Simulação e Análise de Produção e Condicionamento de Biogás

Israel Bernardo de Souza Poblete

Dissertação de Mestrado

Orientadores

Profª. Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo
Prof. José Luiz de Medeiros

Abril de 2019

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE PRODUÇÃO E CONDICIONAMENTO DE BIOGÁS

Israel Bernardo de Souza Poblete

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Orientadores

Profª. Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo

Prof. José Luiz de Medeiros

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Abril de 2019

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE PRODUÇÃO E CONDICIONAMENTO DE BIOGÁS

Israel Bernardo de Souza Poblete

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Aprovado por:

_____
Assed Naked Haddad, D.Sc.

_____
Magali Christe Cammarota, D. Sc.

_____
Ofélia De Queiroz Fernandes Araújo, Ph. D.

Orientador por:

_____
José Luiz de Medeiros, D.Sc.

_____
Ofélia De Queiroz Fernandes Araújo, Ph. D.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Abril de 2019

CIP - Catalogação na Publicação

POBLETE, ISRAEL BERNARDO DE SOUZA
P739s Simulação e análise de produção e condicionamento de biogás / ISRAEL BERNARDO DE SOUZA POBLETE. -- Rio de Janeiro, 2019.
119 f.

Orientadora: Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo.
Coorientador: José Luiz de Medeiros .
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Programa de Pós Graduação em Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos, 2019.

1. biogás. 2. simulação. 3. biodigestor. 4. eletricidade. 5. produção e condicionamento. I. de Queiroz Fernandes Araújo, Ofélia, orient. II. de Medeiros , José Luiz, coorient. III. Título.

Elaborado pelo Sistema de Geração Automática da UFRJ com os dados fornecidos pelo(a) autor(a), sob a responsabilidade de Miguel Romeu Amorim Neto - CRB-7/6283.

“E assim Davi venceu o filisteu com uma atiradeira e uma pedra”

1 Samuel 17:50

AGRADECIMENTOS

À Deus, por sustentar-me até aqui e manter o sopro da vida que há em mim. À Úrsula, minha esposa, que sofreu e me apoiou nos momentos mais difíceis, não teria conseguido chegar até aqui sem você. Aos meus pais, Bernardo e Valéria, e irmã, Larissa, que com indescritível afeto, carinho e amor me proporcionaram o maior bem dessa vida, família. Aos familiares e amigos, Jonatas, Anderson, Rafael, André, Ícaro, Igor, George e tantos outros, que ajudaram a deixar essa jornada mais leve. Aos meus orientadores, Prof. Ofélia e Prof. José Luiz, pela compreensão e doação de conhecimento. Professores, vocês são hoje o exemplo que almejo ser amanhã.

Israel Poblete

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Ciências, com ênfase na área de Engenharia de Processos

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE PRODUÇÃO E CONDICIONAMENTO DE BIOGÁS

Israel Bernardo de Souza Poblete

Abril de 2019

Orientadores: Prof. José Luiz de Medeiros, D.Sc.
Profª. Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, Ph.D

Biogás é um biocombustível gasoso composto majoritariamente por metano e dióxido de carbono. Características como ser renovável, dispor de ampla oferta de matéria-prima e baixo investimento para sua produção, alavancam o biogás como uma alternativa a dependência do petróleo e mitigação de emissão de gases de efeito estufa. Esse trabalho avalia o processo de produção de biogás a partir de efluente líquido, com base em modelos disponíveis na literatura aplicados a planta piloto. Na primeira etapa do trabalho, rotinas codificadas na plataforma computacional MATLAB (The Mathworks Inc) são empregadas para validar o modelo e determinar sua sensibilidade a parâmetros cinéticos e operacionais. Em uma segunda etapa, o modelo é implementadao como uma extensão na plataforma Aspen Custom Modeler (Aspentech Inc), ainda nesta etapa propõe-se um fluxograma de processos conceitual, simulado em ambiente AspenPlus (Aspentech Inc), para avaliar a conversão de resíduos líquido a eletricidade. Na terceira etapa, o desempenho da planta é avaliado com 3 indicadores chave (Vazão de Metano, Potência Líquida Gerada e Redução da Carga Orgânica) frente a variações no tempo de retenção hidráulica (HRT) e taxa de carga orgânica (OLR). A quarta e última etapa, é a avaliação econômica do projeto, com estimativa do investimento de capital e custo operacional do projeto. Foi identificada a melhor faixa de operação de HRT e OLR para o sistema simulado, respectivamente, 7 a 9 dias e 3 a 4 gSV/L.dia, que proporciona um saldo positivo de 2MW na geração energia elétrica, 50% de redução da carga orgânica do resíduo orgânico líquido e uma vazão média de metano de 340kg/h. O fator de emissão de CO_2 é de 0,59t CO_2/MWh, índice 85% inferior a geração a carvão. Os custos de investimento de capital estimado para a planta, em valores atualizados para 2018, é de US$13,0 milhões e o custo de manufatura de US$4,8 milhões/ano.

Abstract of a Thesis presented to Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos - EQ/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science with emphasis on Process Engineering.

SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE PRODUÇÃO E CONDICIONAMENTO DE BIOGÁS

Israel Bernardo de Souza Poblete

April 2019

Supervisors: Prof. José Luiz de Medeiros
Prof. Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo

Biogas is a gaseous biofuel composed mostly of methane and carbon dioxide. Characteristics such as being renewable, having a wide supply of raw material and low investment for its production, make biogas an alternative to reduce dependence on oil and mitigate greenhouse gas emission. This work evaluates the production process of electricity from wastewater, based on in the model available in the literature initially applied to the pilot plant. In the first step of the work, routines implemented in the computation plataform MATLAB (The Mathworks Inc) are used to validate the model and assess its sensitivity to kinetic and operational parameters. In a second step, the model is implemented as an extension to Aspen Plus using the software Aspen Custom Modeler (Aspentech Inc). At this stage, a conceptual project is proposed and simuladed in AspenPlus environment (Aspentech Inc) to evaluate the conversion of liquid waste to electricity. In the third stage, the performance of the plant is evaluated with three key indicators (Methane Flow, Net Power Generation and Reduction of Organic Load) against different hydraulic retention time (HRT) and organic load rate (OLR). The fourth step is the economic evaluation of the project, estimation of fixed capital investment (FCI) and cost of manufacturing (COM). The best operating range of HRT and OLR for the simulated system was identified, respectively, 7 to 9 days and 3 to 4 $gSV.L^{-}1.dia^{-1}$, which provide in the best assessment a positive balance of 2MW in electricity generation, 50% organic load of liquid organic waste and an average methane outflow of 340kg/ h. The CO_2 emission factor is $0.59tCO_2/MWh$, which is 85% lower than power generation from coal. The estimated fixed capital investiment for the plant, in 2018, is US$ 13.0 million and cost of manufacturing of US$ 4.8 million/year.

ÍNDICE

1- INTRODUÇÃO 1
1.1. CONTEXTUALIZAÇÃO 1
1.2. MOTIVAÇÃO 4
1.3. OBJETIVO 5
2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 7
2.1 ASPECTOS GERAIS 7
2.2 APLICAÇÕES DE BIOGÁS 10
2.3 BIOMETANO 13
2.4 CENÁRIO BRASILEIRO 15
2.5 DIGESTÃO ANAERÓBIA 16
2.5.1 Hidrólise 17
2.5.2 Acidogênese 18
2.5.3 Acetogênese 18
2.5.4 Metanogênese 19
2.6 PARÂMETROS OPERACIONAIS 19
2.6.1 Temperatura 19
2.6.2 pH e VFA 20
2.6.3 Tempo de Retenção (HRT e SRT) 21
2.6.4 Taxa de Carga Orgânica (OLR) 23
2.7 MODELOS FENOMENOLÓGICOS PARA DIGESTÃO ANAERÓBIA 24
2.7.1 Modelo de Andrews e Graef (1971) 24
2.7.2 Modelo de Hill e Barth (1977) 26
2.7.3 Modelo de Hill modificado por Husain (1998) 28
2.7.4 Modelo ADM1 (2002) 30
2.8 MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS 33
2.9 ANÁLISE ECONÔMICA DE PROCESSOS 34

2.10 PESQUISA DESENVOLVIDA PARA O CENÁRIO APRESENTADO 36
3- METODOLOGIA 37
3.1 ETAPA 1 – Desenvolvimento de Modelo em Ambiente MATLAB 38
3.1.1 Análise Dinâmica do Modelo de Hill Modificado 38
3.1.2 Análise de Sensibilidade e Plano de Fases 41
3.2 ETAPA 2 – Simulação de Processo 42
3.3 ETAPA 3 – Avaliação de Desempenho Técnico 51
3.4 ETAPA 4 – Avaliação Econômica 52
4- RESULTADOS E DISCUSSÃO 57
4.1 RESULTADOS DA ETAPA 1 - Modelo em MATLAB 57
4.1.1 Validação do Modelo 57
4.1.2 Análise de Sensibilidade 64
4.2 RESULTADOS DA ETAPA 2 – Simulação de Processos 70
4.3 RESULTADOS DA ETAPA 3 – Avaliação de Desempenho Técnico 72
4.4 RESULTADOS DA ETAPA 4 – Avaliação Econômica 73
5- CONCLUSÃO E SUGESTÕES 84
REFERÊNCIAS 86
APÊNDICES 93
A. Tabelas do modelo ADM1 – *Anaerobic Digestion Model No 1* (2002) 93
B. Rotinas no MATLAB 96
C. Rotina no ASPEN CUSTOM MODELER 100

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 - Equivalência do biogás. Adaptado de Anastácio (2010) 2
Figura 1.2 - Taxas de crescimento mundiais anuais para renováveis - 1990-2015 (%). Fonte: International Energy Agency (IEA) (2017) 3
Figura 2.1 Ciclo termodinâmico - Ciclo de Brayton. Adaptado de Poulikkas (2005)..... 11
Figura 2.2 - Esquema básico de turbina a gás ciclo-simples. Adaptado de Poullikkas (2005) 11
Figura 2.3 Esquema básico de turbina a gás com ciclo combinado com turbina a vapor. Adaptado de Poullikkas (2005)..... 12
Figura 2.4 - Curvas de penetração para bioenergia. Fonte: EPE (2016)..... 16
Figura 2.5 - Diagrama de blocos do processo de digestão anaeróbia. Os números nas setas referem-se as etapas: 1 - hidrólise; 2 - acidogênese; 3 - acetogênese e 4 – metanogênese. 17
Figura 2.6 - (a) Taxas de produção de biogás e metano para operação em 50, 30 e 20°C, adaptado de Aschmann et al. (2007). (b) Taxas de crescimento de arqueas metanogênicas psicrófilo, mesófilo e termófilo, adaptado de ANGELIDAKI e SANDERS (2004)..... 20
Figura 2.7 - STR crítico para sistema com resíduos agropecuário em termos de redução de sólidos voláteis (VS) sob condições mesofílicas. Adaptado de NGES e LIU, 2010. 23
Figura 2.8 - Diagrama de blocos do modelo de Andrew. Bactérias produtoras de ácido (1); arqueas produtoras de metano (2). Adaptado de Andrew et al., 1971. 25
Figura 2.9 - Diagrama de blocos do modelo de Hill e Barth (1977). Adaptado de Hill e Barth (1977)..... 27
Figura 2.10 - Diagrama de blocos do modelo simplificado de Hill (1983) e modificado por Husain (1998)..... 29
Figura 2.11 - Diagrama de blocos do modelo ADM1. Adaptado de Batstone e colaboradores, (2002). 31
Figura 3.1 - Diagrama de blocos da metodologia utilizada. 37
Figura 3.2 - Estrutura da simulação da produção de bioenergia. 43
Figura 3.3 - O "método da propriedade", baseado em 3 categorias: a natureza do meio (polar vs. apolar; presença de eletrólitos vs. não eletrólito; ideal vs. real), condição operacional (alta pressão vs. baixa pressão) e conhecimento dos parâmetros de interação com ou sem equilibro líquido-líquido. Adaptado de (AL-MALAH, 2016) e AspenTech Inc., (2015). 44
Figura 3.4 - Fluxograma da simulação do processo da produção de eletricidade a partir de biogás. 45

Figura 3.5 – Setor de digestão anaeróbia (Área 1)..... 47
Figura 3.6 – Setor de compressão do biogás (Área 2) 48
Figura 3.7 – Setor de geração de energia elétrica (Área 3)..... 49
Figura 4.1 - Perfil de sólidos voláteis biodegradáveis (S_{BVS}) (t =0 até t=100 dias). Em preto a concentração de S_{BVS} na entrada do biodigestor ($S_{BVS\ in}$) e em vermelho S_{BVS} no biodigestor reportado por Haugen e colaboradores (2013); em azul o perfil simulado neste trabalho para SBVS..... 58
Figura 4.2 - Biodigestão a partir de 60 dias (t=60 dias). Em preto a concentração de S_{BVS} na entrada do biodigestor ($S_{BVS\ in}$) e em vermelho S_{BVS} no biodigestor reportado por Haugen e colaboradores (2013); em azul o perfil simulado neste trabalho para SBVS. 58
Figura 4.3 - Perfil completo da concentração de ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}) na digestão (t =0 até t=100 dias). Em preto a concentração S_{VFA} na entrada do biodigestor ($S_{VFA,in}$), em vermelho S_{VFA} no biodigestor reportado por Haugen e colaboradores (2013) e em azul o perfil simulado neste trabalho para SVFA. 59
Figura 4.4 – Concentração de S_{VFA} a partir de 60 dias (t=60 dias). Em preto a concentração de S_{BVS} na entrada do biodigestor ($S_{BVS\ in}$) e em vermelho S_{BVS} no biodigestor reportado por Haugen e colaboradores (2013); em azul o perfil simulado neste trabalho para SVFA..... 59
Figura 4.5 - Validação do modelo quanto a produção de metano. Em vermelho resultados experimentais da vazão de metano produzida pela biodigestão reportados por Haugen e colaboradores (2013), em azul resultado da simulação neste trabalho para metano. 60
Figura 4.6 – Ampliação no estado estacionário. Resultados experimentais por Haugen et al. (2013), resultado simulado neste trabalho. 60
Figura 4.7 - Impacto do teor de biodegradáveis no efluente (B_0) na produção de gás metano. 61
Figura 4.8 - Validação do modelo. Impacto da temperatura ambiente na produção de gás metano pela DA. 62
Figura 4.9 - Temperatura ambiente como curva oscilatória. Amplitude térmica de 10°C. (a) Concentração de substratos. (b) Concentração de biomassa. (c) Vazão de gás metano. (d) Temperatura interna do biodigestor. 63
Figura 4.10 - Respostas das variáveis de estado em desvio(%)..... 64
Figura 4.11 - Sensibilidade da variável S_{BVS} a parâmetros do modelo. 65
Figura 4.12 - Sensibilidade da variável S_{VFA} a parâmetros do modelo. 66
Figura 4.13- Sensibilidade da variável Xmet a parâmetros do modelo. 67
Figura 4.14 - Sensibilidade da variável Vazão de CH_4 a parâmetros do modelo. 68
Figura 4.15 - Plano de fases. Vazão de metano vs. Temperatura, um estado estacionário 69

Figura 4.16 - Plano de fases. Sólidos orgânicos voláteis vs. Ácidos orgânicos voláteis, um estado estacionário 69
Figura 4.17 - Resultados da Etapa 2: a) Balanço de Eletricidade (MWh) e Produção de Vapor (t/h); b) Redução de carga orgânica (%) e Emissão de CO_2 (kg/MWh). 72
Figura 4.18 - Respostas do sistema a modificações de HRT 73
Figura 4.19 - Respostas do sistema a modificações de OLR 73
Figura 4.20 – Percentual de cada área no investimento de capital da planta 75
Figura 4.21 - Índice de custo para geração de energia. Referências na figura. 80
Figura 4.22 - Fluxo de caixa por cenários para projeto com turbinas a gás. 82
Figura 4.23 - Fluxo de caixa por cenários para projeto com motores do tipo ciclo-otto. ... 83

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1.1 – Capacidade de produção de biometano no Brasil. (OLIVER JENDE et al., 2016) 5
Tabela 2.1 - Características do biogás. (BRAUN, 2007)..... 8
Tabela 2.2 - Processos de tratamento para obtenção de biometano. Adaptado de Ryckebosch et al., (2011), Dada e Mbohwa (2017) e Angelidaki et al., (2018) 14
Tabela 2.3 – Concentração (base seca) dos substratos em agrupamentos principais. Adaptado de YU, WENSEL e MA (2013)..... 17
Tabela 2.4 – Funções de inibição do modelo ADM 1. Adaptado de Batstone et al. (2002)33
Tabela 2.5 - Fatores de Lang para plantas petroquímicas, Turton (2012). 35
Tabela 3.1 - Modelo de Hill modificado..... 39
Tabela 3.2 - Parâmetros e Condições Operacionais..... 40
Tabela 3.3 - Parâmetros avaliados na análise de sensibilidade..... 41
Tabela 3.4 – Tabela de Premissas para Turbina a Gás 45
Tabela 3.5 – Premissas para simulação do processo de geração de bioenergia..... 50
Tabela 3.6 - Lista de equipamentos 50
Tabela 3.7 - Avaliação das variáveis operacionais no processo 51
Tabela 3.8 - Premissas para estimativa de Investimento de Capital 54
Tabela 3.9 – Premissas para estimativa de COM 54
Tabela 3.10 - Planejamento fatorial para a faixa de acurácia do FCI e COM 56
Tabela 4.1 – Índices de fator de emissão de CO_2 (IPCC, 2007) 71
Tabela 4.2 – Atualização do custo e redimensionamento dos biodigestores 74
Tabela 4.3 – Estimativa de custo para turbinas à gás 74
Tabela 4.4 - Estimativa de custos dos equipamento complementares via Aspen PEA. 75
Tabela 4.5 – Resultados dos Custos fixos totais para a unidade de geração de bioenergia 76
Tabela 4.6 - Resultados dos custos operacionais 77
Tabela 4.7 - Pontos mínimos, máximos e centrais em relação ao FCI em MM US$. 78
Tabela 4.8 - Resultado de FCI e COM em MM US$ para a faixa de acurácia..... 78
Tabela 4.9 – Avaliação de viabilidade de projeto..... 80
Tabela 4.10 – Premissas para cenários de fluxo de caixa da planta com turbinas a gás..... 81

NOMENCLATURA

Símbolo	Descrição	Dimensão
A_f	constante ácida, define a parcela de substrato que já está na forma ácido orgânicos	$(g\ VFA.L^{-1}).(g\ BVS.L^{-1})^{-1}$
B_0	constante de biodegrabilidade, define a parcela biodegradável do substrato	$(g\ BVS/L)(g\ VS/L)^{-1}$
B	razão do tempo de retenção, definida por SRT/HRT	$d.d^{-1}$
F_{alim}	vazão de efluente líquido é inserido ao biodigestor, assume-se volume constante	$L.d^{-1}$
F_{meth}	vazão de gás metano	$L_{CH4}.d^{-1}$
k_1	constante de rendimento	$g\ BVS.(g\ acidogen..L^{-1})^{-1}$
k_2	constante de rendimento	$g\ VFA.(g\ acidogen.L^{-1})^{-1}$
k_3	constante de rendimento	$g\ VFA.(g\ metanogen..L^{-1})^{-1}$
k_5	onstante de rendimento	$L(g\ metanogen)^{-1}$
Ks	constante de saturação ou constante de meia velocidade de Monod para bactérias acidogênicas	g BVS/L
Ksc	constante de saturação ou constante de meia velocidade de Monod para bactérias metanogênicas	g VFA/L
Kd	taxa especifica de morte para bactérias acidogênicas	d^{-1}
Kdc	taxa especifica de morte para bactérias metanogênicas	d^{-1}
μ	taxa de crescimento para bactérias acidogênicas	d^{-1}
μ_c	taxa de crescimento para bactérias metanogênicas	d^{-1}
μ_m	máxima taxa de crescimento para bactérias acidogênicas	d^{-1}
μ_{mc}	máxima taxa de crescimento para bactérias acidogênicas	d^{-1}

ABREVIAÇÕES

ADM1	*Anaerobic digestion model n°1*
BVS	Sólidos orgânicos voláteis biodegradáveis
CI	Combustão Interna
FCI	*Fixed Capital Investiment*
DA	Digestão anaeróbia
ETE	Estação de Tratamento de Efluente
HRT	*Hydraulic Retention Time*
OLR	*Organic Load Rate*
COM	*Cost of Manufacturing*
RA	Resíduo Animal
RAGR	Resíduo Agroindustriais
RSU	Resíduo Sólido Urbano
RF	Resíduo Florestais
VS	Sólidos Voláteis
VFA	Ácidos orgânicos voláteis
KPI	*Key Process Indicator*

1- INTRODUÇÃO

1.1.CONTEXTUALIZAÇÃO

Devido à ação humana dos últimos 2 séculos, o dióxido de carbono (CO_2) acumulou-se na camada atmosférica e recentemente apresenta concentração 150% superior em relação ao período pré-industrial (BLASING, 2016). Soma-se a este efeito a característica da molécula de metano (CH_4) possuir um grau de aquecimento, ou *global warming* (GW, na sigla em inglês) 21 vezes maior que o GW da molécula de CO_2 (IPCC, 2007). Diante deste cenário, diversos pactos ambientais foram feitos no intuito de frear a emissão de carbono na atmosfera, por exemplo, o Protocolo de Kyoto em 1997 (UNFCC, 1997; HANNAH, 2015), o Sistema de Comércio de Emissões da União Europeia (EUETS, na sigla em inglês) em 2005 (PARLIAMENT EUROPEAN, 2003) e o Acordo de Paris adotado na COP21 (*Conference of the Parties*) em 2015. Neste último, o Brasil assume o compromisso de reduzir as emissões de gases de efeito estufa (GEE) em 43% abaixo dos níveis de 2005, até 2030 (NAÇÕES UNIDAS, 2015).

O biogás é caracterizado por ser mistura gasosa resultante da fermentação anaeróbia de matéria orgânica. Sua composição apresenta elevado teor de metano (50-70%) e dióxido de carbono (30-50%) e traços de impurezas, por exemplo, o sulfeto de hidrogênio (H_2S), nitrogênio (N_2), vapor d´água (H_2O) e compostos com base de sílica, os siloxanos (ANGELIDAKI et al., 2018). Embora o biogás tenha composição química semelhante ao gás natural encontrado em reservatórios petrolíferos, o biogás não é um combustível fóssil e é considerado *Carbon Neutral* pois sua matéria prima é oriunda de resíduos da agroindústria, aterros sanitários, estações de tratamento de esgoto ou biomassa (WELLINGER, MURPHY e BAXTER, 2013). A Figura 1.1 ilustra a equivalência do biogás em relação aos demais combustíveis fosseis, por exemplo, o gás natural, madeira, gasóleo e gasolina (a equivalência energética ilustrada considera 1 m³ de biogás com composição 70%CH_4 e 30%CO_2) (ANASTÁCIO, 2010).

Figura 1.1 - Equivalência do biogás. Adaptado de Anastácio (2010)

Atualmente, os maiores obstáculos do setor de biogás no Brasil resultam de uso de projetos e tecnologias estrangeiras, que precisam ser adaptadas as condições brasileiras. Inclui-se, ainda, a dependência de importações com alta incidência de impostos, aumentando o custo de investimento necessários para novos projetos (OLIVER JENDE et al., 2016). A respeito da comercialização, quando inserido na malha nacional de distribuição o biogás ainda é negociado a preço pouco atrativo junto às empresas concessionárias das redes de distribuição, com o ideal entorno de R$1,85/m³ enquanto o negociado está na faixa de R$1,00/m³ (EPE, 2018). Para geração de energia elétrica a partir de biogás, até 2017 o teto para negociação em contratos na geração distribuída era de R$ 104/MWh e apenas em 2018 o Ministério de Minas e Energia (MME) fixou os Valores Anuais de Referência Específicos (VRES) para biogás em R$390/MWh, valor que efetivamente remunera os investimentos (MME, 2018).

Os impactos da aceleração do aquecimento global, fortalecem o apelo para fontes de energias renováveis (NI e NYNS, 1996). Essa conjuntura promove o potencial de utilização do biogás na matriz energética. Estimam-se 17.000 plantas de produção de biogás em operação apenas na Europa (LAMBERT, 2017). Particularmente, a Alemanha é líder mundial na tecnologia, são aproximadamente 9.900 plantas com capacidade instalada de 5 GW (DANIEL-GROMKE et al., 2018).

No âmbito nacional, segundo o último plano decenal de expansão de energia (PDE), o potencial teórico de produção de biogás alcançará 7,2 bilhões de Nm^3 em 2027 (MME, 2018). Em janeiro de 2019, haviam 37 termelétricas em operação utilizando biogás como combustível, totalizando 153,55 MW, que correspondem a 1,03% da capacidade nacional de energia a partir de biomassa. Do total, 20 unidades utilizam resíduos sólidos urbanos (RSU) como matéria-prima, outras 14 utilizam resíduos de animais (RA) e 3 utilizam resíduos agroindustriais (AGR). Há, ainda, 2 termelétricas em construção e 4 outorgadas, acrescentando 92,75 MW na geração de energia através de biogás (ANEEL, 2019). Contudo, as aplicações de biogás não se limitam à geração de energia, tendo outras aplicações como, por exemplo, aquecimento residencial; combustível veicular; injeção na rede (*grid*) de gás natural; matéria-prima na indústria química e geração de vapor (AL SEADIT et al., 2008).

O biogás ainda apresenta participação incipiente no cenário mundial de produção de energia quando comparado a outras fontes. Em 2015, menos de 0,3% da geração de energia elétrica do mundo teve o biogás como origem. Contudo, esta é a terceira fonte de energia renovável com maior taxa de crescimento entre 1990 – 2015, conforme apresentado na Figura 1.2, assumindo postos à frente de biocombustíveis líquidos e geotérmicos (IEA, 2017).

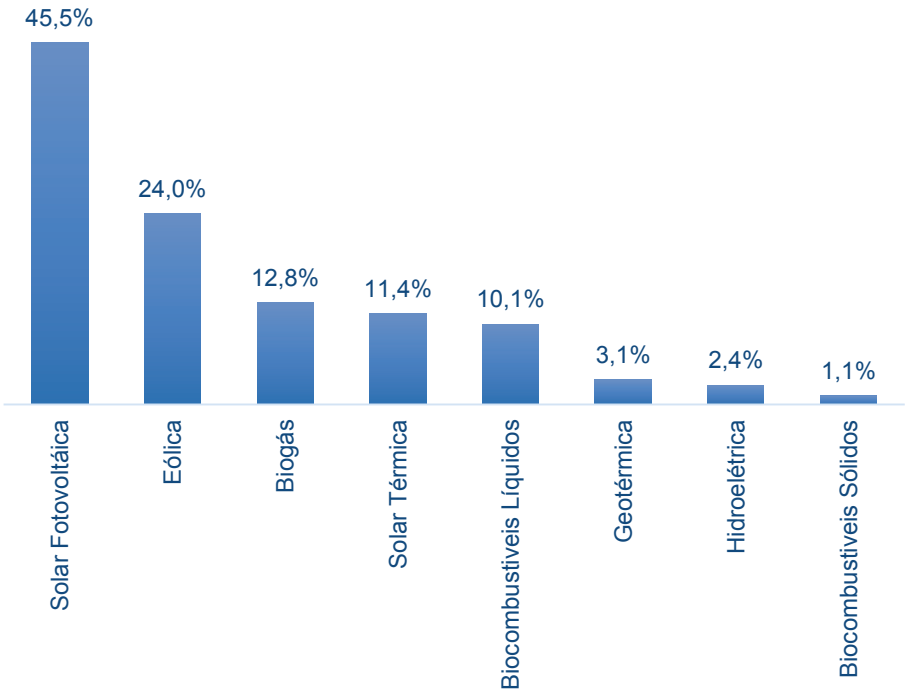


Figura 1.2 - Taxas de crescimento mundiais anuais para renováveis - 1990-2015 (%). Fonte: International Energy Agency (IEA) (2017)

No Brasil, a malha de gasodutos de gás natural é pouco distribuída, concentrando-se

na costa brasileira, o que dificulta o acesso dos pequenos consumidores, principalmente na área agrícola, ao combustível de gás natural (EPE, 2017). O biogás, entretanto, pode ser obtido por uma variedade de substratos, em especial, no interior do pais, há grande disponibilidade de matéria-prima para a digestão anaeróbia. Além disso, a utilização de biogás para geração distribuída de energia elétrica pode utilizar a malha existente (*grid*) de rede elétrica, onde a abrangência é maior que gasodutos (OLIVER JENDE et al., 2016). Dessa forma, a utilização do biogás para compor a matriz energética não só tem efeito no âmbito da redução de GEE e mitigação do passivo ambiental (substratos), como preenche uma lacuna do setor de infraestrutura brasileira.

Diante da variação de cargas e configurações de processos, a tomada de decisão em relação ao processamento e destinação de biogás é beneficiada pela simulação de processos. A ferramenta torna-se de alta relevância para o desenvolvimento de biogás como combustível para geração distribuída de eletricidade. A partir de um fluxograma conceitual, concebido através de artigos, teses e patentes, são resolvidos balanços de massa e energia que servem para identificar os gargalos técnicos e econômicos da utilização do biogás para geração de eletricidade, assim como estimativas do consumo de matéria-prima, utilidades e insumos. Por meio desta ferramenta, também é possível estimar o investimento de capital e custo de manufatura. O primeiro considera custos diretos e indiretos associados a compra e instalação dos equipamentos da unidade, já o segundo considera os custos variáveis e fixos relacionados ao pleno funcionamento do projeto.

1.2.MOTIVAÇÃO

A tendência de longo prazo é a escalada da demanda global de energia enquanto a produção apresenta quadro de esgotamento progressivo das fontes tradicionais, por exemplo, carvão e petróleo. Urge, portanto, a necessidade da utilização de novas fontes, em especial os renováveis (BERNDES, HOOGWIJK e VAN DEN BROEK, 2003; FIELD, CAMPBELL e LOBELL, 2008; DEMIRBAS, BALAT e BALAT, 2009; THRÄN et al., 2010). Diante deste cenário, o biogás surge como ator principal decorrente do potencial para produção de bioenergia, balanço de carbono favorável (CO_2 *footprint*) e redução dos impactos ambientais através da utilização de diferentes resíduos (passivo ambiental) como matéria-prima (BUDZIANOWSKI e POSTAWA, 2017; LORA GRANDO et al., 2017).

A Tabela 1.1 apresenta dados do potencial de produção de biometano no Brasil, classificados por substrato. A soma deste potencial teórico é de 101,3 milhões de m^3/dia de

biometano, superando em 9% a demanda média diária de gás natural no Brasil em setembro 2018 (MME, 2018). O levantamento sugere ainda que o potencial brasileiro não explorado de produção de biogás tem capacidade de eliminar a importação de gás natural, fornecer integralmente combustível para geração de energia em termelétricas e ainda suprir parte da demanda de gás natural para o setor de transporte.

Tabela 1.1 – Capacidade de produção de biometano no Brasil. (OLIVER JENDE et al., 2016)

Substrato	***Capacidade de Produção (milhões m³/dia)***
Residuos Sólidos Urbanos (RSU)	*4,3*
Vinhaça	*13,8*
Resíduos Agropecuários (RAG)	*35,4*
Resíduos Agricolas (RA)	*47,8*
Total	***101,3***

A literatura apresenta modelos fenomenológicos para a representação da digestão anaeróbia de matéria orgânica, alguns deles complexos, como o ADM1 (BATSTONE et al., 2002) que conta com 35 variáveis de estado e aproximadamente 100 parâmetros; e outros modelos simplificados como o de Husain (1998) e Hill (1983), que utilizam apenas 4 variáveis de estado, que com a perda da complexidade reduzem a capacidade de representação. Deve-se, portanto, validar o modelo conveniente a cada aplicação em relação aos parâmetros e condições de processo. Com o modelo validado, é possível analisar a unidade de produção de biogás e bioenergia, isto é, o sistema de produção.

Com a representação matemática do processo em um ambiente computacional de simulação de sistemas de processos (Aspen Plus), pode-se estimar o investimento de capital (FCI do inglês, *Fixed Capital Investiment*) e custo de manufatura (COM, do inglês *Cost of Manufacturing*). A partir destas estimativas de FCI e COM do projeto conceitual proposto, são estabelecidas as bases para tomada de decisão com relação ao investimento.

1.3.OBJETIVO

O objetivo geral desta dissertação é avaliar a geração de energia elétrica a partir de biogás da DA de resíduos orgânicos. Com este objetivo geral, definem-se os objetivos específicos para propor um fluxograma conceitual de produção de eletricidade a partir de resíduo líquido com matéria orgânica solúvel:

- Implementação em MATLAB (The Mathworks Inc) e validação do modelo

de digestão anaeróbia proposto por Hill (1983) frente aos resultados reportados por Haugen e colaboradores (2013);

- Análise de sensibilidade paramétrica do modelo em MATLAB (The Mathworks Inc);
- Implementação do modelo de digestão anaeróbia no simulador de processos Aspen Plus (Aspentech Inc) através de bloco customizado, utilizando o Aspen Custom Modeler (Aspentech Inc);
- Proposição de fluxograma conceitual para produção de eletricidade integrada à produção de biogás por digestão anaeróbia de efluente orgânico;
- Análise de sensibilidade a parâmetros operacionais, tais como: Tempo de Retenção Hidráulica (*Hydraulic Retention Time*, HRT) e Taxa de Carga Orgânica (*Organic Load Rate*, OLR) em Aspen Plus (Aspentech Inc);
- Análise de desempenho de Indicadores Chave (*Key Process Indicator*- KPI) frente às oscilações de condições operacionais, a saber: Potência Líquida Gerada (*Net Power Generation*), Redução de Biodegradáveis e Produção de Metano;
- Comparação do fator de emissão de CO_2 do processo de eletricidade frente a geração de eletricidade a partir de fontes convencionais;
- Estimativa do investimento de capital (FCI) e custos de manufatura (COM) da unidade de geração de eletricidade.

2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo de revisão bibliográfica são abordados os seguintes temas: aspectos gerais do biogás; as aplicações do biogás; o contexto do cenário brasileiro; a digestão anaeróbia de matéria orgânica; os principais parâmetros operacionais do processo de digestão; os principais modelos fenomenológicos de digestão anaeróbia; contextualização sobre modelagem e simulação de processos; e a análise econômica de processos químicos.

2.1 ASPECTOS GERAIS

De acordo com a Resolução Normativa n°8 de 2015 da ANP, o biogás é o "gás bruto obtido da decomposição biológica de produtos ou resíduos orgânicos". A decomposição de resíduos orgânicos pela ação microrganismos é chamada de digestão anaeróbia (DA) e ocorre na ausência de oxigênio. Na natureza, há formação espontânea de biogás em pântanos, fundo de lagos e no rúmen de animais ruminantes (AL SEADIT et al., 2008). Dois componentes são responsáveis por quase a totalidade da mistura gasosa, o metano (50-75 % v/v) e dióxido de carbono (25-50% v/v) (BRAUN, 2007) .Também pode haver quantidades de hidrogênio, sulfeto de hidrogênio, amônia, umidade e traços de outros contaminantes oriundos da decomposição da matéria orgânica. A composição do gás é variável de acordo com a composição da matéria-prima (ABBASI, TAUSEEF e ABBASI, 2012).

O biogás apresenta poder calorífico de aproximadamente 5.000 kcal/m³, semelhante ao do gás natural que tipicamente assume valores próximos de 8.600 kcal/m^3. O poder calorífico é a quantidade de energia, por unidade de massa, liberada pelo combustível. De forma geral, quanto maior a composição de CO_2 no biogás, menor é o seu poder calorífico. Outro importante índice técnico é o Índice de Wobbe (I_W), definido pela razão do poder calorífico e a raiz quadrada da densidade relativa do gás. O índice relaciona a quantidade de energia introduzida no queimador e serve de balizador para compatibilidade de diferentes gases combustíveis. No âmbito da segurança de processo, a mistura de biogás e ar é inflamável dentro dos limites de explosividade, sendo assim, eletricidade estática, faíscas ou fontes de fogo podem causar a ignição da mistura explosiva (BRAUN, 2007). As características típicas do biogás são apresentadas na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 - Características do biogás. (BRAUN, 2007)

Componente	***Faixa***	***Propriedade***
Metano	*50-75 (%) v/v*	*Potencial energético*
Dióxido de carbono	*25-50 (%) v/v*	*Corrosivo; reduz potencial energético*
Nitrogênio	*0-5 (%) v/v*	*Reduz potencial energético*
Umidade	*1-5 (%) v/v*	*Facilita a corrosão*
Sulfeto de hidrogênio(H_2S)	*0-5000 PPM*	*Corrosivo; emissão de SO_2 na combustão*
Amônia (NH_3)	*0-500 PPM*	*Emissão de NOx na combustão*
Siloxanos	*0-500 PPM*	*Formação SiO_2: corrosivo e depósito em queimadores, válvulas, etc.*
Parâmetro	***Faixa***	***Unidade***
Poder calorífico	*4000-5000*	*kcal/m³*
Densidade	*1,19-1,21*	*kg/m³*
Temperatura de Ignição	*650-750*	*°C*
Limite de Explosividade (ar)	*4,4-16,5*	*% v/v*
Wobbe Index (Iw)[1]	*19,5*	*MJ/m³*

[1]propriedade para 60%(v/v) CH_4, 38%(v/v) CO_2 e 2%(v/v) outros componentes.

A composição do biogás está relacionada ao tipo de material orgânico digerido. Dessa forma, a ANEEL (Agencia Nacional de Energia Elétrica) classifica as plantas de biogás de acordo com a fonte de matéria-prima processada, são elas: Resíduos Sólidos Urbanos (RSU), Resíduos Animais (RA), Resíduos AgroIndustriais (RAGR) e Resíduos Florestais (RF).

A utilização dos resíduos sólidos urbanos (RSU) para geração de biogás é extremamente atual no contexto técnico e social, pois lida diretamente com as condições do saneamento brasileiro. A lei n° 12.305/2010, que institui a Política Nacional de Resíduos Sólidos, extingue a criação de lixões e dissemina a utilização de aterros sanitários como forma de destinação de RSU (AUDIBERT, 2011). LINO e ISMAIL (2011) utilizaram aterro sanitário em Campinas-SP como modelo para estimar que a fração orgânica dos resíduos depositados no Brasil é de 118.000 t/dia e tem potencial de geração de 42MW de energia elétrica através do biogás. LIMA e colaboradores (2014) utilizaram uma metodologia de tomada de decisão considerando aspectos ambientais, econômicos, políticos e sociais,

concluindo que a utilização de D.A. em aterros sanitários, combinada com reciclagem de materiais, é viável em todos os aspectos considerados. Recentemente, DALMO e colaboradores (2019) estudaram o potencial de resíduos sólidos urbanos da cidade de São Paulo, concluindo que a D.A. seguida de incineração de 10.800 t/ano de resíduo orgânico que é destinado aos aterros sanitários representa potencial teórico de geração de energia elétrica, acima de 8.000 MWh/ano.

