

11º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



TÍTULO DO TRABALHO: ANÁLISE DA UTILIZAÇÃO DE UM SIMULADOR DE PROCESSO NO PROJETOS DE BIODIGESTORES PARA PRODUÇÃO DE BIOGÁS

AUTORES:

Simone de Aviz Cardoso¹, Sara Mendes de Albuquerque², Milena Pereira de Freitas Andrade³

INSTITUIÇÃO:

¹Faculdade de Biotecnologia, Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Pará, ²Faculdade de Química, Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Universidade Federal do Pará, ³Ciência e Tecnologia dos Alimentos, Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará

ANÁLISE DA UTILIZAÇÃO DE UM SIMULADOR DE PROCESSO NO PROJETO DE BIODIGESTORES PARA PRODUÇÃO DE BIOGÁS

Resumo: A análise da capacidade produtiva de processos de produção de biogás requer análise aprofundada de muitos fatores e parâmetros de processo, e é um procedimento inicial muito importante para a etapa posterior, projeto de biodigestores. Neste trabalho foi feita a análise da utilização de um simulador de processos auxiliado por computador empregado na estimativa da capacidade produtiva de processos de produção de biogás. Para a simulação e estimativa da capacidade produtiva do processo foi utilizado o software COCO e com apoio do software Mathematica Wolfram. O software COCO é uma alternativa interessante dentre os simuladores disponíveis no mercado, pois é não comercial, e o mesmo é compatível com Cape-Open, que são protocolos para interface entre softwares de modelagem para processos químicos. Nem todas as propriedades de substâncias do processo de produção do biogás estão presentes no banco de dados do COCO, assim, foi necessário fazer a inserção das propriedades dessas substâncias. As propriedades das substâncias ausentes no banco de dados foram coletadas da literatura. Algumas propriedades precisaram ser previamente calculadas para serem inseridas no banco de dados, e esses cálculos foram feitos empregando o Mathematica Wolfram. Após a inserção das propriedades das substâncias no banco de dados, foi feita a construção do fluxograma de processo no COCO a partir de informações de capacidade de matéria-prima disponível e em seguida o procedimento de simulação de processo, e finalmente, foi feita a estimativa de capacidade produtiva de biogás. Foi estudada a produção de biogás a partir de duas fontes de biomassa: resíduos alimentares do restaurante universitário Campus Belém da Universidade Federal do Pará e efluentes de frigoríficos de uma indústria frigorífica de porte médio localizada na cidade de Castanhal, no Estado do Pará. Foi constatado que o simulador COCO é uma ferramenta importante na construção de fluxograma de processos, pois o COCO tem a capacidade de apontar a viabilidade de fluxograma do processo e a configuração adequada. No presente estudo, a melhor configuração de fluxograma de processo se deve ao tipo de matéria-prima. Assim, foi possível obter o fluxograma de processo adequado para cada biomassa estudada, e estimar a capacidade produtiva para cada uma. Foi observado que o COCO se mostrou deficiente quando foi estabelecida uma grande quantidade de moléculas e complexas reações, no caso, o efluente frigorífico, e tal insuficiência operacional do COCO conduziu a uma outra configuração de fluxograma de processo.

Palavras-chave: biogás, simulador, processo, software COCO.

ANALYSIS OF THE USE OF A PROCESS SIMULATOR IN BIODIGESTERS PROJECTS FOR BIOGAS PRODUCTION

Abstract: Analysis of the productive capacity of biogas production processes requires in-depth analysis of many factors and process parameters, and is a very important initial procedure for the later step, biodigester. In this work, the use of a computer-assisted process simulator employed in estimating the productive capacity of biogas production processes was done. For the simulation and prediction of the production capacity of the process, COCO software supported by *Mathematics Wolfram* software was used. COCO software is an interesting alternative among the simulators available on the market, as it is non-commercial, and is compatible with Cape-Open, which are protocols for interface between chemical process modeling software. Not all substance ownership in the biogas production process are present in the COCO Software database, so it was necessary to insert the properties of these substances. The properties of the absent substances in the database were collected from the literature. Some properties needed to be previously calculated to be inserted into the database, and these calculations

