



PPGCTA
Programa de Pós-Graduação em
Ciência e Tecnologia de Alimentos



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE
ALIMENTOS

GABRIELLEN KELLY AMARAL DE OLIVEIRA

SIMULAÇÃO *IN SILICO* DA PRODUÇÃO DE BIOGÁS
EM BIODIGESTORES EM SÉRIE UTILIZANDO O
SOFTWARE OCTAVE

BELÉM – PA, BRASIL

2023

GABRIELLEN KELLY AMARAL DE OLIVEIRA

**SIMULAÇÃO *IN SILICO* DA PRODUÇÃO DE BIOGÁS
EM BIODIGESTORES EM SÉRIE UTILIZANDO O
SOFTWARE OCTAVE**

***In silico* simulation of biogas production in
series-connected biodigesters using Octave software**

Dissertation presented to the Graduate Program of Food Science and Technology (PPGCTA) of the Federal University of Pará (UFPA) in partial fulfilment of the requirements for the degree of Master in Food Science and Technology.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos (PPGCTA) da Universidade Federal do Pará (UFPA) como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Ciência e Tecnologia de Alimentos.

Orientador: DR. ANTÔNIO MANOEL DA CRUZ RODRIGUES

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO
FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA.

BELÉM – PA, BRASIL

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

O48s Oliveira, Gabriellen Kelly Amaral de.
Simulação in silico da produção de biogás em biodigestores em
série utilizando o software Octave / Gabriellen Kelly Amaral de
Oliveira. — 2023.
69 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Antônio Manoel da Cruz Rodrigues
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Pará,
Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Ciência e
Tecnologia de Alimentos, Belém, 2023.

1. biogás. 2. múltiplas-fases. 3. simulação computacional.
4. modelagem matemática. I. Título.

CDD 664.8

Data da defesa: 04/09/2023

COMISSÃO EXAMINADORA

Dr. Antônio Manoel da Cruz Rodrigues
Universidade Federal do Pará – PPGCTA/ITEC
Orientador – Presidente da comissão

Dr. Nelson Rosa Ferreira
Universidade Federal do Pará – PPGCTA/ITEC
Membro titular

Dra. Simone de Aviz Cardoso
Universidade Federal do Pará – FABIOTEC/ICB
Membro titular

A ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros também encontra-se registrada no SIGAA e disponível na Secretaria do PPGCTA-UFPA.

Este trabalho é dedicado a Arthur Henrique
Soares dos Santos, meu amado esposo.

Agradecimentos

Agradeço a Deus pelo conhecimento que me foi dispensado, permitindo-me realizar Sua boa obra. Agradeço ao meu esposo, Arthur, pelos seus incentivos e por estar ao meu lado diariamente. Aos meus pais, Gilmar e Gracilene, e ao meu irmão, Herberth, expresso meus sinceros agradecimentos.

Agradeço à Universidade Federal do Pará e ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos (PPGCTA - UFPA) pela oportunidade de realizar este mestrado e contribuir para o progresso da ciência brasileira.

Agradeço ao Dr. Antônio Manoel Rodrigues pela orientação, bem como à banca avaliadora composta pela Dra. Simone Cardoso e pelo Dr. Nelson Ferreira, pelo tempo dedicado e pelas contribuições ao trabalho.

Agradecimentos às agências de fomento à pesquisa
(Acknowledgement to the research funding agencies)

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. *(This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brazil (CAPES) - Finance Code 001).*

Cultivar e Guardar (Gênesis 2:15)

RESUMO

O presente trabalho teve como objetivo principal abordar a produção de biogás e explorar o uso da simulação computacional como uma ferramenta de análise. A pesquisa se concentra em avaliar a eficiência de diferentes substratos e parâmetros de operação em sistemas de biodigestores, visando a geração de biogás, com o auxílio do software Octave, uma linguagem de programação matemática e ambiente de desenvolvimento. No estudo, foram analisadas biomassas de grande ocorrência no bioma amazônico: cacau, açaí e coco, comparando-se duas abordagens de produção: fase única e múltiplas fases. Os resultados revelaram que o sistema de múltiplas fases apresentou os melhores desempenhos. Para a biomassa de cacau, foi alcançada uma produção máxima de biogás de 776,56 mL/gSVad. No caso dos resíduos de açaí, um rendimento notavelmente mais alto, de 834,4 mL/gSVad. Quanto aos resíduos de coco, a produção atingiu 376,9 mL/gSVad. Esses resultados reforçam a eficiência da abordagem em múltiplas fases em comparação com a fase única, evidenciando seu potencial para maximizar a produção de biogás. Além disso, a utilização de resíduos orgânicos como fonte de biogás contribui para a redução de resíduos e a geração de energia limpa, destacando-se como uma alternativa viável e sustentável no contexto da produção de energia renovável.

Palavras-chave: biogás; múltiplas-fases; simulação computacional; modelagem matemática.

ABSTRACT

The main objective of this study was to address biogas production and explore the use of computational simulation as an analytical tool. The research focuses on evaluating the efficiency of different substrates and operational parameters in biodigester systems for biogas generation, aided by the Octave software, a mathematical programming language, and development environment. The study analyzed biomasses that are widely found in the Amazon biome: cocoa, acai, and coconut, comparing two production approaches: single-phase and multi-phase. The results revealed that the multi-phase system exhibited superior performance. For cocoa biomass, a maximum biogas production of 776.56 mL/gVSad was achieved. In the case of acai residues, a notably higher yield of 834.4 mL/gVSad was observed. As for coconut residues, the production reached 376.9 mL/gVSad. These findings underscore the efficiency of the multi-phase approach compared to the single-phase, highlighting its potential to maximize biogas production. Moreover, the utilization of organic waste as a biogas source contributes to waste reduction and clean energy generation, emerging as a viable and sustainable alternative in the realm of renewable energy production.

