: Bioenergy; anaerobic digestion; mathematical modeling.

INTRODUÇÃO

Dentro do contexto global da atualidade, onde há a imperatividade de mitigar os efeitos das mudanças climáticas associadas à emissão de gases de efeito estufa, a digestão anaeróbia apresenta-se consolidada como uma tecnologia industrial de gestão de resíduos e, nos últimos anos, observa-se uma tendência cada vez maior da comunidade

¹ Estudante da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Toledo, Paraná, Brasil. E-mail: yuricarvalho@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 3804536056633316.

² Estudante da Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Toledo, Paraná, Brasil. E-mail: matheusramires@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 8965106762277460.

³ Docente no Curso de Engenharia de Bioprocessos e Biotecnologia. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Toledo, Paraná, Brasil. E-mail: fabianob@utfpr.edu.br ID Lattes: 4578180806056815.

⁴ Docente no Curso de Engenharia de Bioprocessos e Biotecnologia. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Toledo, Paraná, Brasil. E-mail: jonesschmitz@utfpr.edu.br ID Lattes: 6648403802855421.



acadêmica no estudo desse processo, voltado também para a produção de biogás (AMPESE, 2022).

Dessa forma, a perspectiva de desenvolver essa tecnologia para a recuperação de bioenergia a partir de resíduos está em consonância com os seguintes Objetivos de Desenvolvimento Sustentável estabelecidos na Convenção-Quadro das Nações Unidas sobre o Clima (ONU, 2015): ODE 6 (água potável e saneamento), ODE 7 (energia limpa e acessível) e ODE 13 (ação contra a mudança global do clima).

Sob um prisma das reações bioquímicas, a digestão anaeróbia se divide em hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese. A matéria orgânica de maior complexidade como lipídios, proteínas e polissacarídeos, é solubilizada na presença de hidrolases extracelulares liberadas pela comunidade microbiana hidrolítica, que metaboliza os ácidos graxos de cadeia longa, aminoácidos e açúcares simples gerados. A partir do crescimento desses microrganismos fermentativos dá-se a acidogênese, ou seja, o processo de geração de ácidos graxos voláteis como produto de fermentação dos compostos solúveis produzidos na hidrólise. Os ácidos graxos voláteis são então consumidos por bactérias acetogênicas, que os metabolizam gerando acetato, CO₂ e H₂. A obtenção de biogás se dá mediante a transformação dos produtos acetogênicos em metano e gás carbônico, desempenhada no metabolismo da comunidade de metanogênicos (MANCHALA, 2017; MENZEL, 2020).

Dentro dos estudos na área do processo, parte é direcionada à modelagem da digestão anaeróbia. Como recurso, a modelagem permite o monitoramento, controle e predição do comportamento do sistema em condições variadas (RAMACHADRAN, 2019). Como exemplo, o *Anaerobic Digestion Model 1* (ADM1) é um dos modelos estabelecidos na literatura e amplamente aplicado em processo de digestão anaeróbia para o tratamento de efluentes (Batstone, 2002).

Dessa forma, esse trabalho teve como objetivo o desenvolvimento de um modelo matemático simplificado, capaz de descrever o comportamento experimental do processo de digestão anaeróbia em termos de parâmetros agrupados (*“lumped-parameter”*) para a biomassa (X), o substrato (S) e o produto (P).

MÉTODOS

ESTRUTURAÇÃO MATEMÁTICA DO MODELO MONOD DE UMA FASE

Sendo a proposta o desenvolvimento de um modelo simplificado, o processo foi estruturado conceitualmente com a definição de três variáveis dependentes: concentração de substrato (S), concentração de biomassa celular (X) e concentração de biogás (P), que é o produto de interesse.

Destaca-se aqui que, embora as reações bioquímicas sejam realizadas por diversas comunidades microbianas, que consomem substratos complexos com composição variada, gerando múltiplos produtos intermediários na transformação de matéria orgânica em biogás, a simplificação do modelo busca descrever esses numerosos elementos em variáveis agregadas e os diversos estágios da digestão anaeróbia em uma única fase. Consequentemente, a variável X representa os diferentes grupos de microrganismos como um componente único e homogêneo. Da mesma forma, a variável S implica a consideração de um substrato homogêneo enquanto a variável P ignora os produtos intermediários e foca apenas na geração de biogás no sistema.