Quanto à RA, os biodigestores são abastecidos com dejetos de suínos, aves ou animais ruminantes, produzindo biogás que tipicamente serve como combustível para geradores da própria unidade rural (ANASTÁCIO, 2010). ORRICO e colaboradores (2012) identificaram o impacto da dieta do rebanho bovino na composição do biogás e biofertilizante obtido, concluindo que é possível aumentar em 26% o conteúdo de metano no biogás após adaptações da dieta do rebanho. PESSUTO e colaboradores (2016) identificaram e isolaram microrganismo que atua na hidrólise dos dejetos suínos, aumentando a fração molar de CH_4 no biogás. VERONEZE e colaboradores (2019) avaliaram o desempenho de biodigestores com resíduos da suinocultura e frações de glicerina. A codigestão dos substratos não promoveu a produtividade de biogás; contudo, foi possível elevar o conteúdo de glicerina em até 5% v/v sem que houvesse perda de rendimento na DA.

A síntese de biogás a partir de resíduos florestais (RF) (e.g. serragem, cavacos e resíduos lignocelulósicos em geral) requer etapas de pré-tratamento antes de serem submetidos à DA A matéria-prima é composta basicamente por celulose, hemicelulose e lignina, que possuem ligações intermoleculares reticuladas, resultando em uma estrutura compacta, atuando como barreira para a ação dos microrganismos da DA. Pela composição da matéria-prima, a produção de biogás a partir desta fonte está relacionada com a indústria da produção de etanol (ACHINAS, ACHINAS e EUVERINK, 2017). Em HORN (2011) e JANZON (2014), propõe-se a produção de biogás como alternativa a etanol em biorefinarias. Nos dois casos o pré-tratamento de explosão a vapor (*steam explosion*) foi aplicado com objetivo de aumentar a produtividade de biogás na DA. Já BAHMANI, SHAFIEI e KARIMI (2016) propõem um processo no qual a D.A. atua como pré-tratamento biológico de palha de arroz, *hardwood*[1] e *softwood* [2,3], produzindo assim biogás e etanol.

[1] *Hardwood: classificação designada para madeiras porosas de árvores do tipo angiospérmicas no qual as sementes são protegidas por fruto;*
[2] *Softwood: classificação designada para madeiras não-porosas de árvores do tipo gimnospérmicas no qual as sementes não são protegidas por fruto.*
[3] *Não necessariamente madeira do tipo softwood é mais "macia" que hardwood (YOUNG, 2007).*

SAFARI SAFARI, KARIMI e SHAFIEI (2017) aplicaram o pré-tratamento alcalino em *softwood*, a fração líquida do pré-tratamento, majoritariamente hemicelulose, foi direcionada para síntese de biogás, enquanto que a fração sólida sofreu hidrólise e posterior fermentação para produção de etanol.

2.2 APLICAÇÕES DE BIOGÁS

Existem várias formas de utilizar a energia contida no biogás. Uma das aplicações é a geração de energia térmica em caldeiras. Porém, a aplicação de maior destaque é a geração de energia elétrica, através da combustão controlada em turbinas ou em motores de combustão interna (CI) do tipo "Ciclo-Otto". A utilização de biogás em motores de CI representou 80% da aplicação do biogás nos Estados Unidos em 2013, com estimativa de eficiência 5 a 15% inferior em comparação a motores de funcionamento com gás natural. Os motores são relativamente pequenos e produzem de 1 a 2 MW mas podem consumir até mais de 50.000m³/dia de biogás (ABRELPE, 2013). A vantagem inerente aos motores CI são o baixo capital de investimento e menos requisitos de processamento do biogás. Esta tecnologia, entretanto, é historicamente conhecida pela alta emissão de NOx e intensivas interrupções para manutenção (MUSTAFI, RAINE e BANSAL, 2006).

Turbinas a gás utilizam o ciclo termodinâmico de Brayton, conforme apresentado na Figura 2.1. O ciclo é composto por 4 etapas, onde: 1-2 corresponde ao compressor de ar; 2-3 corresponde a câmara de combustão entre ar e gás; 3-4 corresponde à expansão na turbina de expansão; e 4-1 corresponde ao processo de resfriamento do gás exausto pelo ar atmosférico a pressão constante. O diagrama de processo apresentado na Figura 2.2 elucida os equipamentos necessários para geração de energia. O primeiro passo ocorre quando ar atmosférico em condições ambiente é comprimido para alta pressão. Não é adicionado calor neste passo, porém, como resultado da compressão do ar, há aumento da temperatura na descarga, conforme mostrado no ciclo da Figura 2.1. Ar comprimido é injetado em excesso na câmara de combustão para fornecer oxigênio para a queima do gás combustível e, principalmente, atuar como um termo diluente dos gases resultantes da combustão. RAO (2014) verificou que a operação da turbina a gás em condições próximas às proporções estequiométricas ar:gás resultam em gás exausto com temperatura acima de 1900°C, ultrapassando o limite térmico do material de construção das turbinas. A combustão ocorre essencialmente à constante e alta pressão. A reação é altamente exotérmica e os gases resultantes da queima apresentam tipicamente temperaturas próximas a 1300°C. O gás exausto é expandido na turbina, onde ocorre a conversão da energia térmica em energia

cinética. A energia cinética é transferida para o gerador de energia elétrica onde a energia cinética é convertida em trabalho. Esse ciclo de geração de energia apresenta capacidade superior a 1MW; em especial, as turbinas do tipo aeroderivativas podem gerar até 300MW. A eficiência para o ciclo simples é de aproximadamente 38-42% (POULLIKKAS, 2005; BREEZE, 2014).

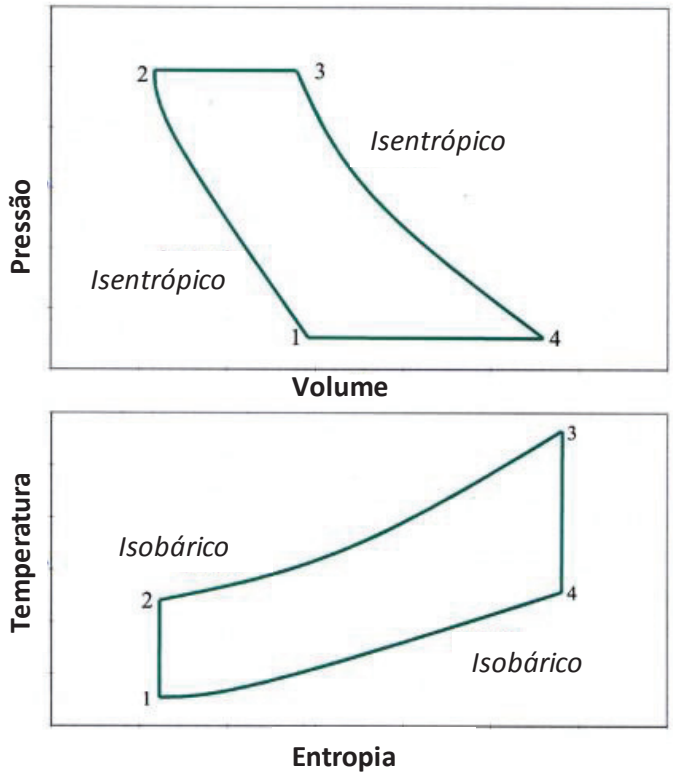


Figura 2.1 Ciclo termodinâmico - Ciclo de Brayton. Adaptado de Poulikkas (2005)

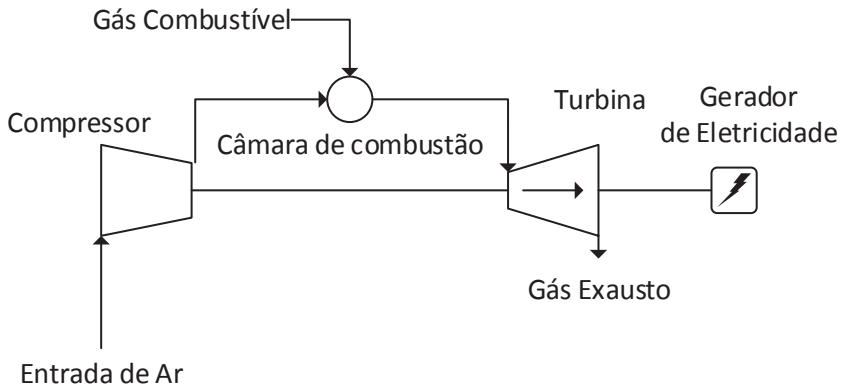


Figura 2.2 - Esquema básico de turbina a gás ciclo-simples. Adaptado de Poullikkas (2005)

A geração de energia por turbinas a gás pode ter eficiência aumentada quando incorporado um sistema de recuperação de calor. O arranjo com ciclo Brayton e ciclo Rankine, chamado de ciclo combinado, é ilustrado na Figura 2.3. O arranjo combinado é formado por uma ou mais turbinas a gás com um sistema de recuperação de energia (HRSG,

do inglês *heat recovery steam generation*) do gás exausto, além de sistema de turbinas a vapor. Dessa forma, dois fluidos de trabalho são responsáveis por gerar energia, gás combustível e vapor. O arranjo de recuperação pode variar de acordo com o processo, mas consiste na produção de vapor com o calor contido nos gases exaustos e sua utilização na geração de energia em turbina a vapor. Fechando o ciclo, o condensado é novamente aquecido para geração de vapor. Em algumas configurações o condensado é direcionado para a etapa de desaeração, que remove gases como o O_2 e CO_2 que estão dissolvidos. A recuperação neste processo é limitada pela temperatura de saída do compressor, pois altas temperaturas promovem danos no material de construção dos equipamentos. A eficiência energética global é na faixa dos 55-60% (POULLIKKAS, 2005; GUPTA, REHMAN e SARVIYA, 2010).

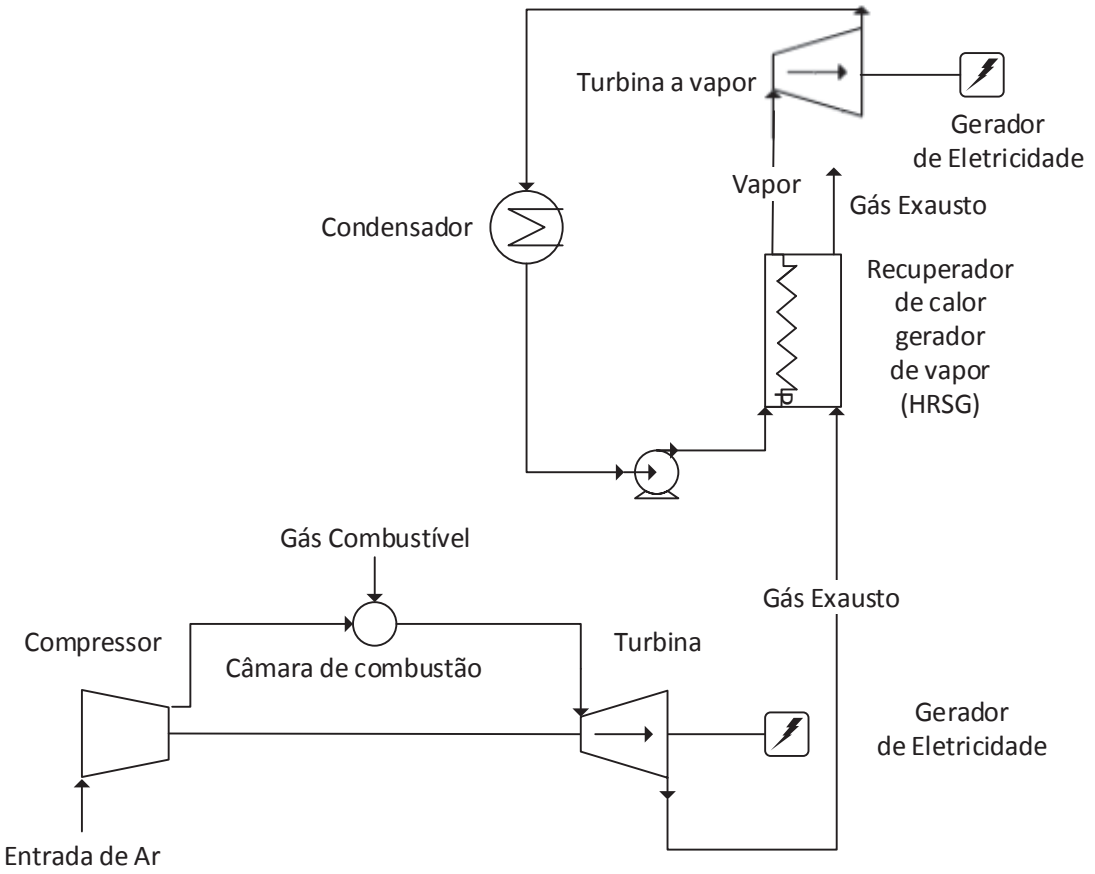


Figura 2.3 Esquema básico de turbina a gás com ciclo combinado com turbina a vapor. Adaptado de Poullikkas (2005).

Também é possível utilizar microturbinas, que são baseadas nos mesmos princípios das turbinas a gás, mas com capacidade de geração de energia muito menor, entre 0,1-0,5 MW. Pode-se utilizar um conjunto de microturbinas com operação em paralelo ou de forma isolada. A eficiência é na faixa de 15-30% e distinguem-se das turbinas convencionais por apresentar rotação maior (cerca de 100.000 rpm), menor emissão de NOx em relação a

turbinas convencionais e possibilidade de operação com gás combustível pobre em metano (até 35% molar) (JANSOHN, 2013). Uma das principais desvantagens, além da baixa eficiência, é o elevado custo de investimento requerido, na faixa de 1.300-2.500 $/kW (EPA, 2013).

2.3 BIOMETANO

Além das aplicações de geração de energia, o biogás pode ser utilizado como substituto do gás natural. Uma das maneiras de substituir o gás natural é injetar biogás na rede de distribuição (*grid*) já existente. Contudo, esta opção reflete em uma série de critérios que devem ser atendidos pela qualidade do biocombustível. Outra opção é processar o biogás até a destinação como combustível veicular (GNV). Ambas alternativas envolvem padrões de qualidade estabelecidos pela Resolução ANP n° 8/2015 e da Resolução ANP nº 685/2017. A primeira é referente à produção de biogás a partir de resíduo agroindustrial, enquanto que a segunda é para biogás a partir de aterros sanitários e estações de tratamento de esgoto (ETE). De toda forma, o biogás deve contemplar as especificações mínimas relativas a sulfeto de hidrogênio, umidade, dióxido de carbono, compostos orgânicos voláteis (VOC, do inglês: *Volatile Organic Compound*), aumentar o conteúdo energético (poder calorífico), atender ao índice de Wobbe e ser pressurizado de acordo com a pressão do gás natural (no caso de substituição), que varia entre 100 e 500 psig (ANP, 2018).

Após o tratamento do biogás, o produto final é referido como biometano. A composição típica é de 95-97% CH_4 e 1-3% CO_2. Parte do tratamento é a remoção da água contida no gás, realizada através de métodos físicos (ciclones, por exemplo) e métodos químicos (absorção e adsorção). O tratamento de remoção de H_2S é feito para minimizar a ação corrosiva e conta com diversos métodos: adsorção em líquidos, adsorção em óxidos e hidróxidos, membranas, entre outros. Sugere-se a remoção de siloxanas para biogás produzido em aterros sanitários; de maneira geral, o tratamento é feito através da absorção, que pode utilizar solventes orgânicos; ácidos fortes; bases fortes; carvão ativado ou sílica em gel. A remoção de VOC é feita por carvão ativado, que também remove parte do NH_3. A remoção do CO_2 é feita através de métodos físico-químicos de absorção de CO_2, separação por membranas; adsorção pressurizada (PSA - *Pressure Swing Adsorption*), entre outros (RYCKEBOSCH, DROUILLON e VERVAEREN, 2011; DADA e MBOHWA, 2017; ANGELIDAKI et al., 2018). A Tabela 2.2 resume os principais métodos utilizados para produzir biometano.

Tabela 2.2 - Processos de tratamento para obtenção de biometano. Adaptado de Ryckebosch et al., (2011), Dada e Mbohwa (2017) e Angelidaki et al., (2018)

Contaminante	*Método*	*Vantagens*	*Desvantagens*
Água	*Ciclones*	*Técnica simples;* *Pré-tratamento para outros processos*	*Baixa remoção de água;* *Dew Point de 1°C*
	Absorção com glicol	*Alta eficiência de remoção;* *Dew point de -5 a -15°C;* *Não tóxico*	*Alto custo;* *Necessário alta pressão e temperatura na regeneração*
H_2S	*Absorção Química (NaOH)*	*Baixa demanda energética;* *Baixa perda de CH_4*	*Sistema de regeneração;* *Vários equipamentos*
	Membranas	*Alta eficiência de remoção (>98%);* *Também remove parcela de CO_2*	*Investimento alto;* *Complexa manutenção*
Siloxanos	*Absorção em solventes orgânicos*	*Alta eficiência de remoção (>95%)*	*Permanência de concentração residual*
	Adsorção em carvão ativado	*Alta eficiência de remoção (>97%)*	*Operação com sistema pressurizado*
NH_3 e VOC	*Adsorção em carvão ativado*	*Alta eficiência de remoção (>95%);* *Também remove parcela de CO_2*	*Regeneração reduz a eficácia de remoção;* *Substituição do leito de carvão*
CO_2	*Absorção com Polietileno glicol*	*Remoção simultânea de H_2S, NH_3 e H_2O;* *Alta eficiência de remoção (>97%)*	*Alto investimento e custo de operação;*
	Absorção com aminas	*Alta eficiência de remoção (>99%);* *Baixa perda de CH_4;* *Baixo custo operacional*	*Demanda energética para regeneração;* *Formação de espuma (foam);* *Alto investimento*
	PSA	*Alta eficiência de remoção (>95%);* *Baixa demanda energética;* *Remove H_2S*	*Alto investimento e custo de operação;* *Sistema de controle e operação complexa;*
	Membranas	*Remoção de H_2S e H_2O;* *Alta confiabilidade;* *Remoção >92%;* *Corrente de CO_2 puro pode ser obtida*	*Requer sistema modular para aumentar a eficiência;* *Perda de CH_4*

A inclusão desses processos de tratamento do biogás para remoção de impurezas e

conversão a biometano tornam o investimento oneroso, com produto final pelo menos 19% mais caro que o gás natural convencional (PATURSKA, REPELE e BAZBAUERS, 2015). Portanto, é evidente o questionamento a respeito da competitividade do *upgranding* de biogás a biometano frente a geração de energia elétrica a partir do uso do biogás. Em 2015, em toda a Europa, haviam 340 plantas produzindo 1.400 mil m³ de biometano, e inserindo na rede de distribuição de gás natural, enquanto que para o mesmo período o total de plantas de geração de energia elétrica de biogás ultrapassava 16.600 unidades, com capacidade instalada acima de 10.000 MW (SCARLAT, DALLEMAND e FAHL, 2018). A conversão de biogás a biometano é uma alternativa para substituir o gás natural, porém a venda e o transporte de moléculas de metano ainda são menos atrativos economicamente que o transporte de elétrons gerado a partir do biogás.

2.4 CENÁRIO BRASILEIRO

Segundo dados do Cadastro Nacional do Biogás mantido pelo CIBiogás (Centro Internacional de Energias Renováveis-Biogás) em 2015, no Brasil, existiam 127 unidades dedicadas à produção de biogás, totalizando 1,6 milhões de m³/dia, classificadas entre unidades de grande, médio e pequeno porte. Ainda segundo CIBiogás, 22 outras unidades estariam com projetos em planejamento/instalação e 10 unidades em reforma, totalizando 153 unidades cadastradas. Esses números garantem o Brasil como o país com mais plantas de biogás em operação do Mercosul. A localização dessas unidades é majoritariamente nas regiões Sul, Sudeste e Centro-Oeste do país. Do total, 43% do biogás é proveniente de aterros sanitários, 29% utiliza substratos agropecuários e 22% substratos da indústria alimentícia (CIBIOGÁS, 2017).

As projeções realizadas pela EPE (Empresa de Pesquisa Energética), em relatório divulgado em 2016, estabelecem curvas de penetrações para a geração de eletricidade a partir de biogás assumindo 2050 como horizonte. O cenário aponta que na próxima década haverá pouca penetração para este tipo de energia na matriz enegética, sendo caracterizado como um período de estabelecimento de processos, com geração de biogás principalmente em aterros sanitários. A projeção é que, a partir de 2030, com a difusão e consolidação dos projetos pioneiros de DA na zona rural e consolidação da tecnologia de conversão de biogás em eletricidade, o mercado de bioenergia atingirá o patamar de desenvolvimento estabelecido (EPE, 2016).

Na Figura 2.4, duas projeções são feitas, a primeira é baseada no consumo e competitividade relativa ao cenário atual. A segunda, denominada NP (Novas Políticas),

assume que a competitividade do biogás dobra com o aprofundamento das questões ambientais e medidas de incentivo para produção de eletricidade.

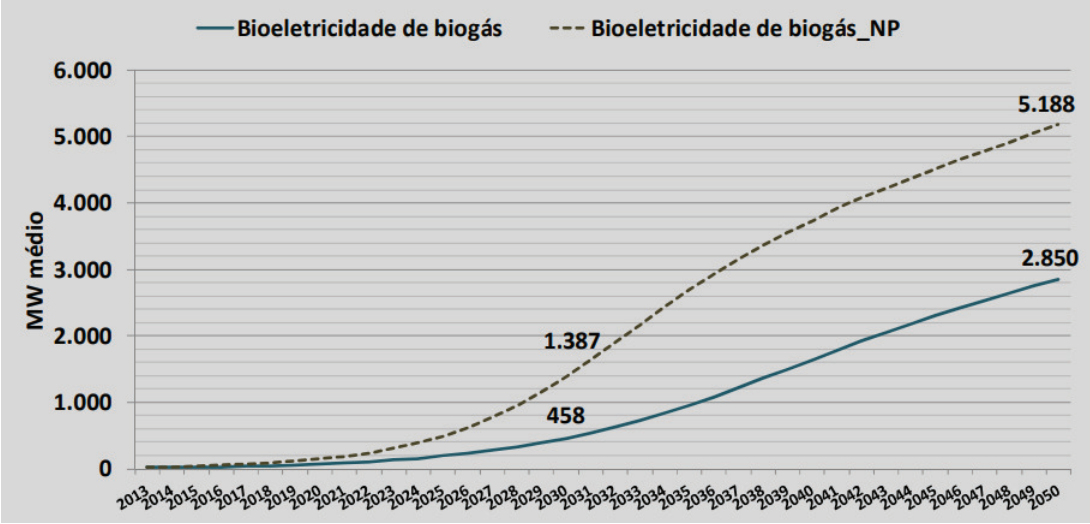


Figura 2.4 - Curvas de penetração para bioenergia. Fonte: EPE (2016)

2.5 DIGESTÃO ANAERÓBIA

A digestão anaeróbia (DA) consiste no processo bioquímico da decomposição de compostos orgânicos complexos em compostos simples sob ausência de oxigênio (ABBASI, TAUSEEF e ABBASI, 2012). Este processo é realizado por microrganismos anaeróbios que convertem moléculas orgânicas complexas em metano, dióxido de carbono, amônia, sulfetos, fosfatos e outros. A D.A., em contraste com a fermentação aeróbia, gera calor e metano, sendo este último o principal produto (AL SEADIT et al., 2008).

A D.A. pode ser descrita em quatro etapas: (1) hidrólise, (2) fermentação ou acidogênese, (3) acetogênese, (4) metanogênese. Na hidrólise (etapa 1), hidrolisadas macromoléculas de proteínas, lipídeos e carboidratos (e.g. celulose), são quebradas (ou despolimerizadas) em moléculas menores como aminoácidos (AA), monossacarídeos (açúcares) e ácidos graxos de cadeia longa (LCFA, do inglês *long chain fatty acid*). Na acidogênese (etapa 2), os produtos da hidrólise são absorvidos e convertidos em ácidos orgânicos (VFA, do inglês *volatile fatty acid*), como propionato, butirato, valerato e outros, além da formação de hidrogênio. Na acetogênese (etapa 3), os VFA são oxidados a acetato, hidrogênio e dióxido de carbono. Por último, na metanogênese (etapa 4), duas classes de arqueas produzem metano. As arqueas hidrogenotróficas utilizam hidrogênio como substrato e as arqueas acetoclásticas, que são predominantes, utilizam o acetato como substrato (KHANAL, 2008). A Figura 2.5 apresenta o diagrama esquemático das etapas da digestão anaeróbia.

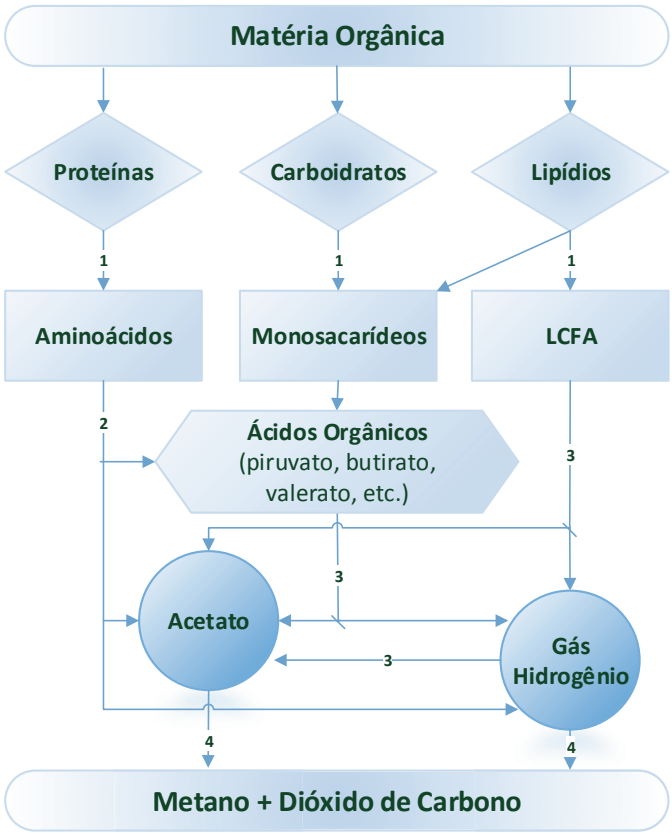


Figura 2.5 - Diagrama de blocos do processo de digestão anaeróbia. Os números nas setas referem-se as etapas: 1 - hidrólise; 2 - acidogênese; 3 - acetogênese e 4 – metanogênese.

Compostos orgânicos complexos compõem três agrupamentos principais: proteínas, carboidratos e lipídios. A aproximação é válida para a maioria dos substratos utilizados na D.A. (YU, WENSEL e MA, 2013). A Tabela 2.3 indica a concentração nos agrupamentos principais.

Tabela 2.3 – Concentração (base seca) dos substratos em agrupamentos principais. Adaptado de YU, WENSEL e MA (2013)

Substrato	*Carboidratos (mg/g)*	*Lipídios (mg/g)*	*Proteínas (mg/g)*
Resíduo Animal	*100-125*	*24-47*	*125-300*
Lodo de ETE	*100-200*	*7-155*	*140-345*
Resíduo Alimentício	*260-610*	*35-80*	*90-208*
Palha de trigo	*800-850*	*0-5*	*0-10*

2.5.1 Hidrólise

A primeira etapa da digestão anaeróbia é uma reação heterogênea e é a etapa limitante, ocorrendo no ambiente extracelular através da ação de enzimas como lipase,

protease e celulase. A ação de enzimas é converter os complexos insolúveis em componentes solúveis de menor massa molecular, que podem ser transportados através da membrana celular, conforme descrito nas reações (2.1) a (2.3).

$$Lipídios \xrightarrow{lipases} Ácidos\ graxos \qquad \text{R. (2.1)}$$

$$Proteínas \xrightarrow{proteases} Amino\ Ácidos \qquad \text{R. (2.2)}$$

$$Carbohidratos \xrightarrow{celulases,amilases,xilanases} Monosacarídeos \qquad \text{R. (2.3)}$$

2.5.2 Acidogênese

Na segunda etapa de D.A., os produtos da hidrólise são convertidos em acetato, hidrogênio, dióxido de carbono e ácidos orgânicos voláteis (VFA, do inglês *volatile fatty acid*). A acidogênese é a etapa mais rápida da D.A. e possui alta complexidade devido à atividade metabólica de duas classes de bactérias: anaeróbias restritas e facultativas. (KHANAL, 2008). Em condições ótimas de operação, a maioria da matéria orgânica é convertida em substratos para as arqueas metanogênicas (51% acetato, 19% $H_2 + CO_2$), mas uma parcela significativa (aproximadamente 30%) é convertida em ácidos orgânicos voláteis. Adicionalmente, há formação de sub-produtos que inibem a D.A., como amônia e sulfeto de hidrogênio, resultados da degradação dos aminoácidos (ANGELIDAKI, ELLEGAARD e AHRING, 1999). As reações 2.4 e 2.5 descrevem esta etapa.

$$Aminoácidos \rightarrow Acetato + Propionato + Butirato + Valerato \qquad \text{R. (2.4)}$$

$$Monossacarideos \rightarrow Acetato + Etanol + Propionato \qquad \text{R. (2.5)}$$

2.5.3 Acetogênese

Produtos da etapa acidogênica, ácidos orgânicos voláteis (VFA) com mais de 2 carbonos, não metabolizados por arqueas metanogênicas são oxidados em acetato, hidrogênio e gás carbônico. A acetogênese usualmente ocorre em paralelo com a etapa metanogênica. Duas classes de bactérias são majoritárias nesse etapa: homoacetogênica, que produz acetato a partir de CO_2 e H_2; e bactérias acetogênicas produtoras de hidrogênio (*hydrogen-producing acetogenic bacteria*), que produzem acetato, CO_2 e H_2 a partir dos VFA (ANGELIDAKI, ELLEGAARD e AHRING, 1999). Nesta etapa, ocorre mecanismo de inibição causado por H_2 em alta pressão parcial ($>10^{-3}$ atm), inibindo a degradação de propionato (KHANAL, 2008).

$$Ácidos\ Graxos\ Voláteis\ (VFA) \rightarrow\ H_2 + CO_2 + Acetato \quad \text{R. (2.6)}$$

$$H_2 + CO_2 \rightarrow\ Acetato \quad \text{R. (2.7)}$$

2.5.4 Metanogênese

Acetato, H_2 e CO_2 são os substratos para a metanogênese. Cerca de 72% da produção de metano é resultado da descarboxilação de acetato, a parcela restante é resultado da redução de CO_2. A classe de arqueas que utiliza acetato como substrato é chamada de acetotrófica ou metanogênica acetoclástica. A outra classe, que utiliza H_2 e CO_2 como substrato, são as metanogênicas hidrogenotróficas (ANGELIDAKI, ELLEGAARD e AHRING, 1999).

A metanogênese é a etapa mais crítica e a mais lenta do processo de DA. É severamente influenciada pelas condições de operação, como: pH, temperatura, composição de substrato,taxa de carga orgânica (OLR, do inglês *organic load rate*) e tempo de retenção hidráulica (HRT, do inglês *hidraulic retention time*) (AL SEADIT et al., 2008).

$$Acetato \rightarrow\ CH_4 + CO_2 \quad \text{R. (2.8)}$$

$$H_2 + CO_2 \rightarrow\ \ CH_4 + H_2O \quad \text{R. (2.9)}$$

2.6 PARÂMETROS OPERACIONAIS

O processo de digestão anaeróbia pode ser influenciado por diversos fatores, que podem ser relacionados às condições de operação do biodigestor e às características do substrato. Esses fatores que interferem no rendimento e produção são: temperatura; pH; nutrientes; VFA; OLR e HRT (AL SEADIT et al., 2008).

2.6.1 Temperatura

A temperatura (e sua estabilidade) é decisiva para a D.A. pois as arqueas metanogênicas são sensíveis a variações de temperatura. De forma geral, o controle de temperatura é realizado por um sistema de aquecimento no interior do biodigestor para conter as oscilações causadas por interferências externas como chuvas ou neve. O processo de D.A. pode ser realizado em 3 faixas de temperatura: psicrofílica (<20°C); mesofílica (20-45°C); e termofílica (45-70°C). As unidades modernas de produção de biogás optam por realizar a DA na faixa das termofílicas por ser mais eficiente na redução de microrganismos patogênicos, promover menor tempo de retenção hidráulica e maior taxa de degradação de substratos sólidos. Contudo, a operação nesta faixa de temperatura confere desvantagens

como a demanda térmica e risco da inibição por amônia (ANGELIDAKI e SANDERS, 2004; ASCHMANN et al., 2007). A Figura 2.6 apresenta as taxas de crescimento das arqueas metanogênicas e os respectivos rendimentos de biogás e metano. As curvas demonstram que a utilização de microrganismos termofílicos, em relação aos mesofilicos e psicrofilicos, proporcionam a operação de biodigestor com menor HRT, o que impacta significativamente o desempenho econômico do processo (ANGELIDAKI e SANDERS, 2004).

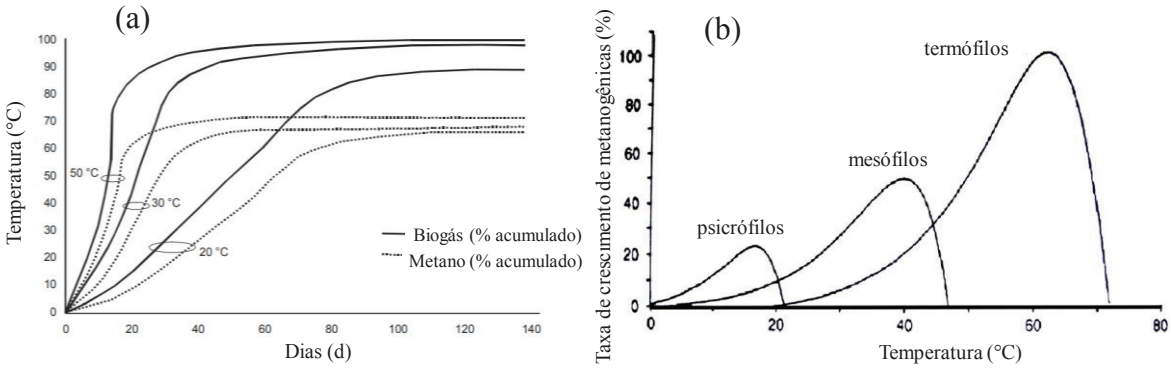


Figura 2.6 - (a) Taxas de produção de biogás e metano para operação em 50, 30 e 20°C, adaptado de Aschmann et al. (2007). (b) Taxas de crescimento de arqueas metanogênicas psicrófilo, mesófilo e termófilo, adaptado de ANGELIDAKI e SANDERS (2004).

A temperatura também pode alterar as características de pH do meio. Atuando em sentidos opostos, a elevação da temperatura do biodigestor reduz a solubilidade de CO_2 na fase líquida. O CO_2 dissolvido produz ácido carbônico em contato com a água. Desta forma, a operação de biodigestores com microrganismo termófilos apresenta valores de pH maiores (DOBRE, NICOLAE e RADOI MATEI, 2014).

2.6.2 pH e VFA

O monitoramento e controle de pH do meio é fundamental para o desempenho da D.A. em termos de rendimentos de biogás. O maior desafio em relação ao pH na DA é conciliar os requisitos de hidrólise a metanogênese. Na etapa de hidrólise, o pH ótimo encontra-se na faixa de 5.5-7.0, porém a etapa metanogênica tem pH ótimo na faixa de 6.5-8.0. Além disso, podem ocorrer alterações no pH do meio pela presença de amônia (resultado da degradação de proteínas ou contaminante do resíduo orgânico) ou através da produção de ácidos orgânicos voláteis (VFA), gerados na etapa acidogênica. Este efeito de acidificação, em especial, reduz a atividade das arqueas metanogênicas e compromete o rendimento da DA. Também é possível que ocorra acumulação de VFA (acetato, propionato,

butirato, valerato, etc.) sem redução no pH devido à característica tampão do efluente. Nesta condição, a acumulação de VFA excede o nível aceitável de inibição e a metanogenese é afetada antes de ser observado uma redução do pH do meio.

BANKS E HUMPHREYS (1998) estudaram estratégias para atenuar a acidificação do meio pela acumulação de VFA, através do conceito de "*pH buffer capacity"* para D.A., que é a capacidade para atenuar as oscilações de pH agindo como um tampão. A estratégia apresentada é a realização da D.A. em dois estágios: o primeiro otimizado para a hidrólise e acidogênese, e o segundo estágio otimizado para a metanogênese. Uma recente estratégia de *pH buffer capacity* foi apresentada por NOVAIS e colaboradores (2018), onde esferas porosas impregnadas com componentes alcalinos são adicionadas ao biorreator. Como resultado, a ação tampão apresentou maior durabilidade que métodos convencionais de manutenção de pH.

2.6.3 Tempo de Retenção (HRT e SRT)

Três importantes parâmetros para dimensionamento e operação do biodigestor são: tempo de retenção hidráulica (HRT, do inglês *hydraulic retention time*), tempo de retenção de sólidos (SRT, do inglês *solid retention time*) e o fator de correlação (*b*) entre HRT e SRT. O HRT é o intervalo de tempo médio que o substrato líquido permanece no biodigestor. Já o SRT é o intervalo de tempo médio que os sólidos (biomassa) permanecem no biodigestor. Ambos são usualmente expressados em dias. O parâmetro *b* varia de acordo com o processo e condição do efluente a ser digerido, a faixa típica que o parâmetro assume é de 1 até 3. Os parâmetros estão diretamente correlacionados com o volume do biodigestor e a taxa de efluente adicionado ao biodigestor. Frequentemente, os biodigestores são operados como um reator CSTR, portanto, assume-se que o taxa volumétrica de entrada é igual à da saída, ou seja, volume reacional constante (MAO et al., 2015). As equações (2.10) a (2.12) apresentam o cálculo dos parâmetros.

$$HRT = \frac{V_u}{\dot{F}_{alim}} \qquad \text{Eq. (2.10)}$$

$$SRT = \frac{m_{sólidos}}{\dot{F}_{sólidos}} \qquad \text{Eq. (2.11)}$$

$$b = \frac{SRT}{HRT} \qquad \text{Eq. (2.12)}$$

Onde:

HRT: tempo de retenção hidráulica [dias]

V_u: volume útil do biodigestor [m³]

F_{alim}: taxa de alimentação de substrato por unidade de tempo [m³/d]

SRT: tempo de retenção de sólidos [dias]

$F_{sólidos}$: massa de sólidos por unidade de tempo [kg/d]

$m_{sólidos}$: massa de sólidos no biodigestor [kg]

b: razão, fator de correlação

SRT e HRT são iguais para sistemas em que a biomassa encontra-se suspensa e não há reciclo, sendo então, o fator *b* igual a 1. Sistemas com reciclo de biomassa, ou onde a biomassa é retida pela ação da gravidade, os valores podem ser consideravelmente discrepantes; nestes casos $b > 3$. Estes parâmetros foram extensamente estudados em planta piloto composta por um CSTR com reciclo, verificando-se que a manipulação dos tempos de retenção influenciam as concentrações de VFA, concentração de biomassa e os rendimentos de biogás (DE LA RUBIA et al., 2006). A Figura 2.7 elucida a influência do SRT nas principais variáveis da DA. NGES e LIU (2010) utilizam sistema composto por CSTR com reciclo alimentado com lodo de esgoto e microrganismos termofílicos. De maneira geral, a faixa de HRT e SRT ótimo é particularizado pela natureza do biorreator, substrato e microrganismos de cada sistema. Contudo, é sabido que baixos valores desses parâmetros ocasionam o *washout*[4] da biomassa em sistemas contínuos. Portanto, a taxa de remoção de biomassa não poderá exceder a taxa de crescimento do microrganismo (GERARDI, 2003). Por exemplo, BURKE e colaboradores (2001) utilizaram sistema de DA com resíduos agropecuários para estudar a condição de *washout*, concluindo que, para aquele sistema, o SRT crítico é na faixa de 9-10 dias. Já NGES e LIU (2010) reporta em seu estudo que o SRT crítico é entre 8-9 dias e MA e colaboradores (2013) reportaram *washout* de biomassa em função do HRT, observando a falha do biodigestor quando HRT < 2 dias (MA et al., 2013).