Keywords: biogas; multiple phases; computational simulation; mathematical modeling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Anatomia do fruto do açaizeiro	22
Figura 2 - Caracterização morfológica na forma do fruto do cacau.....	24
Figura 3 - Constituição do fruto do coqueiro.....	25
Figura 4 - Rotas metabólicas e grupos microbianos envolvidos na digestão anaeróbia.....	28
Figura 5 - Biogás e suas possibilidades de uso	31
Figura 6 - Logo do software gnu octave	35
Figura 7 - Exemplificação do sistema em fase única para biodigestão	38
Figura 8 - Exemplificação do Sistema em série para biodigestão	39
Figura 9 - Degradação de substratos na produção de biogás em única fase	48
Figura 10 - Degradação de substratos na produção de biogás em múltiplas fases	49
Figura 11 - Concentração de ácidos na produção de biogás em única fase	51
Figura 12 - Concentração de ácidos na produção de biogás em múltiplas fases	52
Figura 13 - Produção de biogás em única fase	53
Figura 14 - Produção de biogás em múltiplas fases	54
Figura 15 - Concentração de gases no biogás (única fase)	56
Figura 16 - Concentração de gases no biogás (múltiplas fases)	57
Figura 17 - Vazão de biogás e do digestato em única fase	58
Figura 18 - Vazão de biogás e do digestato em múltiplas fases	59

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Composição típica do biogás	26
--	----

LISTA DE ABREVIATURAS

PNRS - Política Nacional de Resíduos Sólidos;

GEE - Gases do Efeito Estufa;

RSO - Resíduos Sólidos Orgânicos;

SEDAP - Secretaria de Desenvolvimento Agropecuário e da Pesca;

FAO STAT - Organização das Nações Unidas para a Alimentação e Agricultura;

ANEEL - Agência Nacional de Energia Elétrica;

DQO - Demanda Química de Oxigênio;

pH - Potencial Hidrogeniônico;

TRH - Tempo de Retenção Hidráulica;

AGVs - Ácidos Graxos Voláteis;

LISTA DE SÍMBOLOS

CO₂ - Dióxido de Carbono

% - Porcentagem

Kg - quilogramas

ha - hectares

CH₄ - Metano

H₂ - Hidrogênio

N₂ - Nitrogênio

H₂S - Gás Sulfídrico

NH₃ - Amônia

C₆H₁₂O₂ - Ácido Hexanoico

H₂O - Água

K - Constante de degradação de substrato

S - Substrato

$\frac{dS}{dt}$ - Taxa de consumo de substrato por um determinado período de tempo

Y - Taxa de produção específica

V₁ - Volume do biodigestor 1

V₂ - Volume do biodigestor 2

V₃ - Volume do biodigestor 3

V - Volume do reator de digestão anaeróbia

t - Tempo

t_i - Tempo inicial do processo

t_f - Tempo final do processo

g/L - gramas por litro

mL/gSVad - mililitros de biogás produzido por grama de sólidos voláteis adicionados

mL/dia - mililitros por dia

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	17
2 OBJETIVOS	20
2.1. Objetivo geral	20
2.2. Objetivos específicos	20
3 REVISÃO DE LITERATURA	21
3.1 Biomassa	21
3.2 Agroindústria do açaí	22
3.3 Agroindústria do cacau	23
3.4 Agroindústria do coco	24
3.5 Biogás	26
3.5.1 Produção de Biogás	27
3.5.2 Aplicações do biogás e biofertilizante	30
3.6 Biorreatores	32
3.6.1 Tipos de biorreatores com base no tipo de operação	32
3.6.2 Biorreatores em série	32
3.7 Simulação computacional	33
3.8 Software GNU Octave®	34
4 MATERIAL E MÉTODOS	36
4.1 Obtenção dos dados experimentais	36
4.1.1 Visão geral do artigo 1: Cocoa residues as viable biomass for renewable energy production through anaerobic digestion	36
4.1.2 Visão geral do artigo 2: Bottom ash from smoldered digestate and coconut coir as an alkalinity supplement for the anaerobic digestion of fruit waste	36
4.1.3 Visão geral do artigo 3: Integration of subcritical water pretreatment and anaerobic digestion technologies for valorization of açai processing industries residues	37
4.2 Sistemas de biodigestão	37
4.2.1 Sistema em fase única	37
4.2.2 Sistema em série	38
4.3 Modelo matemático para simulação	39
4.3.1 Degradação da matéria orgânica	40
4.3.2 Etapa de produção de ácidos orgânicos	41
4.3.3 Produção de Biogás	42
4.3.4 Composição do biogás	43
4.3.5 Vazão de biogás e do digestato	44
4.4 Modelo matemático para simulação	45
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	47
5.1 Degradação de substratos	47
5.2 Produção de ácidos orgânicos	50
5.3 Produção de biogás	53
5.4 Composição do biogás	55

5.5 Vazão do biogás e do digestato	57
6 CONCLUSÃO	61
7 REFERÊNCIAS	63
APÊNDICES E ANEXOS	69

1 INTRODUÇÃO

Desde o início das civilizações, os seres humanos têm buscado formas de produzir energia, inicialmente utilizando o fogo, a água, o vento e, mais tarde, os combustíveis fósseis (NASCIMENTO et al., 2016). No entanto, nos últimos anos, devido à crescente preocupação com o meio ambiente e a preservação da vida natural, tem aumentado a busca por formas mais sustentáveis de geração de energia, incluindo a utilização da biomassa.

A poluição ambiental tem aumentado em decorrência das atividades econômicas. O elevado nível de CO₂ é resultado do rápido crescimento populacional combinado com o uso de fontes de energia fóssil (SHAHZADI et al., 2022). O consumo de recursos naturais nos países têm aumentado consideravelmente nos últimos anos. As fontes de energia não renováveis têm contribuído significativamente para a exploração de recursos naturais e para a deterioração do meio ambiente (NI et al., 2022).

