

APLICAÇÃO DE UM MODELO DE SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DIGESTÃO ANAERÓBIA EM SOFTWARE DE LICENÇA GRATUITA DWSIM

Leandro Favaretto (PIC/UEM), Daniel Tait Vareschini (Co-orientador),
Caliane Bastos Borba Costa (Orientadora), e-mail: cbbcosta@uem.br

Universidade Estadual de Maringá/Centro de Tecnologia/Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Engenharia Química/Processos Industriais de Engenharia Química

Palavras-chave: Modelagem, digestão anaeróbia, *software* livre.

Resumo:

Diante da relevância do biogás como fonte de energia renovável, a modelagem e a simulação de processos de digestão anaeróbia se mostram fundamentais para aplicação em projeto, otimização e previsão de resultados de plantas industriais de produção de biogás. Nesse contexto, a aplicação de modelos de digestão anaeróbia em simuladores de processos de licença gratuita é conveniente, pois permite a expansão desse ramo de pesquisa para universidades e pesquisadores que não têm acesso a simuladores comerciais. Diante disso, o objetivo deste trabalho foi aplicar um modelo de digestão anaeróbia no simulador de processos de licença gratuita DWSIM, comparar seu desempenho frente aos alternativos comerciais, validar o modelo com estudos de caso reportados na literatura e avaliar possíveis alterações na configuração do processo. Os resultados obtidos com o modelo desenvolvido levaram a desvios de até cerca de 60% em relação a resultados experimentais, mas foram similares àqueles obtidos com simulador comercial.

Introdução

Um grande desafio da modernidade é o constante aumento de demanda por energia e como supri-la. As fontes tradicionais de energia estão se tornando cada vez mais escassas, e há uma tendência mundial de busca de fontes de energia sustentáveis e viáveis economicamente que sejam capazes de substituir, ou pelo menos diminuir, a utilização de combustíveis fósseis. Nesse sentido, o biogás se mostra um combustível de grande potencial, pela sua capacidade de ser produzido a partir de processo biológico de degradação de matéria orgânica, a digestão anaeróbia. O biogás é composto principalmente de metano e gás carbônico e pode ser utilizado na geração de energia térmica ou elétrica.

A modelagem matemática desse processo é útil para projeto, simulação de operação e otimização de plantas industriais. Diversos estudos de simulação de modelos de digestão anaeróbia diferentes já foram realizados, com validação das simulações frente a resultados experimentais. Contudo, a maioria desses estudos utilizaram simuladores de processos comerciais, os quais têm custos de licença anuais elevados. Portanto, este trabalho objetivou implementar um dos modelos dispostos na literatura (RAJEDRAN *et al.*, 2014), utilizando *software* de licença gratuita e *open-source* (DWSIM), de modo a democratizar e incentivar as pesquisas de modelagem de digestão anaeróbia para o âmbito gratuito, comparar os resultados das simulações feitas no DWSIM com experimentos reportados na literatura e com os resultados de modelos em *softwares* comerciais e por fim, analisar alterações na configuração do processo.

Materiais e Métodos

A implementação do modelo seguiu a mesma metodologia descrita por Rajendran *et al.* (2014), no entanto, se fez necessária a implementação, por meio da ferramenta de criação de componentes do *software*, de diversos compostos que não estavam presentes na base de dados do DWSIM. As propriedades físicas desses compostos (pressão e volume críticos, dentre outras), necessárias para a aplicação de modelos termodinâmicos, foram obtidas de bases de dados de componentes disponíveis *online* ou estimadas a partir de métodos de grupos funcionais.

O modelo implementado consistiu em uma simulação no DWSIM com 57 componentes e 45 reações químicas. A partir da simulação, objetivou-se prever a produção de biogás produzido a partir de qualquer substrato na faixa de temperatura de 35 a 55 °C (exceto se houvesse inibição pelo pH) e a composição de todas as correntes envolvidas no processo (porcentagem de metano). O modelo deveria expressar também a sensibilidade dos resultados a alterações no tempo de residência e no volume do reator, e prever inibições causadas por ácidos graxos voláteis, amônia, gás hidrogênio, ou pelo substrato.

Para validação do modelo, utilizaram-se cinco casos de estudo, com substratos, temperatura, tempo de residência e condições diferentes. Nos Casos 4 e 5, analisou-se a validade do modelo em experimentos de digestão anaeróbia com configurações alternativas de processo (utilização de dois biodigestores em série ou a codigestão, que é alimentação de dois substratos diferentes em variadas proporções de mistura), enquanto nos demais casos validou-se o modelo em configurações convencionais de processo.