[4] *Washout* ocorre quando a taxa de diluição (t_d) do biorreator é superior à taxa de crescimento máxima (μ_{max}) do microrganismo. Dessa forma, a velocidade de remoção das células presente no biorreator é superior à velocidade de crescimento do microrganismo. Em termos de tempo de retenção hidráulica (HRT), a taxa de diluição (t_d) é o inverso do HRT.

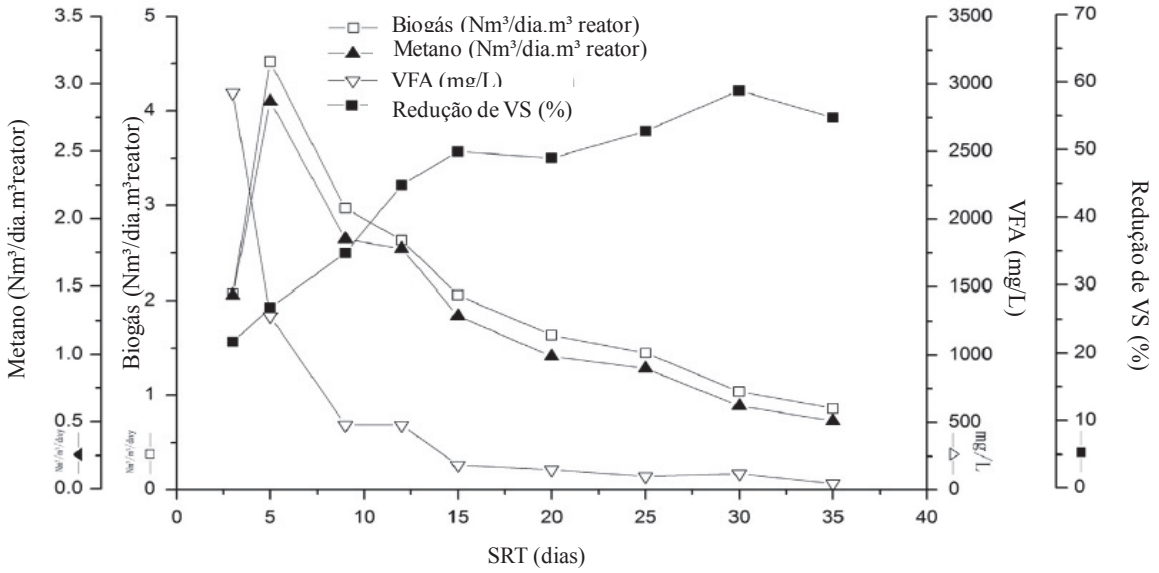


Figura 2.7 - STR crítico para sistema com resíduos agropecuário em termos de redução de sólidos voláteis (VS) sob condições mesofílicas. Adaptado de NGES e LIU, 2010.

2.6.4 Taxa de Carga Orgânica (OLR)

Apesar dos parâmetros HRT e SRT evidenciarem forte impacto nos resultados da D.A., é necessária a utilização de um quarto parâmetro que considere a concentração de substrato alimentado ao biodigestor. O parâmetro taxa de carga orgânica (OLR, do inglês *organic load rate*) representa o total de sólidos voláteis (VS) alimentado no biodigestor. O aumento de OLR também aumenta o rendimento de biogás. Contudo, a elevação excessiva da carga orgânica na alimentação (concentração de substrato) altera o equilíbrio da DA e gera inibição da atividade biológica configurando-se um valor limite para OLR. Adicionalmente, OLR excessivamente altos favorecem a etapa de hidrólise/acidogênese, elevando a concentração de VFA, que pode ocasionar a acidificação irreversível e consequente inibição dos metanogênicos (MAO et al., 2015).

$$OLR = \frac{C_{VS} \times \dot{F}_{alim}}{V_r} = \frac{C_{VS}}{HRT} \qquad \text{Eq. (2.13)}$$

Onde:

OLR:	*organic load rate* ou taxa de carga organica [kgVS/(d.m³)]
C_{vs}:	concentração de sólidos voláteis [kgVS/m³]
HRT:	tempo de retenção hidráulica [dias]
V_r:	volume útil do biodigestor [m³]
F_{alim}:	taxa de alimentação de substrato por unidade de tempo [m³/d]

2.7 MODELOS FENOMENOLÓGICOS PARA DIGESTÃO ANAERÓBIA

A modelagem baseada em correlações físicas, obtidas a partir de equações de conservação (balanços de massa e energia) e equações constitutivas (relações de equilíbrio de fases, equações cinéticas, entre outros) é denominada de modelagem fenomenológica, enquanto a modelagem obtida exclusivamente a partir de dados de entrada e saída de processos, é denominada modelagem empírica. Havendo modelos que combinam as duas abordagens, denomina-se modelagem híbrida (SEBORG et al., 2016). A modelagem de modelos fenomenológicos de processos físicos ou/e bioquímicos, permite simular o comportamento de unidades existentes ou auxiliar no projeto de novos arranjos e processos. Ainda, a simulação de processos permite analisar a resposta do sistema a variações nas variáveis de entrada, permitindo propor estratégias de controle e otimização dos processos, minimizando testes na operação da planta real (ARIS, 1999).

A representação matemática do processo biológico de digestão anaeróbia para fins de simulação do processo, é uma ferramenta fundamental para análise e projeto de processos, e estimativas de viabilidade econômica de projetos, além de permitir otimização de desempenho técnico e redução de impactos ambientais. Assim, a modelagem de processo é aplicável em qualquer fase do projeto, desde suas etapas conceituais até unidades em operação; permitindo promover a segurança de processos através de desenvolvimentos de sistemas de controle mais robustos; entre outras vantagens (OGUNNAIKE, 1996; CAMERON e HANGOS, 2001).

A digestão anaeróbia envolve diversos processos bioquímicos, aumentando a complexidade da simulação de processos. Alguns modelos matemáticos dinâmicos são reportados na literatura, que descrevem o processo de digestão anaeróbia, citando-se por exemplo: ANDREWS e GRAEF (1971); HILL e BARTH (1977); Hill modificado por HUSAIN (1998); ADM1 de BATSTONE e colaboradores (2002). Nesta seção, esses modelos são revistos, destacando-se suas principais características e o diagrama de blocos das etapas consideradas pelos autores. Descreve-se em maiores detalhes o modelo de Hill modificado, que foi recentemente utilizado por (HAUGEN, BAKKE e LIE, 2013) em plantas piloto de biogás, e é utilizado neste trabalho para a modelagem do biorreator.

2.7.1 Modelo de Andrews e Graef (1971)

O modelo pioneiro proposto por (ANDREWS e GRAEF, 1971) é focado na etapa

metanogênica a partir do acetato. Foi proposto que as reações da DA ocorrem em série pela ação de dois tipos de microrganismos: bactérias produtoras de ácidos e arqueas produtoras de metano. Andrews e colaboradores já compreendiam que o ácido acético e o ácido propiônico eram responsáveis por quase a totalidade dos VFA e entendiam as instabilidades causadas pelo acúmulo destes ácidos na produção de metano. Os autores propuseram a incorporação da inibição por VFA ao adicionar constante de inibição na taxa de crescimento (μ em d^{-1}). A abordagem do modelo é segmentada em 3 fases: fase biológica, fase líquida e fase gasosa. Na fase biológica, o modelo não particulariza o tipo de substrato ou microrganismo; portanto, apenas duas equações de balanço são utilizadas, uma para substrato e outra para microrganismo. A sensibilidade a reciclo/concentração de microrganismo e concentração de substrato foram testados pelos autores. Na fase líquida, o modelo restringe-se essencialmente ao balanço de CO_2 dissolvido. A fase gasosa é composta exclusivamente por CO_2 e CH_4. A Figura 2.8 apresenta o diagrama de blocos com as etapas do modelo.

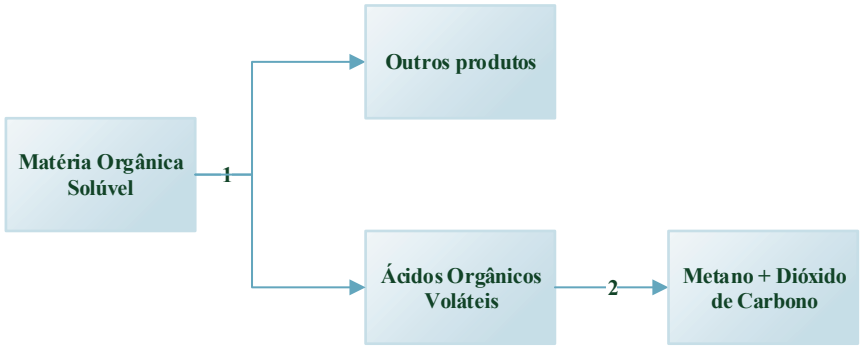


Figura 2.8 - Diagrama de blocos do modelo de Andrew. Bactérias produtoras de ácido (1); arqueas produtoras de metano (2). Adaptado de Andrew et al., 1971.

ANDREWS e GRAEF (1971) considera o acetato como o único substrato presente na digestão. Assume-se, ainda, mistura perfeita em um biorreator do tipo CSTR com constante de inibição (Ki). A Eq. (2.14) corresponde ao balanço de substrato, a Eq. (2.15) corresponde ao balanço dos microrganismos e a taxa de crescimento é descrita na Eq. (2.16). A nomenclatura utilizada nas equações é correspondente ao reportado por ANDREWS e GRAEF (1971).

$$\frac{dS_1}{dt} = (S_0 - S_1)\frac{F_{alim}}{V} - \frac{\mu}{Y} X_1 \qquad \text{Eq. (2.14)}$$

$$\frac{dX_1}{dt} = (X_0 - X_1)\frac{F_{alim}}{V} + \mu X_1 \qquad \text{Eq. (2.15)}$$

$$\mu = \mu_m \frac{S}{\frac{K_S}{S} + \frac{S}{K_i} + 1} \qquad \text{Eq. (2.16)}$$

Onde:

S = concentração de substratos [mols/L]

X = concentração de microrganismos [mols/L]

V = volume útil do reator [L]

F_{alim} = vazão de efluente líquido [L/d]

μ = taxa específica de crescimento de microrganismos [d^{-1}];

μ_m = máxima taxa específica de crescimento de microrganismos [d^{-1}];

Ks = constante de saturação [mols/L];

Ki = constante de inibição [mols/L];

0 = índice para indicar entrada;

1 = índice para indicar saída.

2.7.2 Modelo de Hill e Barth (1977)

O modelo proposto por (HILL e BARTH, 1977) apresenta maior complexidade do que o de ANDREWS e GRAEF (1971). Dois grupos de microrganismos são abordados: acidogênicos e metanogênicos. É incluída a etapa de hidrólise realizada pelas bactérias acidogênicas, que converte matéria orgânica insolúvel em compostos orgânicos solúveis pela ação extracelular de enzimas hidrolíticas. As arqueas metanogênicas foram consideradas como incapazes de realizar a hidrólise. Assim como no modelo de Andrews e Graef, a inibição por VFA foi considerada na taxa de crescimentos dos microrganismos, e foi incluída a inibição por NH_4^+ produzida na etapa de hidrólise para as bactérias metanogênicas. Oito equações de balanço são utilizadas para descrever o processo de D.A. Neste modelo, a etapa de hidrólise é considerada, entretanto, a acidogênese e a acetogênese são representadas em uma única etapa. O modelo tem como variáveis resposta (saídas preditas), as vazões de CH_4, CO_2 e NH_3 produzido. O biogás é dado pela soma dos três componentes. A Figura 2.9 apresenta o diagrama de blocos do modelo proposto.

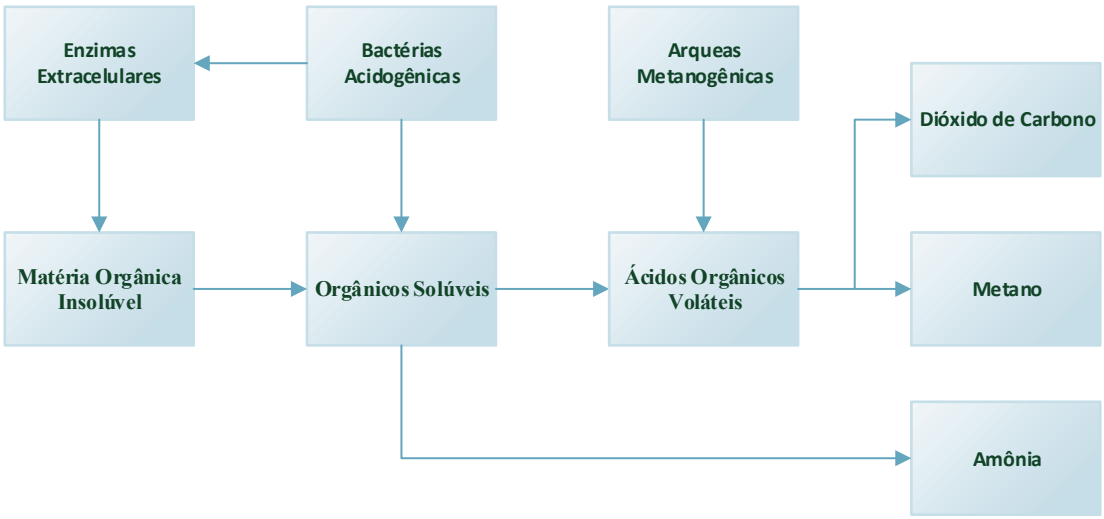


Figura 2.9 - Diagrama de blocos do modelo de Hill e Barth (1977). Adaptado de Hill e Barth (1977)

O modelo considera balanços de substratos para o material volátil particulado (VM) Eq. (2.17), orgânicos solúveis (SO) Eq. (2.18) e ácidos voláteis (VA) Eq. (2.19). Diferentemente de Andrew, são consideradas duas classes de bactérias com balanços correspondentes aos microrganismos, um para bactérias acidogênicas Eq. (2.20) e um para metanogênicas Eq. (2.21). A nomenclatura utilizada nas equações é correspondente ao reportado por HILL e BARTH (1977).

$$\frac{dVM}{dt} = (VM_{in})\frac{F}{V} - \frac{\mu}{YXSO*CF}\,X \qquad \text{Eq. (2.17)}$$

$$\frac{dSO}{dt} = (SO_{in} - SO)\frac{F}{V} - \frac{\mu*X}{YXS} + \frac{\mu*X}{YXSO} \qquad \text{Eq. (2.18)}$$

$$\frac{dVA}{dt} = (VA_{in} - VA)\frac{F}{V} - \frac{\mu 1}{YXS1}\,X_1 + \mu XYHAX \qquad \text{Eq. (2.19)}$$

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - K_D X \qquad \text{Eq. (2.20)}$$

$$\frac{dX1}{dt} = \mu 1X1 - K_{D1}X1 \qquad \text{Eq. (2.20)}$$

$$\mu = \frac{\mu_m}{\frac{K_S}{VA} + \frac{VA}{K_i a} + \frac{NH3}{K_i 2} + 1} \qquad \text{Eq. (2.21)}$$

Onde:

VM = concentração de material volátil não solúvel [mg/L]

SO = concentração de orgânicos solúveis [mg/L]

VA = concentração de ácidos voláteis [mg/L]

V = volume útil do reator [L]

F = vazão de efluente líquido [L/d]

X = concentração de microrganismos [mols/L]

μ = taxa específica de crescimento de microrganismos [d^{-1}];

μ_m = taxa específica de crescimento máximo [d^{-1}];

YXSO = coeficiente de rendimento orgânicos solúveis [mg organismo/mg SO]

YXS = coeficiente de rendimento de acidogênicas [mg organismo/mg SO]

YHAX = coeficiente de rendimento VA a partir de SO [mg VA/mg SO]

YXS1 = coeficiente de rendimento de metanogênicas [mg organismo/mg VA]

CF = coeficiente de conversão de VM em SO [mg SO/mg VM]

Ks = constante de saturação [mg/L]

Kia = constante de inibição de ácidos [mg/L]

Ki2 = constante de inibição de amônia [mg/L]

1 = índice para indicar metanogênicas;

in = índice para indicar entrada.

2.7.3 Modelo de Hill modificado por Husain (1998)

O modelo proposto por (HUSAIN, 1998) é uma adaptação do modelo simplificado proposto por Hill (1983) aplicado apenas à biodigestão de efluente de aves, bovinos, suínos, ou resíduos da indústria de produtos lácteos. As modificações foram aplicadas para simplificar o modelo, aplicando-se a substratos com alto grau de biodegrabilidade, são:

- Etapa de hidrólise é desconsiderada;
- Equação simplificada de Monod para representar a taxa de crescimento;
- Taxas de morte de microrganismos foram assumidas constantes;
- Assume-se que a razão SRT/HRT>2.0;
- A caracterização do substrato é dada por dois parâmetros: constante de biodegradabilidade (B0) e a constante de acidez (Af), assim, o modelo assume que o substrato (sólidos voláteis) contém uma parte biodegradável (BVS) e o conteúdo ácido (VFA), e são necessários apenas esses dois parâmetros para caracterizar o efluente.

A Figura 2.10 apresenta o diagrama de blocos do modelo simplificado proposto.

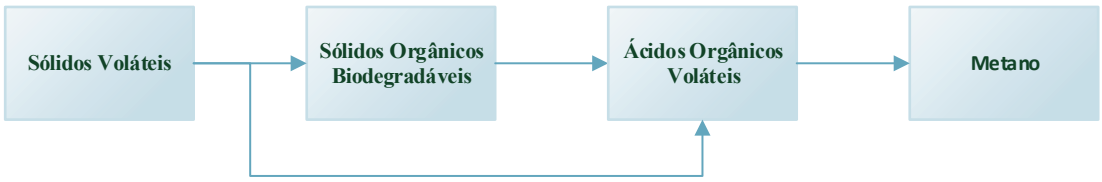


Figura 2.10 - Diagrama de blocos do modelo simplificado de Hill (1983) e modificado por Husain (1998).

O substrato é especificado através de duas equações Eq. (2.22) e Eq. (2.23). Duas equações de balanço descrevem o substrato que estão sob a forma de sólidos voláteis biodegradáveis (SVB) Eq. (2.24) e ácidos orgânicos voláteis (VFA) Eq, (2.25). É feito o balanço para bactérias acidogênicas e metanogênicas, Eq. (2.26) e Eq. (2.27). A estimativa de gás metano é feita na Eq. (2.28). As taxas de crescimento são descritas utilizando a equação de Monod sem inibição Eq. (2.29) a Eq. (2.31). O balanço de energia é feito considerando um reator do tipo CSTR, com fluido incompressível em regime estacionário com propriedades de densidade e capacidade calorifica da água Eq. (2.32).

$$S_{SVBin} = B_0 * S_{SVin} \quad \text{Eq. (2.22)}$$

$$S_{VFAin} = A_f * S_{SVBin} \quad \text{Eq. (2.23)}$$

$$\frac{dS_{SVB}}{dt} = (S_{SVBin} - S_{SVB})\frac{F_{alim}}{V} - \mu k_1 X_{acid} \quad \text{Eq. (2.24)}$$

$$\frac{dS_{VFA}}{dt} = (S_{VFAin} - S_{VFA})\frac{F_{alim}}{V} + \mu k_2 X_{acid} - \mu_C k_3 X_{met} \quad \text{Eq. (2.25)}$$

$$\frac{dX_{acid}}{dt} = \left(\mu - K_d - \frac{F_{alim}/b}{V}\right) X_{acid} \quad \text{Eq. (2.26)}$$

$$\frac{dX_{met}}{dt} = \left(\mu_C - K_{dc} - \frac{F_{alim}/b}{V}\right) X_{met} \quad \text{Eq. (2.27)}$$

$$F_{met} = V \mu_C k_5 X_{met} \quad \text{Eq. (2.28)}$$

$$\mu = \mu_m \frac{S_{SVB}}{K_s + S_{SVB}} \quad \text{Eq. (2.29)}$$

$$\mu_C = \mu_{mc} \frac{S_{VFA}}{K_{sc} + S_{VFA}} \quad \text{Eq. (2.30)}$$

$$\mu_m(T_{reac}) = \mu_{mc}(T_{reac}) = 0.013 T_{reac} - 0.129 \quad \text{Eq. (2.31)}$$

$$\frac{dT_{reac}}{dt} = \frac{1}{\rho c_p V}\left(Q_{term} + c_p F_{alim}(T_{alim} - T_{reac}) + UA(T_{amb} - T_{reac})\right) \quad \text{Eq. (2.32)}$$

Onde:

F_{alim} = vazão de alimentação [L/d];

V = volume útil do biorreator [L];

b = fator de conversão de HRT em SRT;

S_{SVB} = concentração de sólidos voláteis biodegradáveis [g SVB/L];

S_{VFA} = concentração de ácidos orgânicos voláteis [g VFA/L];

S_{SV} = concentração de sólidos orgânicos voláteis [g SV/L];

B_0 = constante de biodegradabilidade [(g SVB/L)/(g SV/L)];

A_f = constante de acidez [(g AGV/L)/(g SVB/L)];

X_{acid} = concentração de bactérias acidogênicas [g/L];

X_{met} = concentração de arqueas metanogênicas [g/L];

F_{met} = vazão de metano [LCH_4/d];

k1 = constante de rendimento [g SVB/(g acidogênicas/L)];

k2 = constante de rendimento [g VFA/(g acidogênicas/L)];

k3 = constante de rendimento [g VFA/(g metanogênicas/L)]

k5 = constante de rendimento [L/g metanogênicas];

Kd = taxa de morte das bactérias acidogênicas [d^{-1}]

Kdc = taxa de morte das arqueas metanogênicas [d^{-1}]

Ks = constante de velocidade especifica de Monod [gSVB/L]

Ksc = constante de velocidade especifica de Monod [gVFA/L]

T_{reac} = temperatura do reator [°C];

T_{amb} = temperatura ambiente [°C];

Q = carga térmica inserida no bioreator [J/d];

Cp = capacidade calorífica [J/kg.K];

ρ = densidade do líquido [kg/m³];

UA = coeficiente global de troca térmica e área de troca [J/d.K];

2.7.4 Modelo ADM1 (2002)

O modelo proposto por BATSTONE e colaboradores (2002) conhecido como ADM1 (*Anaerobic Digestion Model No.1*), foi uma iniciativa da IWA (*International Water Association*) com a intenção de padronizar a simulação de sistemas anaeróbios, por meio de um modelo genérico. É um dos mais complexos descritos na literatura, com 35 variáveis de estado e aproximadamente 100 parâmetros. Este modelo contém duas etapas extracelulares: desintegração do complexo orgânico e hidrólise de componentes orgânicos. São

considerados sete grupos de bactérias: dois grupos acidogênicos, três acetogênicos e dois metanogênicos. Inclui diversos fatores de inibição, como: por pH em todos os grupos, inibição por amônia para as metanogênicas, inibição por hidrogênio para as acetogênicas, inibição por falta de nitrogênio e pela competição de valerato e butirato. Existem ainda equações físico-químicas que abordam a associação-dissociação de íons e a transferência de massa gás-liquido. Como resultado, o modelo prevê as vazões de CH_4, CO_2 e H_2. A Figura 2.11 apresenta o diagrama de blocos do modelo ADM1 e as equações do modelo são apresentadas nesta seção e as tabelas contendo os fatores para estruturação das equações estão no **APÊNDICE A**.

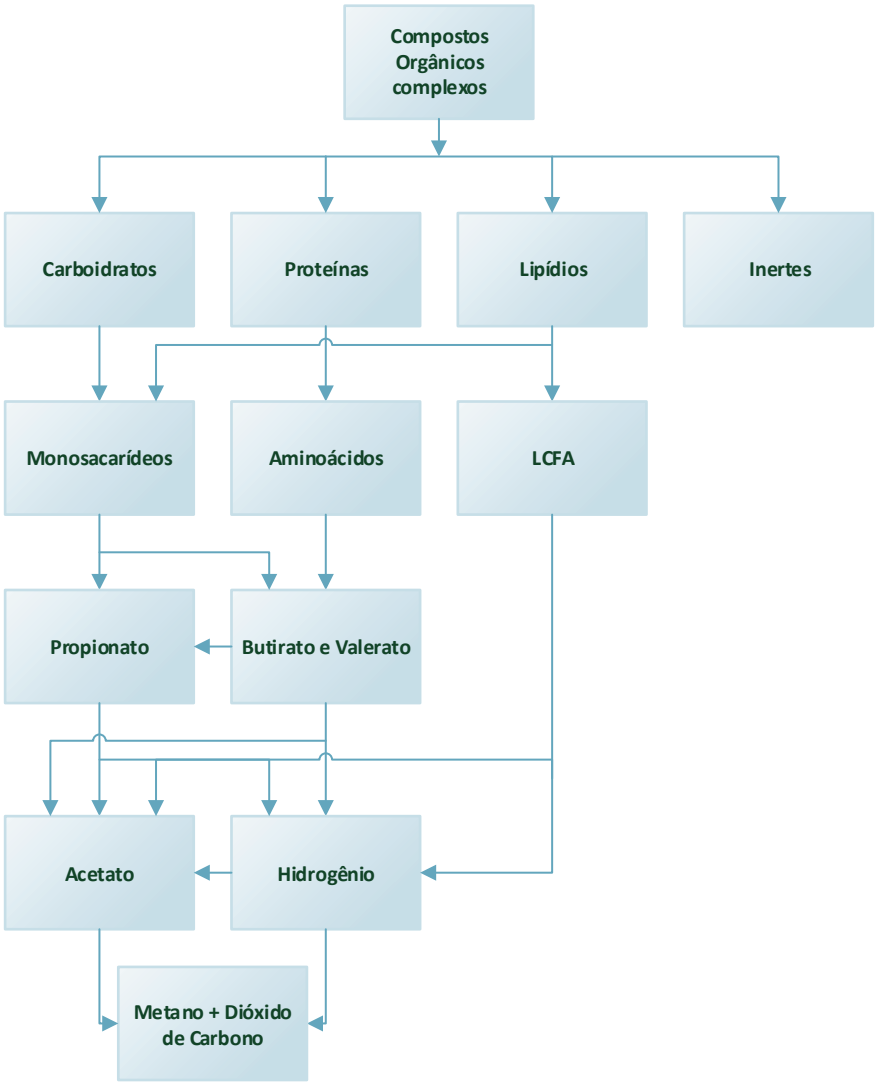


Figura 2.11 - Diagrama de blocos do modelo ADM1. Adaptado de Batstone e colaboradores, (2002).

O modelo ADM1 contém 29 variáveis de estado compreendidas para a fase líquida, equilíbrio líquido-gás e funções de inibição. As equações de balanço de massa para cada componente na fase líquida são descritas da seguinte forma:

$$\frac{dS_{liq,i}}{dt} = \frac{(q_0 S_0 - q_1 S_1)}{V_{liq}} + \sum_{j=1:19} \rho_j \upsilon_{i,j} \qquad \text{Eq. (2.33)}$$

Onde:

S = concentração de substrato [kg.DQO/m³]

q = vazão de efluente líquido [m³/d]

Vliq = volume de efluente líquido [m³]

ρj = equação de taxa cinética [kg.DQO/m³]

υj = coeficiente de taxa bioquímica

0 = índice para indicar entrada;

1 = índice para indicar saída;

O termo somatório das taxas ($\sum_{j=1:19} \rho_j \upsilon_{i,j}$) são determinados para cada processo, isto é, cada etapa (desintegração, hidrólise, consumo de açúcares, etc..) e por componente. O termo ρ_j encontram-se na última coluna da Tabela A.1 e A2 no 0**APÊNDICES**, já o termo $\upsilon_{i,j}$ é determinada pela interseção entre o processo e o componente na tabela.

Para os componentes na fase gasosa, a transferência de massa líquido-gás é descrita através da equação:

$$\rho_{T,j} = k_L a[S_{liq,j} - K_{h,j}\, p_{gas,j}] \qquad \text{Eq. (2.34)}$$

Onde:

$k_L a$ = coeficiente de transferência de massa [d^{-1}]

$K_{h,j}$ = constante de Henry para cada componente [$Mbar^{-1}$]

$p_{gas,j}$ = pressão parcial de cada componente [bar]

A vazão de gás é determinada através da soma de cada componente das transferências de massa para a fase gás, corrigida pela pressão parcial de vapor de água à temperatura de operação do biorreator.

$$q_{T,gás} = \frac{RTV_{liq}}{P_{gás} - p_{gás,H_2O}} [\rho_{T,H_2} + \rho_{T,CH_4} + \rho_{T,CO_2}] \qquad \text{Eq. (2.35)}$$

As funções de inibição consideradas no modelo são decorrentes da presença de hidrogênio em bactérias acetogênicas, presença de amônia em arqueas metanogênicas e a inibição por pH em todos os grupos de bactérias. A função de inibição do pH, em especial,

apresenta-se de duas maneiras. A primeira forma considera os limites inferiores e superiores de pH (pHLL e pHUL) e os microrganismos são inibidos em 50%. Dessa forma se o pHLL = 6,5 e pHUL = 7,5, então o pH ótimo é de 7,0. A segunda função considera que ocorre a completa inibição quando o pH < pHLL. As funções de inibição consideradas no modelo ADM1 são descritas na Tabela 2.4.

Tabela 2.4 – Funções de inibição do modelo ADM 1. Adaptado de Batstone et al. (2002)

Descrição	Equações	Usado para
Não competitiva	$I = \frac{1}{1+S_I/K_I}$	Inibição por hidrogênio Inibição por Amônia
Limitação por Substrato	$I = \frac{S_I}{S_I+K_I}$	Nitrogênio
Empírico	$I = \frac{1+2\times10^{0.5(pH_{LL}-pH_{UL})}}{1+10^{(ph-pH_{UL})}+10^{(pH_{LL}-pH)}}$	Inibição de pH com pH_{LL} e pH_{UL}
	$I = \exp\left(-3\left(\frac{pH-pH_{UL}}{pH_{UL}-pH_{LL}}\right)^2\right)\Big\vert_{pH<pH_{UL}}$ $I = 1\Big\vert_{pH<pH_{UL}}$	Inibição de pH com apenas pH_{LL}

2.8 MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

A plataforma de modelagem MATLAB® (The MathWorks Inc.) é amplamente difundida para engenheiros e cientistas. Baseada em matrizes, permitindo codificar algoritmos para análise de dados, processamento de sinal/medições, sistemas de controle, bioinformática e até processamento de imagem e vídeo (MATHWORKS, 2019). Outras linguagens também possibilitam a codificação de modelos para computação cientifica, como FORTRAN, acrônimo de *IBM Mathematical Formula Translation System*, que foi desenvolvida na década de 50 e é ainda a linguagem com melhor desempenho em tempo de processamento (ARUOBA e FERNÁNDEZ-VILLAVERDE, 2015). As linguagens Python, R, Julia, entre outros, também são úteis para a programação avançada e diferem basicamente na sintaxe e tempo de processamento.

Para promover a simulação de processos químicos e petroquímicos, existem "produtos" (Simuladores de processos), a exemplo do Aspen Plus da AspenTech Inc. O Aspen HYSYS também é uma plataforma de simulação direcionada à área de petróleo, gás e refinarias (ASPENTECH, 2016). O CHEMCAD, da Chemstations, é outro produto com abrangência de bibliotecas de modelos (CHEMSTATIONS, 2018). Um *software* em

desenvolvimento pela UFRGS e UFRJ é o EMSO (*Enviroment for Modelling, Simulation and Optimisation*), utilizado principalmente nas instituições de educação por possuir código fonte livre (*open source*), além de ser caracterizado por possibilitar a codificação dos modelos de usuário e gratuito quando usado sem fins lucrativos (SOARES e SECCHI, 2003).

As plataformas de simulação de processos são focadas em processos químicos e petroquímicos; entretanto, a biblioteca de modelos disponíveis contém uma lacuna no que se refere a bioprocessos em geral, em especial modelos de digestão anaeróbia. Essa limitação é contornada através de inserção de módulos desenvolvidos pelos usuários, que funcionam como extensões dos simuladores. As extensões, após codificadas, podem ser anexadas à biblioteca padrão do simulador e serem utilizados junto aos modelos pré-definidos.

SOUZA (2018) codificou uma extensão para inserir a operação unitária de uma contactora gás-líquido de membrana (CGLM) para absorção de CO_2 da corrente de gás natural, a extensão foi incluída ao simulador Aspen HYSYS 8.8. Já ARINELLI (2015) codificou em Visual Basic outras extensões para representar um separador supersônico e um sistema de permeação em membranas, também incluída ao simulador Aspen HYSYS. RAJENDRAN e colaboradores (2014) desenvolveram uma extensão para representar a digestão anaeróbia no AspenPlus 7.3, entretanto, os códigos da extensão não são disponibilizados.

2.9 ANÁLISE ECONÔMICA DE PROCESSOS

A análise econômica de processos químicos é uma importante etapa na avaliação de projetos. Os métodos para estimativa de custo de capital de investimento vão além da soma dos custos de compra dos equipamentos, sendo inserido nas estimativas custos de instalação, da pintura, instrumentação e outros. FENG e RANGAIAH (2011) estimam que os custos de compra do equipamento são aproximadamente 1/3 do total do investimento.

O método mais convencional para determinação de custo de uma planta petroquímica é o *Lang Factor*. Este método é baseado na soma dos custos de compra dos equipamentos multiplicados por fatores de custo, que variam de acordo com o tipo de processo. Os fatores utilizados neste método variam de 3,10 a 4,74, sendo o menor para processos exclusivamente com sólidos e o maior para processos exclusivamente com fluidos (TURTON, 2012). O custo de investimento é determinado pela Eq. (2.36) e os fator utilizados são apresentados na Tabela 2.5.

$$C_{TM} = F_{Lang} \sum_{i=1}^{n} C_{p,i} \quad \text{Eq. (2.36)}$$

Onde:

C_{TM} = Custo de Investimento Total da planta

F_{Lang} = Fator de Lang

$C_{p,i}$ = Custo de compra dos equipamentos

n = Número de equipamentos individuais

Tabela 2.5 - Fatores de Lang para plantas petroquímicas, Turton (2012).

Tipos de Plantas	*Lang Factor (F_{Lang})*
Processamento de Fluidos	*4,74*
Processamento de Sólidos	*3,10*
Processamento de Fluidos e Sólidos	*3,63*

Outra técnica para estimativa de custo é denominada Método Modular. Este método, indicado para construção de novas unidades, detalha os custos de investimento em três categorias: custos diretos; custos indiretos; e contingências e impostos. Os custos diretos abordam, além da compra dos equipamentos, as tubulações, instrumentação e pintura. Os custos indiretos abordam os gastos com engenharia, seguro e equipamento/construções não-previstos (*overhead*). A soma dos custos diretos e indiretos são denominados custos *bare module* ou custos do módulo primário. O custo total da planta inclui ainda os fatores de contingência e impostos (TURTON, 2012). O custo total da planta é determinado pela Eq. (2.37).

$$C_{TM} = C_{DC} + C_{IDC} + C_{cont} + C_{fee} \quad \text{Eq. (2.37)}$$

Onde:

C_{TM} = Custo de investimento total da planta;

C_{DC} = Custos diretos;

C_{IDC} = Custos indiretos;

C_{cont} = Contingências;

C_{fee} = Impostos e taxas

Existem programas que realizam a estimativa de custo da planta petroquímica, como o CapCost. Este programa é codificado em Visual Basic e utiliza o método modular proposto em Turton (2012). O CapCost conta com um banco de dados de cotações de equipamentos

realizadas em 2001, a atualização das cotações de equipamento é realizada através dos índices CEPCI (*The Chemical Engineering Plant Cost Index*) (TURTON, 2012).

Já a AspenTech Inc. disponibiliza o software *Aspen Process Economic Analyzer* (AspenPEA), que permite a integração da avaliação econômica com a simulação de processos realizada no ambiente HYSYS ou AspenPlus. O *software* utiliza as informações contidas nos fluxogramas de simulação, como vazão, temperatura, pressão, etc., para dimensionar os equipamentos e o material sugerido para os equipamentos de acordo com a condição do processo. Também é possível administrar o fator de localização da planta, o tipo de complexidade do processo (que impactará nas contingências) e o grau de robustez nos sistemas de instrumentação e controle dos equipamentos. Além disso, AspenPEA conta com a atualização de cotações no banco de dados periodicamente a cada três meses (ASPENTECH, 2016).

2.10 PESQUISA DESENVOLVIDA PARA O CENÁRIO APRESENTADO

Identifica-se no contexto da literatura revisada que a simulação de processos é uma ferramenta necessária para apoio de sistemas de produção de biogás, e que os modelos de digestão anaeróbia ainda não estão disponíveis nas bibliotecas dos simuladores comerciais. Por outro lado, existem os modelos propostos por ANDREWS e GRAEF (1973), HILL (1983) e BASTSTONE e colaboradores (2002) que descrevem exclusivamente os biodigestores, sem integração com as operações a montante e jusante, consideração necessária para avaliação econômica do sistema de produção de biogás. A pesquisa visa abordar esta lacuna, com o desenvolvimento, validação e uso de modelo fenomenológico para a D.A. no ambiente de simulação comercial AspenPlus. Seleciona-se para tal o modelo de Hill (1983) simplificado por HAUGEN (1998).

3- METODOLOGIA

São 04 (quatro) etapas metodológicas na sequência à revisão bibliográfica apresentada: (1) Seleção, validação e análise dinâmica do modelo de biodigestor selecionado, segundo a planta piloto de Haugen et al.(2013), e a análise de sensibilidade a parâmetros do modelo; (2) Proposição de fluxograma de processo de D.A., compreendendo desde a digestão de resíduo agroindustrial à geração de bioeletricidade; (3) Avaliação de desempenho do processo e (4) avaliação econômica com a estimativa de investimento de capital (FCI) e custo de manufatura (COM) da unidade proposta. A Figura 3.1 apresenta em diagrama de blocos da estrutura e conceitos utilizados para o desenvolvimento do trabalho.