De acordo com dados da Câmara de Comercialização de Energia Elétrica, a geração de energia limpa no Brasil aumentou 6% no primeiro quadrimestre de 2022 em comparação com o mesmo período de 2021. Além disso, o país reduziu a produção de energia proveniente de usinas consideradas mais poluentes nos primeiros quatro meses de 2022 (CCEE, 2022).

Segundo a legislação da União Europeia, a biomassa é a fração biodegradável de produtos, subprodutos e resíduos de origem biológica, incluindo substâncias vegetais e animais, silvicultura e indústrias relacionadas, bem como resíduos urbanos e industriais (UNIÃO EUROPEIA, 2018). O biogás pode ser obtido a partir da decomposição de uma variedade de recursos renováveis, como plantas, madeira, resíduos agrícolas, restos de alimentos, excrementos e lixo.

O Brasil possui condições favoráveis para a produção em larga escala de biomassa, devido às suas extensas áreas de cultivo e ao clima propício ao longo do ano. A utilização da energia da biomassa apresenta diversos benefícios, como baixo custo de aquisição, emissões que não contribuem para o efeito estufa e menor impacto ambiental em comparação com fontes de combustíveis fósseis, o que reduz o risco ambiental (SOUSA et al., 2020). As biomassas a serem estudadas neste trabalho carecem de estudos na literatura.

A modelagem matemática é uma área de pesquisa que estuda a simulação de sistemas reais com o objetivo de prever seu comportamento. A simulação *in silico* nada mais é que a construção de um modelo de uma situação real em que depois serão testadas determinadas situações para avaliar qual seria sua resposta. Essa técnica é amplamente utilizada em diversos campos de estudo, como física, química, biologia, economia e engenharias. A

modelagem matemática permite descrever fenômenos por meio de equações matemáticas, o que é importante para prever e simular diferentes processos que podem ocorrer em um sistema, resultando na redução de custos de produção e no tempo de pesquisa.

Considerando todos esses aspectos, percebe-se que existe espaço para o uso de ferramentas computacionais, como o software Octave, que é gratuito, para simular e estimar parâmetros de processos, associados a comportamentos cinéticos em biorreatores.

Existem vários softwares livres disponíveis na internet que podem ser aplicados para resolver problemas relacionados a biorreatores e digestão anaeróbica, além de outros processos nas áreas de engenharia e física. Esses softwares são úteis tanto para a simulação quanto para a predição de parâmetros. O uso de software livre proporciona maior acessibilidade aos recursos computacionais, uma vez que não há custos de licenciamento, tornando-se uma alternativa viável para uso acadêmico e em situações em que há restrições econômicas em instituições ou organizações.

A simulação computacional permite obter conhecimento sobre o fenômeno, otimizar o sistema de produção de biogás e aplicar os resultados em escala experimental. Esse tipo de análise reduz o tempo e o investimento financeiro necessários para realizar procedimentos experimentais de produção de biogás, evitando gastos desnecessários, uma vez que fornece informações preliminares sobre o processo produtivo. Neste contexto, presente trabalho tem como foco realizar a simulação computacional, utilizando o software Octave, de biodigestores em série para a produção de biogás a partir de três tipos de biomassas de grande ocorrência no bioma amazônico : caroço de açaí, cascas de cacau e cascas de coco.

Referências

CCEE. Boletim de Dados de Geração 04/2022. Câmara de Comercialização de Energia Elétrica. Disponível em: <https://www.ccee.org.br/web/guest/dados-e-analises/dados-geracao>.

NASCIMENTO, R. S.; ALVES, G. M. **Fontes Alternativas E Renováveis De Energia No Brasil: Métodos E Benefícios Ambientais**. Educação e Ciência para a Cidadania Global, UNIVAP, 2016.

NI, X., WANG, Z., AKBAR, A., ALI, S. **Natural resources volatility, renewable energy, R&D resources and environment: Evidence from selected developed countries**. Resources Policy, V. 77, 2022.

SHAHZADI, Irum et al. **The nexus between research and development, renewable energy and environmental quality: Evidence from developed and developing countries.** *Renewable Energy*, v. 190, p. 1089-1099, 2022.

SOUSA, I. de P. et al . **Energy potential of biogas from pig farms in the state of minas gerais, brazil.** *Eng. Agríc., Jaboticabal* , v. 40, n. 3, p. 396-404, 2020.

UNIÃO EUROPEIA. DIRETIVA (UE) 2018/2001 DO PARLAMENTO EUROPEU E DO CONSELHO de 11 de dezembro de 2018 relativa à promoção da utilização de energia de fontes renováveis (reformulação). Disponível em: <<https://www.europarl.europa.eu/factsheets/pt/sheet/70/renewable-energy>>.

2 OBJETIVOS

2.1. Objetivo geral

O objetivo desta Dissertação foi realizar a simulação computacional, utilizando o software Octave, de biodigestores em série para a produção de biogás, a partir de três matrizes orgânicas: caroço de açaí, cascas de cacau e cascas de coco.

2.2. Objetivos específicos

Os seguintes objetivos específicos foram definidos para atingir o objetivo geral da dissertação:

- Desenvolver as equações envolvidas no processo de biodigestão (Modelo Matemático)
- Realizar a simulação computacional da produção de biogás em múltiplas fases, utilizando o software livre Octave
- Realizar a simulação computacional da produção de biogás em única fase para comparação
- Propor um sistema de biodigestores em série para produção biogás

3 REVISÃO DE LITERATURA

3.1 Biomassa

A Política Nacional de Resíduos Sólidos (BRASIL, 2010), Lei nº 12.305/10, institui que devem ser desenvolvidos sistemas de gestão ambiental e empresarial voltados para a melhoria dos processos produtivos e do reaproveitamento dos resíduos sólidos, incluídos a recuperação e o aproveitamento energético.