A partir dessas considerações iniciais, utilizando as equações de balanço de massa para um sistema isotérmico e homogêneo chega-se no sistema de equações para componentes da Eq.(1) onde Q é a vazão de alimentação do reator (m^3/dia), V é o volume líquido dentro do reator (m^3), S_e , X_e e P_e são as concentrações de substrato, biomassa e produto na corrente de alimentação (kg/m^3), e os termos $\sum r_{g,i}$ e $\sum r_{d,i}$ representam o somatório das reações de geração e destruição do componente i ($\text{kg}/m^3\text{dia}$), com $i = S, X, P$.

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = \frac{Q}{V} \cdot (S_e - S) + \sum r_{g,S} - \sum r_{d,S} \\ \frac{dX}{dt} = \frac{Q}{V} \cdot (X_e - X) + \sum r_{g,X} - \sum r_{d,X} \\ \frac{dP}{dt} = \frac{Q}{V} \cdot (P_e - P) + \sum r_{g,P} - \sum r_{d,P} \end{cases} \quad (1)$$

Considerando que a geração de substrato, destruição de produto, e as concentrações de biomassa e produto na corrente de alimentação são nulas, que a soma dos rendimentos de conversão em substrato e produto é no máximo igual a 1 e descrevendo a reação de consumo de substrato $r_{d,S}$ através da cinética de Monod e a reação de morte celular $r_{d,X}$ através de uma constante de primeira ordem, obtém-se o sistema da Eq.(2), onde D é a razão entre a vazão e o volume no reator (dia^{-1}), μ_{max} é a taxa máxima de crescimento celular específico (dia^{-1}), K_S é a constante de saturação de Monod (kg/m^3), $Y_{P/S}$ e $Y_{X/S}$ são os rendimentos de conversão de substrato em produto e em biomassa (kg/kg), respectivamente, e k_d é taxa de decaimento celular (dia^{-1}).

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = D \cdot (S_e - S) - \frac{\mu_{max}}{Y_{X/S}} \frac{S \cdot X}{K_S + S} \\ \frac{dX}{dt} = D \cdot (-X) + \left(\mu_{max} \frac{S}{K_S + S} - k_d \right) \cdot X \\ \frac{dP}{dt} = D \cdot (-P) + Y_{P/S} \frac{\mu_{max}}{Y_{X/S}} \frac{S \cdot X}{K_S + S} \end{cases} \quad (2)$$

Esse sistema de equações foi implementado como código e integrado numericamente em *Python* 3.11.10, com auxílio das bibliotecas *numpy* (v.1.24.3) e *scipy* (v.1.10.1). O método de integração utilizado para as simulações foi de Runge-Kutta implícito (Radau) de quinta ordem, devido à sua adequação à sistemas de equações rígidos.

EXTRAÇÃO DE DADOS E OTIMIZAÇÃO

A extração de dados experimentais da literatura se deu através da ferramenta *WebPlotDigitizer* (Rohatgi, 2015). O experimento selecionado para modelagem e simulação foi desenvolvido por Rao et al. (2000), que realizaram bateladas em escala laboratorial, utilizando fração orgânica de lixo municipal como substrato e inóculo proveniente de usina



de biogás de esterco bovino. Os dados extraídos então foram usados no cálculo da função objetivo, apresentada na Eq. (3):

$$\hat{E} = \frac{(y_i^{exp} - y_i^{sim}(\mathbf{v}))^2}{\epsilon}, \epsilon = \max(\hat{y}^{exp}) - \min(\hat{y}^{exp}), i = 0, 1, 2, \dots, n \quad (3)$$

Em que n é o número de dados experimentais, y_i^{exp} é o valor do i -ésimo dado no vetor \hat{y}^{exp} que contém os dados experimentais extraídos, $y_i^{sim}(\mathbf{v})$ é o i -ésimo dado obtido na simulação do modelo, que é uma função do vetor \mathbf{v} , que contém os valores dos parâmetros S_e , μ_{max} , K_s , $Y_{X/S}$, $Y_{P/S}$, k_d e D . Por fim, ϵ , é um parâmetro que representa a diferença entre o valor máximo e mínimo do vetor de dados experimentais, introduzido para normalizar os resultados.

