



## Determinação experimental e simulada da produção de biogás usando o ADM1: Calibração do modelo.

### Experimental and simulated determination of biogas production using ADM1: Model calibration.

DOI: <https://doi.org/10.24979/ambiente.v1i1.951>

Pedro Henrique de Lima Gomes - Universidade Estadual do Ceará <https://orcid.org/0000-0002-7001-469X>

Lucinda Oliveira Amaro - Universidade Estadual do Ceará/UECE <https://orcid.org/0000-0002-4436-1196>

Francisca Nayane Saraiva da Silva - Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira <https://orcid.org/0000-0003-0055-4399>

Francisco Frederico dos Santos Matos - Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará/IFCE <https://orcid.org/0000-0001-9403-9149>

Ana Luiza Bessa de Paula Barros - Universidade Estadual do Ceará/UECE <https://orcid.org/0000-0002-5018-3031>

Mona Lisa Moura de Oliveira - Universidade Estadual do Ceará/UECE <https://orcid.org/0000-0001-9301-4134>

**RESUMO:** Dentre os modelos matemáticos que objetivam entender e otimizar o processo de produção de biogás (PB), destaca-se o modelo de digestão anaeróbica nº 1 (ADM1). Os principais fatores limitantes da implementação do ADM1 referem-se a sua calibração. Diante disto, o presente trabalho teve como objetivo ajustar o ADM1 para a PB usando glicose e dejetos suínos diluídos em água. A PB experimental ocorreu dentro de um tempo de retenção hidráulica (TRH) de 13 dias em regime de batelada, e a análise do biogás produzido foi realizada via cromatografia gasosa. A produção simulada foi obtida a partir do MATLAB® mediante o ajuste de parâmetros bioquímicos, físico-químicos e operacionais. O volume médio acumulado diário de biogás experimental obtido foi de 160 mL·dia<sup>-1</sup>, estando 9,03 mL·dia<sup>-1</sup> abaixo do valor simulado ( $R^2 = 0,98$ ). As concentrações percentuais de CO<sub>2</sub> (60% e 52%) e CH<sub>4</sub> (40% e 48%) previstos em simulação para um TRH de 6 dias estavam de acordo com os mensurados experimentalmente, respectivamente. Nesse contexto, conclui-se que o modelo calibrado pode ser usado como base de previsão para a PB em condições similares à observada por esse estudo.

**Palavras-chave:** Produção de biogás, ADM1, MATLAB®.

**ABSTRACT:** Among the mathematical models that aim to understand and optimize the biogas production process (PB), the anaerobic digestion model 1 (ADM1) stands out. The main limiting factors for the implementation of ADM1 refer to its calibration. Given this, the present study aimed to adjust ADM1 for BP using glucose and diluted pig manure. The production of experimental biogas occurred for hydraulic retention time (HRT) of 13 days in a batch regime, and the analysis of the biogas produced was carried out via gas chromatography. The simulated production was obtained from MATLAB® the adjustment of biochemical, physical-chemical, and operational parameters. The average daily accumulated volume of experimental biogas obtained was 160 mL·day<sup>-1</sup>, with 9.03 mL·day<sup>-1</sup> below the simulated value ( $R^2$  of 0.98). The percent concentrations of CO<sub>2</sub> (60% and 52%) and CH<sub>4</sub> (40% and 48%) predicted in simulation for a 6 days HRT agreed with those measured experimentally, respectively. In this context, it is concluded that the calibrated model can be used as a forecasting basis for the production of biogas in conditions similar to that observed by this study.

**Keywords:** Biogas production, ADM1, MATLAB®.

## INTRODUÇÃO

Diante do acentuado efeito estufa gerado pela poluição global dos recursos naturais, o aproveitamento de fontes alternativas de energia menos poluentes, como o biogás, vem ganhando espaço em meio às fontes de geração de energia (Pabón-pereira et al., 2013). Nesse contexto, alocar recursos energéticos de forma eficiente é essencial para otimização dos processos industriais, viabilizando a necessidade da utilização de modelos computacionais como uma alternativa a esse propósito (Daza, 2017). No âmbito computacional, a PB se destaca como um modelo de digestão anaeróbica nº 1 (ADM1), que engloba a desintegração não biológica, hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese, as quais são etapas da digestão anaeróbica (DA) (Batstone et al., 2002; Queen, 2006).