É preciso ressaltar que a PNRS possibilita a responsabilidade conjunta em relação aos resíduos, entre os geradores e o poder público, porém deixa definido a hierarquia das responsabilidades destacando principalmente as dos geradores de acordo com o Artigo 27 que estabelece:

“Art. 27. As pessoas físicas ou jurídicas referidas no art. 20 são responsáveis pela implementação e operacionalização integral do plano de gerenciamento de resíduos sólidos aprovado pelo órgão competente na forma do art. 24.

§1º A contratação de serviços de coleta, armazenamento, transporte, transbordo, tratamento ou destinação final de resíduos sólidos, ou de disposição final de rejeitos, não isenta as pessoas físicas ou jurídicas referidas no art. 20 da responsabilidade por danos que vierem a ser provocados pelo gerenciamento inadequado dos respectivos resíduos ou rejeitos.

§ 2º Nos casos abrangidos pelo art. 20, as etapas sob responsabilidade do gerador que forem realizadas pelo poder público serão devidamente remuneradas pelas pessoas físicas ou jurídicas responsáveis, observado o disposto no § 5º do art. 19.”

Ainda de acordo com a PNRS, a disposição final de resíduos sólidos urbanos produz emissões de gases causadores do efeito estufa. Com o aumento da população mundial e o grau de urbanização que representa 75% do total da população vivendo em cidades, torna-se clara a necessidade de um correto gerenciamento da disposição final de resíduos sólidos urbanos.

A gestão ambientalmente incorreta de resíduos sólidos nos municípios brasileiros vem causando preocupações não só ao poder público, mas à sociedade, visto que o risco de contaminação ambiental e disseminação de problemas de saúde humana que a disposição inadequada desses resíduos ocasiona é iminente (GIRELLI; PIT DAL MAGRO, 2017).

No que tange ao ambiente, o descarte inadequado deflagra uma série de impactos negativos à flora e fauna que habitam a biosfera terrestre: Emissão de gases de efeito estufa (GEE); Contaminação do solo e corpos hídricos superficiais e subterrâneos (aquíferos) por

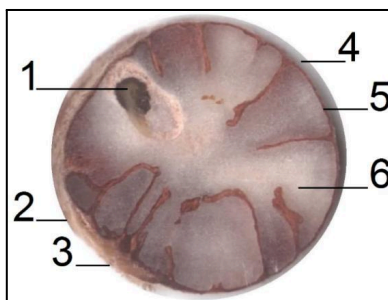
meio da contaminação do chorume, resultante da decomposição dos RSO (Resíduos Sólidos Orgânicos); Proliferação de agentes vetores de doença; e geração de odores. A biomassa residual tem a característica especial de ser barata, renovável e abundante, o que a torna um material interessante em diversos processos industriais (VÁSQUEZ et al, 2019). Os resíduos agroindustriais são ricos em compostos bioativos, principalmente aqueles oriundos do processo de material produtivo de fibra, couro, madeira e alimentos (FREITAS et al, 2019).

3.2 Agroindústria do açaí

O açaí (*Euterpe oleracea* Mart.) é uma fruta nativa da floresta amazônica da América do Sul, colhida de palmeiras de açaí (DE AZEVEDO, 2021). O açaí é consumido pela população paraense em forma de suco, acompanhado pela farinha de mandioca e de tapioca, ou mesmo no acompanhamento das principais refeições, como camarão, peixe e carnes. A partir do açaí se produz sorvetes, cafés especiais, chocolates, além de ser objeto de pesquisa na área cosmética e farmacêutica.

De acordo com o Panorama Agrícola do Pará 2015/2020, o Pará produziu 1.389.941 toneladas de açaí, isso equivale a 94% da produção do país. As cidades que se destacam na produção de açaí são Igarapé-Miri e Cametá, com 420.000 t e 159.540 t, respectivamente. Após processar o fruto, 15% deste constituem polpa e 85% constituem resíduos, (fibras e caroços) (SEDAP, 2021). A anatomia do caroço de açaí pode ser observada na Figura 1.

Figura 1 - Anatomia do fruto do açaizeiro (corte transversal): (1) Embrião, (2) Endocarpo, (3) Cicatriz, (4) Polpa, (5) Pericarpo + Tegumento e (6) Mesocarpo



Fonte: CORDEIRO et al, 2019.

O descarte de resíduos do processamento de açaí de forma desregulada é um cenário comum, principalmente na capital do estado do Pará. Não há uma destinação adequada, portanto, os caroços de açaí são descartados nas calçadas, terrenos baldios, e a água do despulpamento é descartada ao ar livre, se tornando contaminante para águas limpas. Esses

resíduos geram transtornos em vários âmbitos, o mau cheiro que interfere na convivência da vizinhança, a ocupação das calçadas com os sacos de caroços e, o florescimento dos caroços, que podem fazer com que as espécies cresçam em locais inadequados.

De acordo com o estudo de Sganzerla et al., (2021), a digestão anaeróbica de sementes de açaí mostrou-se uma tecnologia adequada para recuperar biogás rico em metano e mitigar as emissões da indústria do açaí. A rota tecnológica proposta para a valorização de resíduos permitiu a produção de energia elétrica e térmica, que poderia ser utilizada para suprir parte da energia requerida pela indústria do açaí.

3.3 Agroindústria do cacau

A árvore do cacau (*Theobroma cacao* L.) é uma espécie da família Malvaceae, nativa da América Central e do Sul, especificamente da bacia amazônica. O cacauzeiro é uma planta amante da sombra capaz de atingir entre 4 e 10 m de altura, essa árvore geralmente inicia a formação dos frutos aos 3 anos e atinge seu máximo rendimento e produtividade após 8 a 9 anos (VÁSQUEZ et al, 2019).

Quando se busca fontes renováveis de energia, os resíduos do cacau devem ser considerados, pois o fruto é utilizado na indústria alimentícia e na confeitaria mundial, gerando uma quantidade expressiva de resíduos na sua produção, principalmente pós-colheita (ANTWI et al, 2019).