Utilizou-se da biblioteca *lmfit* (v.1.2.1) para realizar a minimização da função objetivo, feita através do método *Simplex* desenvolvido por Nelder – Mead. A qualidade do ajuste do modelo foi avaliada através dos índices: qui-quadrado, critério de informação Akaike, critério de informação bayesiano e R^2 .

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para efetuar a otimização da função objetivo em um espaço paramétrico conciso com o comportamento esperado em uma batelada, definiu-se que $\mu_{max} \geq k_d$, de forma a garantir um estágio de crescimento celular. O parâmetro $Y_{P/S}$ foi fixado no valor de 0,877 kg_P/kg_S, em congruência com o rendimento encontrado por Rao et al. (2000). Como K_s é um parâmetro que costuma variar significativamente entre diferentes substratos, forneceu-se um amplo intervalo de variação nessa dimensão do espaço paramétrico. Assim, o espaço paramétrico definido através das hipóteses levantadas é apresentado na Tabela 1.

Tabela 1 – Espaço paramétrico e valores de estimativas iniciais empregadas na otimização e estimação de parâmetros.

Parâmetro	Valor inicial	Limite inferior	Limite superior
μ_{max}	0,1	0,02	1,2
K_s	219,43	0,0403	7.6 e+3
$Y_{X/S}$	0,004	0,004	0,123
k_d	0,008	0,001	μ_{max}

Fonte: dos Autores (2023).

Os resultados dos ajustes do modelo aos dados experimentais são apresentados na Tabela 2, obtidos com a otimização usando a função objetivo para três situações: apenas dados experimentais de substrato; apenas com dados de produto; e com ambos os conjuntos de dados. Nota-se que a estrutura simplificada do modelo foi capaz de reproduzir o comportamento experimental esperado, visto que as curvas ilustradas na Figura 1 apresentam um ajuste satisfatório aos dados experimentais. Comparando com a literatura tabelada em Batstone *et al.* (2002), percebe-se que há correspondência entre os valores de μ_{max} , $Y_{X/S}$ e k_d , que já foram reportados. Contudo, o valor de K_s otimizado ao modelo é três ordens de grandeza maior que a média dos valores tabelados para esse parâmetro. Esse alto valor da constante de saturação de Monod indica que desde o começo da



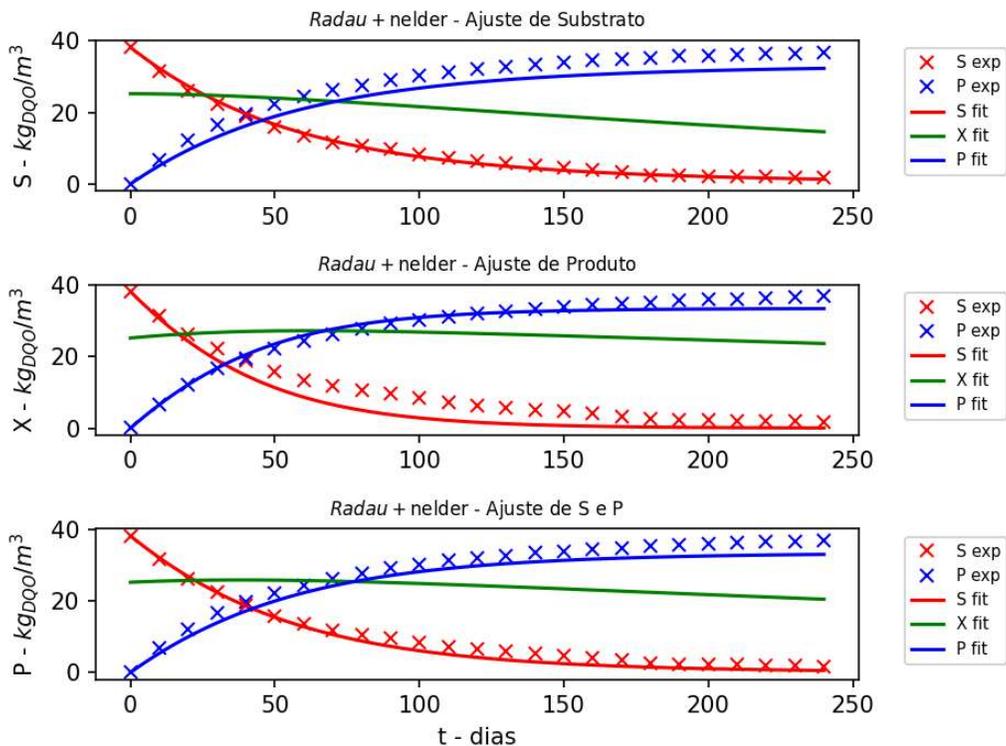
simulação, quando S_0 é significativamente menor que K_S , a taxa de consumo de substrato é menor que metade do valor de μ_{max} . Para o modelo simplificado, o efeito de descrever várias reações em cadeia em uma única reação de transformação acelera a taxa de reação global, de forma que o parâmetro K_S assume valores elevados para atuar como inibidor da taxa de consumo de substrato.