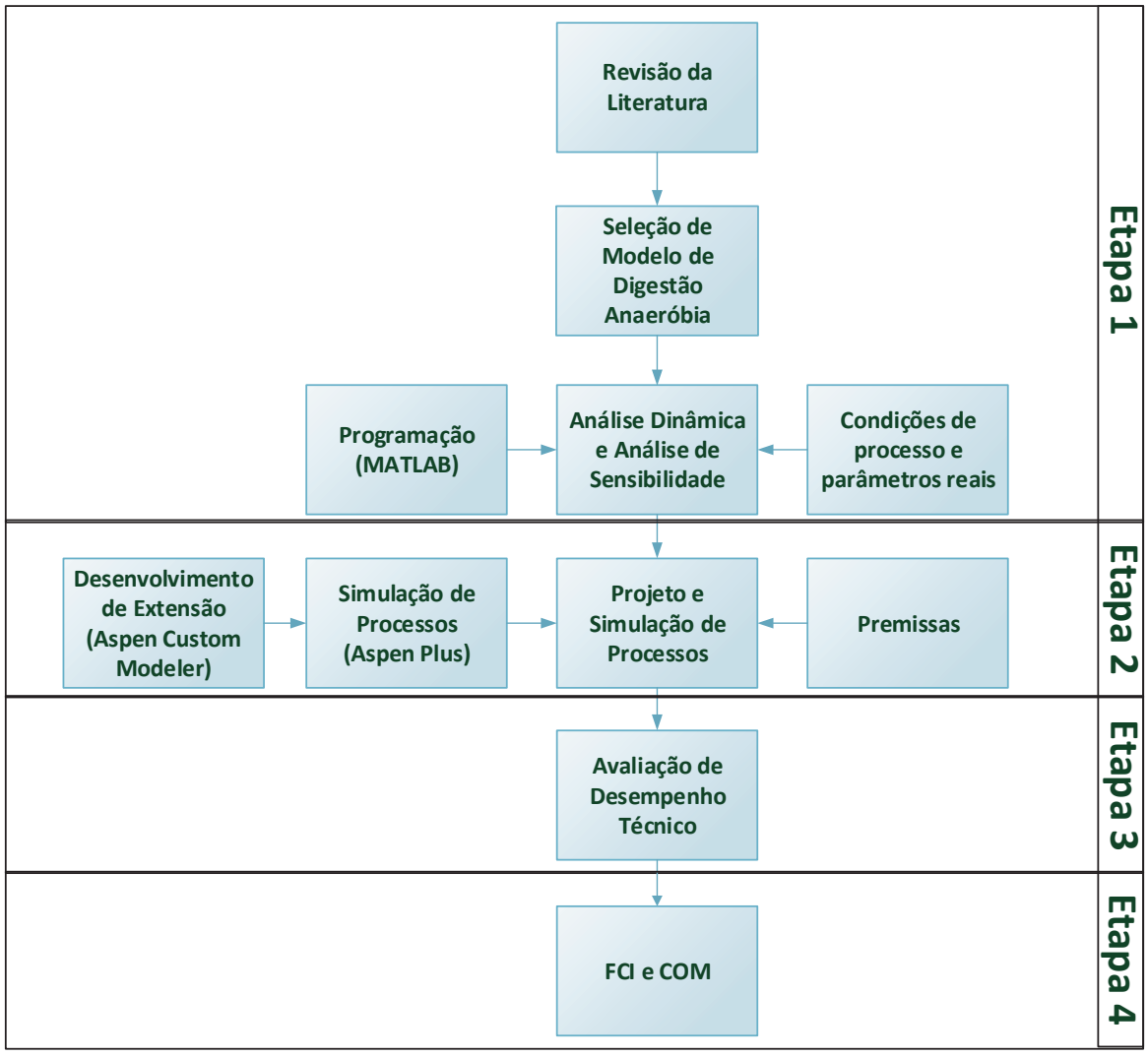


Figura 3.1 - Diagrama de blocos da metodologia utilizada.

3.1 ETAPA 1 – Desenvolvimento de Modelo em Ambiente MATLAB

A etapa 1 é iniciada com a revisão da literatura de digestão anaeróbia, sobretudo os modelos que descrevem o processo de digestão da matéria orgânica. De posse dos modelos consolidados de DA, é escolhido o modelo de Hill modificado. Este modelo considera substratos com alto índice de biodegrabilidade, como efluente com matéria orgânica solúvel de aves, suínos, e bovinos criados em espaço confinado. Recentemente, Haugen et al. (2013) utilizou o modelo em planta piloto de produção de biogás na Noruega. Os autores disponibilizam as condições operacionais e parâmetros que foram ajustados para o processo. Portanto, a escolha deste modelo é conveniente, dada a larga disponibilidade de matéria-prima deste tipo no Brasil, a confiabilidade já comprovada do modelo para reproduzir a produção de biogás, disponibilidade de dados como parâmetros e condições operacionais reais de planta e simplicidade matemática frente outros modelos complexos.

Em ambiente MATLAB, onde o modelo de biodigestão é codificado, o estudo dinâmico do modelo é desenvolvido utilizando o solver de equações diferenciais ODE45. Esta etapa contempla, ainda, a análise de sensibilidade a parâmetros do modelo das seguintes variáveis respostas: concentração de sólidos voláteis biodegradáveis (*SVB*), concentração de ácidos graxos voláteis (*VFA*) e vazão de metano (*Fmet*). Para as respostas mais sensíveis, ainda na Etapa 1, é desenvolvida análise de plano de fases em relação aos substratos e temperatura de reação. Nesta fase, as condições de processo e as características do resíduo são replicadas das informações reportadas por HAUGEN et al. (2013).

3.1.1 Análise Dinâmica do Modelo de Hill Modificado

As equações do modelo de biodigestão, assim como as considerações para os valores adotados para cada parâmetro do modelo, estão descritos nos artigos base para desenvolvimento deste trabalho (HAUGEN et al. (2013), HUSAIN (1998) e HILL (1983)). Adota-se no trabalho o modelo de Hill modificado cujas equações são descritas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Modelo de Hill modificado

Descrição	*Equação*
Definição do resíduo que pode servir de substrato	$S_{SVBin} = B_0 * S_{SVin}$
Definição da porção de material biodegradável que se apresenta inicialmente na forma ácida	$S_{VFAin} = A_f * S_{SVBin}$
Balanço de massa para os sólidos voláteis biodegradáveis	$\frac{dS_{SVB}}{dt} = (S_{SVBin} - S_{SVB})\frac{F_{alim}}{V} - \mu k_1 X_{acid}$
Balanço de massa para VFA	$\frac{dS_{VFA}}{dt} = (S_{VFAin} - S_{VFA})\frac{F_{alim}}{V} + \mu k_2 X_{acid} - \mu_C k_3 X_{met}$
Balanço de massa para arqueas acidogênicas	$\frac{dX_{acid}}{dt} = \left(\mu - K_d - \frac{F_{alim}/b}{V}\right) X_{acid}$
Balanço de massa para arqueas metanogênicas	$\frac{dX_{met}}{dt} = \left(\mu_C - K_{dc} - \frac{F_{alim}/b}{V}\right) X_{met}$
Equação para produção de gás metano	$F_{met} = V \mu_C k_5 X_{met}$
Taxas de crescimento	$\mu = \mu_m \frac{S_{SVB}}{K_s + S_{SVB}}$ $\mu_C = \mu_{mc} \frac{S_{AGV}}{K_{sc} + S_{AGV}}$
Taxa máxima de crescimento	$\mu_m(T_{reac}) = \mu_{mc}(T_{reac}) = 0.013 T_{reac} - 0.129$
Balanço de Energia	$\frac{dT_{reac}}{dt} = \frac{1}{\rho c_p V}(Q_{term} + c_p F_{alim}(T_{alim} - T_{reac}) + UA(T_{amb} - T_{reac}))$

O trabalho não envolve testes experimentais em laboratório. Assim, os valores dos

parâmetros e condições operacionais são obtidas a partir das informações disponíveis em (HILL, 1983; HUSAIN, 1998; BATSTONE et al., 2002; HAUGEN, BAKKE e LIE, 2013). A Tabela 3.2 elenca os parâmetros utilizados e a respectiva fonte. O volume (V) e a biodegrabilidade do efluente (B_0), particularmente, na Etapa 1 são definidos de acordo com o projeto do biodigestor e resíduo utilizado por Haugen et al. (2013) (250 litros e 25% de biodegrabilidade). Porém, nas etapas subsequentes, estes parâmetros são modificados conforme desenvolvimentos do trabalho.

Tabela 3.2 - Parâmetros e Condições Operacionais

Parâmetro	*Valor*	*Unidades (*)*	*Fonte*
V	*250*	*L*	*Haugen et al. (2013)*
B0	*0,25*	*(g SVB/L)/(g SV/L)*	*Haugen et al. (2013)*
Af	*0,69*	*(g VFA/L)/(g SVB/L)*	*Haugen et al. (2013)*
b	*2,90*	*-*	*Haugen et al. (2013)*
k1	*3,89*	*g SVB/(g acidogênica/L)*	*Haugen et al. (2013)*
k2	*1,76*	*g VFA/(g acidogênica/L)*	*Haugen et al. (2013)*
k3	*31,7*	*g VFA/(g metanogênicas/L)*	*Hill (1983)*
k5	*26,3*	*L/g metanogênicas*	*Haugen et al. (2013)*
Ks	*15,5*	*g SVB/L*	*Haugen et al. (2013)*
Ksc	*3,00*	*g VFA/L*	*Husain (1998)*
Kd	*0,02*	*d^{-1}*	*Batstone et al. (2002)*
Kdc	*0,02*	*d^{-1}*	*Batstone et al. (2002)*
Cp	*4200*	*J/(kg.K)*	*Haugen et al. (2013)*
P	*1000*	*kg/m^3*	*Haugen et al. (2013)*
Qterm	*1.96x105*	*(J/d).K*	*Haugen et al. (2013)*

(*) SVB = sólidos voláteis biodegradáveis; SV= sólidos voláteis; VFA = ácidos orgânicos voláteis

O modelo simplificado de Hill é focado na produção de CH_4, não considerando CO_2, H_2 e outros gases presentes no biogás. Entretanto, Haugen et al. (2013) identificaram uma composição aproximada de 70%CH_4, 20%CO_2 e 10% dos demais gases. Para o desenvolvimento da Etapa 1 é apenas considerado como resultado da D.A. o CH_4; nas demais etapas é discutida a composição adotada para o biogás.

Dentro das rotinas de resolução de equações diferenciais ordinárias disponíveis no MATLAB, é utilizada a função *ode45*, que utiliza o método Runge-Kutta. O estado inicial está baseado em condição de estado estacionário do biodigestor obtida por Haugen et al. (2013) após 66 dias de operação, a saber: $S_{bvs:}$ 5,40 gS_{BVS}/L; S_{vfa} =1,10 gS_{VFA}/L; X_{acid}= 1,32

gXacid /L; X_{meth}: 0,36 gXmeth./L; F_{metano} = 198 L_{CH4}/dia.

O biorreator, de 250 litros, tem forma cilíndrica com raio de 0,4 metros e altura de 0,5 metros. O resíduo é alimentado no biorreator a uma taxa de 45 L/dia e contém 30,2 g SV/L (sólidos voláteis) com 25% de biodegrabilidade (B_0=0,25) e teor de ácidos que contém no resíduo é de 69% (e.g. Af=0,69). Dessa forma, os autores utilizam HRT de 5,55 dias e OLR de 5,44 $gSV.d^{-1}L^{-1}$. A temperatura da alimentação é de 25°C e a temperatura ambiente, considerada constante, em 25°C. Uma carga térmica é inserida no biodigestor para manter a temperatura constante em 36°C. No trabalho original de Haugen et al. (2013) as condições de temperatura ambiente e alimentação eram muito distintas (13°C e 18°C) do considerado neste trabalho. Como consequência, a demanda térmica para manter o sistema em condição ideal para bactérias mesofílicas é adaptada de 17.2MJ/dia para 4.7MJ/dia.

A validação do modelo é realizada com os resultados experimentais disponíveis no trabalho de Haugen et al. (2013), a saber: sólidos orgânicos voláteis biodegradáveis (S_{BVS}) e ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}) - concentração na alimentação do biodigestor - e vazão de gás metano (CH_4). Não há dados experimentais relativos à concentração de bactérias. Ainda na validação, são simuladas diferentes temperaturas ambiente, a fim de identificar sua influência no desempenho do biodigestor.

Adicionalmente, são analisadas as respostas do modelo para oscilações da temperatura do ambiente. É simulado um padrão oscilatório para representar a amplitude térmica. A análise é feita através do percentual de desvio das variáveis de estado.

3.1.2 Análise de Sensibilidade e Plano de Fases

Para avaliar os parâmetros do modelo de D.A. que mais impactam as suas respostas, realiza-se a análise de sensibilidade. Na análise, perturbações na faixa de +50% a -50% foram avaliadas em cada um dos parâmetros descritos na Tabela 3.3. Os efeitos dessas perturbações são avaliados em cinco variáveis de estado do modelo: concentração de sólidos voláteis biodegradáveis (S_{SVB}), concentração de ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}), concentração de arqueas acidogênicas (X_{acid}), concentração de arqueas metanogênicas (X_{met}) e vazão de metano produzido (F_{met}).

Tabela 3.3 - Parâmetros avaliados na análise de sensibilidade

Parâmetros (p)		***Variáveis (v)***			
		S_{SBVS}	S_{VFA}	X_{acid}	F_{met}
1	k_1	$S_{SBVS,k1}$	$S_{SVFA,k1}$	$S_{Xacid,k1}$	$S_{Fmet,k1}$
2	k_2	$S_{SBVS,k2}$	$S_{SVFA,k2}$	$S_{Xacid,k2}$	$S_{Fmet,k2}$
3	k_3	$S_{SBVS,k3}$	$S_{SVFA,k3}$	$S_{Xacid,k3}$	$S_{Fmet,k3}$

Parâmetros (p)		Variáveis (v)			
		S_{SBVS}	S_{VFA}	X_{acid}	F_{met}
4	k_5	$S_{SBVS,k5}$	$S_{SVFA,k5}$	$S_{Xacid,k5}$	$S_{Fmet,k5}$
5	K_s	$S_{SBVS,Ks}$	$S_{SVFA,Ks}$	$S_{Xacid,Ks}$	$S_{Fmet,Ks}$
6	K_{sc}	$S_{SBVS,Ksc}$	$S_{SVFA,Ksc}$	$S_{Xacid,Ksc}$	$S_{Fmet,Ksc}$
7	K_d	$S_{SBVS,Kd}$	$S_{SVFA,Kd}$	$S_{Xacid,Kd}$	$S_{Fmet,Kd}$
8	K_{dc}	$S_{SBVS,Kdc}$	$S_{SVFA,Kdc}$	$S_{Xacid,Kdc}$	$S_{Fmet,Kdc}$

Na análise de sensibilidade são mantidas as mesmas condições iniciais (S_{SVB}, S_{VFA}, X_{acid}, X_{met}, F_{met}) e operacionais (F_{alim}, $Volume$, VS_{in}) assumidas na etapa de validação do modelo. Para cada análise, apenas um dos parâmetros sofreu alteração no seu valor, enquanto os demais são mantidos inalterados. Cada parâmetro teve sensibilidade medida após 100 dias (t=100dias) de operação de biodigestor, isto é, cada resultado de sensibilidade representa uma digestão anaeróbia em t=100 dias. O cálculo da sensibilidade é feito de acordo com a Eq. (3.1):

$$S_{variável,parametro}(\%) = \frac{\Delta v}{v_0} x100 = \frac{v_1 - v_0}{v_0} x100 \qquad \text{Eq. (3.1)}$$

onde:

$S_{variável,parâmetro}$ = sensibilidade relativa da variável v em relação ao parâmetro p;

v = parâmetro para o qual é avaliada a sensibilidade;

p = parâmetro no qual é feito o pulso;

v_0 = valor do parâmetro v sem o pulso;

v_1 = valor do parâmetro v após o pulso;

A seguir é realizado a análise de plano de fases das variáveis de estado. Esta análise proporciona a verificação de múltiplos estados estacionários, assim como elucida se o estado estacionário é afetado por uma condição inicial. Esta análise utiliza-se de curvas de trajetórias das variáveis de estado. A faixa de temperatura avaliada é de 20 a 70°C, a faixa da concentração de sólidos orgânicos voláteis (S_{BVS}) é de 0,10 até 10,00 g/L e de ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}) de 0,10 até 4,00 g/L.

3.2 ETAPA 2 – Simulação de Processo

Na Etapa 2, os componentes utilizados na simulação utilizam os parâmetros e propriedades disponíveis no banco de dados da AspenTech Inc. Os sólidos orgânicos voláteis (VS), em especial, assume-se as propriedades da dextrose para representar os VS

na simulação. Esta premissa é adotada pois não há dados disponíveis para representação dos resíduos. Todos os componentes utilizados são do tipo *Conventional*, isto é, não foram considerados componentes sólidos ou pseudo-componentes. O líquido que é alimentado ao biodigestor utiliza as propriedades da água para realização do balanço de energia.

Ainda na Etapa 2, é estruturado um fluxograma de processos para produção de bioeletricidade com operação em modo estacionário. Para representar o biodigestor é desenvolvido um bloco de usuário, os demais equipamentos utilizam blocos já existentes na biblioteca de operações unitárias do Aspen Plus® V8.8. O bloco de usuário é uma ferramenta para customização de processos, possibilitando a inserção de modelos que representam operações não existentes na biblioteca. O desenvolvimento do bloco de usuário é feito no ambiente de codificação Aspen Custom Modeler ® V8.8. O modelo de Hill modificado é recodificado na plataforma de customização em linguagem própria do ambiente, e exportado para a plataforma de simulação. Assim, o fluxograma de processo de uma planta de geração de bioenergia a partir de resíduo é simulado.

A simulação é estruturada em 3 setores: o setor da digestão anaeróbia, com o biodigestor codificado com o modelo de Hill modificado para estimar a vazão de biogás produzido; o setor de compressão do biogás produzido, onde sucessivos estágios de compressão e resfriamento são realizados para pressurizar o biogás até a pressão para combustão; o último setor de combustão e expansão do gás em turbina, para geração de energia elétrica. Ainda neste último setor há uma recuperação de energia térmica do gás exausto para produção de vapor de baixa pressão que pode ser utilizado para manutenção da temperatura no complexo de biodigestores. O diagrama de blocos da Figura 3.2 apresenta a estrutura da simulação.

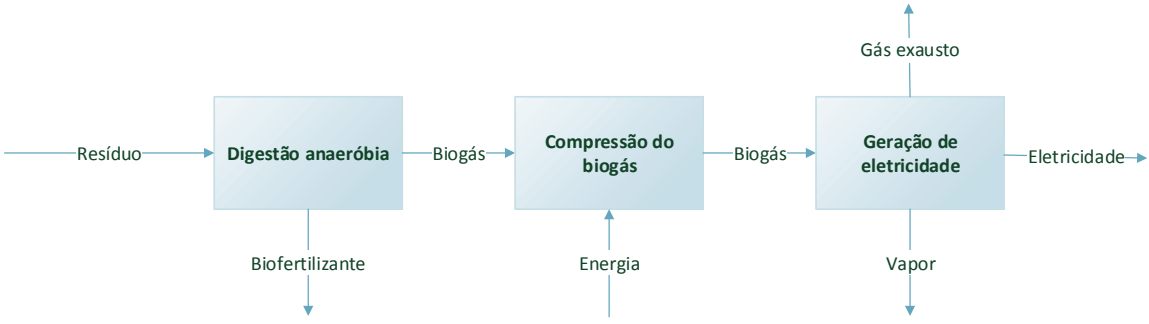


Figura 3.2 - Estrutura da simulação da produção de bioenergia.

O modelo termodinâmico foi selecionado de acordo com “método da propriedade”, apresentado na Figura 3.3. Neste, a escolha é baseada na propriedade do meio, condição de operação e presença de equilíbrio líquido-líquido, sendo sugerido pelos desenvolvedores do

simulador. Para o biodigestor, é utilizado o modelo NRTL (*Non-Random Two Liquid Model*) e para os demais equipamentos é utilizado modelo PR-EOS baseado em equação de estado desenvolvida por Peng e Robinson (1976).

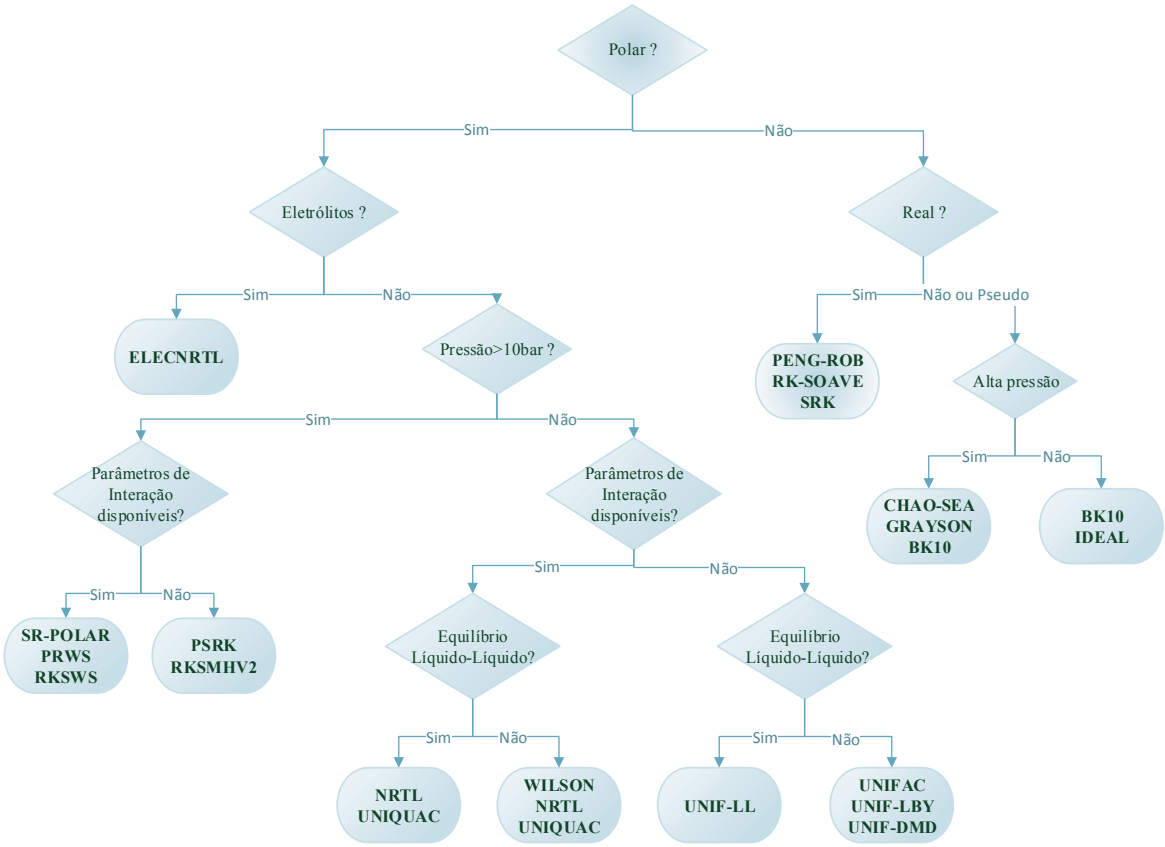


Figura 3.3 - O "método da propriedade", baseado em 3 categorias: a natureza do meio (polar vs. apolar; presença de eletrólitos vs. não eletrólito; ideal vs. real), condição operacional (alta pressão vs. baixa pressão) e conhecimento dos parâmetros de interação com ou sem equilibro líquido-líquido. Adaptado de (AL-MALAH, 2016) e AspenTech Inc., (2015).

O fluxograma desenvolvido no AspenPlus é apresentado na Figura 3.4. Na simulação de processos, são utilizados mais de um bloco para representar a turbina. Utiliza-se um compressor de ar para representar a entrada de ar comprimido na turbina. Ar atmosférico é comprimido e adicionado na turbina até que a temperatura da combustão seja igual a 1200°C; o bloco RGibbs é utilizado para representar a combustão do biogás e ar atmosférico. Utiliza-se o bloco de turbina disponível na biblioteca no AspenPlus para extrair a energia sob a forma de trabalho, o gás exausto é exaurido na faixa de 500-600°C. A Tabela 3.4 apresenta as premissas para simulação da turbina (BREEZE, 2014; RAO, 2014).

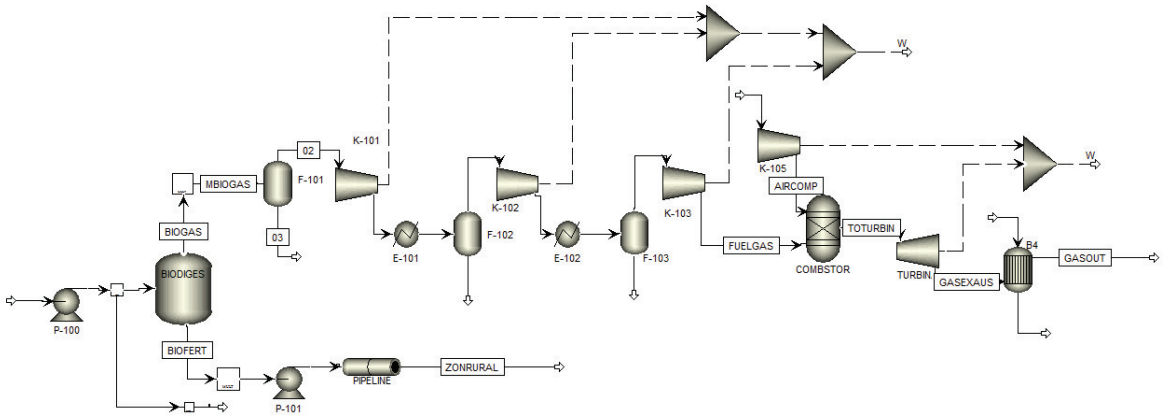


Figura 3.4 - Fluxograma da simulação do processo da produção de eletricidade a partir de biogás.

Tabela 3.4 – Tabela de Premissas para Turbina a Gás

Parâmetro	*Valor adotado*	*Fonte*
Temperatura de combustão	*1200 °C*	*Rao (2014)*
Razão de Compressão	*14,0*	*Breeze (2014)*
Eficiência	*42,0 %*	*Breeze (2014)*
Temperatura Gás Exausto	*550 °C*	*Breeze (2014)*

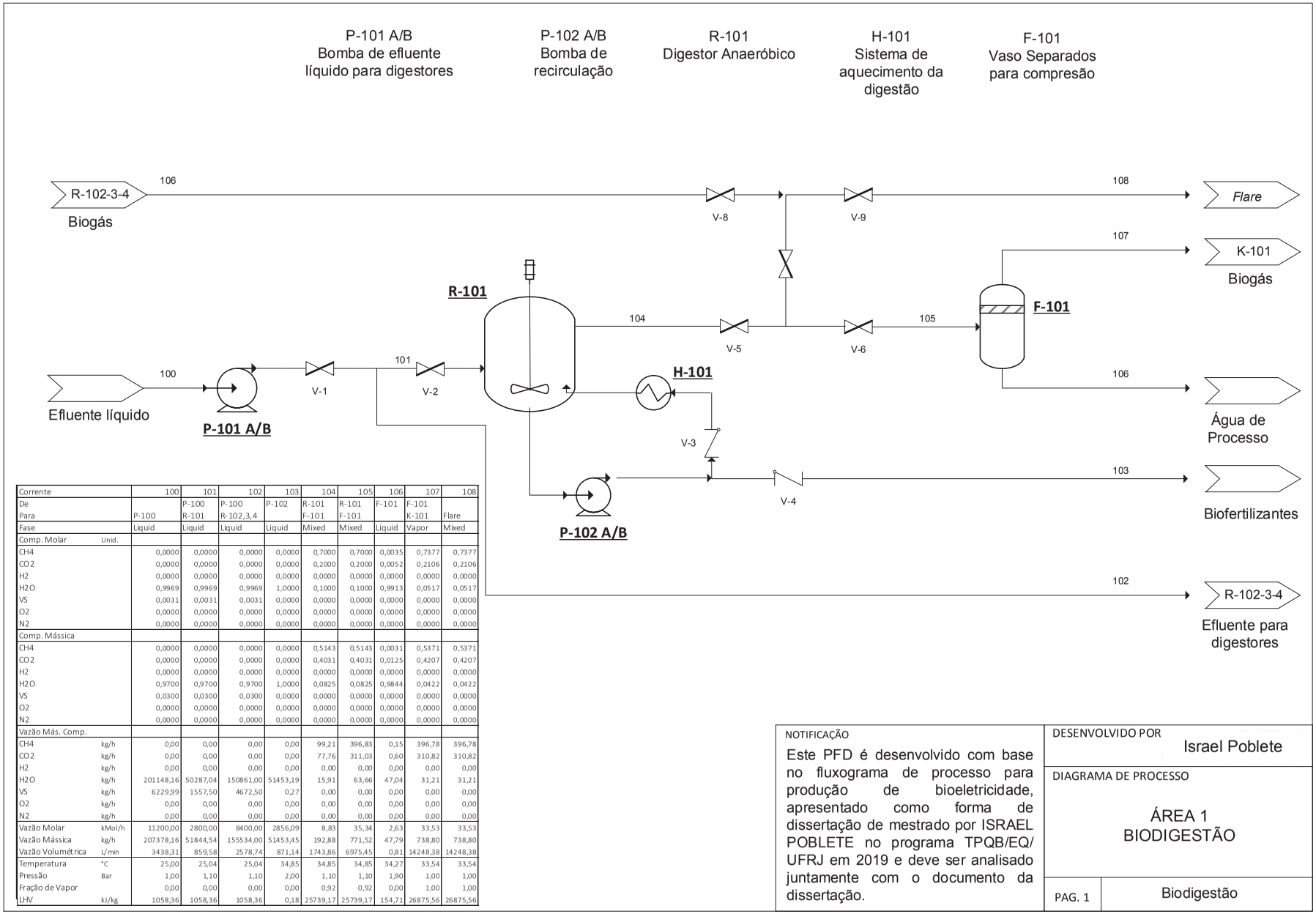
Os diagramas de processos (PFD) para a biodigestão, compressão e geração de energia são apresentados, respectivamente, nas Figura 3.5, Figura 3.6, Figura 3.7.

Na Figura 3.5, setor de digestão anaeróbia (ÁREA1), o biodigestor (R-101), que utiliza o bloco de usuário, é especificado através das variáveis: temperatura interna constante em 35°C (T_{reac}); pressão de operação de 1 bar (P_{feed}). Na corrente 100, a temperatura de alimentação do efluente é de 25°C (T_{feed}); vazão molar do efluente é de 2.800kmol/h (F_{molar}) ou 51,6m³/h ($F_{feedVol}$). O efluente é adicionado aos biodigestores pela bomba P-101. Destaca-se que a vazão de efluente alimentado ao biodigestor deve estar em base molar. Também é especificado o volume útil de 7.000 m³, que confere capacidade de produção de 2500 m³/dia de biogás. A taxa de diluição (TD) resultante é de 0,1768 dia^{-1}. O biodigestor realiza o flash nas correntes de saída 103 e 104 (flash TP) para transição de pacotes termodinâmicos da D.A. para o setor de compressão e geração de energia. O processo proposto utiliza 4 biodigestores idênticos em paralelo, totalizando uma capacidade de 7.993 m³/dia de biogás. Na simulação, a representação desse complexo de biodigestores é feita através de um multiplicador de fator 4 na corrente de saída de gás e saída de líquido do biodigestor. Ainda na Figura 3.5, a corrente 103 é resíduo líquido da digestão, sendo considerado como subproduto biofertilizante. Já a corrente 104 é o biogás produzido na D.A., com composição fixa pelo modelo de 70% de CH_4, 20%CO_2 e 10% de H_2O. O biogás

é direcionado ao vaso separador (F-101) para remover o líquido contido na corrente, em seguida, na corrente 107 o biogás com componentes apenas na fase vapor, é direcionado ao setor de compressão. Um sistema de *flare* é considerado para eventual falha de operação e necessidade de parada de operação. O sistema de recirculação é composto pela bomba P-102 e trocador de calor H-101. Quando necessário realizar o esvaziamento do biodigestor ou parada para manutenção, um sistema de válvulas é acionado e a mesma bomba P-102 é responsável pelo esvaziamento do biodigestor. Tanto a bomba P-101 como a P-102 possui bomba reserva (*spare*).

Na Figura 3.6, o sistema de compressão do biogás é composto por 3 estágios de compressão (K-101), 2 vasos separadores (F-102 e F-103) e 2 trocadores *intercooler* (E-101 e E-102). A razão de compressão para os estágios 1, 2, 3 são, respectivamente, 2,8, 2,6 e 2,6. O compressor simulado é do tipo politrópico usando o método ASME com eficiência politrópica e mecânica de 80%. Os vasos separadores (F-102 e F-103) são especificados com carga térmica nula e perda de carga em 10 kPa. Os trocadores de calor (E-101 e E-102) que atuam como *intercooler* são especificados para resfriar o gás comprimido até 40°C com perda de carga de 50 kPa. O fluido de resfriamento é água de resfriamento com temperatura de entrada em 25°C e temperatura de saída em 30°C. A fração líquida dos vasos separadores são agrupadas como água de processo, que pode ser utilizada para fins de diluição do efluente líquido a ser digerido. Na corrente 118, biogás comprimido a 14 bar e 135°C, é direcionado para a ÁREA 3, onde há geração de energia.

Na Figura 3.7, o sistema de geração de bioeletricidade é simulado por uma câmara de combustão, uma turbina e um compressor de ar. A composição dos 3 blocos representa a turbina a gás (G-101). A câmara de combustão utiliza o modelo de reator de Gibbs (RGibbs) com cálculo de equilíbrio químico e de fases. A operação da combustão é a 14 bar e com carga térmica adicionada nula. Além do biogás em alta pressão, ar atmosférico também é alimentado à câmara de combustão, contendo 21%v/v de oxigênio e 79%v/v de nitrogênio, comprimido até 14 bar por um bloco de compressor politrópico com 90% de eficiência utilizando o método ASME de resolução. O excesso de ar é ajustado na câmara de combustão para obter a temperatura do gás pós-combustão de 1200°C. A turbina utilizada é do tipo isentrópica, especificada com 90% de eficiência isentrópica e com pressão de descarga em 1 atm. O gás exausto, na corrente 123, passa por um sistema de recuperação de calor (E-103), resfriado de 550°C para 135°C, com geração de vapor de baixa pressão na corrente 124 (*LP - low presure steam*). A corrente 125 contém gás exausto a 1 atm e 135°C.



Corrente		100	101	102	103	104	105	106	107	108
De			P-100	P-100	P-102	R-101	R-101	F-101	F-101	
Para		P-100	R-101	R-102,3,4		F-101	F-101		K-101	Flare
Fase		Liquid	Liquid	Liquid	Liquid	Mixed	Mixed	Liquid	Vapor	Mixed
Comp. Molar	Unid.									
CH4		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,7000	0,7000	0,0035	0,7377	0,7377
CO2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,2000	0,2000	0,0052	0,2106	0,2106
H2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H2O		0,9969	0,9969	0,9969	1,0000	0,1000	0,1000	0,9913	0,0517	0,0517
VS		0,0031	0,0031	0,0031	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
O2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
N2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Comp. Mássica										
CH4		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,5143	0,5143	0,0031	0,5371	0,5371
CO2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,4031	0,4031	0,0125	0,4207	0,4207
H2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H2O		0,9700	0,9700	0,9700	1,0000	0,0825	0,0825	0,9844	0,0422	0,0422
VS		0,0300	0,0300	0,0300	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
O2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
N2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Vazão Más. Comp.										
CH4	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	99,21	396,83	0,15	396,78	396,78
CO2	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	77,76	311,03	0,60	310,82	310,82
H2	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H2O	kg/h	201148,16	50287,04	150861,00	51453,19	15,91	63,66	47,04	31,21	31,21
VS	kg/h	6229,99	1557,50	4672,50	0,27	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
O2	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
N2	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Vazão Molar	kMol/h	11200,00	2800,00	8400,00	2856,09	8,83	35,34	2,63	33,53	33,53
Vazão Mássica	kg/h	207378,16	51844,54	155534,00	51453,45	192,88	771,52	47,79	738,80	738,80
Vazão Volumétrica	L/min	3438,31	859,58	2578,74	871,14	1743,86	6975,45	0,81	14248,38	14248,38
Temperatura	°C	25,00	25,04	25,04	34,85	34,85	34,85	34,27	33,54	33,54
Pressão	Bar	1,00	1,10	1,10	2,00	1,10	1,10	1,90	1,00	1,00
Fração de Vapor		0,00	0,00	0,00	0,00	0,92	0,92	0,00	1,00	1,00
LHV	kJ/kg	1058,36	1058,36	1058,36	0,18	25739,17	25739,17	154,71	26875,56	26875,56

NOTIFICAÇÃO

Este PFD é desenvolvido com base no fluxograma de processo para produção de bioeletricidade, apresentado como forma de dissertação de mestrado por ISRAEL POBLETE no programa TPQB/EQ/ UFRJ em 2019 e deve ser analisado juntamente com o documento da dissertação.