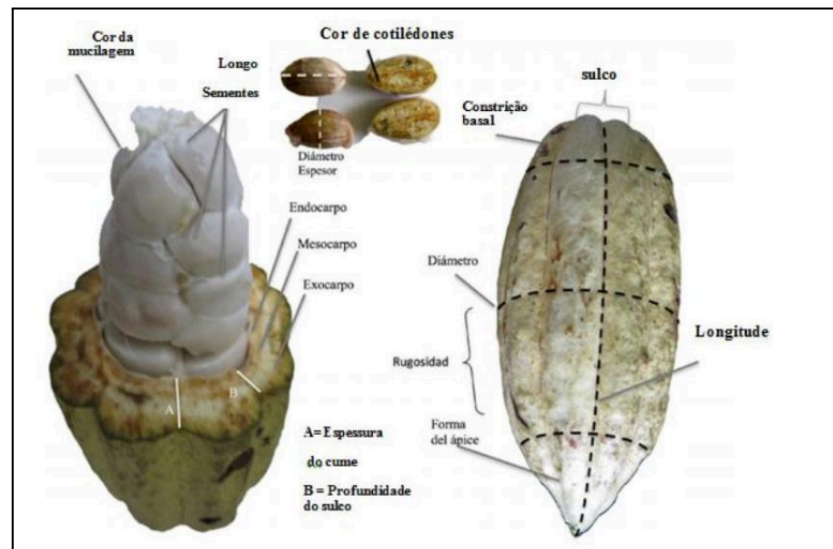
De acordo com o Núcleo de Planejamento e Assessoria Técnica e Estatística da Secretaria de Desenvolvimento Agropecuário e da Pesca (SEDAP, 2021), o Pará ocupa a primeira colocação no cenário nacional de produção cacauzeira com representatividade de 50,68% da produção brasileira. O rendimento médio do cacau por hectare produzido no Pará é maior até que o nacional. Enquanto no Brasil a projeção de janeiro é de 469 quilos por hectare, no Pará ela é de 948 kg/ha.

A cultura do cacau ocorre majoritariamente em três regiões tropicais: América Latina, Sudeste Asiático e África Ocidental (DAHUNSI et al., 2019). Na última década, a produção de grãos da fruta foi de 4,6.106 ton/ano (mundial), sendo a casca o seu maior resíduo, (ANTWI et al, 2019) que é comumente descartado diretamente no local da colheita (ACOSTA et al., 2018).

O grão de cacau, quando processado como licor ou manteiga, é um dos principais ingredientes dos produtos de chocolate. O cacau em pó também é usado em bebidas com

sabor de chocolate e sobremesas, como sorvetes, bolos, molhos e biscoitos (IDOWU et al, 2022).

Figura 2 - Caracterização morfológica na forma do fruto do cacau, destacando o exocarpo, mesocarpo e endocarpo.



Fonte: RAMÍREZ-GUILLERMO et al, 2018.

Os resíduos do cacau, como a casca, podem ser utilizados na produção de biocombustíveis. Devido à natureza higroscópica e o teor de umidade da maioria dos agro-resíduos, o tipo de pré-tratamento necessários para melhorar a qualidade do combustível e os prazos de validade dos materiais devem ser investigados antes que possam ser implantados com confiança (AJEWOLE et al, 2021). A caracterização do resíduo é um requisito importante no processamento de biomassa para geração de biocombustíveis (ZINLA et al, 2021).

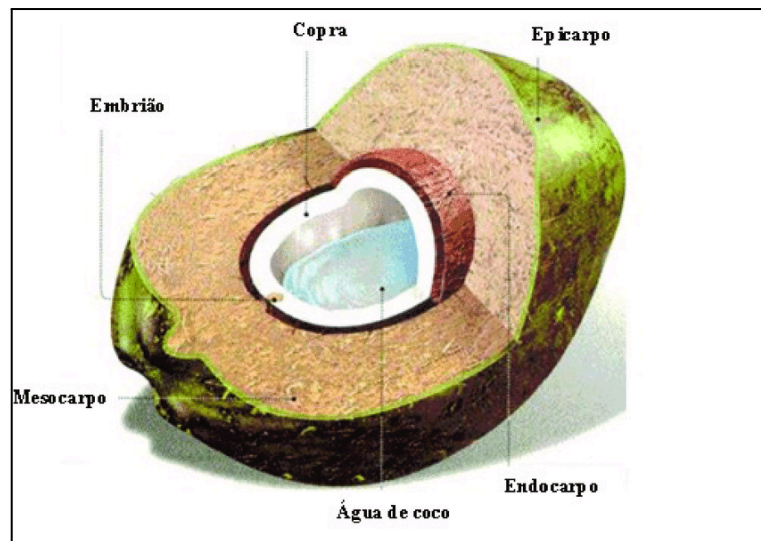
Diversas alternativas têm sido propostas para manter o equilíbrio econômico do mercado cacauero preservando a biodiversidade local, como a diversificação da produção e, no caso da agricultura familiar, o uso de sistemas agroflorestais (DJUIDEU et al., 2021). Seguindo esse exemplo, a casca do fruto (ver Figura 2) do cacauero pode ser empregada na produção de biogás em digestores, devido às sua característica composição química, rica em lipídios, fibras e carboidratos.

3.4 Agroindústria do coco

Conforme os últimos dados fornecidos pela Faostat (2021), a área mundial colhida com coco é de 11,8 milhões de hectares, produzindo 62,9 milhões de toneladas. Apenas três produtores, Indonésia, Filipinas e Índia ocupam 73,0% dessa área e participam com 74,1% da produção. Dentre os maiores produtores mundiais, o Brasil é quem possui o maior rendimento (13.114 kg/ ha), que está relacionado à tecnologia empregada na cultura, como condução e manejo dos coqueirais, sistemas intensivos de cultivo e variedades melhoradas do tipo anão e híbrido.