O uso do ADM1 é amplo, diversificado e é capaz de fornecer previsões do desempenho da DA, indicar falhas e incertezas desse processo (Demitry, 2016). Dentro dessa área de estudo, Girault et al. (2011) observaram que a metanogênese acetoclástica, a acetogênese do propionato e a acidogênese dos açúcares são etapas sensíveis do processo de DA de dejetos suínos. Já Galí et al. (2009), analisando a biodegradabilidade de resíduos agroindustriais, validaram modelos em condições de mono e codigestão anaeróbica em regime de batelada, em condições de monodigestão em regime contínuo para o esterco suíno em meio a determinação das frações de Demanda Química de Oxigênio (DQO) particulado e a constante de desintegração do ADM1. Nesse contexto, o presente trabalho teve como objetivo a calibração do ADM1 mediante a PB, utilizando glicose e dejetos suínos diluídos em água.

## MATERIAIS E MÉTODOS

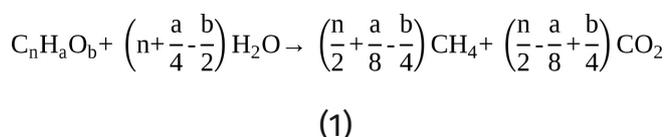
### Parâmetros reacionais e caracterização do substrato, inóculo e biogás

O reator em regime de batelada (1,09 L) utilizado nos experimentos, continha uma fase líquida (30%) e outra gasosa (70%), além de um sistema de controle de pressão (manômetro + válvula). A fase líquida era composta por 130,8 mL de água, 130,64 mL de dejetos suínos diluídos (inóculo) e 102,02 g de glicose em pó (substrato). O tempo de retenção hidráulica (TRH) adotado foi de 13 dias, desconsiderando as etapas de desintegração e hidrólise. A razão água:substrato e inóculo:substrato utilizada foi igual a 2. A PB teve início com um pH de 7,4 e manteve uma  $T_{operacional}$  de 35 °C pelo TRH. O substrato utilizado foi obtido comercialmente. Já o inóculo foi oriundo da suinocultura da Faculdade de Veterinária da Universidade Estadual do Ceará. Para analisar o biogás gerado, um cromatógrafo Micro GC 490 B da Agilent ( $t_{backflush}$  (10 s);  $T_{injetor}$  (100 °C); gás arraste (Hélio);  $t_{injeção}$  (40 ms);  $T_{coluna}$  (40 °C); e  $P_{injeção}$  (25,4 psi)) foi inserido em linha com o reator em uso.

A partir de uma amostra do inóculo foram determinados os teores de sólidos totais, voláteis e fixos, conforme metodologia descrita por Pontes (2018). O valor da DQO do substrato foi definida através da determinação experimental dos coeficientes de conversão de proteínas, carboidratos e lipídios em DQO fornecidas por Aquino, Silva e Chernicharo (2006). Para relacionar os valores da DQO do inóculo:substrato com o ADM1, foi necessário fracionar o valor da DQO teórica proveniente do inóculo e do substrato em componentes biodegradáveis solúveis, particulados e inertes, conforme Girault et al. (2011).

## Determinação teórica e experimental de biogás e ADM1

A PB teórica foi determinada com base na Eq.1, descrita por Buswell e Mueller (1952). Segundo os autores o seu uso pode trazer rendimentos de 95 a 100%.



Onde: a é o nº de mols de C; b é o nº de mols de H<sub>2</sub>; e c é o nº de mols de O<sub>2</sub> presentes na molécula do substrato ou inóculo utilizado na PB.

No que diz respeito à produção experimental de biogás, seguiu-se a metodologia apresentada por Ivanova *et al.* (2008), e a partir dela utilizou-se a Eq. 2.

$$V_{gás} = \frac{\Delta P}{P_{atm}} * V_{hs} \quad (2)$$

Onde: V<sub>gás</sub> é o volume do biogás gerado (L); V<sub>hs</sub> é o volume acima da fase líquida (L); ΔP é a pressão manométrica (psi); e P<sub>atm</sub> é a pressão atmosférica (psi).

O volume de biogás gerado leva em consideração o vapor de água, sendo assim, um fator de correção deve ser aplicado para normalizar o biogás a condições padrão (0 °C e 1 atm) (Richards *et al.* 1991). Nesse trabalho o fator de 0,8371 foi utilizado.

O *software* escolhido para a implementação das equações diferenciais ordinárias presentes no ADM1 foi o MATLAB® que, juntamente com o *software* Excel da Microsoft®, foi utilizado seguindo a metodologia descrita por Nguyen (2014). Os valores numéricos referentes aos parâmetros do ADM1 foram baseados nas sugestões de Batstone *et al.* (2002), e ajustados com base nos trabalhos de Girault *et al.* (2011), Nguyen (2014) e Galí *et al.* (2009).