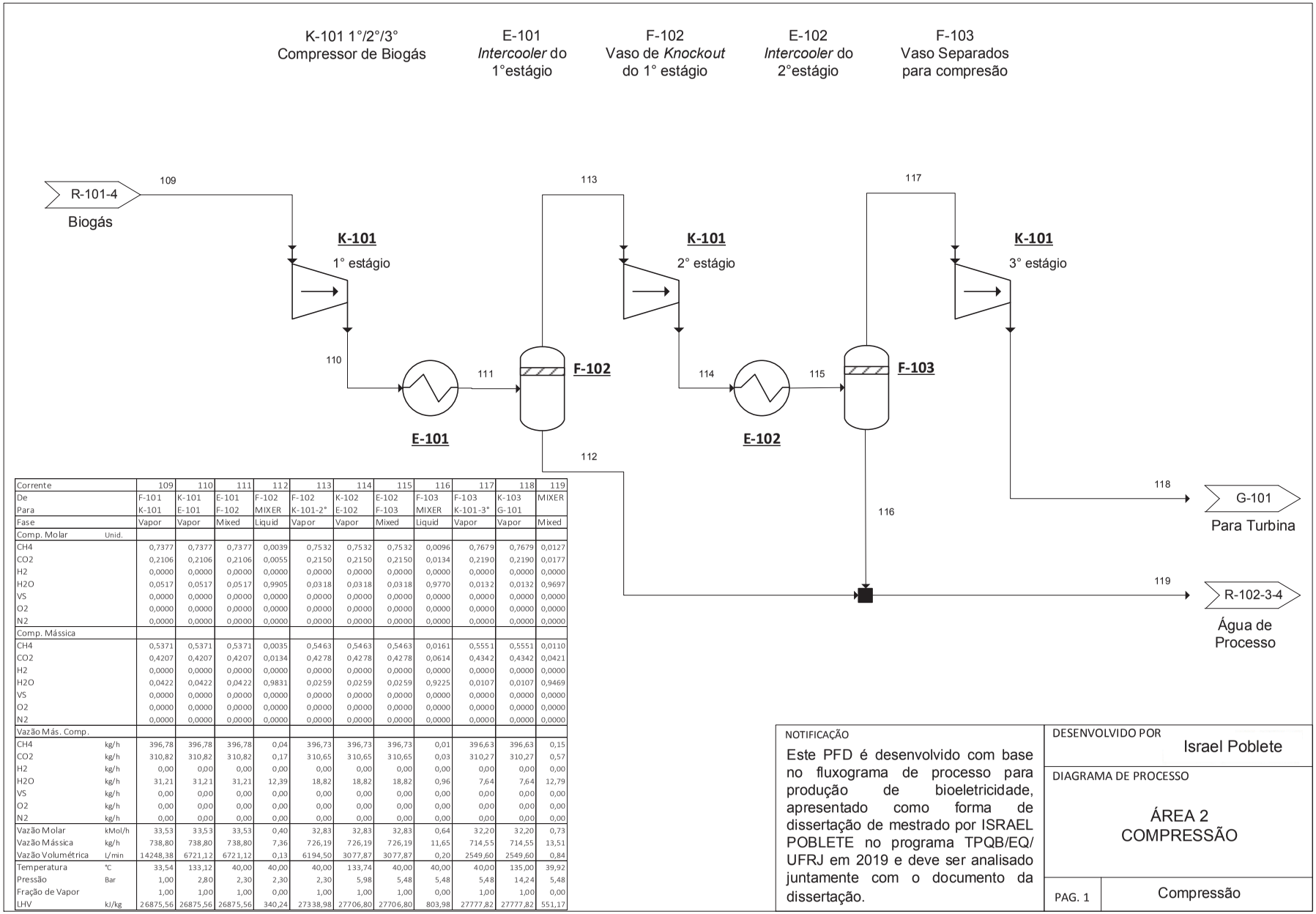
DESENVOLVIDO POR Israel Poblete

DIAGRAMA DE PROCESSO

ÁREA 1
BIODIGESTÃO

PAG. 1 | Biodigestão

Figura 3.5 – Setor de digestão anaeróbia (Área 1)



Corrente		109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119
De		F-101	K-101	E-101	F-102	F-102	K-102	E-102	F-103	F-103	K-103	MIXER
Para		K-101	E-101	F-102	MIXER	K-101-2°	E-102	F-103	MIXER	K-101-3°	G-101	
Fase		Vapor	Vapor	Mixed	Liquid	Vapor	Vapor	Mixed	Liquid	Vapor	Vapor	Mixed
Comp. Molar	Unid.											
CH4		0,7377	0,7377	0,7377	0,0039	0,7532	0,7532	0,7532	0,0096	0,7679	0,7679	0,0127
CO2		0,2106	0,2106	0,2106	0,0055	0,2150	0,2150	0,2150	0,0134	0,2190	0,2190	0,0177
H2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H2O		0,0517	0,0517	0,0517	0,9905	0,0318	0,0318	0,0318	0,9770	0,0132	0,0132	0,9697
VS		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
O2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
N2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Comp. Mássica												
CH4		0,5371	0,5371	0,5371	0,0035	0,5463	0,5463	0,5463	0,0161	0,5551	0,5551	0,0110
CO2		0,4207	0,4207	0,4207	0,0134	0,4278	0,4278	0,4278	0,0614	0,4342	0,4342	0,0421
H2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H2O		0,0422	0,0422	0,0422	0,9831	0,0259	0,0259	0,0259	0,9225	0,0107	0,0107	0,9469
VS		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
O2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
N2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Vazão Más. Comp.												
CH4	kg/h	396,78	396,78	396,78	0,04	396,73	396,73	396,73	0,01	396,63	396,63	0,15
CO2	kg/h	310,82	310,82	310,82	0,17	310,65	310,65	310,65	0,03	310,27	310,27	0,57
H2	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H2O	kg/h	31,21	31,21	31,21	12,39	18,82	18,82	18,82	0,96	7,64	7,64	12,79
VS	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
O2	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
N2	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Vazão Molar	kMol/h	33,53	33,53	33,53	0,40	32,83	32,83	32,83	0,64	32,20	32,20	0,73
Vazão Mássica	kg/h	738,80	738,80	738,80	7,36	726,19	726,19	726,19	11,65	714,55	714,55	13,51
Vazão Volumétrica	L/min	14248,38	6721,12	6721,12	0,13	6194,50	3077,87	3077,87	0,20	2549,60	2549,60	0,84
Temperatura	°C	33,54	133,12	40,00	40,00	40,00	133,74	40,00	40,00	40,00	135,00	39,92
Pressão	Bar	1,00	2,80	2,30	2,30	2,30	5,98	5,48	5,48	5,48	14,24	5,48
Fração de Vapor		1,00	1,00	1,00	0,00	1,00	1,00	1,00	0,00	1,00	1,00	0,00
LHV	kJ/kg	26875,56	26875,56	26875,56	340,24	27338,98	27706,80	27706,80	803,98	27777,82	27777,82	551,17

NOTIFICAÇÃO

Este PFD é desenvolvido com base no fluxograma de processo para produção de bioeletricidade, apresentado como forma de dissertação de mestrado por ISRAEL POBLETE no programa TPQB/EQ/ UFRJ em 2019 e deve ser analisado juntamente com o documento da dissertação.

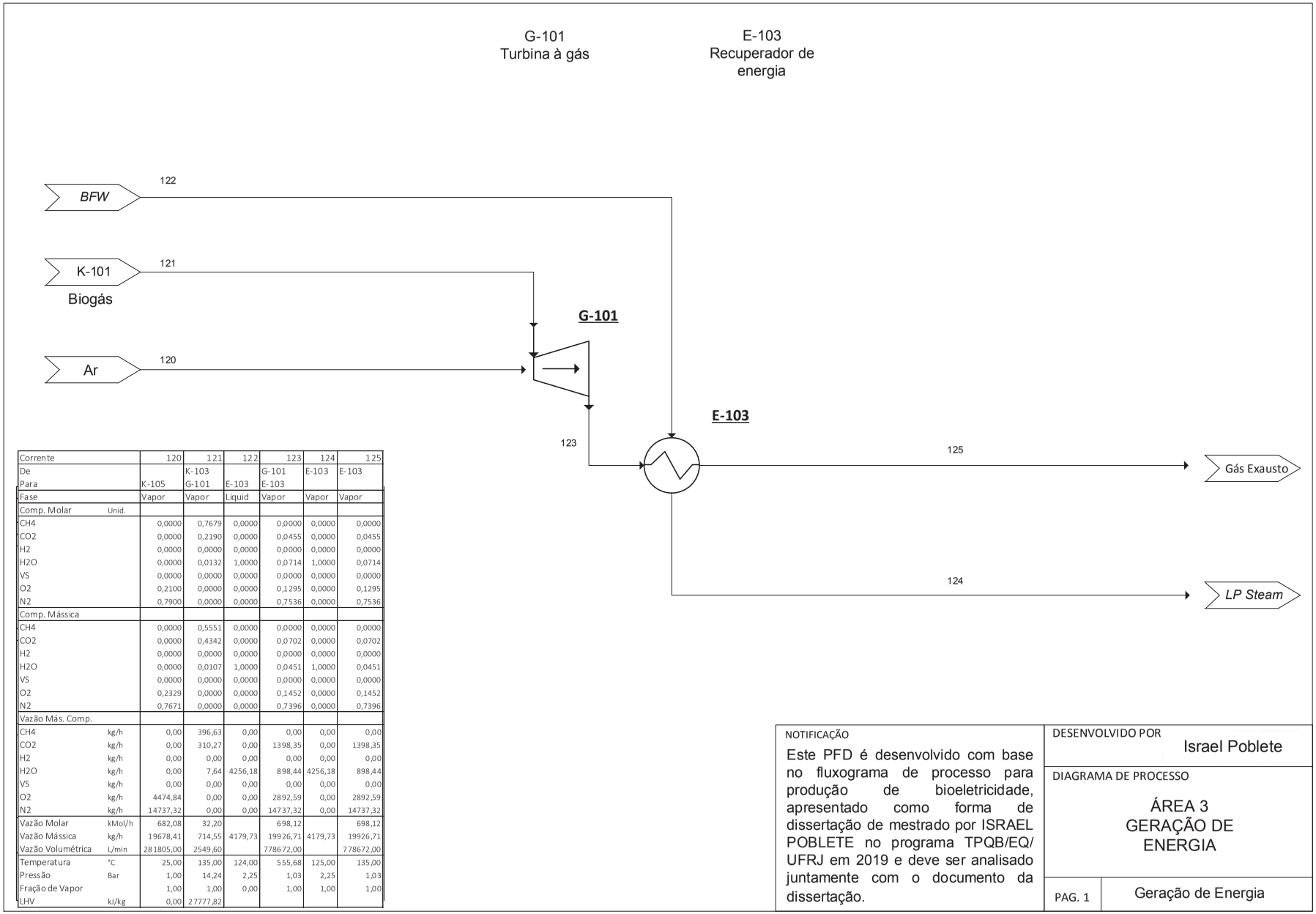
DESENVOLVIDO POR Israel Poblete

DIAGRAMA DE PROCESSO

ÁREA 2
COMPRESSÃO

PAG. 1 | Compressão

Figura 3.6 – Setor de compressão do biogás (Área 2)



Corrente		120	121	122	123	124	125
De			K-103		G-101	E-103	E-103
Para		K-105	G-101	E-103	E-103		
Fase		Vapor	Vapor	Liquid	Vapor	Vapor	Vapor
Comp. Molar	Unid.						
CH4		0,0000	0,7679	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
CO2		0,0000	0,2190	0,0000	0,0455	0,0000	0,0455
H2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H2O		0,0000	0,0132	1,0000	0,0714	1,0000	0,0714
VS		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
O2		0,2100	0,0000	0,0000	0,1295	0,0000	0,1295
N2		0,7900	0,0000	0,0000	0,7536	0,0000	0,7536
Comp. Mássica							
CH4		0,0000	0,5551	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
CO2		0,0000	0,4342	0,0000	0,0702	0,0000	0,0702
H2		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H2O		0,0000	0,0107	1,0000	0,0451	1,0000	0,0451
VS		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
O2		0,2329	0,0000	0,0000	0,1452	0,0000	0,1452
N2		0,7671	0,0000	0,0000	0,7396	0,0000	0,7396
Vazão Más. Comp.							
CH4	kg/h	0,00	396,63	0,00	0,00	0,00	0,00
CO2	kg/h	0,00	310,27	0,00	1398,35	0,00	1398,35
H2	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H2O	kg/h	0,00	7,64	4256,18	898,44	4256,18	898,44
VS	kg/h	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
O2	kg/h	4474,84	0,00	0,00	2892,59	0,00	2892,59
N2	kg/h	14737,32	0,00	0,00	14737,32	0,00	14737,32
Vazão Molar	kMol/h	682,08	32,20		698,12		698,12
Vazão Mássica	kg/h	19678,41	714,55	4179,73	19926,71	4179,73	19926,71
Vazão Volumétrica	L/min	281805,00	2549,60		778672,00		778672,00
Temperatura	°C	25,00	135,00	124,00	555,68	125,00	135,00
Pressão	Bar	1,00	14,24	2,25	1,03	2,25	1,03
Fração de Vapor		1,00	1,00	0,00	1,00	1,00	1,00
LHV	kJ/kg	0,00	27777,82				

Figura 3.7 – Setor de geração de energia elétrica (Área 3)

As principais premissas da simulação são elencadas na Tabela 3.5, onde o gás exausto pós-recuperação de energia térmica é denominado "gás final". A temperatura interna no biodigestor é considerada constante devido à premissa de operação em regime estacionário. A vazão de efluente processado foi calculado a partir da premissa de manutenção dos parâmetros operacionais (HRT e OLR) da planta piloto de HAUGEN et al., (2013). A lista de equipamentos é apresentada na Tabela *3.6*.

Tabela 3.5 – Premissas para simulação do processo de geração de bioenergia

Premissas	***Valor***	***Unidade***
N° de biodigestores	*4*	*-*
Pressão no biodigestor	*1*	*bar*
Temperatura no biodigestor	*35*	*°C*
Raio do digestor	*11*	*m*
Altura do digestor	*23*	*m*
Volume útil do biodigestor	*7.000*	*m³*
HRT	*5,66*	*Dia*
OLR	*5,34*	*gSV/L.dia*
Vazão de efluente	*51,6*	*m³/h*
Temperatura do efluente	*25*	*°C*
*Concentração de SV no efluente**	*30,2*	*gSV/L*
Razão de Compressão(1°,2° e 3°)	*2,8, 2,6 e 2,6*	*-*
Temperatura pós intercooler	*40*	*°C*
Temperatura pós combustão	*1200*	*°C*
Temperatura gás exausto	*550*	*°C*
Temperatura gás final	*135*	*°C*
Pressão no combustor	*14*	*bar*
Pressão na turbina	*1*	*bar*
Eficiência Ciclo Simples	*40,0*	*%*

(*) SV = sólidos orgânicos voláteis

Tabela 3.6 - Lista de equipamentos

Equipamento	***Identificação***	***Observação***
Biodigestores	*R-101*	*4 biodigestores*
Compressor	*K-101*	*3 estágios*

Equipamento	*Identificação*	*Observação*
Turbina a gás	*G-101*	*Ver Tab. 3.4*
Vasos separador	*F-101*	*1° estágio de compressão*
Vaso separador	*F-102*	*2°estagio de compressão*
Vaso separador	*F-103*	*3° estágio de compressão*
Heater do biodigestor	*H-101*	-
Intercooler	*E-101*	*1° estágio de compressão*
Intercooler	*E-102*	*2° estágio de compressão*
Recuperador de energia	*E-103*	*Geração de vapor LP*
Bomba de alimentação	*P-101*	*Possui bomba reserva*
Bomba de recirculação	*P-102*	*Possui bomba reserva*

3.3 ETAPA 3 – Avaliação de Desempenho Técnico

Na Etapa 3, os balanços de massa e energia resolvidos para o processo proposto são base para cálculo de 03 (três) indicadores de desempenho em função do tempo de retenção hidráulica (HRT) e *organic load rate* (OLR), a saber: geração de energia líquida (*Net Power Generation)*, resultado da diferença entre a energia gerada na turbina e a consumida pelo compressor de ar; redução de biodegradáveis no efluente, que é a redução percentual da concentração de matéria orgânica entre o efluente de entrada e saída do biodigestor; e produção de metano, que é a vazão mássica de metano presente no biogás.

Para identificar o impacto das variáveis operacionais (HRT e OLR) no processo, a taxa de diluição é modificada através da manipulação da vazão volumétrica de efluente líquido adicionado ao biodigestor. O volume útil do biodigestor, para tal, foi mantido constante em 7.000 m³. A concentração de sólidos orgânicos voláteis (SV) na corrente de alimentação do biodigestor foi mantida constante em 30,2 gSV/L em todas as simulações de avaliação. A Tabela 3.7 elucida a faixa investigada para HRT e OLR.

Tabela 3.7 - Avaliação das variáveis operacionais no processo

Taxa de diluição (dia^{-1})	*HRT (dia)*	*OLR ($gSV.L^{-1}.dia^{-1}$)*
0,075	*13,33*	*2,27*
0,100	*10,00*	*3,02*

Taxa de diluição (dia^{-1})	*HRT (dia)*	*OLR ($gSV.L^{-1}.dia^{-1}$)*
0,125	*8,00*	*3,77*
0,150	*6,67*	*4,53*
0,177	*5,66*	*5,34*
0,200	*5,00*	*6,04*
0,250	*4,00*	*7,55*

3.4 ETAPA 4 – Avaliação Econômica

Na Etapa 4, são realizadas as estimativas dos custos de equipamentos para o processo proposto. Esta etapa é realizada com o auxílio do Aspen Process Economic Analyzer® (Aspen PEA) V8.8, plataforma de estimativa de custo integrada ao AspenPlus V8.8 da AspenTech Inc®. O AspenPEA possui base de dados com custos de implantação dos principais equipamentos da indústria química. Na estimativa de investimento de capital (FCI), o AspenPEA considera além dos custos diretos com a aquisição de equipamentos, custos indiretos associados à montagem da unidade como, por exemplo, mão de obra, tipo de solo, isolamento térmico, cabeamento, entre outros. Apesar de considerar diversos fatores além do custo de compra do equipamento, a avaliação econômica deste trabalho, de acordo com a metodologia FEL (*Front End Loading*), é classificada como FEL-1, que é uma estimativa preliminar focada na identificação de oportunidades. A base de dados utilizou custos referente ao 1° trimestre de 2014 na América do Sul que foram posteriormente atualizados por meio de índices técnicos-econômicos para a indústria química. A atualização de custos utiliza o indicador *Chemical Engineering Plant Cost Index* (CEPCI) de acordo com a seguinte equação:

$$Custo\ atual = Custo\ base\ x \frac{CEPCI\ atual}{CEPCI\ base} \qquad \text{Eq. (3.2)}$$

Alguns equipamentos não constam na base de dados da plataforma de estimativa de custo AspenPEA ou do CapCost, sendo necessário a busca por cotações específicas em documentos auxiliares. Este é o caso do sistema de biodigestores, que utilizou a cotação apresentada por (NREL, 2015), e da turbina a gás para geração de eletricidade que utilizou correlação de custo apresentada por (NREL, 2010). Evidentemente as cotações não estão atualizadas em relação ao ano de avaliação e no quesito capacidade de processamento para o presente trabalho. Utiliza-se, portanto, a Eq. (3.3) para compatibilizar a capacidade e cotação do sistema de biodigestão:

$$Novo\ investimento = (Investimento\ base) * (\frac{Nova\ capacidade}{Capacidade\ base})^{0,6} \quad \text{Eq. (3.3)}$$

Os biodigestores são equipamentos que possuem tempo de retenção hidráulica variável, de acordo com o processo. Há, portanto, grande impacto do volume no custo do biodigestor quando se assume puramente a vazão do efluente processado para o método de compatibilização de capacidade. NREL (2015) destaca essa dificuldade de compatibilização e sugere que a variável mais representativa para scale-up de custo é a DQO (Demanda Química de Oxigênio) ou em inglês COD (*Chemical Oxygen Demand*), da carga processada. Infelizmente, o trabalho base de Haugen (2013) não apresenta a DQO do efluente. Porém, é possível considerar o parâmetro DTeO (Demanda Teórica de Oxigênio). O DTeO, ou em inglês ThOD (*Theorical Oxygen Demand*), é um indicador teórico e mais conservador que a DQO, que considera a demanda de oxigênio para completa oxidação da matéria orgânica até CO_2 e H_2O. Portanto, a DTeO considerada para o método de compatibilização é calculada a partir da solução de glicose com 30,2g/L, seguindo a equação estequiométrica de oxidação da Eq. (3.4).

$$C_6H_{12}O_6 + 6\ O_2 \rightarrow 6\ CO_2 + 6H_2O \quad \text{Eq. (3.4)}$$

Assim, são necessários 1,066 gO_2/gGlicose. Para a carga orgânica processada considerando glicose, tem-se DTeO de 32,21 gO_2/L.

Para a estimativa do investimento de capital considera-se apenas três áreas (1 – Biodigestores, 2 – Sistema de compressão, 3 – Geração de Eletricidade). Apenas os gastos de ISBL correspondentes aos equipamentos simulados são contabilizados. O custo de construção de uma unidade de OSBL, que envolve a produção de água de resfriamento, vapor, energia e demais utilidades, não é considerado. Assim, o FCI é estimado segundo a as premissas da metodologia apresentadas na Tabela 3.8. A metodologia utilizada para a análise de investimento segue de acordo com o reportado por INTRATEC (2012). O custo de ISBL é a soma dos equipamentos instalados de todas as áreas do projeto. A contingência de processo (PCC) representa os equipamentos não previstos, e são assumidos como 5% do total do ISBL.O investimento de capital total no processo (TPC) é dado pela soma dos custos de ISBL, OSBL e PCC. Adicionalmente, inclui-se 15% de contingência do projeto (PJC), considerado 15% do TPC. O capital adicional requerido (ACR) refere-se a custos para partida de plantas, como licenças, *royalties*, carregamento inicial de catalisadores, etc. e

assume 5% da soma de TPC e PJC. O investimento de capital da planta (FCI) é a soma do TPC, PJC e ACR.

Tabela 3.8 - Premissas para estimativa de Investimento de Capital

Componente	***Estimativa***
Área 1	*Área 1*
Área 2	*Área 2*
Área 3	*Área 3*
ISBL	*Área 1 + Área 2 + Área 3*
Contingência de Processo (PCC)	*5% (ISBL)*
OSBL	*OSBL*
Investimento Total no Processos (TPC)	*ISBL + OSBL + PCC*
Contingência de Projeto (PJC)	*15% (TPC)*
Capital Adicional Requerido (ACR)	*5% (TPC+PJC)*
Investimento de Capital (FCI)	***TPC+PJC+ACR***

Nos cálculos dos custos de manufatura (COM) da unidade são utilizados os resultados de balanços de material, de energia e nos princípios gerais de engenharia econômica para processos químicos (TURTON, 2012). O COM é composto por custos variáveis e fixos, sendo os primeiros relacionados a consumo de matéria-prima e utilidades e o segundo associado aos custos com mão-de-obra, manutenção, entre outros. Partindo-se da premissa que a matéria-prima utilizada é considerada resíduo/passivo ambiental, não é adotado o custo de compra de matéria-prima. Também, é adotado o custo mais conservador para tratamento do biodigestato, segundo os coeficientes reportado por TURTON (2012), o tratamento terciário tem custo de 56$/1.000m³. A Tabela 3.9 apresenta a metodologia e premissas aplicadas para estimar o custo de manufatura (COM). Ressalta-se que a estimativa de COM, de acordo com a metodologia proposta por TURTON (2012), assume taxa de depreciação média (a/a) de 10% FCI. O COM é dado pela Eq. (3.5)

$$COM = DMC + FMC + GE \qquad \text{Eq. (3.5)}$$

Tabela 3.9 – Premissas para estimativa de COM

Componente	***Fator de Custo***
Matéria Prima	*CRM*
Tratamento de Efluentes	*CWT*

Componente	*Fator de Custo*
Utilidades	*CUT*
Mão de Obra Operacional	*COL*
Trabalho de supervisão e escritório	*0,18*COL*
Manutenção e reparo	*0,06*FCI*
Suprimentos operacionais	*0,009*FCI*
Taxas de laboratório	*0,15*COL*
Patentes e Royalties	*0,03*COM*
Custos Diretos de Manufatura (DMC)	***CRM + CWT + CUT +1,33 COL + 0,69 FCI +0,03COM***
Despesas Gerais de Manufatura (GE)	
Custos de administração (AC)	*(0,177*COL) + (0,009*FCI)*
Custos de distribuição e venda (DSC)	*0,11*COM*
Pesquisa e desenvolvimento (RD)	*0,05*COM*
Despesas Gerais de Manufatura (GE)	***AC + DSC + RD***
Custos Fixos de Manufatura (FMC)	
Depreciação, Impostos, Seguro e Custos Fixos Adicionais (FMC)	***(0,708*COL) + (0,068*FCI) + depreciação***

A determinação do número de operadores é baseada na quantidade de equipamentos principais da planta, contabilizando trocadores, compressores, vasos e digestores, de acordo com TURTON (2012), apresentado na Eq. (3.6)

$$N_{operadores} = 4{,}5\left(6{,}29 + 0{,}23\, N_{equipamentos}\right)^{0{,}5} \qquad \text{Eq. (3.6)}$$

Após a realização da estimativa de FCI e COM, é realizada uma análise de sensibilidade dos custos, baseados no planejamento fatorial de 3 níveis, considerando a faixa de acurácia da metodologia FEL-1. Dessa forma, são estimados FCI e COM para cada ponto da análise de sensibilidade. A

Tabela *3.10* apresenta o planejamento fatorial aplicado, no qual o índice -1 é referente ao ponto mínimo da estimativa (-25% do estimado),o índice 0 (zero) é o ponto central (neste caso, o exato valor FCI e COM), e índice +1 o ponto máximo da estimativa (+40% do estimado).

Tabela 3.10 - Planejamento fatorial para a faixa de acurácia do FCI e COM

Estimativa	***Fatores***		
1	*-1*	*-1*	*-1*
2	*-1*	*-1*	*1*
3	*-1*	*1*	*-1*
4	*-1*	*1*	*1*
5	*1*	*-1*	*-1*
6	*1*	*-1*	*1*
7	*1*	*1*	*-1*
8	*1*	*1*	*1*
9	*0*	*0*	*0*

4- RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo expõe e analisa os resultados obtidos. Os resultados são apresentados da mesma forma que foram apresentados no Capítulo 3, como: Resultados da Etapa 1: compreende a validação do modelo e análise de sensibilidade a parâmetros; Resultados da Etapa 2: simulação de processos da geração de bioeletricidade; Resultados da Etapa 3: avaliação de desempenho técnico com base em indicadores de processo chave; Resultados da Etapa 4: avaliação econômica com estimativa de FCI e COM da unidade projetada.

4.1 RESULTADOS DA ETAPA 1 - Modelo em MATLAB

4.1.1 Validação do Modelo

A implementação do modelo de digestão anaeróbia em MATLAB simula uma planta com operação de 100 dias (t=100). Porém os dados coletados por (HAUGEN, BAKKE e LIE, 2013) acerca de concentração de sólidos voláteis biodegradáveis (S_{BVS}) e ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}) foi iniciada após 66 dias (t=66 dias). O autor afirma que apenas após este ponto o sistema de DA atinge o estado estacionário. Logo, apenas a partir do dia 66 há dados de concentração do efluente (S_{BVS} *in,* $S_{BVS,}$ S_{VFA}) e produção de CH_4.

As análises de laboratório de sólidos voláteis biodegradáveis, realizadas por HAUGEN, BAKKE e LIE (2013), na entrada do biodigestor (S_{BVS} *in*) e no efluente (S_{BVS}), são apresentadas junto com os resultados da simulação obtida neste trabalho na Figura 4.1 e Figura 4.2. Destaca-se a importância do acompanhamento de S_{BVSin} e S_{BVS}, pois o efluente alimentado na DA é de origem resíduo animal. Dessa forma, há possibilidade de apresentar variações na concentração de orgânicos biodegradáveis de acordo com a dieta, condição climática ou outros fatores externos. Os resultados da simulação acompanharam as oscilações observadas nos dados experimentais apresentados no artigo base.

HAUGEN, BAKKE e LIE (2013) também reportam análises para ácidos orgânicos voláteis na entrada do biodigestor (S_{VFA} *in*) e no efluente (S_{VFA}). Na Figura 4.4 e Figura 4.5 são apresentados resultados da simulação juntamente com os resultados experimentais. Os ácidos orgânicos também são apresentados juntamente com os dados da corrente de entrada do biodigestor. Para rejeito de animais, a razão da concentração de S_{VFA}/S_{BVS} na entrada assume valores típicos de 0.05~0.20 (HILL, 1983), porém o resíduo utilizado apresentou elevado teor de ácidos, com razão na faixa de 0.65~0.70.

Outra variável com análise experimental reportada por HAUGEN, BAKKE e LIE (2013) é a vazão do gás CH_4, apresentado na Figura 4.6. A simulação representa a produção do CH_4 de forma adequada.

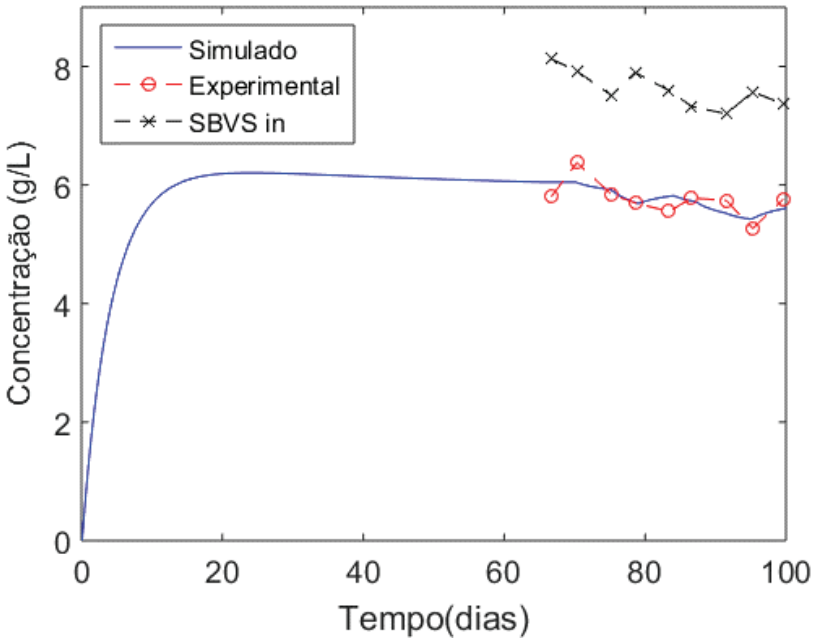


Figura 4.1 - Perfil de sólidos voláteis biodegradáveis (S_{BVS}) (t =0 até t=100 dias). Em preto a concentração de S_{BVS} na entrada do biodigestor ($S_{BVS\ in}$) e em vermelho S_{BVS} no biodigestor reportado por Haugen e colaboradores (2013); em azul o perfil simulado neste trabalho para SBVS.

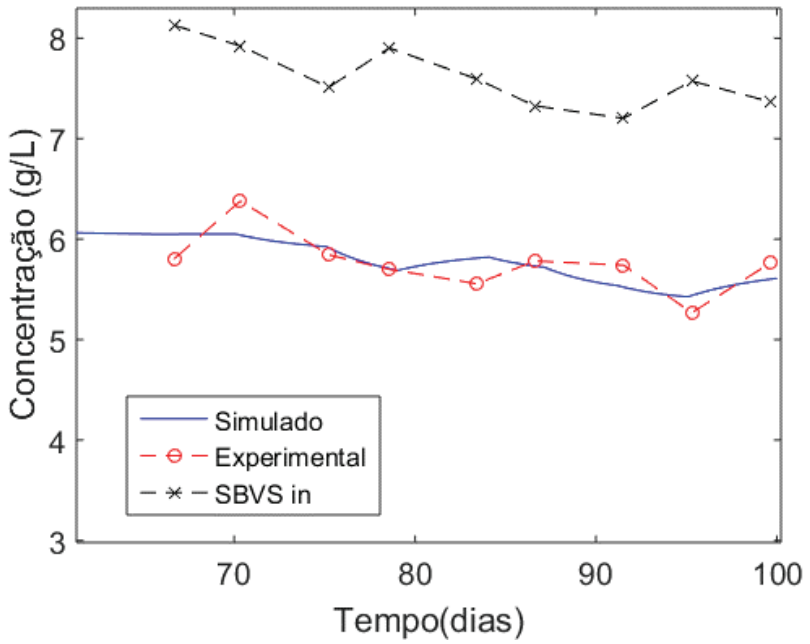


Figura 4.2 - Biodigestão a partir de 60 dias (t=60 dias). Em preto a concentração de S_{BVS} na entrada do biodigestor ($S_{BVS\ in}$) e em vermelho S_{BVS} no biodigestor reportado por Haugen e colaboradores (2013); em azul o perfil simulado neste trabalho para SBVS.

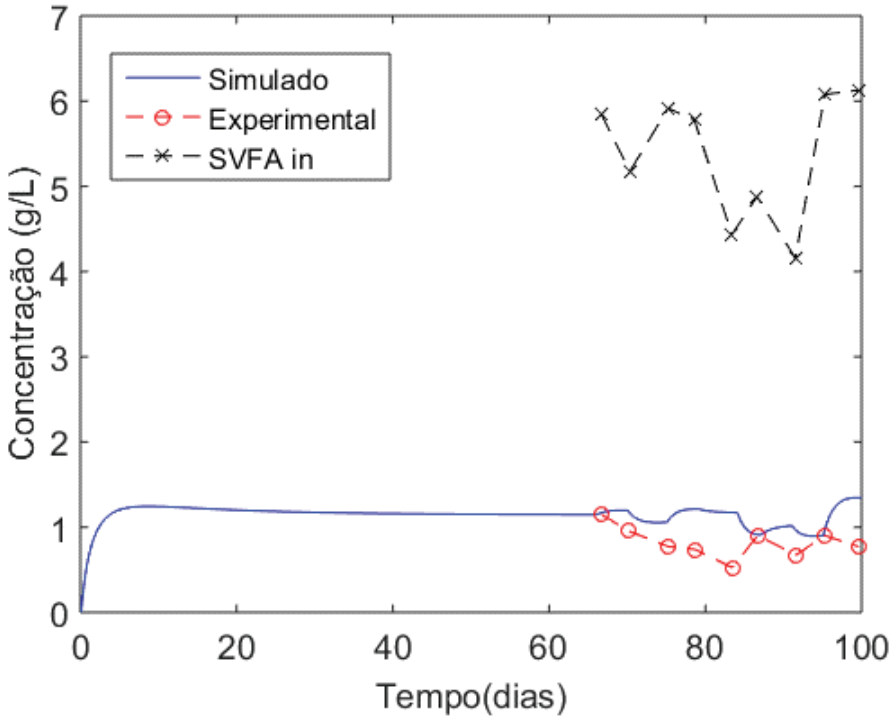


Figura 4.3 - Perfil completo da concentração de ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}) na digestão (t =0 até t=100 dias). Em preto a concentração S_{VFA} na entrada do biodigestor ($S_{VFA,in}$), em vermelho S_{VFA} no biodigestor reportado por Haugen e colaboradores (2013) e em azul o perfil simulado neste trabalho para SVFA.

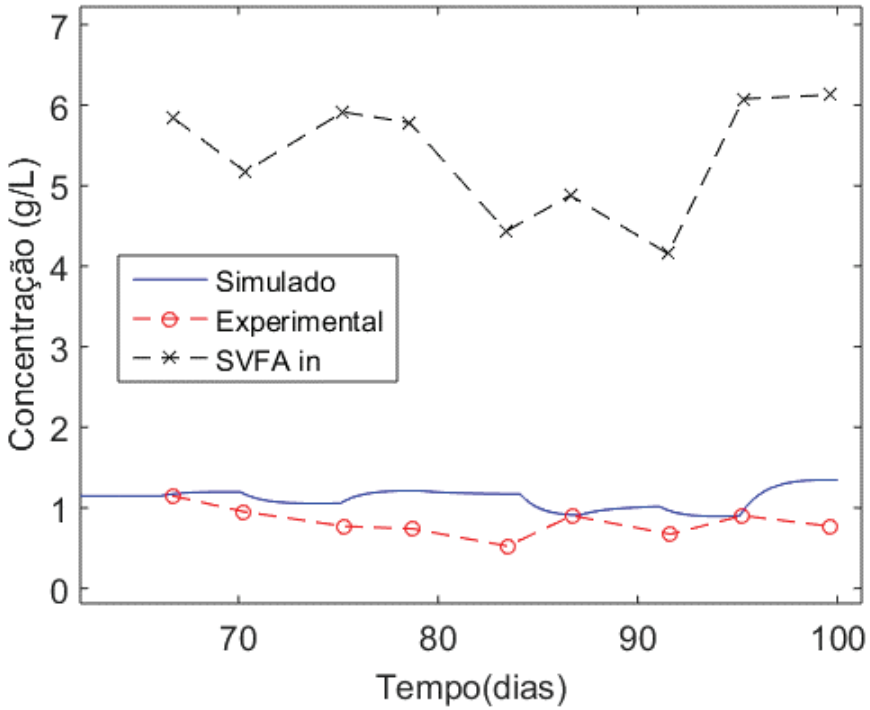


Figura 4.4 – Concentração de S_{VFA} a partir de 60 dias (t=60 dias). Em preto a concentração de S_{BVS} na entrada do biodigestor ($S_{BVS\ in}$) e em vermelho S_{BVS} no biodigestor reportado por Haugen e colaboradores (2013); em azul o perfil simulado neste trabalho para SVFA.

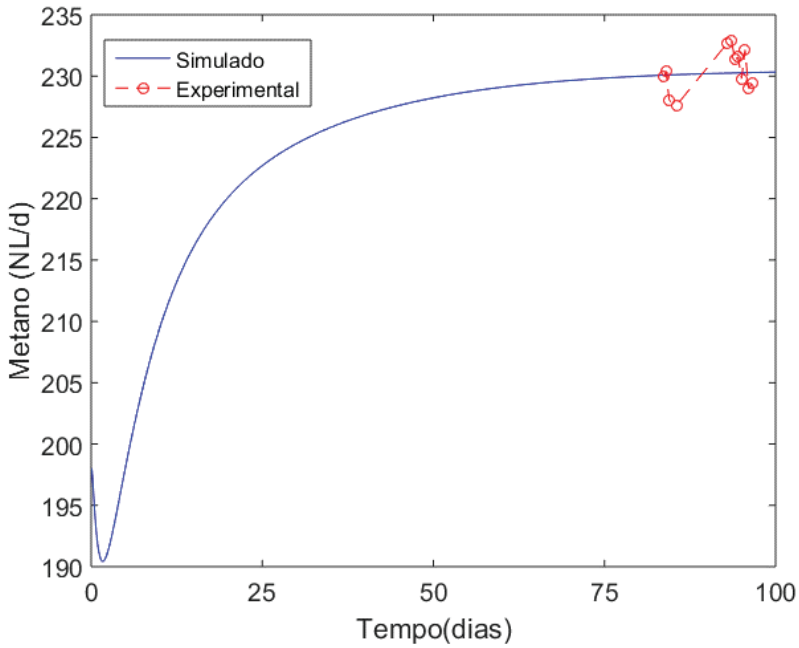


Figura 4.5 - Validação do modelo quanto a produção de metano. Em vermelho resultados experimentais da vazão de metano produzida pela biodigestão reportados por Haugen e colaboradores (2013), em azul resultado da simulação neste trabalho para metano.

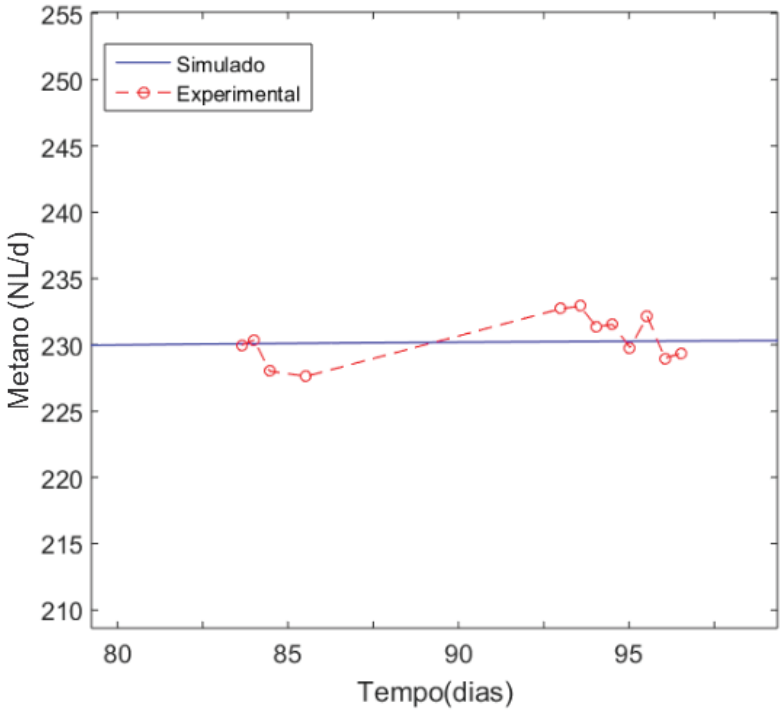


Figura 4.6 – Ampliação no estado estacionário. Resultados experimentais por Haugen et al. (2013), resultado simulado neste trabalho.

Um importante parâmetro do modelo é o teor de sólidos biodegradáveis no efluente

líquido (B_0) que é alimentado ao biodigestor. Este é o principal parâmetro para caracterização do efluente, sendo uma das vantagens do modelo de Hill modificado. Este parâmetro tem forte impacto na previsão de produtividade em gás metano. A Figura 4.7 apresenta a variação de B_0 e a respectiva produção de metano. Em HILL (1983), há indicação para utilizar $B_0 = 0{,}90$ para resíduo suíno (90% de biodegradáveis) e $B_0 = 0{,}36$ para resíduo bovino.