O coqueiro está sendo cultivado em quase todo o Brasil, cuja área atual é de 187,5 mil ha com produção de 1,6 bilhão de frutos. Na região Nordeste, concentram-se 80,9% da área colhida de coco do País e 73,5% de sua produção. A segunda maior área de coco está na região Norte, onde prevalece a variedade híbrida (FAOSTAT, 2021). Em 2020, o Ceará tornou-se o maior produtor de coco do Brasil, com 21,2% da área e 24,7% da produção nacional.

Figura 3 - Constituição do fruto do coqueiro.



Fonte: MATTOS, 2011.

O aumento na produção e na comercialização do coco, verde ou maduro, pelas agroindústrias e pelo consumo in natura, vem causando uma conseqüente elevação na geração de resíduos sólidos, a anatomia do fruto pode ser observada na Figura 3. De acordo com a Lei 12.305, de 2 de agosto de 2010, o resíduo do coco possui características para ter destinação final ambientalmente adequada (BRASIL, 2010), no entanto somente as cascas geradas pelo consumo e/ou processamento do coco maduro têm expressiva direção de aproveitamento.

Durante o consumo e/ou processamento deste fruto, somente a água e a polpa do coco são utilizadas. O coco possui diversas aplicações principalmente em alimentos, bebidas e como fonte de madeira e artesanato. Dadas as suas amplas funcionalidades, um dos produtos de coco de maior destaque é o óleo de coco virgem. A produção mundial de óleo de coco vem crescendo nos últimos anos, principalmente devido à maior demanda global (MARIANO et al, 2020).

3.5 Biogás

O biogás é um biocombustível proveniente de materiais orgânicos e, portanto, é uma fonte alternativa de energia (KATUWAL E BOHARA, 2009). A composição do biogás produzido a partir da digestão anaeróbica está diretamente relacionada ao tipo de matéria orgânica decomposta. Assim, considerando a amplitude da biomassa existente, a Agência Nacional de Energia Elétrica - ANEEL, classifica o biogás utilizado para produzir energia elétrica em quatro grandes grupos: resíduos florestais, resíduos sólidos urbanos, resíduos animais e resíduos agroindustriais (FREITAS et al, 2019).

Tabela 1 – Composição típica do biogás.

Gás	Símbolo	Concentração no biogás (%)
Metano	CH ₄	50-80
Dióxido de carbono	CO ₂	20-40
Hidrogênio	H ₂	1-3
Nitrogênio	N ₂	0,5-3
Gás Sulfídrico e Amônia	H ₂ S/NH ₃	1-5

Fonte: Adaptado de Barrera (1993).

Os principais componentes do biogás são o metano e o dióxido de carbono, onde a fração de metano representa o recurso energético útil. Além destes, o biogás pode conter pequenas quantidades de nitrogênio e oxigênio, bem como traços de compostos de enxofre (H₂S, mercaptanos, sulfetos, etc.), compostos de silício (siloxanos, silanos), amônia, compostos halogenados e outros compostos orgânicos voláteis (CALBRY-MUZYKA et al, 2022).

3.5.1 Produção de Biogás

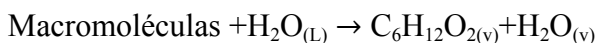
O biogás é obtido a partir do processo de digestão anaeróbia, um processo fermentativo em que matéria orgânica complexa é degradada a compostos mais simples por bactérias fermentativas. O processo de geração distribuída a partir de biomassa residual envolve a transformação do resíduo em biogás com o uso de biodigestores. A quantidade de biogás produzida varia dependendo de muitos fatores diferentes, como matérias-primas, tecnologia de pré-tratamento, temperatura e tempo no reator (FREITAS et al, 2019).

A digestão anaeróbica é um equilíbrio delicado de comunidades microbianas complexas e os parâmetros fisiológicos do biorreator, e pode facilmente falhar em decorrência da flutuação do pH, temperatura, concentração e composição do lodo, modos de operação, dinâmica do líquido, força iônica e configurações do tanque. Além disso, diferentes resíduos orgânicos podem necessitar de tratamentos especiais devido aos componentes tóxicos e recalcitrantes que podem ter efeitos prejudiciais no desempenho da digestão anaeróbica (ARIF et al, 2018).

Segundo Lima et al. (2017) nas camadas inferiores de aterros e lixões abertos, a concentração de oxigênio é baixa e os componentes orgânicos biodegradáveis são decompostos por processo biológico anaeróbio, gerando gás contendo de 50-60% de metano.