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Segundo Batstone *et al.* (2002), o ADM1 tem como base de cálculo a DQO teórica do afluyente utilizado na PB, sendo assim, a DQO referente aos dejetos suínos foi definida em 64% para os componentes inertes, 24% para solúveis, e 12% para particulados (Girault *et al.* 2011). De forma a aproximar a simulação dos dados experimentais, as concentrações iniciais de todas as variáveis do ADM1 receberam um valor zero, exceto as concentrações relacionadas aos monossacarídeos e aos cátions e ânions, que receberam um valor de DQO de 103 gO<sub>2</sub>L<sup>-1</sup>, 0,04 kmol cat m<sup>-3</sup> e 0,02 kmol an m<sup>-3</sup>, respectivamente.

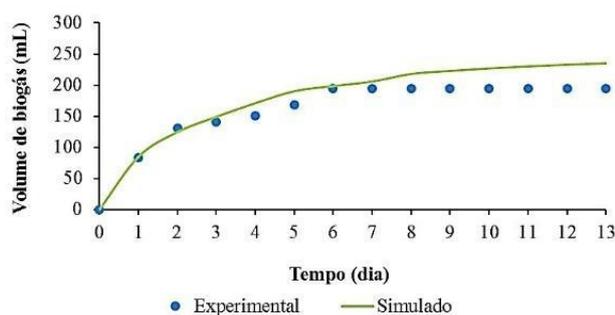
Dentre os parâmetros ajustados, estão as taxas de formação referentes aos ácidos graxos de cadeia longa (AGCL) provindos de monossacarídeos e aminoácidos (0,10–0,44); H<sub>2</sub> derivado de açúcares (0,09) (Batstone *et al.* 2002); e material particulado solúvel e inerte (0,10–0,36) (Galí *et al.* 2009). Tratando-se das concentrações de carbono inorgânico e de bactérias, estes foram ajustados a partir da redução do valor padrão ao longo das simulações. Já o conteúdo de carbono e nitrogênio total existente no substrato foram ajustados em 0,0041 e 0,0049 kmolN.kgDQO<sup>-1</sup>, respectivamente, para que a PB simulada se ajustasse à experimental. A concentração de íons H<sup>+</sup> foi ajustada para representar o pH inicial de 7,4. Já a formação de material complexo e dos seus produtos (0,2 d<sup>-1</sup>) foi ajustada para os grupos de bactérias consumidoras de açúcares, aminoácidos, ácidos graxos totais, acetato e H<sub>2</sub> (Batstone *et al.* 2002).

Referindo-se às taxas de crescimento máximo para a biomassa consumidora de propionato (4 d<sup>-1</sup>), monossacarídeos (1,1 d<sup>-1</sup>) e acetato (3 d<sup>-1</sup>), e as constantes de Monod para a biomassa consumidora, monossacarídeos (1,80 kg.DQO.m<sup>-3</sup>) e propionato (0,60 kg.DQO.m<sup>-3</sup>), sendo estas baseadas nos trabalhos de Girault *et al.* (2011). As constantes

de Monod foram ajustadas para que a taxa de crescimento específico da biomassa consumidora de  $H_2$  (ajustada em  $45 d^{-1}$  conforme Batstone *et al.* (2002)) e acetato fosse retardada durante a acetogênese. Vale ressaltar que todos esses ajustes objetivaram a adequação da curva de produção de biogás simulada à experimental.

A produção teórica de biogás a partir da utilização da glicose forneceu uma estimativa de PB de  $746 mL.g^{-1}$  de sólidos voláteis considerando um rendimento de 100%. Frente a esse cenário ótimo previsto foram geradas as curvas de PB simulada e experimental acumulada apresentada pela Fig. 1.

**Figura 1:** PB simulada e experimental acumulada.



O volume médio acumulado diário de biogás experimental e simulado observado foi de  $160 mL.dia^{-1}$  e  $178 mL.dia^{-1}$ , respectivamente. A adequação do modelo de simulação é visível pela proximidade dos pontos experimentais à curva gerada, e também pode ser observada pelo valor do coeficiente de determinação ( $R^2 = 0,98$ ) determinado por análise de regressão linear. Os resultados experimentais provenientes da cromatografia indicaram um percentual de  $CH_4$  em torno de 48% e de 52% para o  $CO_2$  para um TRH de seis dias em contraste aos 40% e 60% previstos nas simulações, respectivamente.

## CONCLUSÕES

O fracionamento adotado mostrou ser uma metodologia adequada à distribuição dos componentes da DQO teórica, pois juntamente com os parâmetros do ADM1 ajustados foi

observada uma adequação da curva de produção de biogás simulada à curva experimental, dada a análise de regressão linear realizada. Em relação aos ajustes do ADM1, foi possível observar que o acúmulo de bactérias decaídas influencia a formação indesejada de material complexo, inerte e solúvel. Além disso, observou-se que agentes inibitórios, a exemplo do pH, mantêm influência direta com o desempenho dos processos presentes na DA e na produção de biogás, por isso precisam ser monitorados e controlados ao longo do TRH estudado.