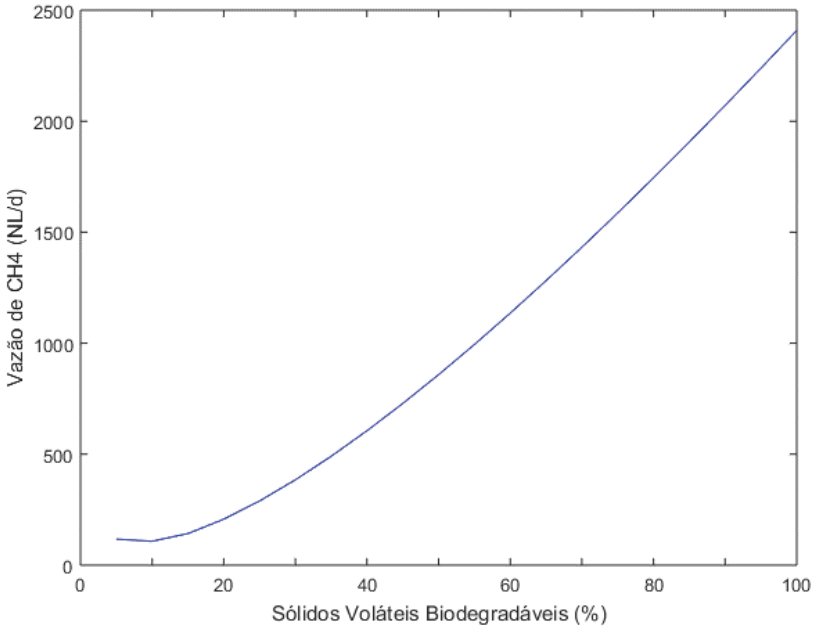


Figura 4.7 - Impacto do teor de biodegradáveis no efluente (B_0) na produção de gás metano.

Simulações foram realizadas para avaliar a influência da temperatura ambiente no desempenho da DA, especificamente na vazão de metano produzido. Este trabalho tem como base planta piloto localizada na Noruega, portanto, a temperatura ambiente é um ponto de adaptação para a operação no Brasil. Ressalta-se, também, que o modelo original de Hill é validado apenas para uma restrita faixa de temperatura (20°C< T <60°C), não sendo recomendada a utilização deste modelo para descrever DA com microrganismos termofílicos. A Figura 4.8 apresenta as curvas de produção de metano na qual cada curva representa uma simulação da DA com temperaturas ambiente especifica, de 25°C a 36°C. Os resultados demonstram que o aumento da temperatura ambiente resulta em maior produção de gás metano. Há um aumento de até 40L/dia na produção de CH_4, representando uma elevação de aproximadamente 18%, devido a alteração da condição do ambiente. Este resultado também é relevante para considerar variações climáticas decorrentes de mudança de estação. A Figura 4.8, no entanto, apresenta resultados que utilizam os coeficientes

globais de troca térmica (UA) do biodigestor de HAUGEN e colaboradores (2013), que não esclarecem condições de isolamento e disposição (e.g. coberturas, paredes) em relação ao ambiente em que o biodigestor foi instalado. Dessa forma, foram realizadas simulações para verificar o quanto a temperatura ambiente impacta na temperatura interna do biorreator. Para a faixa de temperatura ambiente (considerada constante durante o período de operação) os resultados das simulações, que utilizam os parâmetros fornecidos por HAUGEN, BAKKE e LIE (2013), demostram que não há isolamento térmico eficiente na planta piloto.

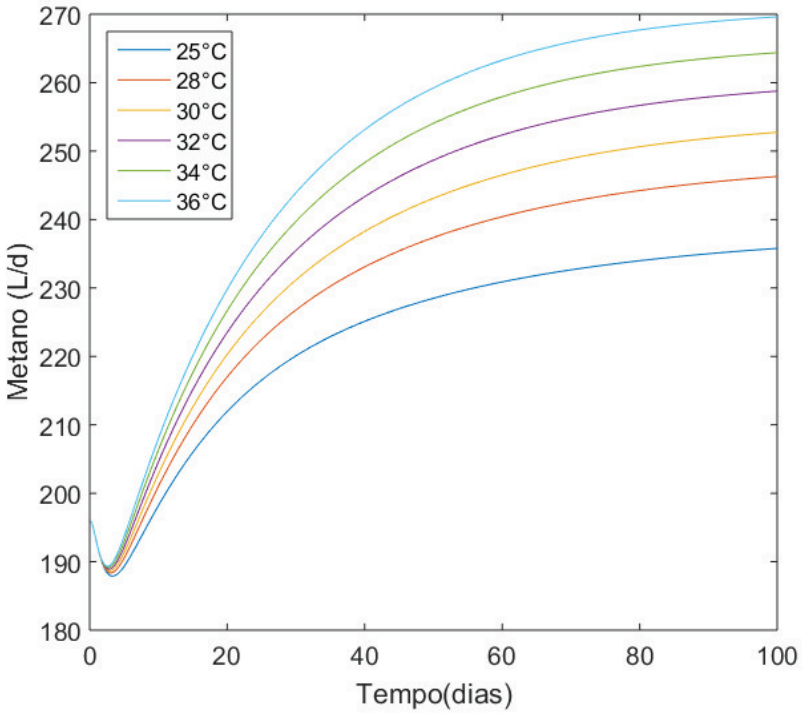


Figura 4.8 - Validação do modelo. Impacto da temperatura ambiente na produção de gás metano pela DA.

Como o isolamento térmico da planta piloto não se mostrou eficiente, foram realizadas simulações considerando uma determinada amplitude térmica na temperatura ambiente. Na Figura 4.9, a temperatura ambiente foi simulada como padrão oscilatório de amplitude térmica igual a 10°C, com mínimos em 25°C e máximos em 35°C. Esta análise visa identificar o impacto do gradual aumento e redução de temperatura no decorrer do dia. Com o sistema em estado estacionário e temperatura interna do biodigestor em 36°C foi aplicada a oscilação de temperatura ambiente. É possível identificar que a temperatura interna do biodigestor sofre acréscimos periódicos decorrente da elevação de temperatura ambiente. Porém as variáveis de estados S_{BVS}, S_{VFA}, X_{acid},X_{met} e vazão de metano têm baixa sensibilidade na resposta, e principalmente, não demonstram oscilações que poderiam ocasionar falha na operação do biodigestor.

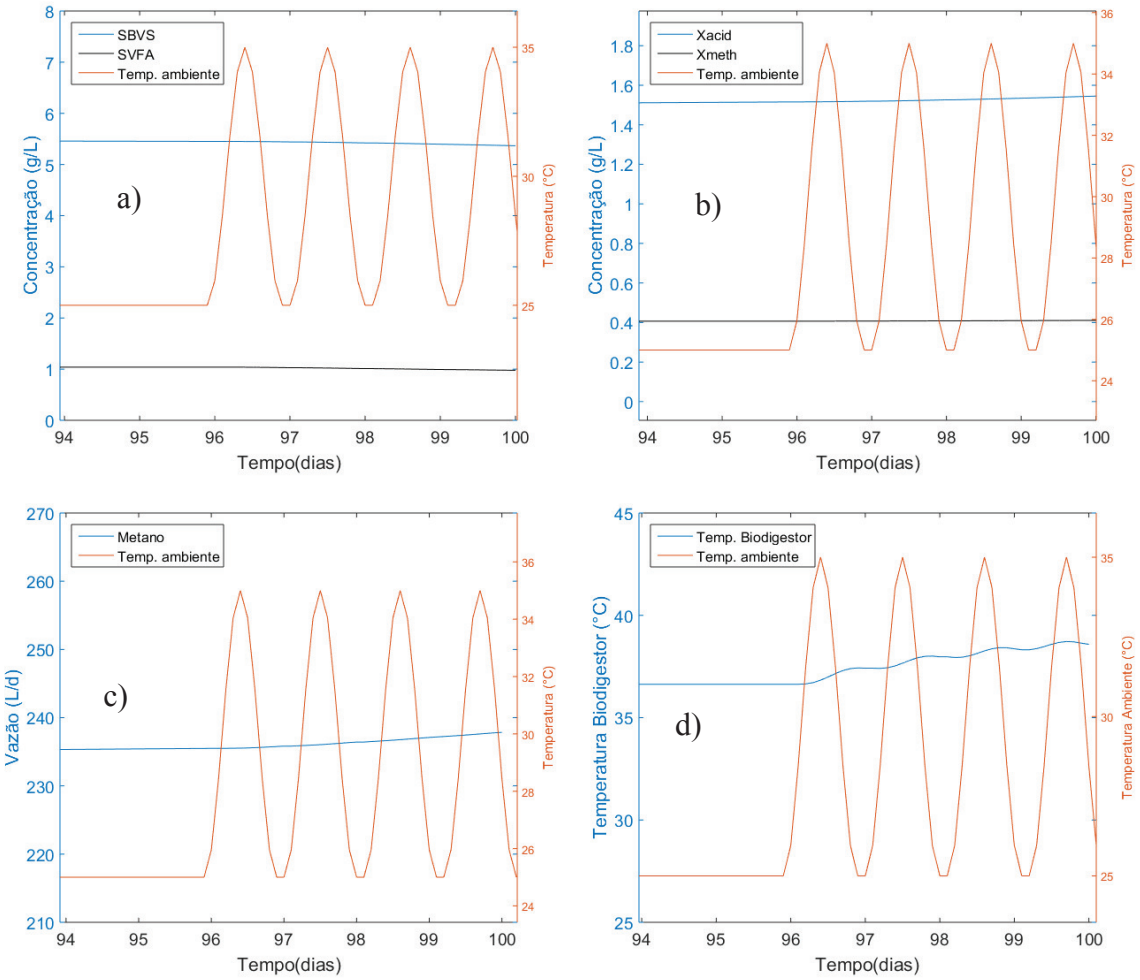


Figura 4.9 - Temperatura ambiente como curva oscilatória. Amplitude térmica de 10°C. (a) Concentração de substratos. (b) Concentração de biomassa. (c) Vazão de gás metano. (d) Temperatura interna do biodigestor.

Como os valores assumidos pelas variáveis de estado possuem diferentes escalas, a resposta a amplitude térmica do ambiente é analisada sob a perspectiva de desvio. O desvio é a razão entre a diferença da variável de estado em relação ao estado estacionário da própria variável e o valor do estado estacionário. Neste trabalho usa-se percentagem do desvio. Na Figura 4.10 observa-se que desvio mais significativo é para a concentração de ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}), onde a concentração dos ácidos reduz em -5% até o fim o ciclo. Os sólidos voláteis biodegradaveis (S_{BVS}) também apresentam redução de concentração, porém com pouca significância, com alteração de aproximadamente 2% em relação a DA com temperatura ambiente constante. A redução da concentração dos substratos S_{BVS} e S_{VFA} é resultado do aumento da concentração de bactérias acidogênicas (X_{ACID}) e metanogênicas (X_{METH}), onde, respectivamente, ocorre aumento de 2% e 1% ao fim do ciclo. A temperatura interna do reator e a vazão de CH_4 produzida sofre, respectivamente, aumento de 0,6% e

1%.

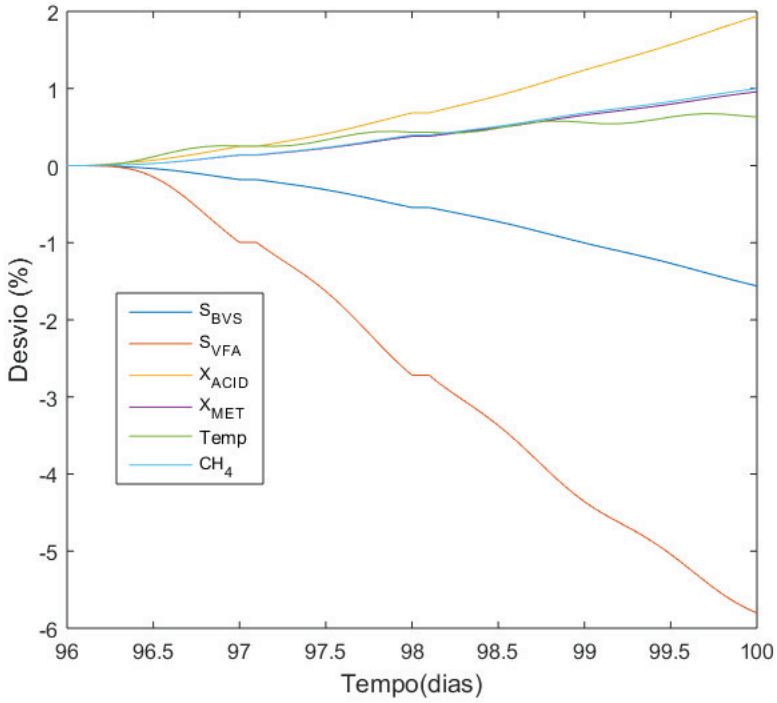


Figura 4.10 - Respostas das variáveis de estado em desvio(%)

4.1.2 Análise de Sensibilidade

A análise de sensibilidade foi realizada para 8 parâmetros do modelo através de perturbação no valor original de cada parâmetro. A avaliação de sensibilidade observou as respostas de substratos biodegradáveis (S_{BVS}), ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}), arqueas metanogênicas (X_{MET}) e Vazão de gás metano, conforme apresentado na Tabela 3.3.

Os sólidos biodegradáveis (S_{BVS}), Figura 4.11, apresentam sensibilidade a 3 (três) parâmetros: k_1, K_d *e* K_s. O parâmetro k_1 representa a constante de rendimento (g SVB/(g acidogênicas/L)) e a análise mostra que a redução desta constante provoca um aumento na concentração do substrato, isto é, o rendimento das bactérias acidogênicas é menor conforme este parâmetro é reduzido. Já os parâmetros K_s *e* K_d representam, respectivamente, a constante de meia velocidade de Monod para acidogênicas (ou constante de saturação) e a taxa de mortalidade das bactérias acidogênicas. A redução nessas constantes implica em maior consumo de substrato (logo menor concentração e por isso sensibilidade percentual negativa), com sensibilidade maior ao parâmetro K_s. A redução de *Ks* significa que a velocidade máxima de crescimento é atingida com menor concentração de substrato e a redução de K_d implica em maior concentração de células acidogênicas que metabolizam o substrato.

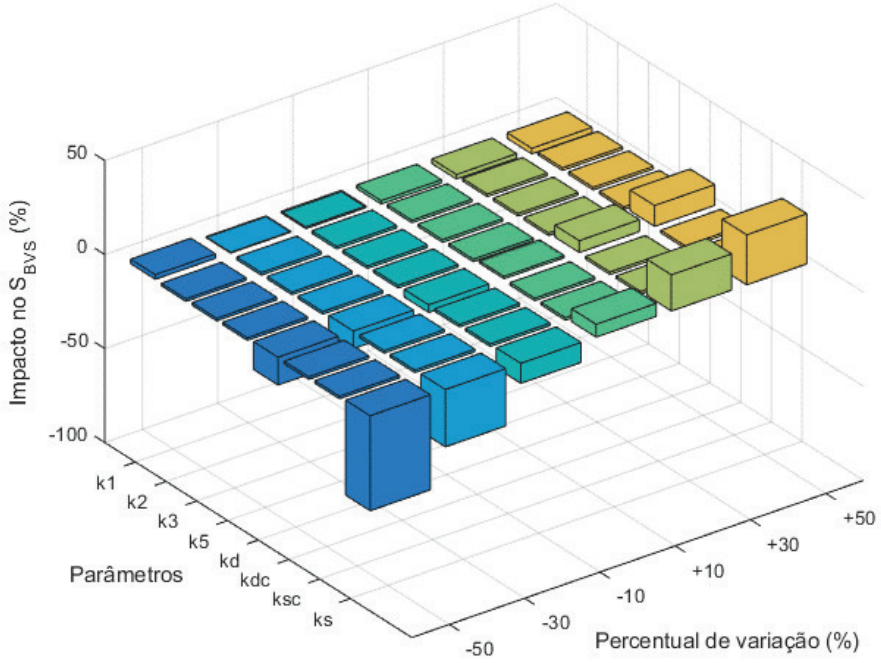


Figura 4.11 - Sensibilidade da variável S_{BVS} a parâmetros do modelo.

A análise de sensibilidade para a concentração de ácidos orgânicos voláteis (S_{VFA}), Figura 4.12, apresenta forte sensibilidade a 2 (dois) parâmetros: K_{dc} *e* K_{sc}. Os parâmetros K_{dc} *e* $K_{sc,}$ são, respectivamente, a constante de meia velocidade de Monod para metanogênicas (ou constante de saturação) e a taxa de mortalidade de arqueas metanogênicas. A sensibilidade para estes parâmetros é paralela aos parâmetros K_s *e* K_d para os sólidos orgânicos biodegradáveis. Portanto, a redução de valor destes parâmetros resulta em menor concentração de ácido no biodigestor.

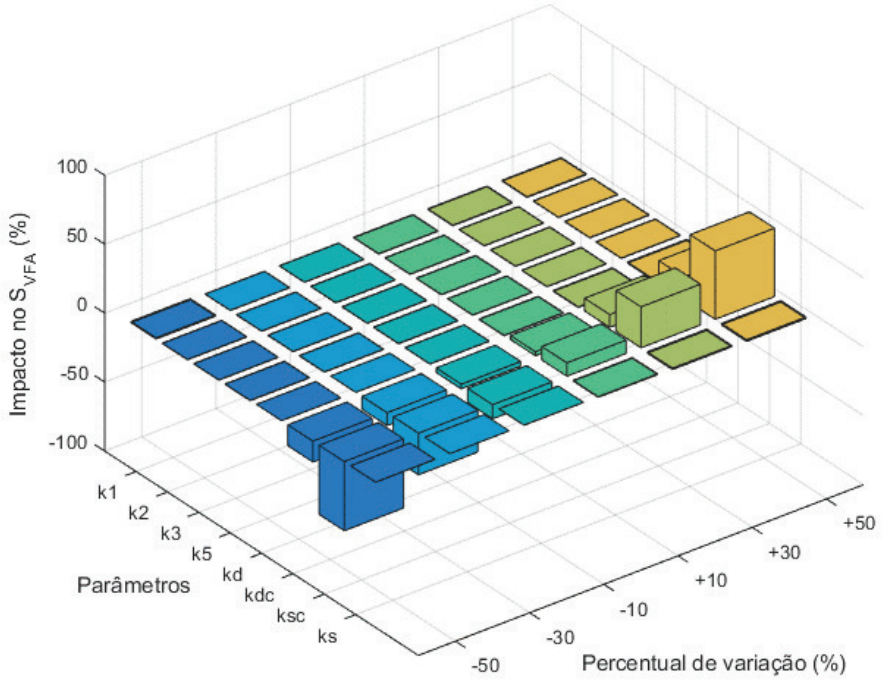


Figura 4.12 - Sensibilidade da variável S_{VFA} a parâmetros do modelo.

A análise de sensibilidade a parâmetros relacionada a arqueas metanogênicas (X_{MET}), Figura 4.13, mostra que este estado é sensível a todos os parâmetros, exceto ao parâmetro k_5 que é o rendimento das arqueas metanogênicas em biogás. Os parâmetros k_1, k_2, k_3, K_d e K_{dc} apresentaram maior impacto, sendo o parâmetro k_2 o único que mantém relação direta, isto é, favorece o crescimento das metanogênicas quando aumentado. k_1, K_d, K_{dc}, K_s e K_{sc} têm relação inversa, quando há redução no valor do parâmetro ocorre aumento na concentração de arqueas. Observa-se, também, que a sensibilidade às taxas de mortalidade de arqueas (K_d e K_{dc}) é maior do que a sensibilidade às constantes de meia velocidade (K_s, K_{sc}).

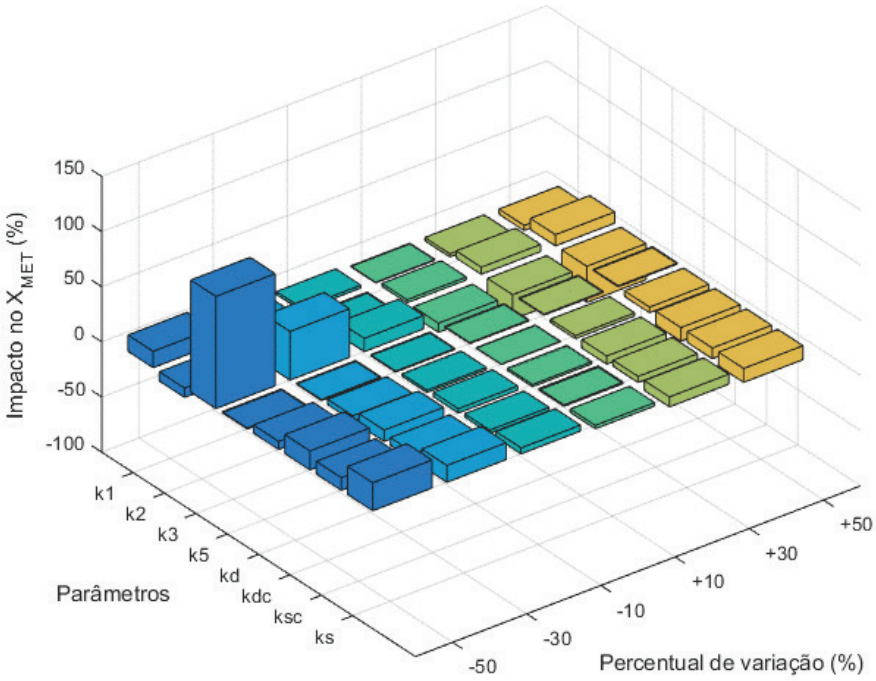


Figura 4.13- Sensibilidade da variável Xmet a parâmetros do modelo.

A análise de sensibilidade a parâmetros da produção de metano, Figura 4.14, apresenta sensibilidade a todos os parâmetros investigados. Os parâmetros com respostas mais intensas são: k1, com -11% de variação da resposta quando k1 assume +50% do valor original; Ks, com 25% de variação da resposta quando Ks assume -50% do valor original; Kdc e Ksc apresentam variação de 17% e 11%, respectivamente, quando assumem -50% do valor original; e k2 apresenta 10% de variação da resposta quando k2 assume +50% do valor original.

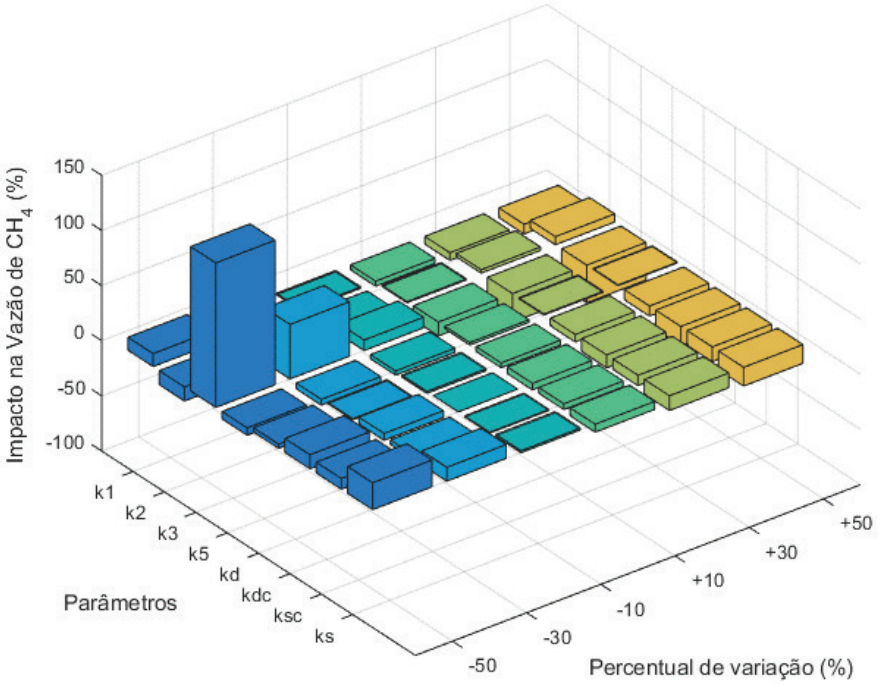


Figura 4.14 - Sensibilidade da variável Vazão de CH_4 a parâmetros do modelo.

Adicionalmente, apresenta-se o estudo do plano de fases para identificar possíveis múltiplos estados estacionários. O estudo faz uso de curvas da evolução das variáveis de estado, no caso S_{BVS}, S_{VFA}, Temperatura e Vazão de Metano e mantém a variável tempo implícita. Diversas condições iniciais são dadas e as trajetórias das variáveis de estado são contrapostas para identificar os pontos de convergência. Cada ponto de convergência é um estado estacionário.

As Figura 4.15 e 4.16 demonstram que é possível alterar as condições iniciais do biorreator, situação que pode ser necessária durante a operação do complexo de biodigestores que possuem grandes volumes e casos onde um biorreator tem enchimento com um efluente de composição diferente da ideal. Após o início da DA, mantendo as condições operacionais de OLR e HRT, o estado estacionário será o mesmo. O estado estacionário para a faixa avaliada é tem convergência para 218 NL/dia de vazão de metano, a temperatura de 34,75°C, sólidos orgânicos voláteis de 5,97 g/L e ácidos orgânicos 1,14 g/L.

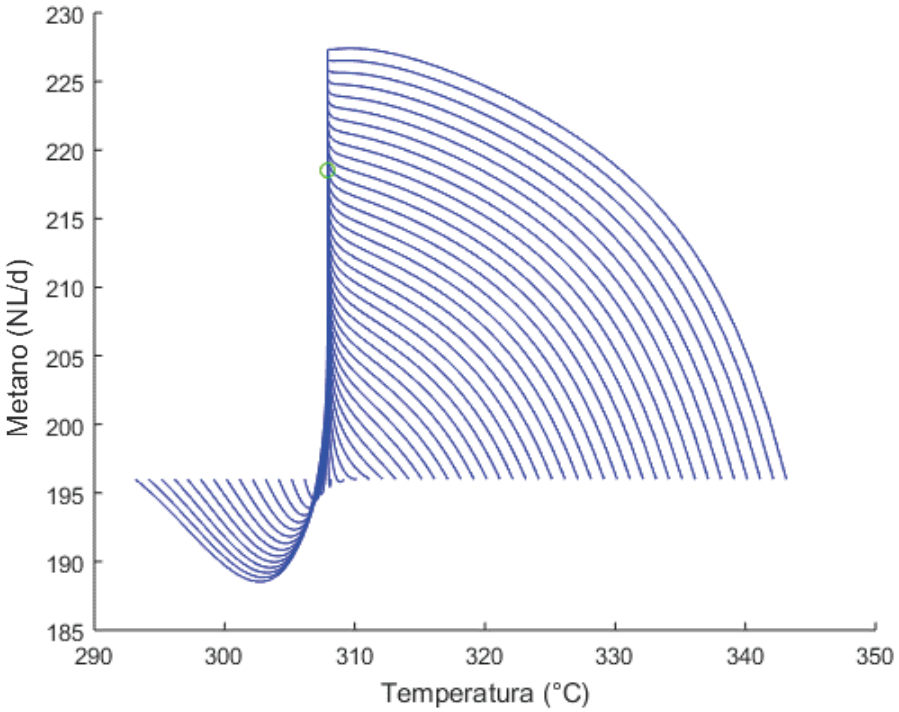


Figura 4.15 - Plano de fases. Vazão de metano vs. Temperatura, um estado estacionário

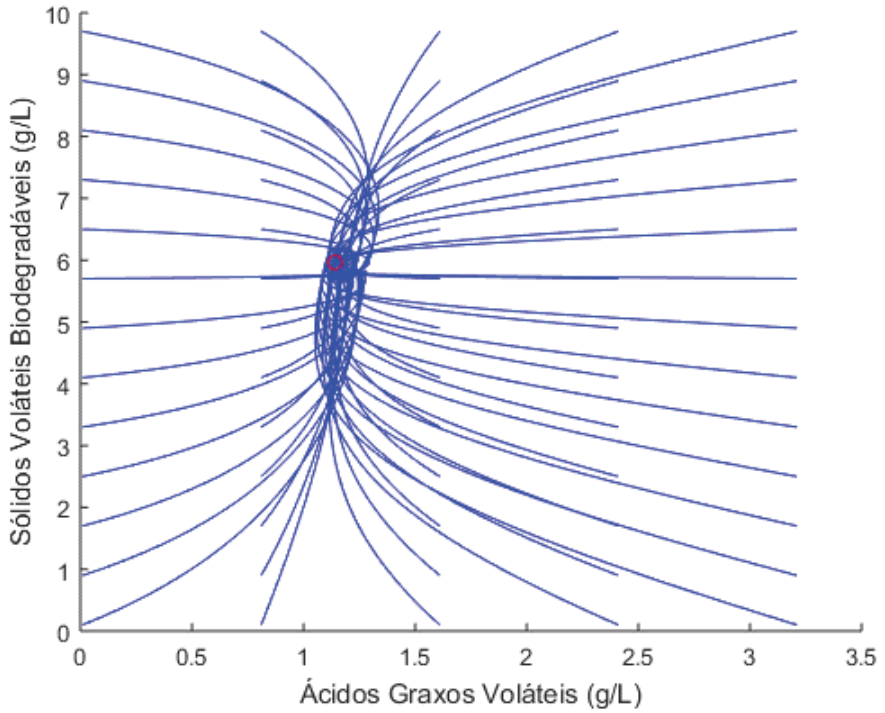


Figura 4.16 - Plano de fases. Sólidos orgânicos voláteis vs. Ácidos orgânicos voláteis, um estado estacionário

4.2 RESULTADOS DA ETAPA 2 – Simulação de Processos

O resultado da digestão do efluente líquido alimentado ao biodigestor é biogás e digestato, que pode ser utilizado como fertilizante. O biogás, com composição de 70% CH_4, 20% CO_2 e 10% H_2O (%molar), é produzido com taxa de 418,5 m³/h (ou 104,6 m³/h para cada biodigestor). O subproduto líquido da digestão anaeróbia, o digestato, é produzido com taxa de 209 m³/h, sendo majoritariamente composto por água, células e residual de 5,16 g/L de sólidos orgânicos voláteis e 1,0g/L de ácidos orgânicos voláteis. A redução da carga orgânica no efluente líquido, estabilizado pela digestão anaeróbia é considerada um bio-tratamento. A redução da carga orgânica alcançada neste processo foi de 79,6%, considerando que o resíduo é alimentado ao biorreator com concentração de sólidos voláteis de 30,2g/L e o biodigestato resultante é composto pelo residual de S_{BVS} e S_{VFA}. Isto significa que uma parcela significativa da carga orgânica contida no resíduo agroindustrial é removida, o que já seria um ganho ambiental mesmo em uma hipotética não geração de biogás.

O biogás é produzido no complexo de 4 biodigestores a uma taxa de 771,5 kg/h. O biogás na saída do biodigestor ainda está saturado de vapor de água. Portanto, após a realização do primeiro flash a vazão mássica de biogás é de 723 kg/h com composição molar de 75,6% CH_4, 21,5% CO_2 e 2,8% H_2O e poder calorifico (LHV – *lower hearting value*) de 27.428 kJ/kg.

O biogás é processado na etapa de compressão em 3 estágios para elevar a pressão de 1 bar até 14 bar. No final da etapa de compressão o biogás com vazão mássica de 710 kg/h contém 77,3% CH_4, 22,02% CO_2 e 0,6%H_2O a 135°C e LHV de 27.940 kJ/kg. A última etapa de compressão não contém *intercooler* pois o produto desta etapa é direcionado para a câmara de combustão. O consumo de energia elétrica nos compressores totaliza 107 kW ou 385,2 MJ/h. Os trocadores de calor consomem 11,83 t/h de água de resfriamento (5,95 t/h no primeiro estágio e 5,88 no segundo estágio). A carga térmica demandada pelos trocadores é de 124,31 MJ/h no primeiro estágio e 122,80 MJ/h no segundo estágio.

Os resultados da simulação referente a geração de eletricidade através do ciclo simples indicam 40,0% de eficiência energética. Esta eficiência está de acordo com a eficiência esperada para um sistema de ciclo-simples (EPA, 2013). A eficiência é calculada pela razão entre o saldo de geração de energia e o potencial energético do gás combustível. O biogás comprimido (710 kg/h a 14 bar) é combustível para a geração de 4,40 MW de energia na turbina. O compressor de ar da turbina a gás demanda 2,10 MW de energia para pressurizar 19,6 t/h de ar atmosférico que é alimentado à câmara de combustão. Gás exausto

é liberado com 4,44% (molar) de CO_2, resultando em uma taxa de emissão de 1.397,66 $kgCO_2/h$ ou 12.251,47 t/ano. O fator de emissão de CO_2 para o sistema simulado foi de 595 $kgCO_2/MWh$. O fator de emissão de CO_2 é comparado com outras fontes de geração de energia elétrica na Tabela 4.1 conforme índices reportado por IPCC (2007).

Tabela 4.1 – Índices de fator de emissão de CO_2 (IPCC, 2007)

Fonte de geração	***Fator de Emissão ($kgCO_2/MWh$)***	***Comparação (%)***
Carvão (pulverizado)	*1100,0*	*-84,79*
Carvão (com leito fluidizado)	*874,0*	*-46,79*
Óleo combustível	*774,0*	*-30,15*
Óleo diesel	*762,0*	*-28,13*
*Gás natural (ciclo simples)**	*532,0*	*+10,55*

(*) Considerando eficiência de CC de 45%

Apesar do fator de emissão de CO_2 de bioenergia ser maior quando comparado com o do gás natural por ciclo simples, deve-se ressaltar que para a bioenergia a emissão de CO_2 é de fonte biogênica. Adicionalmente, aproximadamente 0,40 t/h ou 3.172 t/ano de CH_4, resultado da digestão anaeróbia e utilizado para geração de eletricidade, deixou de ser emitido na atmosfera na forma de CO_2. A transição entre a emissão de moléculas de CH_4 para moléculas de CO_2 minimiza os impactos atmosféricos já que a molécula de CH_4 possui *GWP* pelo menos 21 vezes maior que a molécula de CO_2.

Gás exausto da turbina a 550°C, é resfriado até 135°C em um sistema de recuperação de energia térmica que produz 4,17 t/h de vapor de baixa pressão (LP - *Low Pressure*) que pode ser utilizado para o sistema de aquecimento dos biorreatores ou exportado para a rede de aquecimento de casas. A Figura 4.17 reúne os principais resultados e indicadores do projeto conceitual proposto para geração de bioenergia a partir de efluente líquido.

O saldo de energia elétrica resultante da planta pode ser exportado e vendido. Segundo a ANEEL (2019) o consumo médio brasileiro por residência é de 170 kW/mês. Portanto, a planta projetada tem capacidade para suprir uma região com aproximadamente 18.000 MWh/ano ou 8.800 residências/ano.

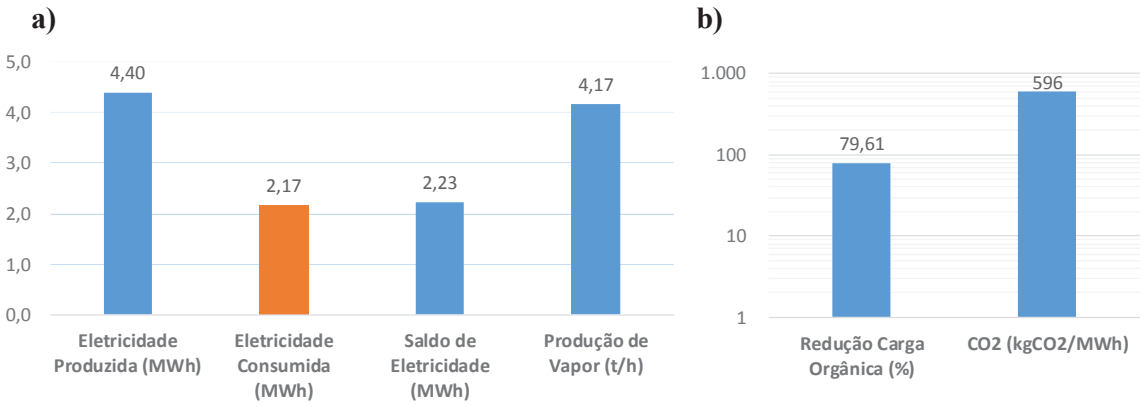


Figura 4.17 - Resultados da Etapa 2: a) Balanço de Eletricidade (MWh) e Produção de Vapor (t/h); b) Redução de carga orgânica (%) e Emissão de CO_2 (kg/MWh).

4.3 RESULTADOS DA ETAPA 3 – Avaliação de Desempenho Técnico

É sabido que a geração de bioenergia a partir de resíduos orgânicos é muito sensível às condições de operação do processo, tais como: tempo de retenção hidráulica (HRT, *hydraulic retention time*) e carga orgânica (OLR, *organic load rate*), conforme apresentado na Figura 4.18 e Figura 4.19. Os resultados elucidados nas Figuras demonstram que o indicador de redução da biodegrabilidade também é dependente de HRT e OLR, e apresenta curva de evolução contrária à de produção de biogás e geração de bioenergia. Portanto, o conflito de escolhas estabelece um *trade-off* de desempenho entre a minimização do passivo ambiental, isto é, redução da carga orgânica no efluente digerido, e a geração de bioenergia.

A análise de desempenho da Figura 4.18 e Figura 4.19 indica que HRT entre 7 e 8 dias e OLR entre 4 e 5 gSV/L.dia proporcionam os melhores desempenhos. O *Net Power Generation* é o saldo de geração de energia produzida na planta, e para a faixa de HRT e OLR supracitada tem-se um saldo positivo de aproximadamente 2 MWh. A vazão mássica de metano produzida é de aproximadamente 340 kg/h. A redução de compostos biodegradáveis é de aproximadamente 82%.

Considerando-se que a carga orgânica presente no efluente líquido adicionada ao biodigestor seja mantida em 30,2 gSV/L, valor utilizado na planta piloto de HAUGEN (HAUGEN, BAKKE e LIE, 2013)(2013), para alcançar a operação da planta com desempenho mencionado, sugere-se que a vazão volumétrica de efluente seja controlada em 36,45 m^3/h (taxa de diluição = 0,125 dia^{-1}) dessa forma o HRT será de 8,0 dias e OLR será de 3,77 gSV/L.d , valores dentro da faixa na qual foi identificado o melhor desempenho.