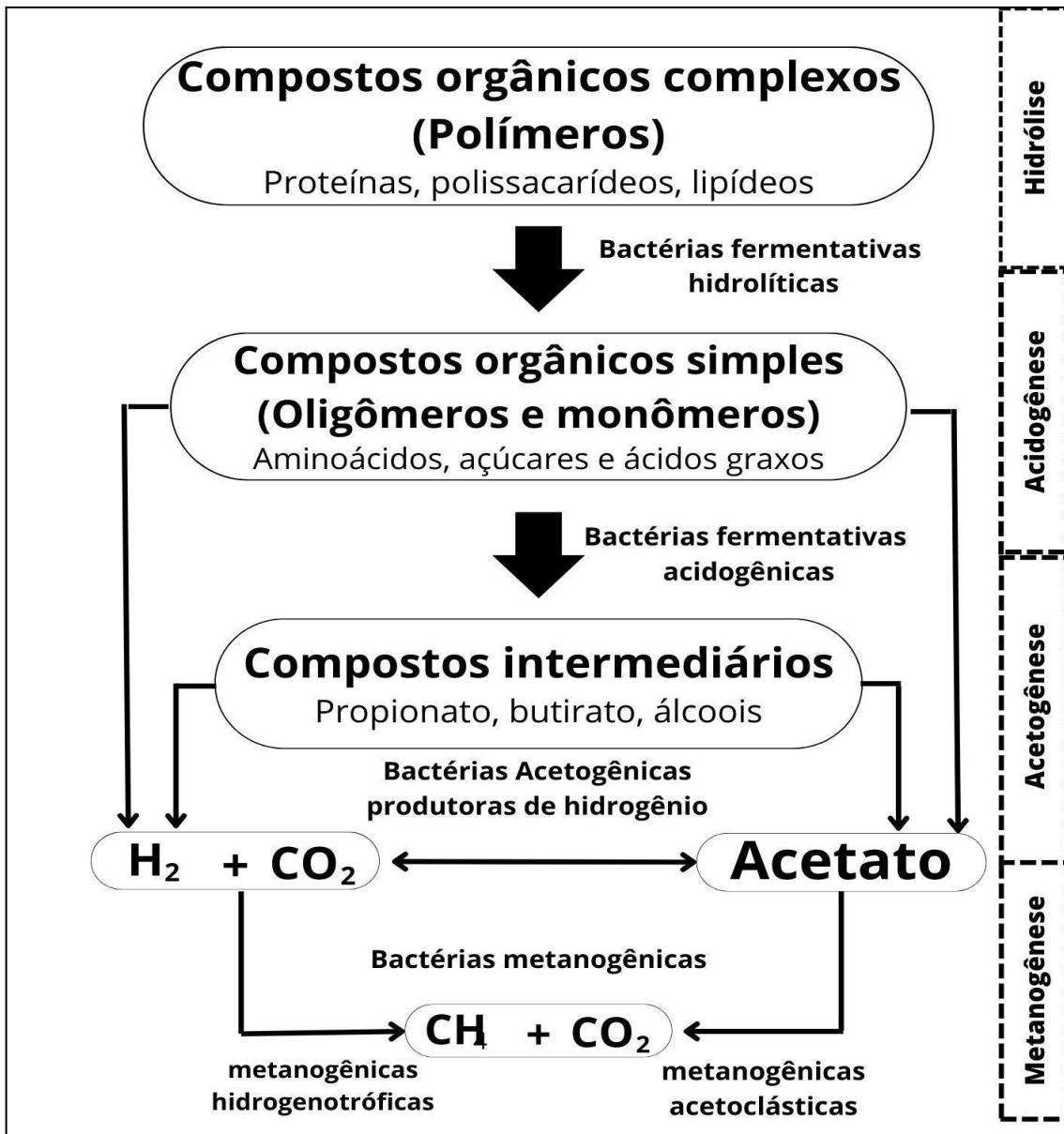
A degradação ocorre através da ação de diversos grupos de microrganismos que interagem simultaneamente, até a formação dos produtos finais, metano e gás carbônico. De acordo com Arif et al (2018) o processo de produção de biogás a nível bioquímico pode ser descrito da seguinte forma:

Hidrólise: as ligações moleculares complexas (macromoléculas), chamados polímeros, são quebradas por enzimas em um processo bioquímico liberadas por um grupo específico de bactérias e dão origem a compostos orgânicos simples (monômeros), como aminoácidos, ácidos graxos e açúcares. Esse processo é demonstrado abaixo:.



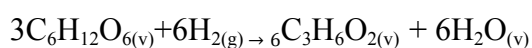
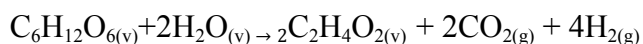
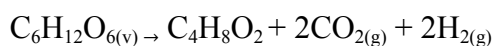
O tipo de hidrólise a ser desempenhada depende do tipo de matéria a ser degradada. Esse processo é de fundamental importância para a produção de biogás, pois dada a quebra dos polímeros maiores, inicia-se o processo de biodigestão.

Figura 4 - Rotas metabólicas e grupos microbianos envolvidos na digestão anaeróbia.



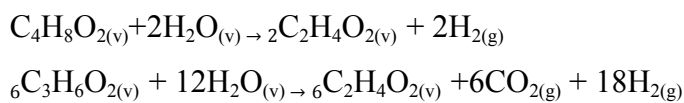
Fonte: Elaborado pela autora, 2023.

Acidogênese: os produtos solúveis oriundos da fase de hidrólise são metabolizados no interior das células das bactérias fermentativas, sendo convertidos em diversos compostos mais simples, e então excretados pelas células. Como os ácidos graxos voláteis são os principais produtos dos organismos fermentativos, estes são usualmente designados de bactérias fermentativas acidogênicas (exemplo, espécies *Clostridium* e *Bacteroides*).



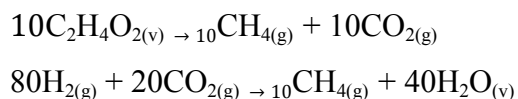
Na acidogênese as substâncias resultantes da hidrólise são transformadas por bactérias acidogênicas em ácido butanóico, ácido acético, ácido propanóico e álcoois, assim como hidrogênio e gás carbônico.

Acetogênese: as bactérias acetogênicas são responsáveis pela oxidação dos produtos gerados na fase acidogênica em substrato apropriado para as bactérias metanogênicas. Os produtos gerados pelas bactérias acetogênicas são o hidrogênio, o dióxido de carbono e o acetato.



Metanogênese: etapa final do processo de degradação anaeróbia de compostos orgânicos em metano e dióxido de carbono efetuada pelas arqueas metanogênicas. Em função de sua afinidade por substrato e magnitude de produção de metano, as metanogênicas são divididas em dois grupos principais:

- Metanogênicas acetoclásticas: formam metano a partir do ácido acético ou metanol. Os microrganismos predominantes na digestão anaeróbia são responsáveis por cerca de 60 a 70 % de toda a produção de metano. Estes microrganismos pertencem a dois gêneros principais: *Methanosarcina* e *Methanosaeta*.
- Metanogênicas hidrogenotróficas: bactérias que são capazes de produzir metano a partir de hidrogênio e dióxido de carbono. Os gêneros mais frequentemente isolados em reatores anaeróbios são: *Methanobacterium*, *Methanospirillum* e *Methanobrevibacter*.