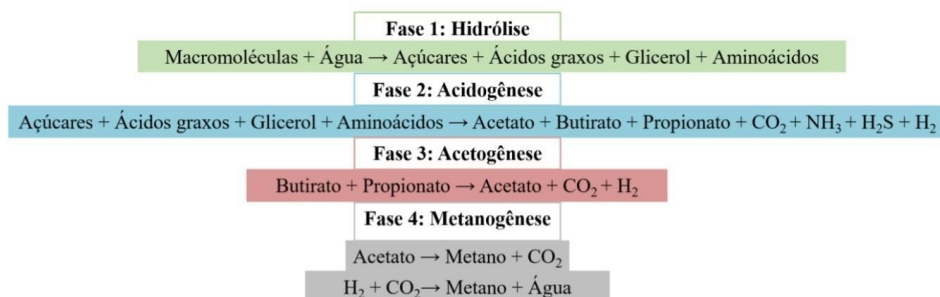
were made employing *Mathematica Wolfram*. After insertion of the properties of substances in the database, the process flow chart was built in the COCO software from information of the available raw material capacity, then the process simulation was done, and finally, it was estimated the productive capacity in biogas. The study of biogas production was done from two sources of biomass: food waste from the Campus Belém university restaurant of the Federal University of Pará and fridge effluents of a medium -sized refrigerator industry in the city of Castanhal, in the state of Pará. It was found that the COCO simulator is an important tool in building process flowchart, as it has the ability to point out the process flow viability of the process and the proper configuration. In the present study, the best process flowchart configuration is due to the type of raw material. Thus, it was possible to obtain the proper process flowchart for each studied biomass, and estimate the productive capacity for each. It was observed that COCO software was deficient when a large amount of molecules and complex reactions was established, in this case the refrigerator effluent, and such operational insufficiency of the COCO led to another process flowchart configuration.

Keywords: Biogas, simulator, process, COCO software.

Introdução

Com o aumento da população e crescentes demandas econômicas, o consumo desenfreado da água, recursos naturais e energia se tornaram bem mais frequente e intenso, assim como a disposição inadequada dos resíduos e rejeitos advindos de atividades antropogênica manuais e/ou industriais, as quais podem ocasionar acentuados danos ambientais, sanitários e financeiros (CARVALHO; PASSIG; KREUTZ, 2011). Uma boa parte desses resíduos não possui destinação sanitária ambientalmente adequada, é o que mostrou os dados produzidos pela ABRELPE (Associação Brasileira das Empresas de Limpeza Pública e Resíduos Especiais) que relata que os resíduos sólidos produzidos no Brasil eram destinados aos aterros sanitários 59,5% do total, os aterros controlados receberam 23% e os lixões (vazadouros a céu aberto) 17,5% (ABRELPE, 2019). Diante do atual cenário, a sociedade mundial, de maneira geral, tem buscado por inovações tecnológicas que sejam ambientalmente corretas para minimizar esses efeitos prejudiciais de maneira eficiente e também sustentável. É então, que, o sistema de produção de biocombustíveis ganha importância e atenção como alternativa sustentável para a produção de gás metano, através da degradação de material orgânico utilizando biodigestores, os quais são sistemas mais sustentáveis, e bem menos poluentes, que podem ser instalados e abastecidos localmente, assim, reduzindo a dependência de combustíveis fósseis e fazendo com que os resíduos orgânicos não sejam direcionados para os lixões e aterros sanitários, além da possibilidade de entrada no mercado do carbono. Portanto, a digestão biológica anaeróbia é um método alternativo de obtenção de energia somado ao tratamento do resíduo orgânico (APPELS et al., 2011). Ferreira (2015) descreve que, no sistema de tratamento biológico, cerca de 80% da matéria orgânica presente no substrato é convertido em biogás, o qual é composto principalmente por metano.