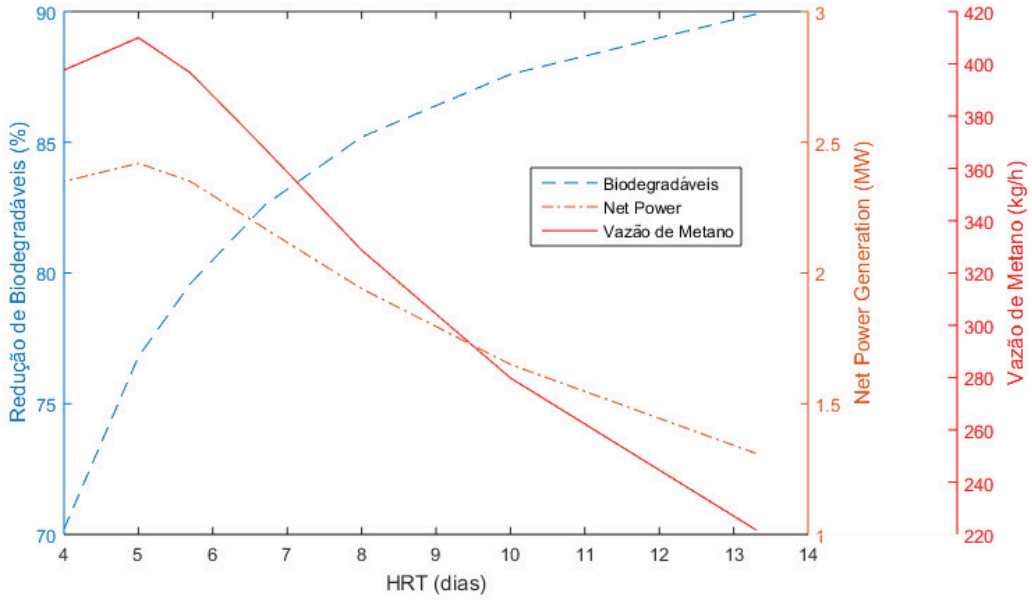


Figura 4.18 - Respostas do sistema a modificações de HRT

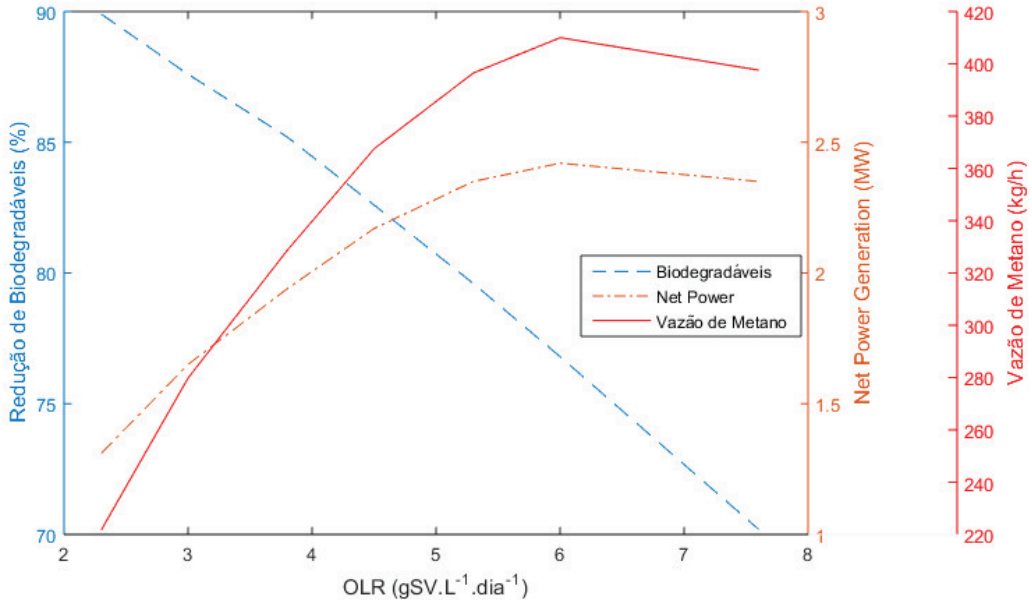


Figura 4.19 - Respostas do sistema a modificações de OLR

4.4 RESULTADOS DA ETAPA 4 – Avaliação Econômica

Na Etapa 4, foram realizadas estimativas de custo fixos para a planta de geração de eletricidade. Inicialmente as atualizações de custo referente ao sistema de biodigestor e turbina foram feitas para o ano de 2014, mesmo ano das cotações do banco de dados do *software Aspen Process Economic Analyzer.* Ao final desta seção o investimento de capital

da planta é atualizado para o ano de 2018.

A estimativa do investimento do sistema de biodigestão está elucidada na Tabela 4.2, correspondente a cotação reportada por NREL (2015), após a atualização temporal de custos de acordo com o índice CEPCI e redimensionamento para a capacidade requerida. O sistema de biodigestores tem investimento de US$ 4,75 milhões, com ano base de 2014. O sistema é composto 4 biodigestores, bombas de recirculação, misturadores, sistema de controle de temperatura e um sistema de *flare* para queima de biogás em caso de falha na operação e necessidade de queima.

Tabela 4.2 – Atualização do custo e redimensionamento dos biodigestores

Equipamento	***Cotação (US$)***	***Capacidade***	***Ano da cotação***	***CEPCI***
Sistema de Biodigestores (NREL)	*25.800.000,00*	*27.211,00 kg DQO/h*	*2012*	*584,6*
Sistema de Biodigestores (Neste trabalho)	*4.749.760,89*	*1.661,24 kg DTeO/h*	*2014*	*576,1*

O sistema de geração de energia tem investimento estimado de acordo NREL (2010), que indica que um sistema de turbinas à gás tem custo de equipamento instalado de 445 US$/kW para turbinas de até 100MW. A Tabela 4.3 elucida a estimativa de investimento para a geração de 4,4 MW. Estima-se que o sistema de geração de eletricidade tem investimento de US$ 2,74 milhões, com ano base de 2014.

Tabela 4.3 – Estimativa de custo para turbinas à gás

Equipamento	***Cotação***	***Capacidade***	***Ano da cotação***	***CEPCI***
Turbina à gás (NREL)	*US$ 445.000*	*1.000 kW*	*2006*	*499,6*
Turbina à gás (Neste trabalho)	*US$ 1.958.000,39*	*4.400 kW*	*2014*	*576,1*

O sistema de compressão teve investimento estimado através da plataforma AspenPEA. Os equipamentos avaliados foram: compressor de biogás; *intercoolers*; vasos de separação (*knockout*) e trocador de calor para recuperação de energia térmica do gás exausto. Foi considerado um projeto situado na América Latina, com processo de complexidade típica e sistemas de controle e instrumentação do tipo SIS (*Safety Intrumented Systems*) mais sofisticado disponível. A área de construção de 100x50 metros do tipo

GRADE (sofisticação básica de estrutura, como: iluminação a cada 15 metros, tipo de concreto, etc.) e especificação de projeto do *Grass Roots* (inclui aparelhagem e cabeamento para distribuição de energia). O sistema de compressão totaliza US$ 2,31 milhões de custo de aquisição.

Tabela 4.4 - Estimativa de custos dos equipamento complementares via Aspen PEA.

Equipamento	*Custos Aquisição (US$)*	*Descrição*
P-101	*59.500,00*	*Bomba de efluente*
P-102	*83.100,00*	*Bomba de biofertilizante*
E-101	*62.900,00*	*Intercooler*
E-102	*62.900,00*	*Intercooler*
E-103	*774.400,00*	*Recuperador de Energia*
F-101	*136.400,00*	*Vaso de knockout*
F-102	*136.400,00*	*Vaso de knockout*
F-103	*130.100,00*	*Vaso de knockout*
K-101	*864.600,00*	*Compressor de biogás*
	Total US$ 2.310.300,00	

O custo de ISBL da planta de geração de eletricidade totaliza US$ 9,8 milhões. Do total, 53% é correspondente ao sistema de biodigestores, 25% corresponde ao sistema de compressão e 22% corresponde ao sistema de geração de eletricidade (turbina a gás). A Figura 4.20 mostra a distribuição dos custos no ISBL da planta.

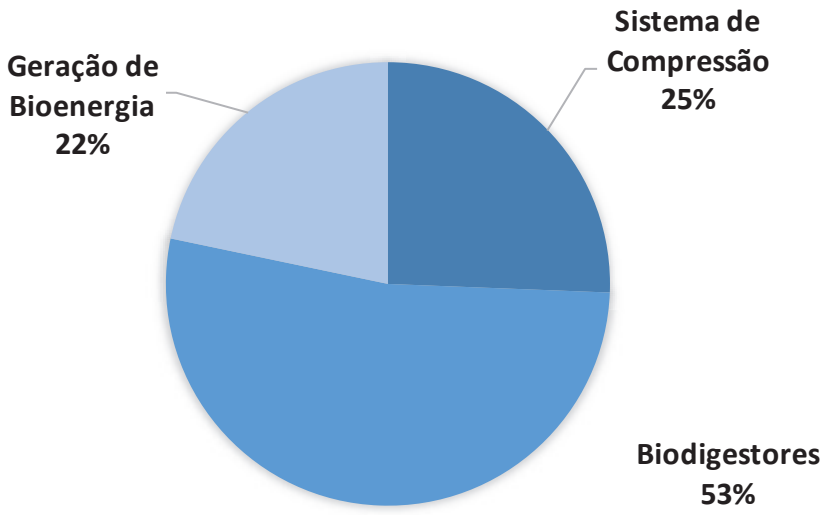


Figura 4.20 – Percentual de cada área no investimento de capital da planta

O investimento de capital (FCI) para a planta é de US$ 11,97 milhões, conforme a

Tabela 4.5, para o primeiro trimestre de 2014. Este investimento inclui equipamentos não previstos, contingências e capital adicional. Não foram realizadas estimativas referente a construção da área de OSBL. Destaca-se, ainda, a possibilidade da inclusão do investimento referente a destinação do digestato, que no presente trabalho opta-se pelo envio à zona rural como fertilizante. Contudo, é sabido que o processo de DA pode ter aumento de eficiência com a inclusão de uma bateria de centrífugas para a lama residual da digestão. O produto líquido das centrífugas pode ser destinado novamente à digestão sob a forma de reciclo ou enviado para uma área de tratamento de efluentes. Já o produto sólido das centrífugas pode ser matéria-prima para queima (NREL, 2015).

Tabela 4.5 – Resultados dos Custos fixos totais para a unidade de geração de bioenergia

Componente	***MM US$***
Área 1 – Biodigestores	*4,75*
Área 2 – Sistema de Compressão	*2,31*
Área 3 – Geração de Bioeletricidade	*1,96*
ISBL	*9,02*
OSBL	*-*
Contingência de Processo (PCC)	*0,45*
Investimento Total no Processos (TPC)	*9,46*
Contingências de Projeto (PJC)	*1,42*
Capital Adicional Requerido (ACR)	*0,54*
Investimento de Capital (FCI)	***11,43***

Com a atualização temporal do investimento de capital (FCI) para o ano de 2018, ocorre o aumento de FCI para US$ 12,97 milhões, pois o índice de atualização CEPCI apresentou elevação de 576,1 para 603,1 no intervalo de 2014 a 2018.

A estimativa do custo de manufatura é feita a partir das premissas e metodologia sugerida por Turton (2012). Considerando 13 equipamentos principais, a metodologia sugere 14 operadores a um custo por operador de US$30mil/ano. Também foi adotado o custo de US$ 14,8 /1000m³ para a água de resfriamento e o custo de tratamento de US$56 /1000m³ para o efluente gerado. Os demais custos são apresentados na Tabela 4.6. O COM estimado é de US$ 3,06 milhões/ano considerando que o custo de matéria-prima é nulo. O DMC estimado é de US$ 1,33 milhões/ano, o GMC é US$ 0,74 milhões/ano e FMC de 0,68 milhões/ano.

Tabela 4.6 - Resultados dos custos operacionais

Componente	***US$***
Matéria Prima (CRM)	-
Tratamento de Efluentes (CWT)	*23.548,00*
Utilidades (CUT)	*1.535,70*
Mão de Obra (COL)	*414.00,00*
Trabalho de supervisão e escritório	*74.520,00*
Manutenção e reparo	*718.604,00*
Suprimentos operacionais)	*107.090,00*
Taxas de laboratório	*62.100,00*
Patentes e Royalties	*99.086,00*
Custos Diretos de Manufatura (DMC)	**1.501.076,00**
Despesas Gerais de Manufaturas (GE)	
Custos de administração (AC)	*181.004,00*
Custos de distribuição e venda (DSC)	*364.716,00*
Pesquisa e desenvolvimento (RD)	*165.780.00*
Despesas Gerais de Manufatura (GE)	***711.501,00***
Custos Fixos de Operação (FMC)	
Depreciação	*1.196.007,00*
Impostos locais e seguro	*383.028,00*
Custo Fixos Adicionais	*724.019,00*
Depreciação, Impostos e Seguro (FMC)	***2.304.011,00***
Custo de Operação (COM) (a.a)	**4.512.570,00**

O custo de manufatura (COM) da planta de produção de energia elétrica a partir de resíduo é de US$ 4,5 milhões/ano, considerando 10% de taxa de depreciação.

Considera-se que a estimativa de FCI e COM feita a partir de um fluxograma de

processo, projeto de classificação FEL-1, tem intervalo de acurácia de -25% a +40% do valor estimado, estabelecendo uma faixa de assertividade. Dessa forma, são propostos pontos mínimos, máximos e centrais para a avaliação de FCI em cada área, conforme descrito na Tabela 4.7. A partir dos pontos estabelecidos, é realizado um planejamento fatorial com estimativas geradas para COM e FCI. A Tabela 4.8 elucida os resultados do planejamento fatorial.

Tabela 4.7 - Pontos mínimos, máximos e centrais em relação ao FCI em MM US$.

Área	*Mínimo (-1)*	*Central (0)*	*Máximo (1)*
Área 1 – Biodigestores	*3,56*	*4,75*	*6,65*
Área 2 – Sistema de Compressão	*1,73*	*2,31*	*3,23*
Área 3 – Geração de Bioeletricidade	*1,47*	*1,96*	*2,74*
Total	***7,35***	***9,81***	***13,73***

Os resultados apresentados na Tabela 4.8 indicam que o FCI mínimo e máximo estimado é de 8,97 e 16,75 MM US$, com COM correspondente a 3,67 e 5,85 MM US$/ano. Este tipo de análise de sensibilidade cria uma zona de assertividade da avaliação econômica considerando o erro de estimativa para cada área.

Tabela 4.8 - Resultado de FCI e COM em MM US$ para a faixa de acurácia

Estimativa			*Área 1*	*Área 2*	*Área 3*	*FCI (MM US$)*	*COM (MM US$)*
-1	*-1*	*-1*	*3,56*	*1,73*	*1,47*	***8,97***	***3,67***
-1	*-1*	*1*	*3,56*	*1,73*	*2,74*	***10,66***	***4,15***
-1	*1*	*-1*	*3,56*	*3,23*	*1,47*	***10,96***	***4,23***
-1	*1*	*1*	*3,56*	*3,23*	*2,74*	***12,65***	***4,70***
1	*-1*	*-1*	*6,65*	*1,73*	*1,47*	***13,07***	***4,82***
1	*-1*	*1*	*6,65*	*1,73*	*2,74*	***14,76***	***5,29***
1	*1*	*-1*	*6,65*	*3,23*	*1,47*	***15,06***	***5,38***
1	*1*	*1*	*6,65*	*3,23*	*2,74*	***16,75***	***5,85***
0	*0*	*0*	*4,75*	*2,31*	*1,96*	***11,97***	***4,51***

Trabalhos disponíveis na literatura realizam a análise de FCI e COM com o processamento de *upgrade* do biogás a biometano (GEBREZGABHER et al., 2010;

COLLET et al., 2017; ANGELIDAKI et al., 2018) . Dessa forma, alguns resultados e informações não são perfeitamente aplicáveis para comparação com o presente investimento desenvolvido, pois lidam com outros tipos de processos e a análise não refletiria a verdade. Além disso, a matéria-prima utilizada na DA é determinante no rendimento, tipo de processamento do biogás e custo gerado. Portanto, é preciso realizar a comparação de FCI com unidades que utilizaram o mesmo tipo de substrato e processo. Resguardada a limitação de dados disponíveis, os trabalhos de (MÉSZÁROS, JÁN e PETER, 2014) e (BUER, 2012) são base para comparação de índices econômicos, pois dentre os averiguados são os que tem abordagem mais semelhante e contemplam a conversão direta de biogás a eletricidade.

Avalia-se o *Levelized Cost of Eletricity* (LCoE) para o processo proposto. Este índice serve de baliza para custos de investimentos para a geração de energia elétrica, e é especialmente importante quando necessário comparar fontes renováveis com as tradicionais. O LCoE é a razão entre o FCI e geração de energia elétrica, tipicamente em US$/MWh. Dessa forma, para construção do índice deve-se retomar os resultados técnicos. A capacidade projetada diária do processo simulado é de 17.424 Nm^3/dia de biogás com geração líquida de energia 2,23 MW. De forma conservadora, considera-se o fator de disponibilidade da planta de 90% do ano em operação (7900h/ano), totalizando geração de 18.600MWh. Para a unidade projetada o índice LCoE é de 647 US$/MWh, e considerando a faixa de acurácia de estimativa de FCI, o índice varia entre 482 US$/MWh e 900 US$/MWh. Este índice é comparado com projetos que produzem bioenergia a partir da digestão de resíduo de milho, resíduo orgânico, energy crop e lodo de esgoto. A Figura 4.21 apresenta os resultados de LCoE com as faixas de mínimo e máximo referente a estimativa deste trabalho. Os índices de LCoE dos trabalhos utilizados na comparação, foram atualizados para o ano de 2018 utilizando o CEPCI.

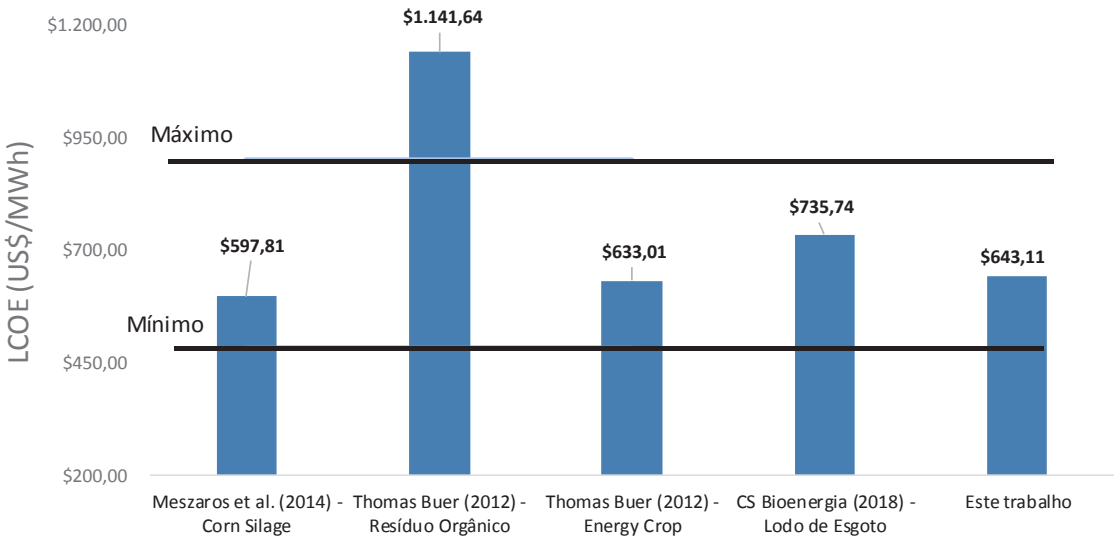


Figura 4.21 - Índice de custo para geração de energia. Referências na figura.

Recentemente, a planta de biogás da CS Bioenergia localizada no município de São José dos Pinhais, estado do Paraná, obteve licença para operação e irá gerar 2,8MW de energia elétrica utilizando resíduo do tratamento de esgoto. O investimento divulgado para completo comissionamento da planta foi de R$ 62 milhões, resultando no índice de investimento de 735 US$/MWh, índice compreendido na faixa estimada de incertezas de projeto (ÉPOCA NEGOCIOS, 2019).

Através das estimativas de FCI e COM é possível realizar a análise de viabilidade econômica do projeto considerando a fonte de receita pela venda de energia elétrica, conforme apresentado na Tabela 4.9. Considerando a geração de 18.600 MWh/ano e o preço mínimo de venda de energia elétrica por fonte de biogás, de acordo com a Portaria do MME n°65, em R$ 390/MWh ou aproximadamente US$ 100/MWh, o projeto se mostra inviável. Mesmo removendo os impostos do COM, a arrecadação só é superior quando o preço de venda de energia elétrica é acima de US$222/MWh. Entretanto, o valor presente líquido (VPL) do projeto (considerando 20 anos de operação) só se mostra positivo a partir do valor de US$ 312/MWh. Desta forma, em condições inferiores a supracitadas, o projeto é inviável.

Tabela 4.9 – Avaliação de viabilidade de projeto

Caso	*COM (MM US$/ano)*	*Preço de Venda de energia elétrica (US$/MWh)*	*Arrecadação (MM US$)*	*Saldo (MM USD)*
Base	*4,50*	*100*	*1,86*	*- 2,65*
Removendo Impostos	*4,13*	*100*	*1,86*	*- 2,27*
Saldo nulo	*4,13*	*222*	*4,13*	*0*

Caso	*COM (MM US$/ano)*	*Preço de Venda de energia elétrica (US$/MWh)*	*Arrecadação (MM US$)*	*Saldo (MM USD)*
VPL nulo	*4,13*	*312*	*5,89*	*1,69*

Entretanto, é possível que a fonte de receita do projeto não seja apenas resultado da venda do saldo de energia elétrica, mas também, pela produção de vapor e venda de digestato (como biofertilizante). Dessa forma, a melhor maneira de avaliar a viabilidade do projeto é através da estruturação em cenários, sendo eles: (i) cenário pessimista; (ii) cenário realista e; (iii) cenário otimista.

O cenário pessimista consiste na receita pela venda do saldo de energia elétrica, a penalização (e.g. gasto) sobre a geração de biodigestado e o consumo de todo o vapor de baixa pressão (LP) (e.g. saldo nulo). O cenário realista consiste na receita pela venda do três produtos: saldo de energia elétrica, biodigestato e vapor. No cenário otimista, além de considerar a receita pela venda dos 3 produtos, considera também a precificação de carbono, já que a energia elétrica é produzida a partir de fonte biogênica e pode substituir outras fontes não renováveis que tem balanço positivo na emissão de carbono.

O fluxo de caixa do projeto assume premissas e considerações baseadas em WIESBERG et al. (2017), são elas: capital de investimento realizado nos dois primeiros anos (ano 0 e 1); o horizonte de operação do projeto (20 anos); de precificação de carbono de 75 US$/t CO_2. Já os valores referentes a venda do biodigestato foram baseados segundo a referência europeia EA (2009). O valor de venda de vapor de baixa pressão (LP) está baseado no preço de compra de utilidades reportados por TURTON (2012). A Tabela 4.10 reúne as premissas para cada cenário da planta com geração de energia elétrica por turbina a gás.

Tabela 4.10 – Premissas para cenários de fluxo de caixa da planta com turbinas a gás.

Variáveis	*Unidades*	*Otimista*	*Realista*	*Pessimista*
Energia Elétrica	*(US$/MWh)*	*200*	*150*	*100*
Vapor LP	*(US$/t)*	*29*	*16*	*0*
Digestato	*(US$/t)*	*15*	*5*	*-1,0*
Precificação de Carbono	*(US$/tCO2)*	*75*	*0*	*0*

Na Figura 4.22 o fluxo de caixa acumulado é apresentado para os três cenários

avaliados. No cenário pessimista o projeto se mostra inviável, mesmo considerando uma possível precificação de carbono. Entretanto, no cenário realista e otimista o projeto se mostra viável mesmo negligenciando a precificação de carbono, com *payback* de 12,9 e 1,8 anos, VPL de 3,86 e 73,56 MMUS$ e TIR de 8,88% e 72,38% (a.a), respectivamente. Considerando a precificação de carbono o *payback* do projeto reduz para 7,65 e 1,68 anos, para o cenário realista e otimista, respectivamente.

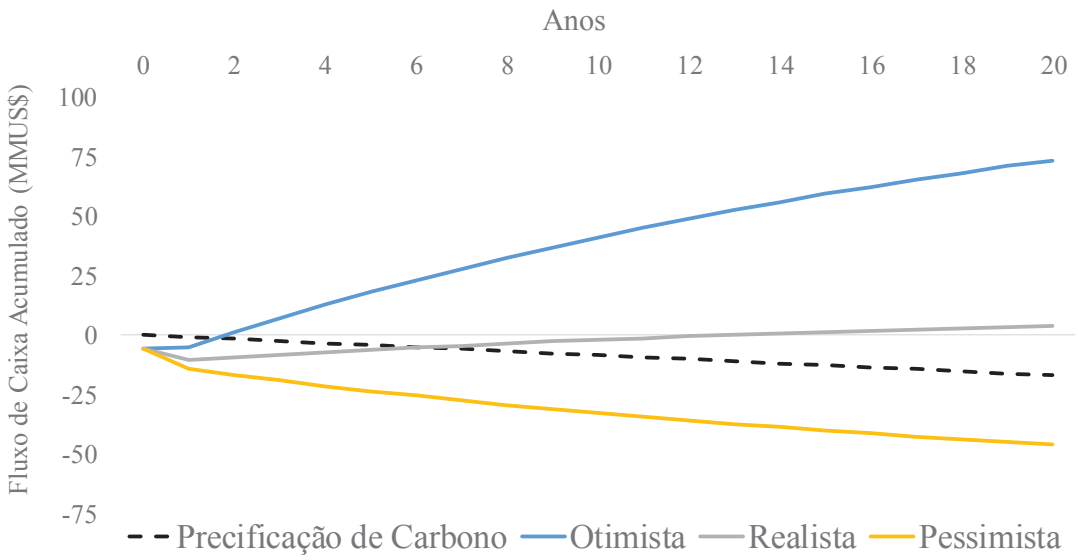


Figura 4.22 - Fluxo de caixa por cenários para projeto com turbinas a gás.

Uma avaliação econômica adicional do projeto foi realizada, considerando que a geração de energia elétrica é feita por motores do tipo ciclo-otto, e não por tubinas a gás como proposto nos cenários anteriores. Esta mudança na tecnologia de geração de energia elétrica tem impacto no FCI e COM, motivadas pelas seguintes características de motores do tipo ciclo-otto: (i) não é necessário a etapa rigorosa de compressão do biogás como foi aplicada na turbinas a gás (pode ser utilizado biogás em pressão de 2 bar); (ii) motores do tipo ciclo-otto tem vida útil menor que o tempo do projeto (50.000 horas), sendo assim, é preciso realizar compra de novos conjuntos de motor durante o período de vida do projeto; (iii) a eficiência energética dos motores é menor (aproximadamente de 30%) quando comparada as turbinas a gás, que tipicamente apresenta 40% de eficiência no ciclo simples, sendo assim, o saldo de energia disponível para venda é menor; (iv) e custo de instalação do conjunto de motores é de aproximadamente 600 US$/kW líquido produzido. Todas as premissas foram baseadas em JÖRß et al. (2003).

O FCI para a planta com a utilização de motores do tipo ciclo-otto é de US$ 7,64

milhões e COM de US$ 3,27 milhões/ano. A área 2 – zona de compressão, pode ser negligenciada na estimativa de FCI, pois não é necessária elevação severa de pressão do biogás. A área 1 – biodigestão corresponde a 83% do investimento de capital, enquanto que os conjuntos de motores - área 3 correspondem a 17% (US$ 1.0 milhão), com a ressalva de que o capital de investimento dos motores é necessário a cada 6 anos.

O fluxo de caixa para a geração de energia elétrica com conjunto de motores ciclo-otto é apresentado na Figura 4.23, com destaque para que este fluxo de caixa não considera a receita pela venda de vapor LP, pois não há recuperação energia dos gases exaustos. As setas em vermelho destacam o momento em que novos conjuntos de ciclo motores são adquiridos. Os cenários pessimista, realista e otimista para ciclo motores mantiveram as premissas assumidas na Tabela 4.10. O cenário pessimista, assim como na turbina a gás, é inviável, isto é, o fluxo de caixa permanece negativo durante todo ciclo de vida do projeto mesmo considerando uma possível precificação de carbono. Já os cenários realista e otimista são viáveis, com *payback* em 13,95 e 1,33 anos, VPL de 1,85 e 63,25 MMUS$ e TIR de 8,11% e 101,39% (a.a), respectivamente.

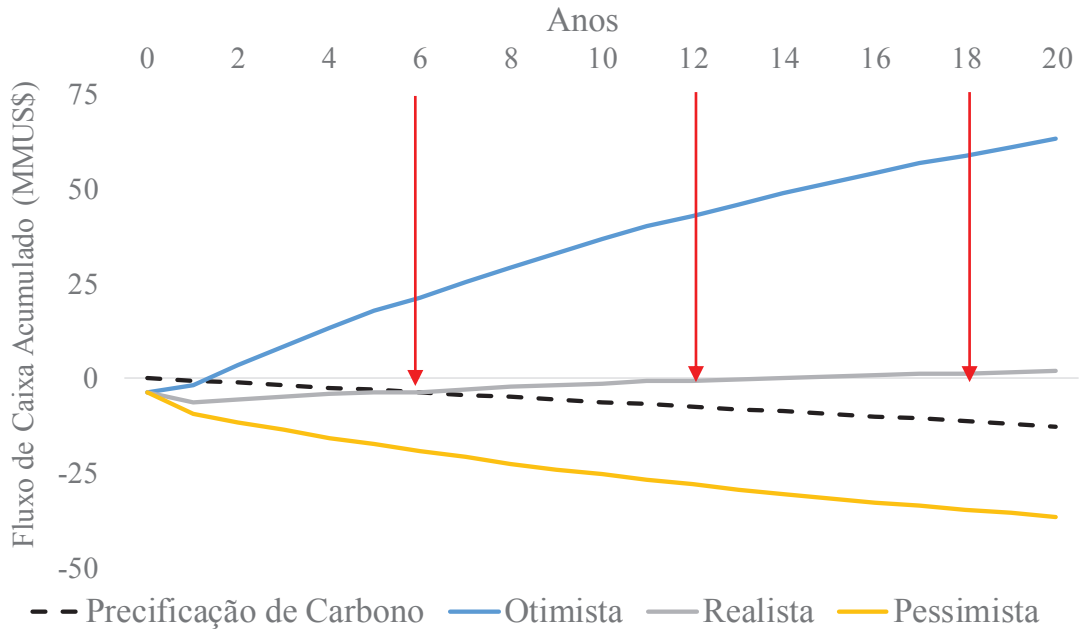


Figura 4.23 - Fluxo de caixa por cenários para projeto com motores do tipo ciclo-otto.

5- CONCLUSÃO E SUGESTÕES

O presente trabalho analisa e valida o modelo da digestão anaeróbia proposto por Hill (1983) e simplificado por Husain et al (1998) e empregado por Haugen et al (2013) em planta piloto cuja matéria-prima é resíduo. O modelo é usado para avaliar técnica e economicamente o processo de geração de eletricidade. Na primeira etapa do trabalho, o modelo foi codificado e implementado em MATLAB para validação. Na etapa subsequente, o modelo testado foi implementado no simulador de processos AspenPlus (AspenTech Inc.) uma unidade de produção e processamento de biogás e geração de eletricidade. Os biodigestores utilizaram o modelo fenomenológico para representar a DA após implementação feita no ambiente de customização Aspen Costumer Modeler (AspenTech Inc.).

As variáveis de estado do modelo de DA demostraram ser sensíveis a diversos parâmetros, contudo, a principal variável de estado "*vazão de metano"* demonstrou alta sensibilidade ao parâmetro *k1*, referente a produtividade das células acidogênicas, o que sugere que devem ser realizados programação experimental para ajustes destes parâmetros. O estudo ainda demonstrou que a parcela de orgânicos biodegradáveis (B_0) é determinante na produção de metano, o que ressalta a importância de processos de pré-tratamento para que ocasiões em que a matéria-prima apresente baixa índices de biodegrabilidade, como, por exemplo, cavaco de madeira. Em tempo, observou-se que a influência das oscilações diárias da temperatura externa no biodigestor resulta em leve incremento da temperatura reacional, porém, a resposta na variável "*vazão de metano*" é pouco significativa.

A avaliação técnica da unidade de geração de eletricidade é feita por indicadores chaves de processo (KPIs). O principal é a geração líquida de eletricidade, ou *Net Power Generation*, o que demonstra que a unidade além de ser autossustentável pode exportar energia elétrica. A geração total de eletricidade da unidade é de 4,4MW e o consumo de 2,17MW, o que resulta em uma geração líquida de energia elétrica de 2,23MW. A unidade projetada também é efetiva no tratamento do passivo ambiental, este resultado foi constatado através do KPI de redução de biodegrabilidade, na qual a carga orgânica é reduzida em 79% em relação ao efluente líquido inicial. A unidade ainda produz vapor de baixa pressão, que pode ser utilizado dentro do complexo ou exportado. Em relação a emissão de GEE, a unidade utiliza mais de 3.100 t/ano de CH_4 para geração de eletricidade. Dessa forma, evita-se emitir o carbono sob a forma de CH_4 que ocorrerá como CO_2, molécula com potencial de GW 21 vezes menor. O fator de emissão de CO_2 para a geração de eletricidade foi 84% menor que através de carvão, 28% menor que via diesel e 10% maior que gás natural.

Ressalta-se que, no caso do biogás, a emissão de CO_2 é de origem biogênica e, portanto, não contribui como *footprint* de CO_2.

Foi realizada a análise de desempenho da planta projetada e identificado que os parâmetros operacionais HRT e OLR podem ser modificados para auxiliar no *trade-off* de decisões. A partir do efluente sugerido por Haugen et al. (2013), foi identificado que a faixa de operação de HRT e OLR que proporciona redução de 82% de biodegrabilidade, produção de 340 kg CH_4/h e geração de eletricidade em saldo positivo de aproximadamente 2MW.

A estimativa do investimento de capital (FCI) sugere que o sistema de digestão é a área mais onerosa, correspondendo a 53% do total. O sistema de compressão corresponde a 25% do FCI e o sistema de geração de eletricidade corresponde a 22%. O FCI foi estimado em US$ 11,97 milhões, relativo ao 1°trimestre de 2018. O COM estimado foi de US$4,51 milhões/ano. O índice técnico-econômico LCoE para a geração de eletricidade a partir de biogás foi de 643 US$/MWh. Ressalta-se que não foram considerados custos de matéria-prima., negligenciando o custo referente à logística do resíduo, já que a digestão utiliza resíduo agrícola como substrato. O projeto mostra-se inviável se o preço de venda da energia elétrica for mantido abaixo de US$312/MWh, considerando que a fonte de receita do projeto é exclusivamente através da venda de energia elétrica. Ainda que a tecnologia de geração de energia elétrica seja alterada para motores do tipo ciclo-otto, o cenário pessimista, que consiste em receita apenas pela através da energia elétrica, o projeto é inviável. Já a avaliação dos cenários realista e otimista, o projeto se mostra viável tanto na utilização de turbinas a gás como com conjunto de motores do tipo ciclo-otto para geração de energia elétrica.

Sugere-se para trabalhos futuros a inclusão do estudo do processamento da lama de digestão. Neste trabalho, é considerado que a suspensão gerada é integralmente destinada como biofertilizante, porém, é conhecido que processos como baterias de centrífugas aumentam a eficiência do processo. Uma segunda sugestão é avaliação da transformação do biogás em biometano. Dessa forma, os índices técnicos e econômicos podem ser confrontados entre duas aplicações: alimentar o *grid* energia elétrica ou a rede de distribuição de gás natural.

REFERÊNCIAS

ABBASI, T.; TAUSEEF, S. M.; ABBASI, S. A. **Biogas Energy**. 2012. 223 ISBN 978-1-4614-1039-3.

ABRELPE. **Atlas Brasileiro de Emissões de GEE e Potencial Enegético na Destinação de Resíduos sólidos** 2013.

ACHINAS, S.; ACHINAS, V.; EUVERINK, G. J. W. A Technological Overview of Biogas Production from Biowaste. **Engineering,** v. 3, n. 3, p. 299-307, 2017/06/01/ 2017.

AL-MALAH, K. I. Introducing Aspen Plus. **Aspen Plus®**, 2016/10/17 2016.

AL SEADIT et al. **Biogas Handbook**. Biogas for Eastern Europe, 2008. ISBN 978-87-992962-0-0

ANASTÁCIO, M. C. F. **Produção de Energia na Forma de Biogás a Partir de Resíduos Animais para o Desenvolvimento Rural**. 2010. 65 (Msc). Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto (FEUP), Universidade do Porto

ANDREWS, J. F.; GRAEF, S. P. Dynamic Modeling and Simulation of the Anaerobic Digestion Process. In: (Ed.). **Anaerobic Biological Treatment Processes**: AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, v.105, 1971. cap. 8, p.126-162. (Advances in Chemistry). ISBN 0-8412-0131-5.

ANEEL. **Banco de Informações de Geração (BIG) - Combustivel Biomassa** 2019.

ANGELIDAKI, I.; ELLEGAARD, L.; AHRING, B. K. A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. **Biotechnology and Bioengineering,** v. 63, n. 3, p. 363-372, 1999.

ANGELIDAKI, I.; SANDERS, W. Assessment of the anaerobic biodegradability of macropollutants. **Re/Views in Environmental Science & Bio/Technology,** v. 3, n. 2, p. 117-129, 2004/06/01 2004.

ANGELIDAKI, I. et al. Biogas upgrading and utilization: Current status and perspectives. **Biotechnology Advances,** v. 36, n. 2, p. 452-466, 2018/03/01/ 2018.

ANP. **Biometano**. BIOCOMBUSTÍVEIS 2018.

ARINELLI, L. D. O. **Dinâmica de Processamento Offshore de Gás Natural Rico em CO2: Desidratação TEG, Expansão Joule-Thomson e Permeação em Membranas versus Separador Supersônico**. 2015. (M.Sc). UFRJ

ARIS, R. Mathematical Modeling: A Chemical Engineer's Perspective. In: STEPHANOPOULOS, G. e PERKINS, J. (Ed.). **Process Systems Engineering**. Florida: Academic Press, v.1, 1999. ISBN 978-0-12-604585-7.

ARUOBA, S. B.; FERNÁNDEZ-VILLAVERDE, J. A comparison of programming languages in macroeconomics. **Journal of Economic Dynamics and Control,** v. 58, p.

265-273, 2015/09/01/ 2015.

ASCHMANN, V. et al. **Biogashandbuch Bayern – Materialienband. Augsburg, Germany.** 2007.

ASPENTECH. User Guide (Documentation) - AspenPlus and AspenHYSYS 2016.

AUDIBERT, J. L. **Avaliação Qualitativa e Quantitativa do Biogás do Aterro Controlado de Londrina**. 2011. 186 (Msc). Universidade Estadual de Londrina

BAHMANI, M. A.; SHAFIEI, M.; KARIMI, K. Anaerobic digestion as a pretreatment to enhance ethanol yield from lignocelluloses. **Process Biochemistry,** v. 51, n. 9, p. 1256-1263, 2016/09/01/ 2016.

BANKS, C. J.; HUMPHREYS, P. N. The anaerobic treatment of a ligno-cellulosic substrate offering little natural pH buffering capacity. **Water Science and Technology,** v. 38, n. 4, p. 29-35, 1998/01/01/ 1998.

BATSTONE, D. J. et al. The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). **Water Science and Technology,** v. 45, n. 10, p. 65-73, 2002.

BERNDES, G.; HOOGWIJK, M.; VAN DEN BROEK, R. The contribution of biomass in the future global energy supply: a review of 17 studies. **Biomass and Bioenergy,** v. 25, n. 1, p. 1-28, 2003/07/01/ 2003.

BLASING, T. J. Recent Greenhouse Gas Concentrations. **Environmental System Science Data Infrastructure for a Virtual Ecosystem**, 2016.

BRAUN, R. Anaerobic digestion: a multi-faceted process for energy, environmental management and rural development. In: RANALLI, P. (Ed.). **Improvement of Crop Plants for Industrial End Uses**. Dordrecht: Springer Netherlands, 2007. p.335-416. ISBN 978-1-4020-5486-0.

BREEZE, P. Chapter 4 - Natural Gas–fired Gas Turbines and Combined Cycle Power Plants. In: BREEZE, P. (Ed.). **Power Generation Technologies (Second Edition)**. Boston: Newnes, 2014. p.67-91. ISBN 978-0-08-098330-1.