## REFERÊNCIAS

- AQUINO, S. F.; SILVA, S. Q.; CHERNICHARO, C. A. L. Considerações práticas sobre o teste de demanda química de oxigênio (DQO) aplicado a análise de efluentes anaeróbios. *Revista de Engenharia Sanitária e Ambiental*, Rio de Janeiro, v. 11, n. 4, p. 295–304, abr. 2006. Disponível em: <<https://www.scielo.br/pdf/esa/v10n2/a09v10n2>>. Acesso em: 08 jul. 2019.
- BATSTONE, *et al.* The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). *Water Science & Technology*, Australia, p.1–11, 2002. Disponível em: <[https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/4296694/mod\\_resource/content/1/ADM1-WST.pdf](https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/4296694/mod_resource/content/1/ADM1-WST.pdf)>. Acesso em: 08 jun. 2019.
- BUSWELL, A. M., MUELLER, H. F. Mechanism of methane formation. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 40, n. 3, p 550–552, 1952. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ie50507a033>. Acesso em: 09 jul. 2019.
- DAZA, Silva Marina Araujo. Nusselt number correlation for a jacketed stirred tank using computational fluid dynamics. 2017. 107 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2017. Disponível em: <<http://repositorio.unicamp.br/jspui/handle/REPOSIP/330527>>. Acesso em: 12 set. 2019.
- DEMITRY, Morris Elya. Estabilidade do processo de digestão anaeróbica e a extensão do ADM1 para a codigestão de lodo municipal com

resíduos de padaria. Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) — Utah State University, Logan, 144 f, 2016. Disponível em: <<https://digitalcommons.usu.edu/etd/4945>>. Acesso em: 13 ago. 2019.

GALÍ, A. *et al.* Modified version of ADM1 model for agro-waste application. *Bioresource Technology*, v. 100, n. 11, p.2783–2790, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.12.052>>. Acesso em: 05 mar. 2019.

GIRAULT, R. *et al.* Combination of batch experiments with continuous reactor data for ADM1 calibration: application to anaerobic digestion of pig slurry. *Water Science & Technology*, p.2575–2582, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.2166/wst.2011.594>>. Acesso em: 04 jan. 2019.

IVANOVA, Lyudmila. K.; RICHARDS, David. J.; SMALLMAN, David. J. The long-term settlement of landfill waste. *Waste and Resource Management*, v. 161, p. 121-133, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1680/warm.2008.161.3.121>> Acesso em: 13 out. 2019.

NGUYEN, Hoa Huu. Modelling of food waste digestion using ADM1 integrated with Aspen Plus. These (Doctorate of Philosophy) — University of Southampton, 305 f., 2014. Disponível em: <[https://eprints.soton.ac.uk/375082/2/HHN\\_Thesis\\_FINAL\\_Feb\\_2017\\_rechecked.pdf](https://eprints.soton.ac.uk/375082/2/HHN_Thesis_FINAL_Feb_2017_rechecked.pdf)>. Acesso em: 27 out. 2019.

PABÓN-PEREIRA, C. P.; SLINGERLAND, M.; VAN LIER, J. B.; RABBINGE, R. Anaerobic digestion as a key technology for biomass valorization: contribution to the energy balance of biofuel chains. In: WELLINGER, A.; MURPHY, J.; BAXTER, D. *The biogas handbook science, production and applications*. Philadelphia: Woodhead Publishing, 2013. cap. 7, p.166–186.

PONTES, Anderson Honório de Brito. Automatização de um biorreator para avaliação da codigestão de biomassas. 2018. 128 f. Dissertação (Mestrado em Ciências Físicas Aplicadas) — Centro de Ciências e

Tecnologia, Universidade Estadual do Ceará, Fortaleza, 2018.

QUEEN, André Sampaio. Simulador de Reatores Anaeróbios com base no ADM1. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Sistemas) — Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 100 f, 2006. Disponível em: <<https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3139/tde-04092006-170243/publico/AndreQueen.pdf>>. Acesso em: 12 set. 2019.

RICHARDS, B. K., CUMMINGS, R. J., WHITE, T. E., JEWEL, W. J. Methods for kinetic analysis of methane fermentation in high solids biomass digesters. *Biomass and Bioenergy*, v. 1, n. 2, p. 65–73, 1991. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0961-9534\(91\)90028-B](https://doi.org/10.1016/0961-9534(91)90028-B)>. Acesso em: 12 a. 2019.