Figura 1. Etapas do processo de decomposição da matéria orgânica para a produção de metano.



Fonte: ANDRADE, 2019.

Desse modo, a utilização de biodigestores permite a utilização dos recursos naturais sem comprometer o meio ambiente e as futuras gerações, ou seja, respeitando o desenvolvimento sustentável nas suas três

bases: social, ambiental e econômica. O processo de produção de metano é constituído por quatro etapas, apresentadas na Figura 1, e ocorrem de maneiras perfeitamente coordenadas para que se realize a produção de forma adequada (STEINHAUSER; DEUBLEIN, 2008).

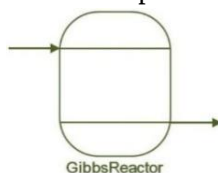
Portanto, é importante estimar a capacidade produtiva e energética de biogás produzidos através do processo de biodigestão anaeróbica, assim como estudar os fatores que afetam o processo através do emprego de simulador de processos. Desse modo, no presente trabalho foi feita a análise da utilização de um simulador de processos auxiliado por computador empregado na estimativa da capacidade produtiva de processos de produção de biogás.

Metodologia

No presente estudo foi feita a análise da utilização de um simulador de processos auxiliado por computador empregado na estimativa da capacidade produtiva de processos de produção de biogás. Para a simulação e estimativa da capacidade produtiva do processo foi utilizado o software COCO e com apoio do software *Mathematica Wolfram*. O software COCO é uma alternativa interessante dentre os simuladores disponíveis no mercado, pois é não comercial, e o mesmo é compatível com Cape-Open, que são protocolos para interface entre softwares de modelagem para processos químicos. Tem como propósito auxiliar na elaboração e dimensionamento de processos produtivos em larga escala, avaliar a eficiência desses processos, identificar falhas, bem como observar potenciais impactos ambientais, são algumas das questões que podem determinar o sucesso ou o fracasso na implantação de um processo. Assim, o COCO é uma alternativa importante, que ajuda prevenir grandes erros e também possibilita identificar muitas oportunidades de melhoria num processo.

Foram utilizados duas fontes de biomassas para produção do biogás. Uma fonte, foram os resíduos de alimentos produzidos no Restaurante Universitário (RU) da Universidade Federal do Pará (UFPA), onde foram coletados dos restos despejados no lixo pelos consumidores (alunos, professores, funcionários e visitantes). Com os dados coletados, os mesmos foram tratados com estatística básica, obtendo-se as informações: média, desvio padrão e variância. A outra, foram as águas residuárias em abatedouros e frigoríficos bovinos a partir da quantificação de bois abatidos por dia, fornecida por um frigorífico da região, próximo do município de Castanhal-PA. A partir desse dado coletado, o mesmo foi submetido a análise estatísticas com o propósito de se obter resultados precisos para o desenvolvimento dos cálculos. Com as informações tratadas com estatística básica sobre o fluxo diário de biomassa nas duas situações analisadas foi feita a simulação da produção de biogás por digestão anaeróbia utilizando o software COCO. O processo foi planejado com o propósito de projetar uma unidade de geração de biogás a partir do efluente alimentício do Restaurante Universitário da Universidade Federal do Pará, campus Belém, e outra a partir de águas residuárias de abatedouros e frigoríficos bovinos de um frigorífico próximo do município de Castanhal-PA.

Figura 2. Desenho do ícone do reator GibbsReactor presente no módulo COFE.



Fonte: Autoria própria.

Em seguida, foi escolhido um módulo do COCO apropriado para a simulação de processos químicos, e foi selecionado o COFE. Nesse módulo, foi escolhido a partir da unidade de operação, Unit Operation, o reator GibbsReactor. Na Figura 2, encontra-se o modelo do reator escolhido.