Tabela 2 – Parâmetros otimizados

Parâmetro	Ajuste de S		Ajuste de P		Ajuste de S e P	
	Valor	Erro (%)	Valor	Erro (%)	Valor	Erro (%)
$\mu_{max} - \text{dia}^{-1}$	0,06	0,75	0,02	0,00	0,0316	1,67
$K_s - \text{kg}_{\text{DQO}}/\text{m}^3$	724,4	0,00	152,3	5,58	365	1,01
$Y_{X/S} - \text{kg}_{\text{DQO}}/\text{kg}_{\text{DQO}}$	0,123	0,00	0,123	0,00	0,1148	0,48
$k_d - \text{dia}^{-1}$	0,0031	0,00	0,031	0,00	0,00158	0,16
R^2	0,9957		0,9697		S: 0,9756; P: 0,9273	

Fonte: dos Autores (2023).

Figura 1 – Resultados do ajuste com diferentes variáveis



Fonte: dos Autores (2023).

CONCLUSÃO

Constatou-se a possibilidade de descrever uma reação sequencial e complexa como a digestão anaeróbia através de um modelo simples de uma reação, com menos variáveis monitoradas e menor número de parâmetros que os modelos complexos baseados no ADM1. As considerações e restrições feitas para simplificar a resolução do modelo foram efetivas na definição de um espaço paramétrico conciso, diminuindo o erro padrão



observado na otimização. Na conceptualização do modelo Monod de uma fase, estabelece-se uma relação entre os parâmetros μ_{max} , k_d e K_S onde, para que a simulação se ajuste ao experimento, k_d assume metade do valor de μ_{max} e K_S extrapola para valores acima da faixa encontrada na literatura.

De forma geral, conclui-se que o modelo proposto foi efetivo em representar um sistema em batelada, embora sejam necessários estudos com diferentes condições experimentais de forma a aumentar a robustez e capacidade preditiva do modelo.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Universidade Tecnológica Federal do Paraná pelo fomento interno à pesquisa.

DISPONIBILIDADE DE CÓDIGO

O código desenvolvido ao longo do projeto não está disponível a terceiros por fazer parte do Trabalho de Conclusão de Curso dos autores, ainda em desenvolvimento.

CONFLITO DE INTERESSE

Não há conflito de interesse.

REFERÊNCIAS

AMPESE, L. et al. Research progress, trends, and updates on anaerobic digestion technology: A bibliometric analysis. **Journal of Cleaner Production**. v. 331, 2022.

BATSTONE, D. J. et al. Anaerobic Digestion Model No.1 (ADM1). London: **IWA Publishing**, 2002.

MENZEL, T.; NEUBAUER, P.; JUNNE, S. Role of Microbial Hydrolysis in Anaerobic Digestion. **Energies**. 2020, 13, 5555.

Organização das Nações Unidas (ONU). Assembleia Geral. **Resolução 70/1**. Transforming our World: the 2030 Agenda for Sustainable Development. 15 de setembro de 2015.

RAMACHADRAN, A.; RUSTUM, R.; ADELOYE, A.J. Review of Anaerobic Digestion Modeling and Optimization Using Nature-Inspired Techniques. **Processes**. 2019; 7(12): 953.

RAO, M.S. et al. Bioenergy conversion studies of the organic fraction of MSW: assessment of ultimate bioenergy production potential of municipal garbage. **Applied Energy**. v.66, p.75-87, 2000.

ROHATGI, A. WebPlotDigitizer (v.3.9) [Computer software]. 2015. Disponível em:<
<https://automeris.io/WebPlotDigitizer/>>.