Resultados e Discussão

Os resultados dos casos de estudo estão dispostos na Tabela 1, em que a coluna **Desvio (%)** indica a variação percentual entre o volume de biogás previsto pelo modelo e aquele obtido experimentalmente. Pode-se perceber

que o modelo, em geral, não foi capaz de prever a produção para os substratos e condições dos experimentos analisados, reportando erros de até 63%. É possível que essa diferença entre os valores possa ser causada pelas diferenças de operação dos reatores, quantidade e tipo de inóculo, dentre outros fatores. Além disso, para cada experimento realizado, uma análise físico-química do substrato deveria estar reportada. Contudo, essa não é a realidade que se encontra nos trabalhos científicos que reportam resultados de trabalhos experimentais e estava além do escopo deste trabalho realizar experimentos de digestão anaeróbia e a caracterização físico-química dos substratos. É razoável admitir, portanto, que alguns erros podem ser atribuídos a essa ausência de informações acerca da composição dos substratos utilizados nos devidos experimentos, e que a simulação poderia produzir resultados mais precisos com caracterizações de cada substrato. Por fim, constatou-se que o modelo é insensível a variações no tempo de residência no reator: a adição ou remoção de um ou dois dias não afetou o resultado reportado pela simulação. Uma comparação entre os resultados simulados do Caso 1, analisado em ambos os simuladores (*Aspen Plus* e *DWSIM*), revela uma diferença de 0,6%. Essa diferença pode ser explicada pela diferença de propriedades físicas dos compostos nas bases de dados dos dois *softwares* e também por diferenças de métodos numéricos utilizados.

Tabela 1– Comparação entre os experimentos e o resultado obtido pela simulação.

Caso	Substrato	T (°C)	Desvio (%)	$y_{CH_4,exp}$ (%)	$y_{CH_4,sim}$ (%)
1	DB + Água	54,0	4,2	-	-
2	Vinhaça	35	63,0	55,0	43,0
3	DS	35	-38,6	39,6	38,1
4 (Seriada)	DBDT + DB	54,7 (R ₁) 52,3 (R ₂)	8,4	67	26,5
5a (Codigestão)	DB	35	59,79	56,15	29,71
5b (Codigestão)	4 DB: 1 DS	35	59,99	56,24	32,17
5c (Codigestão)	3 DB: 2 DS	35	59,49	56,58	34,13
5d (Codigestão)	1 DB: 4 DS	35	46,33	56,82	34,13
5e (Codigestão)	DS	35	41,12	57,10	38,09

Fonte: Elaborado pelos autores. O termo y_{CH_4} se refere à pureza de metano no biogás e os subíndices “exp” e “sim” se referem aos resultados experimentais e simulados, respectivamente. R₁ e R₂ identificam os reatores colocados em série. DB – Dejeito de Bovino. DBDT – Dejeito de Bovino Digerido Termofilicamente. DS – Dejeito de Suíno. 4 DB: 1 DS indica 4 partes de DB para 1 parte de DS. Detalhes de cada caso estão reportados em Kaparaju *et al.* (2009) (Casos 1 e 4), Pinto (1999) (Caso 2), Orrico Junior *et al.* (2011) (Caso 3), e Li *et al.* (2014) (Caso 5).

Conclusões

Pode-se concluir que os objetivos foram cumpridos: um modelo de digestão anaeróbia foi selecionado da literatura, implementado no DWSIM, foram feitas comparações dos resultados de simulação desse modelo implementado com aqueles reportados na literatura (tanto resultados experimentais quanto resultado de simulações feitas pelo *Aspen Plus*, fornecidas por Rajendran *et al.* (2014)), foram avaliadas a utilização de reatores em série em condições operacionais diferentes e a codigestão. Além disso, baixa diferença entre os resultados reportados por ambos os simuladores leva à conclusão de que a reprodução do modelo do *Aspen Plus* no DWSIM foi feita com sucesso.

Quanto à adequação do modelo desenvolvido aos casos experimentais, pode-se concluir que não houve uma boa compatibilidade, pois observou-se que, em diversas condições diferentes, houve grandes erros relativos entre o resultado reportado no experimento e o calculado na simulação. Todavia, pode-se aventar que frações destes erros estejam atrelados à ausência de informações acerca da composição dos substratos utilizados nos devidos experimentos, e que a simulação poderia produzir resultados mais precisos se estivessem disponíveis na literatura caracterizações físico-químicas de cada substrato utilizado.

Agradecimentos

Os autores agradecem a UEM pela oportunidade de desenvolver o projeto no qual este trabalho está inserido, e também agradecem ao Daniel Wagner, criador do DWSIM, pelo *software* desenvolvido, que trouxe uma oportunidade de desenvolver estudos de modelagem e simulação em *software* de licença gratuita, e também pelo auxílio durante o desenvolvimento do projeto.

Referências

KAPARAJU, P.; ELLEGAARD, L.; ANGELIDAKI, I. Optimisation of biogas production from manure through serial digestion: Lab-scale and pilot-scale studies. **Bioresource Technology**, v. 100, p. 701-709, 2009.

LI, J.; JHA, A. K.; BAJRACHARYA, T. R. Dry Anaerobic Co-digestion of Cow Dung with Pig Manure for Methane Production. **Applied Biochemistry and Biotechnology**, v. 173, p. 1537-1552, 2014.

ORRICO JUNIOR, M. A. P. **Biodigestão Anaeróbia dos Dejetos de Suínos e Bovinos e Utilização do Biofertilizante no Capim-Piatã**. Dissertação (Doutorado em Zootecnia) – Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, Universidade Estadual Paulista. Jaboticabal, 2011.

PINTO, C. P. **Tecnologia da Digestão Anaeróbia da Vinhaça e Desenvolvimento Sustentável**. Dissertação (Mestrado em Planejamento de Sistemas Energéticos) – Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 1999.

RAJENDRAN, K.; KANKANALA, H.; LUNDIN, M.; TAHERZADEH, M. J. A novel process simulation model (PSM) for anaerobic digestion using Aspen Plus. **Bioresource Technology**, v. 168, p. 7-13, 2014.