Para a configuração do processo no software COCO foi necessário previamente estimar a constante de equilíbrio das reações que acontecem para cada biomassa investigada. Essa estimativa foi feita com auxílio dos softwares de computação simbólica *Mathematica Wolfram* a partir da entalpia e da energia

de Gibbs de formação das espécies participantes das reações, as quais foram obtidas através da literatura e também da biblioteca do COCO. Também foi realizada a estimativa do calor de reação em função da temperatura a partir da capacidade calorífica para cada reação do processo empregando o *Mathematica Wolfram*. Os valores das constantes da relação da capacidade calorífica em função da temperatura para cada espécie química das reações foram retiradas da biblioteca do COCO.

Em seguida, foram configuradas as reações no módulo COFE e nessa configuração também foram utilizados os dados estimados com auxílio do *Mathematica Wolfram*.

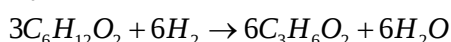
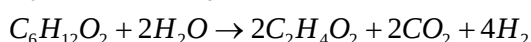
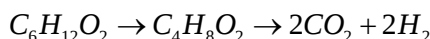
O processo foi configurado adicionando um pacote de propriedades e um pacote de reações dentro do módulo COFE do COCO. Esses pacotes foram adequados para alimentar o modelo com propriedades das substâncias que participam do processo. Com exceção da reação de hidrólise, devido o desconhecimento das moléculas que compõem a biomassa e que não estão inseridas na biblioteca de propriedades de moléculas do COFE, o CHEMSEP.

Para os resíduos de alimentos as reações que foram inseridas no pacote de reações e as substâncias participantes que foram inseridas no pacote de propriedades, são as apresentadas a seguir:

Hidrólise:

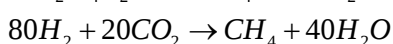
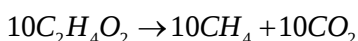
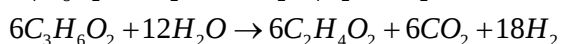
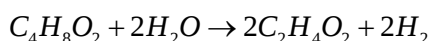


Acidogênese:



Eqs. 1-8

Acetogênese e Metanogênese:



Para as águas residuárias em abatedouros e frigoríficos bovinos as reações que foram inseridas no pacote de reações e as substâncias participantes que foram inseridas no pacote de propriedades, são as Eqs. 9-26. Depois, foram adicionadas as correntes de entrada e saída com as especificações das frações molares de cada componente nas correntes e condições de operação. Na corrente de saída não são feitas especificações, pois os resultados das simulações são apresentados nessa corrente. E finalmente, foram configuradas as condições operacionais do GibbsReactor, e as simulações foram realizadas.

Resultados e Discussão

Estatística básica sobre a geração de resíduos alimentícios no RU da UFPA, campus de Belém:

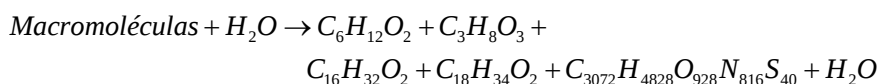
A coleta de dados sobre os resíduos das refeições no RU iniciou em setembro de 2018 e finalizou em novembro do mesmo ano. A análise estatístico evidenciou uma média de biomassa residual de 182 kg/dia, tendo uma variância de 2864,58 kg e um desvio padrão de 53,51 kg. Essa média foi usada para calcular a massa residual média total produzida em um mês, com o resultado de 3638 kg/mês contando 20 dias úteis no mês.