BUDZIANOWSKI, W. M.; POSTAWA, K. Renewable energy from biogas with reduced carbon dioxide footprint: Implications of applying different plant configurations and operating pressures. **Renewable and Sustainable Energy Reviews,** v. 68, p. 852-868, 2017/02/01/ 2017.

BUER, T. **Optimising the upgrading process of biogas**. Global Biomethane Congress. Brussels 2012.

BURKE, D. **Dairy waste anaerobic digestion handbook**. 2001. 1-57

CAMERON, I. T.; HANGOS, K. M. Process Modelling and Model Analysis. In: PERKINS, J. e STEPHANOPOULOS, G. (Ed.). **Process Systems Engineering**. Florida: Academic Press, v.4, 2001. ISBN 978-0-12-156931-0.

CHEMSTATIONS. About ChemCAD. 2018. Disponível em: < https://www.chemstations.com/CHEMCAD/ >.

CIBIOGÁS. Relatório do grupo GAHB sobre biogás e biometano. 2017.

COLLET, P. et al. Techno-economic and Life Cycle Assessment of methane production via biogas upgrading and power to gas technology. **Applied Energy,** v. 192, p. 282-295, 2017/04/15/ 2017.

DADA, O.; MBOHWA, C. Biogas Upgrade to Biomethane from Landfill Wastes: A Review. **Procedia Manufacturing,** v. 7, p. 333-338, 2017/01/01/ 2017.

DALMO, F. C. et al. Energy recovery overview of municipal solid waste in São Paulo State, Brazil. **Journal of Cleaner Production,** v. 212, p. 461-474, 2019/03/01/ 2019.

DANIEL-GROMKE, J. et al. Current Developments in Production and Utilization of Biogas and Biomethane in Germany. **Chemie Ingenieur Technik,** v. 90, n. 1-2, p. 17-35, 2018.

DE LA RUBIA, M. et al. **Effect of solids retention time (SRT) on pilot scale anaerobic thermophilic sludge digestion**. 2006. 79-86

DEMIRBAS, M. F.; BALAT, M.; BALAT, H. Potential contribution of biomass to the sustainable energy development. **Energy Conversion and Management,** v. 50, n. 7, p. 1746-1760, 2009/07/01/ 2009.

DOBRE, P.; NICOLAE, F.; RADOI MATEI, F. **Main factors affecting biogas production-An overview**. 2014. 9283-9296

EA. **Environment Agency - Anaerobic Digestate: Partial Financial Impact Assessment of the introduction of Quality Protocol for the production and use of anaerobic digestate**. 2009

EPA. **United States Environmental Protection Agency - Renewable Energy Fact Sheet: Microturbines** 2013.

EPE. Nota Técnica DEA 13/15 - Estudos de Demanda de Energia. 2016.

_____. **Impactos da participação do biogás e do biometano na matriz energética**. IV Fórum do Biogás 2017.

_____. **Empresa de Pesquisa Energética. Estudo sobre a Economicidade do Aproveitamento dos Resíduos Sólidos Urbanos em Aterro para Produção de Biometano. NOTA TÉCNICA EPE 019/2018**. Ministério de Minas e Energia 2018.

ÉPOCA NEGOCIOS. Brasil começará a produzir energia a partir de lixo e esgoto" "Acessado em Março/2019. 2019. Disponível em: < https://epocanegocios.globo.com/Brasil/noticia/2019/03/brasil-comecara-produzir-energia-partir-de-lixo-e-esgoto.html >.

FENG, Y.; RANGAIAH, G. P. Evaluating Capital Cost Estimation Programs - Five capital-cost-estimation programs are compared using a set of case studies. **Chemical Engineering** 2011.

FIELD, C. B.; CAMPBELL, J. E.; LOBELL, D. B. Biomass energy: the scale of the potential resource. **Trends in Ecology & Evolution,** v. 23, n. 2, p. 65-72, 2008.

GEBREZGABHER, S. A. et al. Economic analysis of anaerobic digestion—A case of Green power biogas plant in The Netherlands. **NJAS - Wageningen Journal of Life Sciences,** v. 57, n. 2, p. 109-115, 2010/06/01/ 2010.

GERARDI, M. H. Retention Times. **The Microbiology of Anaerobic Digesters**, 2003/08/08 2003.

GUPTA, K. K.; REHMAN, A.; SARVIYA, R. M. Bio-fuels for the gas turbine: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews,** v. 14, n. 9, p. 2946-2955, 2010/12/01/ 2010.

HANNAH, L. Chapter 17 - International Climate Policy. In: HANNAH, L. (Ed.). **Climate Change Biology (Second Edition)**. Boston: Academic Press, 2015. p.365-377. ISBN 978-0-12-420218-4.

HAUGEN, F.; BAKKE, R.; LIE, B. Adapting Dynamic Mathematical Models to a Pilot Anaerobic Digestion Reactor. **Modeling, Identification and Control,** v. 34, p. 35-54, 2013.

HILL, D. T. Simplified monod kinetics of methane fermentation of animal wastes. **Agricultural Wastes,** v. 5, n. 1, p. 1-16, 1983/01/01/ 1983.

HILL, D. T.; BARTH, C. L. A Dynamic Model for Simulation of Animal Waste Digestion. **Journal (Water Pollution Control Federation),** v. 49, n. 10, p. 2129-2143, 1977.

HORN, S. J. et al. Biogas production and saccharification of Salix pretreated at different steam explosion conditions. **Bioresource Technology,** v. 102, n. 17, p. 7932-7936, 2011/09/01/ 2011.

HUSAIN, A. Mathematical models of the kinetics of anaerobic digestion—a selected review. **Biomass and Bioenergy,** v. 14, n. 5, p. 561-571, 1998/05/01/ 1998.

IEA. **Renewables Information 2017**. International Energy Agency: 2017.

INTRATEC. **Eletricity Generation from Natural Gas - Cost Analysis** INTRATEC. FREE SAMPLE ELETRICITY E21A. 2012

IPCC. **Intergovernmental Panel on Climate Change - Working Group III Report "Mitigation of Climate Change"** 2007.

JANSOHN, P. 2 - Overview of gas turbine types and applications. In: JANSOHN, P.

(Ed.). **Modern Gas Turbine Systems**: Woodhead Publishing, 2013. p.21-43. ISBN 978-1-84569-728-0.

JANZON, R. et al. Steam pretreatment of spruce forest residues: Optimal conditions for biogas production and enzymatic hydrolysis. **Carbohydrate Polymers,** v. 100, p. 202-210, 2014/01/16/ 2014.

JÖRß, W. et al. **Decentralised Power Generation in the Liberalised EU Energy Markets**. 2003.

KHANAL, S. K. Microbiology and Biochemistry of Anaerobic Biotechnology. **Anaerobic Biotechnology for Bioenergy Production**, 2008/09/26 2008.

LAMBERT, M. **Biogas: A significant contribution to decarbonising gas markets?** The Oxford Institute for Energy Studies. 2017

LIMA, J. D. D. et al. Uso de modelos de apoio à decisão para análise de alternativas tecnológicas de tratamento de resíduos sólidos urbanos na Região Sul do Brasil. **Engenharia Sanitaria e Ambiental,** v. 19, p. 33-42, 2014.

LINO, F. A. M.; ISMAIL, K. A. R. Energy and environmental potential of solid waste in Brazil. **Energy Policy,** v. 39, n. 6, p. 3496-3502, 2011/06/01/ 2011.

LORA GRANDO, R. et al. Technology overview of biogas production in anaerobic digestion plants: A European evaluation of research and development. **Renewable and Sustainable Energy Reviews,** v. 80, p. 44-53, 2017/12/01/ 2017.

MA, J. et al. Methanosarcina domination in anaerobic sequencing batch reactor at short hydraulic retention time. **Bioresource Technology,** v. 137, p. 41-50, 2013/06/01/ 2013.

MAO, C. et al. Review on research achievements of biogas from anaerobic digestion. **Renewable and Sustainable Energy Reviews,** v. 45, p. 540-555, 2015/05/01/ 2015.

MATHWORKS. Homepage MATLAB - Overview. 2019. Disponível em: < https://www.mathworks.com/products/matlab.html >.

MÉSZÁROS, A.; JÁN, Z.; PETER, K. **Economic Evaluation of Biogas Plant - Perspectives for the development of low-power systems using biomass**. 2014. Zapadoceska Univerzita

MME. **Plano Decenal de Expansão de Energia 2027**. ENERGIA, M. D. M. E. 2018.

MUSTAFI, N. N.; RAINE, R. R.; BANSAL, P. K. The Use of Biogas in Internal Combustion Engines: A Review. n. 42061, p. 225-234, 2006.

NAÇÕES UNIDAS. **Adoção do Acordo de Paris** 2015.

NGES, I. A.; LIU, J. Effects of solid retention time on anaerobic digestion of dewatered-sewage sludge in mesophilic and thermophilic conditions. **Renewable Energy,** v. 35, n. 10, p. 2200-2206, 2010/10/01/ 2010.

NI, J.-Q.; NYNS, E.-J. New concept for the evaluation of rural biogas management in developing countries. **Energy Conversion and Management,** v. 37, n. 10, p. 1525-1534, 1996/10/01/ 1996.

NOVAIS, R. M. et al. High pH buffer capacity biomass fly ash-based geopolymer spheres to boost methane yield in anaerobic digestion. **Journal of Cleaner Production,** v. 178, p. 258-267, 2018/03/20/ 2018.

NREL. **Analysis of Hybrid Hydrogen Systems**. 2010

_____. **Process Design and Economics for the Conversion of Lignocellulosic Biomass to Hydrocarbons**. 2015

OGUNNAIKE, B. A. A Contemporary Industrial Perspective on Process Control Theory and Practice. **Annual Reviews in Control,** v. 20, p. 1-8, 1996.

OLIVER JENDE et al. **Barreiras e propostas de soluções para o mercado de biogás no Brasil / Probiogás**. CIDADES, M. D. 2016.

ORRICO JUNIOR, M. A. P. et al. Biodigestão anaeróbia dos dejetos da bovinocultura de corte: influência do período, do genótipo e da dieta. **Revista Brasileira de Zootecnia,** v. 41, p. 1533-1538, 2012.

PARLIAMENT EUROPEAN. **DIRECTIVA 2003/87/CE DO PARLAMENTO EUROPEU E DO CONSELHO**. relativa à criação de um regime de comércio de licenças de emissão de gases com efeito de estufa
na Comunidade e que altera a Directiva 96/61/CE do Conselho 2003.

PATURSKA, A.; REPELE, M.; BAZBAUERS, G. Economic Assessment of Biomethane Supply System based on Natural Gas Infrastructure. **Energy Procedia,** v. 72, p. 71-78, 2015/06/01/ 2015.

PESSUTO, J. et al. Enhancement of biogas and methane production by anaerobic digestion of swine manure with addition of microorganisms isolated from sewage sludge. **Process Safety and Environmental Protection,** v. 104, p. 233-239, 2016/11/01/ 2016.

POULLIKKAS, A. An overview of current and future sustainable gas turbine technologies. **Renewable and Sustainable Energy Reviews,** v. 9, n. 5, p. 409-443, 2005/10/01/ 2005.

RAJENDRAN, K. et al. A novel process simulation model (PSM) for anaerobic digestion using Aspen Plus. **Bioresource Technology,** v. 168, p. 7-13, 2014/09/01/ 2014.

RAO, A. Evaporative Gas Turbine (EvGT)/Humid Air Turbine (HAT) Cycles. **Handbook of Clean Energy Systems**, 2014/11/18 2014.

RYCKEBOSCH, E.; DROUILLON, M.; VERVAEREN, H. Techniques for transformation of biogas to biomethane. **Biomass and Bioenergy,** v. 35, n. 5, p. 1633-1645, 2011/05/01/ 2011.

SAFARI, A.; KARIMI, K.; SHAFIEI, M. Dilute alkali pretreatment of softwood pine: A biorefinery approach. **Bioresource Technology,** v. 234, p. 67-76, 2017/06/01/ 2017.

SCARLAT, N.; DALLEMAND, J.-F.; FAHL, F. Biogas: Developments and perspectives in Europe. **Renewable Energy,** v. 129, p. 457-472, 2018/12/01/ 2018.

SEBORG, D. E. et al. **Process Dynamics and Control, 4th Edition**. Wiley, 2016. ISBN 9781119298489.

SOARES, R. D. P.; SECCHI, A. R. EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimisation. In: KRASLAWSKI, A. e TURUNEN, I. (Ed.). **Computer Aided Chemical Engineering**: Elsevier, v.14, 2003. p.947-952. ISBN 1570-7946.

SOUZA, I. R. **Desenvolvimento da Operação Unitária Contactora Gás-Líquido com Membrana no Simulador HYSYS 8.8**. 2018. (MSc). UFRJ

THRÄN, D. et al. Global biomass potentials — Resources, drivers and scenario results. **Energy for Sustainable Development,** v. 14, n. 3, p. 200-205, 2010/09/01/ 2010.

TURTON, R. Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes. **Michigan: Prentice Hall**, 2012.

UNFCC. **Kyoto Protocol Reference Manual on Accounting of Emissions and Asssigned Amount**. United Nations Framework Convention on Climate Change 1997.

VERONEZE, M. L. et al. Production of biogas and biofertilizer using anaerobic reactors with swine manure and glycerin doses. **Journal of Cleaner Production,** v. 213, p. 176-184, 2019/03/10/ 2019.

WELLINGER, A.; MURPHY, J.; BAXTER, D. **The biogas handbook: Science, production and applications**. Woodhead Publishing Limited, 2013. 501 ISBN 978-0-85709-741-5 (online).

WIESBERG, I. L. et al. Carbon dioxide utilization in a microalga-based biorefinery: Efficiency of carbon removal and economic performance under carbon taxation. **Journal of Environmental Management,** v. 203, p. 988-998, 2017/12/01/ 2017.

YOUNG, R. A. Wood and Wood Products. In: KENT, J. A. (Ed.). **Kent and Riegel's Handbook of Industrial Chemistry and Biotechnology**. Boston, MA: Springer US, 2007. p.1234-1293. ISBN 978-0-387-27843-8.

YU, L.; WENSEL, P. C.; MA, J. Mathematical Modeling in Anaerobic Digestion (AD). **Journal Bioremediation & Biodegradation**, 2013.

APÊNDICES

A. Tabelas do modelo ADM1 – *Anaerobic Digestion Model No 1* (2002)

Para melhor visualização, as tabelas de coeficientes do modelo ADM1 são apresentadas nas próximas páginas em orientação horizontal.

Este espaço foi deixado intencionalmente em branco.

Tabela A.1 – Coeficientes bioquímicos para componentes solúveis. Adaptado de Batstone et al. (2002).

Coeficientes e taxas bioquimicas ($\nu_{i,j}$), equações das taxas cinéticas (ρ_j) de componentes solúveis ($i = 1 - 12$, $j = 1 - 19$)

	Componente →	i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	taxas(ρ_j, kg COD.m^{-3}.d^{-1})
j	Processo ↓		S_{su}	S_{aa}	S_{fa}	S_{va}	S_{bu}	S_{pro}	S_{ac}	S_{h2}	S_{ch4}	S_{IC}	S_{IN}	S_I	
1	Desintegração													$f_{sI,xc}$	$k_{dis}X_c$
2	Hidrólise de Carboidrados		1												$k_{hyd,ch}X_{ch}$
3	Hidrólise de Proteína			1											$k_{hyd,pr}X_{pr}$
4	Hidrólise de Lipídos		$1-f_{fa,li}$		$1-f_{fa,li}$										$k_{hyd,li}X_{li}$
5	Consumo de Açúcares		−1				$(1-Y_{su})f_{bu,su}$	$(1-Y_{su})f_{pro,su}$	$(1-Y_{su})f_{ac,su}$	$(1-Y_{su})f_{h2,su}$		$-\sum_{i=9,11-24} C_i\nu_{i,5}$	$-(Y_{su})\,N_{bac}$		$k_{m,su}\frac{S_{su}}{K_S+S}X_{su}I_1$
6	Consumo de A.A.			−1		$(1-Y_{aa})f_{va,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{bu,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{pro,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{ac,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{h2,aa}$		$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i\nu_{i,6}$	$N_{aa}-(Y_{aa})\,N_{bac}$		$k_{m,aa}\frac{S_{aa}}{K_S+S_{aa}}X_{aa}I_1$
7	Consumo de LCFA				−1				$(1-Y_{fa})$ 0.7	$(1-Y_{fa})$ 0.3			$-(Y_{fa})\,N_{bac}$		$k_{m,fa}\frac{S_{fa}}{K_S+S_{fa}}X_{fa}I_2$
8	Consumo de Valerato					−1		$(1-Y_{c4})$ 0.54	$(1-Y_{c4})$ 0.31	$(1-Y_{c4})$ 0.15			$-(Y_{c4})\,N_{bac}$		$k_{m,c4}\frac{S_{va}}{K_S+S_{va}}X_{c4}\frac{1}{1+S_{bu}/S_{va}}I$
9	Consumo de Butirato						−1		$(1-Y_{c4})$ 0.8	$(1-Y_{c4})$ 0.2			$-(Y_{c4})\,N_{bac}$		$k_{m,c4}\frac{S_{bu}}{K_S+S_{bu}}X_{c4}\frac{1}{1+S_{va}/S_{bu}}I$
10	Consumo de Propionato							−1	$(1-Y_{pro})$ 0.57	$(1-Y_{pro})$ 0.43		$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i\nu_{i,10}$	$-(Y_{pro})\,N_{bac}$		$k_{m,pr}\frac{S_{pro}}{K_S+S_{pro}}X_{pro}I_2$
11	Consumo de Acetato								−1		$(1-Y_{ac})$	$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i\nu_{i,11}$	$-(Y_{ac})\,N_{bac}$		$k_{m,ac}\frac{S_{ac}}{K_S+S_{ac}}X_{ac}I_3$
12	Consumo de Hidrogênio									−1	$(1-Y_{h2})$	$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i\nu_{i,12}$	$-(Y_{h2})\,N_{bac}$		$k_{m,h2}\frac{S_{h2}}{K_S+S_{h2}}X_{h2}I_1$
13	Decaimento de Xsu														$k_{dec,Xsu}X_{su}$
14	Decaimento de Xaa														$k_{dec,Xaa}X_{aa}$
15	Decaimento de Xfa														$k_{dec,Xfa}X_{fa}$
16	Decaimento de Xc4														$k_{dec,Xc4}X_{c4}$
17	Decaimento de Xpro														$k_{dec,Xpro}X_{pro}$
18	Decaimento de Xac														$k_{dec,Xac}X_{ac}$
19	Decaimento de Xh2														$k_{dec,Xh2}X_{h2}$
			Monosacarideos (kgCOD·m^{-3})	Aminoácidos (kgCOD·m^{-3})	LCFA (kgCOD·m^{-3})	Valerato total (kgCOD·m^{-3})	Butirato total (kgCOD·m^{-3})	Propionato total (kgCOD·m^{-3})	Acetato total (kgCOD·m^{-3})	Gás Hidrogênio (kgCOD·m^{-3})	Gás Metano (kgCOD·m^{-3})	Inorgânicos Carb. (kmoleC·m^{-3})	Inorgânicos N. (kmoleN·m^{-3})	Inertes Solúveis (kgCOD·m^{-3})	Fatores de Inibição $I_1 = I_{pH}{}'_{IN,lim}$ $I_2 = I_{pH}{}'_{IN,lim}\cdot I_{h2}$ $I_3 = I_{pH}{}'_{IN,lim}\cdot I_{NH3,Xac}$

Tabela A.2 – Coeficientes bioquímicos para componentes solúveis. Adaptado de Batstone et al. (2002).

Coeficientes e taxas bioquimicas ($\nu_{i,j}$) equações das taxas cinéticas (ρ_j) de componentes solúveis ($i = 13 - 24, j = 1 - 19$)

j	Componente → / Processo ↓	i	13 X_c	14 X_{ch}	15 X_{pr}	16 X_{li}	17 X_{su}	18 X_{aa}	19 X_{fa}	20 X_{c4}	21 X_{pro}	22 X_{ac}	23 X_{h2}	24 X_I	taxas (ρ_j, kg COD.m^{-3}.d^{-1})
1	Desintegração		-1	$f_{ch,xc}$	$f_{pr,xc}$	$f_{li,xc}$								$f_{xl,xc}$	$k_{dis}X_c$
2	Hidrólise de Carboidrados			-1											$k_{hyd,ch}X_{ch}$
3	Hidrólise de Proteína				-1										$k_{hyd,pr}X_{pr}$
4	Hidrólise de Lipídos					-1									$k_{hyd,li}X_{li}$
5	Consumo de Açúcares						Y_{su}								$k_{m,su}\frac{S_{su}}{K_S + S}X_{su}I_1$
6	Consumo de A.A.							Y_{aa}							$k_{m,aa}\frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}}X_{aa}I_1$
7	Consumo de LCFA								Y_{fa}						$k_{m,fa}\frac{S_{fa}}{K_S + S_{fa}}X_{fa}I_2$
8	Consumo de Valerato									Y_{c4}					$k_{m,c4}\frac{S_{va}}{K_S + S_{va}}X_{c4}\frac{1}{1+S_{bu}/S_{va}}I$
9	Consumo de Butirato									Y_{c4}					$k_{m,c4}\frac{S_{bu}}{K_S + S_{bu}}X_{c4}\frac{1}{1+S_{va}/S_{bu}}I$
10	Consumo de Propionato										Y_{pro}				$k_{m,pr}\frac{S_{pro}}{K_S + S_{pro}}X_{pro}I_2$
11	Consumo de Acetato											Y_{ac}			$k_{m,ac}\frac{S_{ac}}{K_S + S_{ac}}X_{ac}I_3$
12	Consumo de Hidrogênio												Y_{h2}		$k_{m,h2}\frac{S_{h2}}{K_S + S_{h2}}X_{h2}I_1$
13	Decaimento de Xsu		1				-1								$k_{dec,Xsu}X_{su}$
14	Decaimento de Xaa		1					-1							$k_{dec,Xaa}X_{aa}$
15	Decaimento de Xfa		1						-1						$k_{dec,Xfa}X_{fa}$
16	Decaimento de Xc4		1							-1					$k_{dec,Xc4}X_{c4}$
17	Decaimento de Xpro		1								-1				$k_{dec,Xpro}X_{pro}$
18	Decaimento de Xac		1									-1			$k_{dec,Xac}X_{ac}$
19	Decaimento de Xh2		1										-1		$k_{dec,Xh2}X_{h2}$

Compositos (kgCOD·m^{-3}) | Carboidratos (kgCOD·m^{-3}) | Proteinas (kgCOD·m^{-3}) | Lipidios (kgCOD·m^{-3}) | Açúcares Degradados (kgCOD·m^{-3}) | Aminoácidos Degradados (kgCOD·m^{-3}) | LCFA Degradados (kgCOD·m^{-3}) | Valerato e butirato degradados (kgCOD·m^{-3}) | Propionato degradado, (kgCOD·m^{-3}) | Acetato degradado (kgCOD·m^{-3}) | Hidrogênio Degradado (kgCOD·m^{-3}) | Particulados Inertes (kgCOD·m^{-3}) | Fatores de Inibição $I_1 = I_{pH}I_{IN,lim}$ $I_2 = I_{pH}I_{IN,lim}I_{h2}$ $I_3 = I_{pH}I_{IN,lim}I_{NH3,Xac}$

B. Rotinas no MATLAB

Rotinas de integração e análise de sensibilidade

```
%%% Rotinas de Integração %%% Israel-Modelo de biodigestor (Hill)
clear all
close all
clc
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% MODELO HILL %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%% Integracao - ODE 45  modelo HILL com adaptações de 2013
options=odeset('NonNegative',[],'Reltol',               1E-7,'AbsTol',1E-
6,'InitialStep',[],'MaxOrder',[],'BDF','on');
tspam = (0.1:0.1:100)' ;
FLOW = 50.;        %Vazão em L/d
VOL  = 250.;       %Volume do Reator (L)
VSin = 32.4;       %Concentração de Solidos Volateis (gVS/L)
k = [3.89;         %k1-g BVS/(g acidogen/L)
    1.76;          %k2-g VFA/(g acidogen/L)
    31.7;          %k3-g VFA/(g methanogen/L)
    26.3;          %k5-L/g methanogen
    0.02;          %kd-l/d taxa de morte bact. acidogenicas
    0.02;          %kdc-l/d taxa de morte bact. metanogec.
    3.00;          %ksc-l/d constante de velocidade de Monod Metanog.
    15.5];         %ks-l/d constante de velocidade de Monod Acidog.
x0 = [0 0 1.32 0.36 308 196];             %Condição inicial para ODE45

[tout,xout] = ode45(@HILL2013beta,tspam,x0,options,FLOW,VOL,VSin,k);

 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% SENSIBILIDADE %%%%%%%%%%%%%%%%%%
 % SENSITIVE HRT
tabHRT=zeros(1000,1);
for i = 1:1:10
    VOL = (150 + 100*i);
    [tout,xHRT] = ode45(@HILL2013beta,tspam,x0,options,FLOW,VOL,VSin,k);
    tabHRT = [tabHRT xHRT];
end
 VOL = 250;

 %SENSITIVE SB
 tabSB=zeros(1000,1);
 for i = 1:1:20
   B0 = 0.05*i;
    [tout,xSB] = ode45(@HILL2013B0,tspam,x0,options,FLOW,VOL,VSin,B0,k);
    tabSB = [tabSB xSB];
 end
 figure(1)
  hold on
 plot((1:1:20)*0.05,tabSB(end,7:6:end),'b');
xlabel('Sólidos Voláteis Biodegradáveis (%)')
ylabel('Vazão de CH4 (L/dia)')
 hold off

%SENSITIVE TEMPERATURA DE REAÇÃO
 tabtemp=zeros(1000,1);
 x0=zeros;
  for i = 20:1:70
    Treac = 273.15+i;
       x0 = [5.4 1.01 1.32 0.36 Treac 196];            %Condição inicial
```

```
para ODE45
    [tout,xtemp] = ode45(@HILL2013beta,tspam,x0,options,FLOW,VOL,VSin,k);
    tabtemp = [tabtemp xtemp];
  end
  figure(2)
  hold on
 plot(tabtemp(:,6:6:end),tabtemp(:,7:6:end),'b');
 plot(xout(end,5),xout(end,6),'go');
xlabel('Temperatura (°C)')
ylabel('Vazão de CH4 (L/dia)')
 hold off
 x0 = [5.4 1.01 1.32 0.36 308 196];

  %SENSITIVE SVFA
 tabSVFA=zeros(1000,1);
 x0=zeros;
  for i =0.01:0.8:4
    SVFA = i
    for j = 0.1:0.8:10
        VS = j
       x0 = [VS SVFA 1.32 0.36 308 196];              %Condição inicial
para ODE45
    [tout,xSVFA] = ode45(@HILL2013beta,tspam,x0,options,FLOW,VOL,VSin,k);
    tabSVFA = [tabSVFA xSVFA];
    end
  end
  figure(3)
hold on
plot(tabSVFA(:,3:6:end),tabSVFA(:,2:6:end),'b');
plot(xout(end,2),xout(end,1),'ro');
xlabel('Ácidos Graxos Voláteis (g/L)')
ylabel('Sólidos Voláteis Biodegradáveis (g/L)')
hold off
x0 = [5.4 1.01 1.32 0.36 308 196];

  % SENSITIVE PARA k's
tabelao=zeros(1000,1);
for i = 1:1:8
    for j= 0.1:0.2:2
        k = [3.89 1.76 31.7 26.3 0.02 0.02 3.00 15.5];
        k(i) = k(i)*j;
        k;
    [tout,xk] = ode45(@HILL2013beta,tspam,x0,options,FLOW,VOL,VSin,k);
    tabelao = [tabelao xk];
    end
end

figure(4)
plot(0.1:0.2:2,tabelao(end,7:6:61),'b')
xlabel('Valor Original K1 (%)')
ylabel('Vazão de CH4 (L/dia)')
figure(5)
plot(0.1:0.2:2,tabelao(end,67:6:121),'b')
xlabel('Valor Original K2 (%)')
ylabel('Vazão de CH4 (L/dia)')
```

Rotina do modelo de digestão anaeróbia (Hill adaptado)

```
function f = HILL2013beta (t, x,FLOW,VOL,VSin,k)
%% Constantes
k1  = k(1); %g BVS/(g acidogen/L)
```

```
k2  = k(2); %g VFA/(g acidogen/L)
k3  = k(3); %g VFA/(g methanogen/L)
k5  = k(4); %L/g methanogen
b   = 2.90; %d/d
Af  = 0.69; %(g VFA/L)/(g BVS/L)
B0  = 0.25; %(g BVS/L)/(g VS/L)
kd  = k(5); %l/d taxa de morte bact. acidogenicas
kdc = k(6); %l/d taxa de morte bact. metanog.
ksc = k(7); %l/d constante de velocidade de Monod Metanog.
ks  = k(8); %l/d constante de velocidade de Monod Acidog.
RHO = 1000; %kg/m³
cp  = 4200; %J/(kg/K)

Pheat       = 60*3600*24; % W*3600*24 = J/d ------> No artigo usa
resistencia de 200W em modo on-off
G           = 1.96*10^5;  %J/(d*K)----------------> No artigo é
unificado UA no parametro G. Realizaremos um detalhemento aqui.
Raioreact   = 0.40 ;      %metros
Alturareact = 0.50 ;      %metros
Ab          = pi*(Raioreact^2); % Area da base - Reator cilindrico
Al          = 2*pi*(Raioreact)*Alturareact ; %Area da Lateral
U           = G/(Al+Ab+Ab)  ;


Tfeed = 22+273.15; %K
Troom = 22+273.15; %K
%%
Sbvs    = x(1);
Svfa    = x(2);
Xacid   = x(3);
Xmeth   = x(4);
Treac   = x(5);
F=      FLOW ;% L/d
V=      VOL; %L

%Concentração Inicial
Svsin = VSin;    %g VS/L
Sbvsin = B0*Svsin;
Svfain = Af*Sbvsin;

%Taxa de Crescimento
Mim = 0.013*(Treac-273.15) - 0.129;
Mimc = Mim;

Mi = Mim*Sbvs/(Sbvs + ks);
Mic = Mimc*Svfa/(Svfa + ksc);

dSbvs = (Sbvsin - Sbvs)*(F/V) - Mi*k1*Xacid;                %dSbvsdT
dSvfa = (Svfain - Svfa)*(F/V) + Mi*k2*Xacid - Mic*k3*Xmeth; %dSvfadT
dXacid = (Mi -   kd  - ((F/V)/b) )*Xacid;                   %dXaciddT
dXmeth = (Mic -  kdc - ((F/V)/b) )*Xmeth;                  %dXmethdT

%BE
dTreac = (1/(RHO*cp*(V/1000))*(Pheat + (RHO*cp*(F/1000)*(Tfeed-Treac)) +
(U*(Ab+Ab+Al))*(Troom-Treac)));

f(1) = dSbvs;
f(2) = dSvfa;
f(3) = dXacid;
f(4) = dXmeth;
f(5) = dTreac;
```

```
f(6) = V*Mic*k5*dXmeth;
f = f(:);
```

C. Rotina no ASPEN CUSTOM MODELER

Model Bioreator2

//Declaracao de variaveis //

```
k1          as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 3.89);
k2          as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 1.76);
k3          as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 31.7);
k5          as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 26.3);
Af          as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 0.69);
B0          as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 0.25);
b           as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 2.9  );
Kd          as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 0.02 );
Kdc         as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 0.02 );
Ks          as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 15.5 );
Ksc         as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 3.0  );
V           as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 250, upper: 1000000  ); // 250L
Svsin       as REAC_CONSTANTS    (fixed, value: 30.2);

RHO         as REAC_CONSTANTS    (fixed,  value: 1000.);                    //1000 kg/m³
Cp          as REAC_CONSTANTS    (fixed,  value: 4200.,     upper: 5000       );    // 4200
J/(kg.K)
Pheat       as REAC_CONSTANTS    (fixed,  value: 8294400.,  upper: 30000000 );//8.2*10^6
[J/d]
G           as REAC_CONSTANTS    (fixed,  value: 196000.,   upper: 30000000 );
//1.96*10^5 J/d)K
MW          as REAC_CONSTANTS    (fixed,  value: 18.52095);                 //MW
baseado em solução de glicose com concentração de 30,2 g/L
//Ffeed as realvariable   (fixed);                                          //caso base ffeed=45L/d
Fmolar      as Flow_Mol          (fixed,   value: 0.100);                   //caso base fmol =
2,418797 mol/dia OU 0.1 mol/hora
Fvol        as realvariable      (value: 45.);                              //FVOL EM DIA!!!!!
Ffeed_mass  as realvariable ;

Fvol=(Fmolar*24)*MW/(RHO/1000);                 //L/dia - convertendo a vazao molar
em vazao volumetrica (TEMP REF = 35C E P=1 ATM)
Ffeed_mass = (Fmolar*24)*MW;                    //Kg/dia

mmax            as realvariable;
mi              as realvariable;
mc              as realvariable;
Sbvs            as realvariable (initial, value: 5.21,lower: 0.000001);
Svfa            as realvariable (initial, value: 1.00,lower: 0.000001);
Xacid           as realvariable (initial, value: 1.31,lower: 0.000001);
Xmeth           as realvariable (initial, value: 0.36,lower: 0.000001);
Fmeth           as realvariable;
Massa_Svs       as realvariable;
Massa_Dilu      as realvariable;
Z_Svs           as realvariable;
```

```
Z_Dilu            as realvariable;
Treac             as REAC_CONSTANTS (fixed,value: 308);   // [K]
Pfeed             as realvariable (fixed, value:1);       //1 bar
Tfeed             as realvariable (fixed, value: 13.7);   // Tfeed=Troom = 13,7°C Precisa ser em °C pois a porta MoleFraction só entende T em [°C}
Troom             as realvariable (fixed, value: 286.85); // [K]
MWliq             as realvariable (initial, value: 18.005);
Fliq_mass_out     as realvariable;
Fliq_molar_out    as realvariable;
Massa_Sbvs_out    as realvariable;
Massa_Dilu_out    as realvariable;
Z_Sbvs_out        as realvariable;
Z_Dilu_out        as realvariable;

TD                as REAC_CONSTANTS (fixed, value: 0.176821);          // TD = FVOL / V  - [DIA];

// Conexoes de INPUT
FEED as Input MolefractionPort;
FEED.F = Fmolar;
FEED.T = Tfeed;
FEED.P = Pfeed;

Massa_Svs  = (Svsin*Fvol)/1000 ;                                  //Calculo de massa KG/DIA de solidos biodegradaveis utilizando a concentração já informada (Sbvs)
Massa_Dilu = Ffeed_mass - Massa_Svs;                              //Calculo da massa de água(diluente)
Z_Svs              =    (Massa_Svs/180.158)/((Massa_Svs/180.158)+(Massa_Dilu/18.005)); //Composição MOLAR do componente SBVS considerando GLICOSE no peso molecular
Z_Dilu     = (1 - Z_Svs);

/*
FEED.z("VS")  = Z_Svs;
FEED.z("H2O") = Z_Dilu;
FEED.z("CH4") = 0;
FEED.z("CO2") = 0;
FEED.z("H2")  = 0;

Hin       as enth_mol ;
call(Hin) = pEnth_Mol(FEED.T,FEED.P,FEED.z);

FEED.h = Hin;
*/

// taxas de crescimento
mmax = 0.013*(Treac-273.15) - 0.129;
mi = mmax*Sbvs/(Sbvs+Ks);
mc = mmax*Svfa/(Svfa+Ksc);

// BALANCOS de Massa
$Sbvs = ((B0*Svsin)-Sbvs)*TD - (mi*k1*Xacid);
```

```
$Svfa = ((Af*B0*Svsin)-Svfa)*TD + (mi*k2*Xacid) - mc*k3*Xmeth ;
$Xacid = (mi-Kd-(TD/b))*Xacid;
$Xmeth = (mc-Kdc-(TD/b))*Xmeth;
Fmeth = V*mc*k5*Xmeth;

dSbvs   as realvariable;
dSvfa   as realvariable;
dXacid  as realvariable;
dXmeth  as realvariable;
dSbvs   = $Sbvs;
dSvfa   = $Svfa;
dXacid  = $Xacid;
dXmeth  = $Xmeth;

//BALANCOS de Energia

//$Treac    = (1/(RHO*Cp*(V/1000)))*(Pheat + (RHO*Cp*(Fvol/1000)*((Tfeed+273.15)-
Treac)) + G*(Troom-Treac) );
Treac = 308 ;

Tmet     as realvariable;
Tmet     = Treac;

// converter Fmeth vol em Fmeth molar

// conexoes de OUTPUT
METHANE as Output MULTIPORT OF MoleFractionPort;

        // converter Fmeth vol em Fmeth molar
RHObiogas   as REAC_CONSTANTS (fixed, value : 0.789735); // kg/m³ de densidade para
70% ch4, 20%co2 e 10%h2
MWbiogas     as REAC_CONSTANTS (fixed, value : 20.23348); // g/mol  para 70% ch4,
20%co2 e 10%h2
Fmeth_mass  as realvariable;
Fmeth_mass  = Fmeth*(RHObiogas/1000);


METHANE.connection.F = (Fmeth*(RHObiogas/1000)/MWbiogas)/24;    //Kmol/hora
METHANE.connection.P = 1;
METHANE.connection.T = Treac-273.15;                        //T[°C]
/*
METHANE.connection.z("CH4") = 1;
METHANE.connection.z("CO2") = 0;
METHANE.connection.z("H2")  = 0;
METHANE.connection.z("H2O") = 0;
METHANE.connection.z("VS")  = 0;
*/

LIQUID as Output MULTIPORT OF MoleFractionPort;

LIQUID.connection.P = 1;
```

```
LIQUID.connection.T = Treac-273.15;                    //T[°C]

MWliq          = (0.017366*Sbvs) + 18.005;                    // EQ.LINEAR PARA MW
DO LIQ - SOLUCAO DE GLICOSE EM H2O.
Fliq_mass_out      = (Fmolar*MW*24) - (Fmeth*(RHObiogas/1000));          // Vazao de
liq.(Fertilizantes) em Kg/dia
Fliq_molar_out     = Fliq_mass_out/(MWliq);                    // Vazao de liq.(Fert.) em
Kmol/dia

LIQUID.connection.F = Fliq_molar_out/24; // Vazao de liq.(Fert.) em Kmol/HORA <<<

Massa_Sbvs_out   = (Sbvs*Fliq_mass_out/RHO)/1000 ;                //Calculo de massa
KG/DIA de solidos biodegradaveis utilizando a concentração já informada (Sbvs)
Massa_Dilu_out   = Fliq_mass_out - Massa_Sbvs_out;                //Calculo da massa
de água(diluente) na saida
Z_Sbvs_out                                                                    =
(Massa_Sbvs_out/180.158)/((Massa_Sbvs_out/180.158)+(Massa_Dilu_out/18.005));
//Composição MOLAR do componente SBVS considerando GLICOSE no peso molecular
Z_Dilu_out    = (1 - Z_Sbvs_out);


LIQUID.connection.z("VS")  = Z_Sbvs_out;
LIQUID.connection.z("H2O") = Z_Dilu_out;
LIQUID.connection.z("CH4") = 0;
LIQUID.connection.z("H2")  = 0;
LIQUID.connection.z("CO2") = 0;
```