Estatística básica sobre Produção de águas residuárias de abatedouro e frigoríficos:

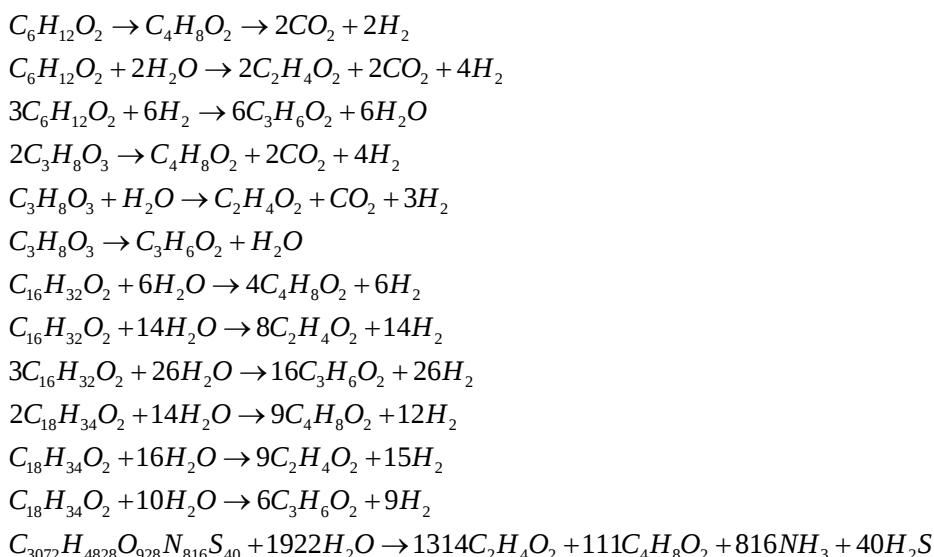
Uma indústria de porte médio deste ramo localizada na cidade de Castanhal, no estado do Pará, forneceu dados reais sobre a quantidade de abates mensais nos anos de 2017 e 2018 na região Norte do Brasil. Para estabelecer a relação com a produção industrial, a quantificação de bois abatidos por dia, fornecida

pelo frigorífico em valores aproximados diariamente, são 495 cabeças de gado. Para a estimativa da produção de águas residuárias foi utilizada a definição de Pacheco e Yamanaka (2008), os quais definem que a produção de água residuária no processo de abate, industrialização e graxaria gera cerca de 3864 litros por boi. Então, a produção de efluentes por boi, relacionada apenas a fatores intrínsecos ao processo produtivo, foi calculada em 1.912.680 litros/dia.

Hidrólise:

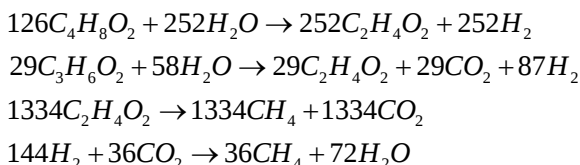


Acidogênese:



Acetogênese e Metanogênese:

Eqs. 9-26



Onde, $C_6H_{12}O_6$: glicose, $C_4H_8O_2$: ácido butírico, CH_4 : metano, $C_{16}H_{32}O_2$: ácido palmítico, $C_{3072}H_{4828}O_{928}N_{816}S_{40}$: albumina, $C_{18}H_{34}O_2$: ácido oleico, $C_3H_6O_2$: ácido propiônico, $C_3H_8O_3$: glicerol e $C_2H_4O_2$: ácido acético.

Simulação do processo no COCO: resíduos alimentícios no RU da UFPA, campus de Belém

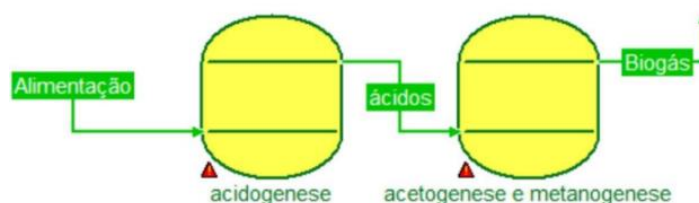
A simulação em uma unidade de operação não foi possível de ser utilizadas, devido o software COCO não permitir configuração para as sete reações num único GibbsReactor. O software COCO enviou mensagem de “erro” e não simulou. Então, foram utilizados duas unidades de operação GibbsReactor que foram conectadas em série. O primeiro GibbsReactor foi configurado para realizar as reações de acidogênese e acetogênese, e o segundo GibbsReactor foi configurado para realizar as reações de metanogênese, porém, também não foi permitida a simulação no COCO para essa configuração, devido a lógica de reações do COCO ser bem estabelecida, pois no pacote de reações se a estequiometria das reações inseridas apresentarem erro ao executar a simulação, o software emite mensagem de “erro”, e não aceita a reação com balanço estequiométrico não estabelecido corretamente.

Então, foi feita outra configuração, na qual, o primeiro GibbsReactor foi configurado para realizar as reações de acidogênese, e o segundo GibbsReactor foi configurado para realizar as reações de acetogênese e metanogênese. Finalmente, os resultados simulados para essa configuração foram satisfatórios e o software COCO permitiu essa configuração. Após a validação interna do COCO, que

resultou em mensagem de permissão, foram feitas as simulações através do botão solve. Ver Figura 3. A partir da configuração apresentada na Figura 3 foram realizados testes de simulação com variação da fração molar de água adicionada na corrente de alimentação com faixa de 0,3 até 0,8 para analisar a interferência da adição de água no rendimento mássico em metano.

Figura 3. Configuração em série no software COCO para dois GibbsReactor.

Stream	Alimentação	ácidos	Biogás	Unit
Pressure	1.15	1.15	1.15	atm
Temperature	308	308	308	K
Flow rate	113.643	113.643	113.644	kg / day
Mass frac Hydrogen	0	2.86685e-17	3.67936e-07	
Mass frac Methane	0	0	0.228334	
Mass frac Acetic acid	0	4.27816e-06	1.70588e-14	
Mass frac Carbon dioxide	0	0.20879	0.626374	
Mass frac N-butyric acid	0	0.208993	3.99294e-08	
Mass frac Propionic acid	0	0.351451	2.02896e-15	
Mass frac Water	0.145295	0.230762	0.145293	
Mass frac Glucose	0.854705	2.56206e-15	2.56205e-15	
Flow Methane	0	0	25.9487	kg / day



Fonte: ALBUQUERQUE, 2019.

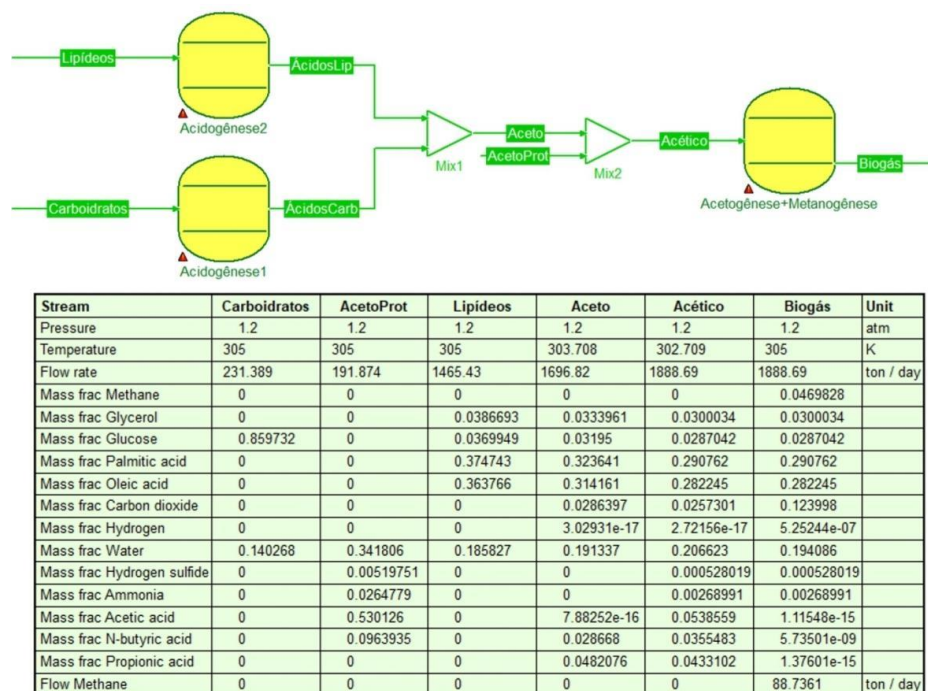
Simulação do processo no COCO: águas residuárias de abatedouro e frigoríficos

Foram feitas diversas tentativas de fluxos processuais e simulações foram testadas de acordo com a composição macromolecular do efluente. Entretanto, na primeira tentativa, o primeiro impasse observado foi o limite de quantidade de moléculas no cálculo estequiométrico no COCO, por isso, para solucionar esse problema, foi realizado o balanço estequiométrico das reações utilizando o *Mathematica Wolfram*. A segunda tentativa sem sucesso, aconteceu no momento da execução das simulações e estava relacionada à disposição das reações nas unidades de operação, a qual, até então, estava configurada em apenas dois “GibbsReactor”, um responsável pela acidogênese e o outro pela acetometanogênese, sendo apenas uma corrente de entrada, uma de ligação entre os reatores e a última, de saída. O COCO apontou uma mensagem de “erro” para esta configuração. A terceira tentativa se baseou na separação dos compostos proteicos e lipídicos dos carboidratos durante a acidogênese, assim então, surgiu a terceira unidade GibbsReactor, onde os fluxos de entrada foram recalculados, e assim, rearranjada as reações presentes na análise, fazendo o primeiro GibbsReactor para uma parte das reações de acidogênese, e o segundo para a outra parte das reações de acidogênese, sem mudanças para o reator responsável pela acetometanogênese (terceira unidade). Mesmo assim, a simulação não funcionou.

Após essas três tentativas, a simulação ocorreu, gerando o resultado apresentado na Figura 4. Nessa quarta tentativa foi feita a retirada da reação que compreende a parcela proteica das análises, por causa da sua alta quantidade e complexidade das moléculas, no entanto, seria substituída por uma corrente de entrada de acordo com o fluxo do efluente correlacionado as proteínas que teoricamente já teriam reagido na acidogênese, denominada de “Acetoprot”. Além disso, a reação de glicose em acético foi movida para o reator “Acidogênese2” por motivos de similaridade reacional. Porém, ao observar os resultados obtidos, notou-se que a composição lipídica quase que por completamente não foi reagente no processo de biodigestão, além disso, foi testada também a contribuição de ácido acético gerado, e foi possível afirmar que para o reator “Acidogênese2”, sob estas condições, apenas a glicose estava

forneendo reagente para a acetometanogênese. Tal conjuntura pode estar relacionada a complexidade química das moléculas lipídicas, quanto ao tamanho e processo de degradação.

Figura 4. Fluxograma processual da biodigestão anaeróbica e resultados.



Fonte: ANDRADE, 2019.

Entretanto, além disso, é conhecido o seu potencial tóxico aos microrganismos do processo, assim como entraves operacionais, tais como difícil solubilidade em meio aquoso e formação de espuma. Algumas alternativas já foram desenvolvidas para solucionar ou minimizar os efeitos negativos dessas moléculas no processo de biodigestão, são elencadas a adição de lipases e o acréscimo do processo de saponificação anterior a produção de biogás (BATTIMELLI; CARRÈRE; DELGENÈS, 2009; MENDES et al., 2005).

Conclusões

Foi constatado que o simulador COCO é uma ferramenta importante na construção de fluxograma de processos, pois o COCO tem a capacidade de apontar a viabilidade de fluxograma do processo e a configuração adequada.

No presente estudo, a melhor configuração de fluxograma de processo se deve ao tipo de matéria-prima. Assim, foi possível obter o fluxograma de processo adequado para cada biomassa estudada, e estimar a capacidade produtiva para cada uma.

Foi observado também, que o COCO se mostrou deficiente quando foi estabelecida uma grande quantidade de moléculas e complexas reações, no caso, o efluente frigorífico, e tal dificuldade operacional do COCO conduziu a uma outra configuração de fluxograma de processo, porém, tal dificuldade no processo de biodigestão, também é conhecida e relatada na literatura, e pode estar relacionada a complexidade química das moléculas lipídicas, quanto ao tamanho e processo de degradação. Além disso, é conhecido o seu potencial tóxico aos microrganismos do processo, assim como também entraves operacionais, tais como difícil solubilidade em meio aquoso e formação de espuma. Algumas alternativas já foram desenvolvidas para solucionar ou minimizar os efeitos negativos dessas moléculas no processo de biodigestão, e são elencadas a adição de lipases e o acréscimo do processo de saponificação anterior a produção de biogás (BATTIMELLI; CARRÈRE; DELGENÈS, 2009; MENDES et al., 2005).

Agradecimentos

Agradecemos à Faculdade de Biotecnologia do Instituto de Ciências Biológicas da UFPA e à Faculdade de Química do Instituto de Ciências Exatas e Naturais da UFPA pelo suporte acadêmico que permitiu a realização desse trabalho.

Referências Bibliográficas

ABRELPE. Associação Brasileira das Empresas de Limpeza Pública e Resíduos Especiais. **Panorama dos resíduos sólidos no Brasil**. 2019. Disponível em: <
https://www.migalhas.com.br/arquivos/2020/1/492DD855EA0272_PanoramaAbrelpe_-2018_2019.pdf >.
Acesso em: 20 de junho 2021.

ALBUQUERQUE, SARA MENDES DE. **Projeto de digestor anaeróbio para produção de biometano auxiliado por computador**. 2019, 60f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Faculdade de Química, Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Universidade Federal do Pará, Belém, 2019.

ANDRADE, MILLENA PEREIRA DE FREITAS. **Projeto de biodigestor anaeróbio mediado por computador para a produção de biogás a partir de efluentes frigoríficos**. 2019, 72f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Faculdade de Biotecnologia, Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Pará, Belém, 2019.

APPELS, LISE; LAUWERS, J.; DEGRÈVE, J.; HELSEN, L.; LIEVENS, B.; WILLEMS, K. & DEWIL, R. **Anaerobic digestion in global bio-energy production: potential and research challenges**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 15, n. 9, p. 4295-4301, 2011.

BATTIMELLI, A.; CARRÈRE, H.; DELGENÈS, J. P. **Saponification of fatty slaughterhouse wastes for enhancing anaerobic biodegradability**. Bioresource Technology, v.100, n.15, p. 3695-3700, 2009.

CARVALHO, K.; PASSIG, F.; KREUTZ, C. **Tratamento de efluentes**: 1.ed. Curitiba: Editora UTFPR, 2011.

FERREIRA, BERNARDO ORNELAS. **Avaliação de um sistema de metanização de resíduos alimentares com vistas ao aproveitamento energético do biogás**. Escola de Engenharia, UFMG, Belo Horizonte, 2015.

MENDES, A. et al. **Application of lipases for wastewater treatment containing high levels of lipids**. Química nova, v. 28, n. 2, p.296-305, 2005.

PACHECO, J. W. F.; YAMANAKA, H. T. **Guia técnico ambiental de abate (bovino e suíno) Série P+L – CETESB**. São Paulo, 2008.

STEINHAUSER, A.; DEUBLEIN, D. **Biogas from Waste and Renewable Resources**. Germany: Wiley-VCH, 450p., 2008.