Durante a metanogênese na biodigestão anaeróbia, o ácido acético, o hidrogênio e dióxido de carbono são finalmente convertidos em metano e gás carbônico através da ação de microrganismos metanogênicos.

3.5.2 Aplicações do biogás e biofertilizante

O biogás pode ser utilizado em praticamente todas as aplicações desenvolvidas para o gás natural. No entanto, para algumas aplicações, o biogás requer tratamento devido a diferenças consideráveis entre os requisitos para aplicações estacionárias do biogás e seu uso como combustível ou distribuição por tubulações.

De acordo com Zanette (2009), as aplicações mais comuns para o biogás são o aquecimento e a geração de eletricidade. Além dessas aplicações, a utilização como combustível veicular e a injeção na rede de gás natural são aplicações que vêm atraindo interesse cada vez maior. Nos países em desenvolvimento, o uso mais comum do biogás em plantas de pequena escala é para cocção e iluminação. Fogões convencionais a gás e lamparinas podem ser facilmente ajustados para usar biogás modificando a razão ar/gás. Nos países industrializados, caldeiras estão presentes apenas em um pequeno número de plantas onde o biogás é utilizado como combustível sem co-geração. Em diversas aplicações industriais, o biogás é utilizado para a produção de vapor.

O biogás também é um combustível adequado para a geração de energia elétrica ou cogeração. Existem diversas tecnologias disponíveis, sendo as principais aplicações em geradores de combustão interna e turbinas a gás (LANTZ, 2004).

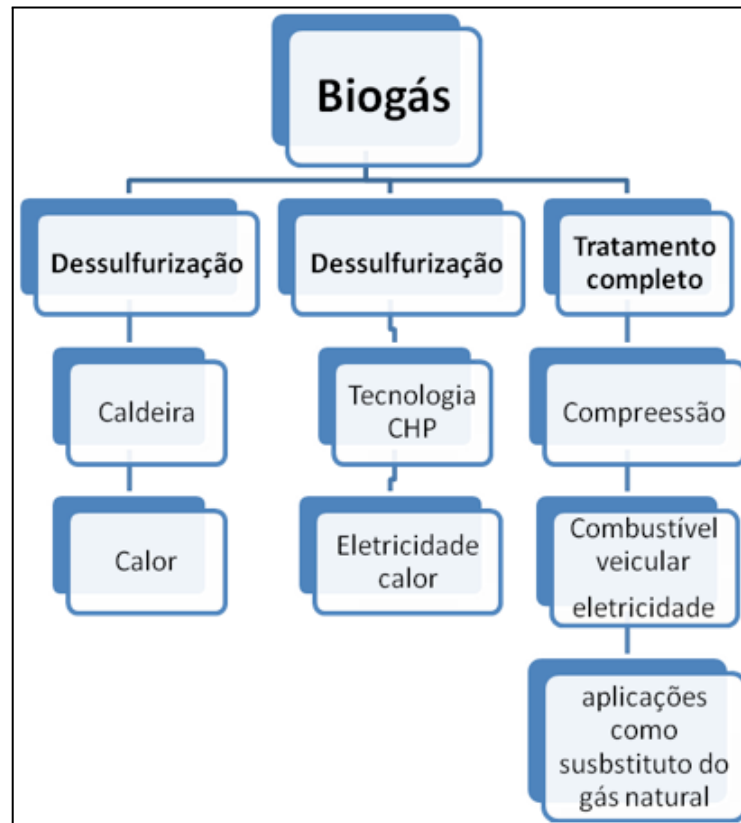
No caso da geração de eletricidade, a utilização de biogás em sistemas de combustão interna é uma tecnologia amplamente estabelecida e extremamente confiável. Milhares de equipamentos operam em estações de tratamento de efluentes, aterros sanitários e plantas de biogás. O tamanho dos equipamentos varia de 12 kW em pequenas fazendas a vários MW em grandes aterros (IEA, 2005).

Nessa linha, o Biogás se apresenta como um biocombustível com boas perspectivas futuras, particularmente, no Brasil, que apresenta potencial de geração, consumo e distribuição. Sobremaneira, o Biogás se apresenta como uma fonte energética relativamente eficiente, além de ser renovável podendo ser obtido natural ou artificialmente. Outro aspecto positivo é a menor emissão de poluentes, quando comparado a outros combustíveis fósseis. Algumas das aplicações do biogás podem ser observadas na figura 5.

É importante destacar o subproduto obtido através da fermentação anaeróbica de resíduos vegetais em um processo de biogás, o biofertilizante, podendo também ser chamado de digestato (KARLSSON et al., 2014). A produção de biogás, portanto, é responsável pela geração de um resíduo rico em nutrientes, que pode ser administrado e descartado de forma

correta ou pode ser utilizado como biofertilizante na agricultura (IOANNOU-TTOFA et al. 2021).

Figura 5 - Biogás e suas possibilidades de uso.



Fonte: Monteiro, 2011.

Diversos artigos têm demonstrado formas de utilização deste resíduo proveniente da produção do biogás. O estudo de Veroneze et al. (2019) demonstra que o material resultante da co-digestão anaeróbia de resíduos de suínos e doses de glicerina pode ser empregado como biofertilizante na agricultura. Ioannou-Ttofa et al. (2021) relatam que a utilização do resíduo do processamento do biogás como biofertilizante parece contribuir com a sustentabilidade de forma a proporcionar uma redução de aproximadamente 38% da pegada ambiental. De acordo com Yong, Bashir & Hassan (2021), o biofertilizante pode ser usado e vendido para indústrias agrícolas, incentivando o desenvolvimento econômico concomitante com a sustentabilidade na área de gestão de resíduos.

3.6 Biorreatores

Denominam-se biorreatores, os reatores químicos em que ocorrem uma série de reações químicas catalisadas por biocatalisadores. Esses biocatalisadores podem ser enzimas ou células vivas (SCHMIDELL, 2001). Os biorreatores podem ser divididos em dois grandes grupos:

1: Biorreatores nos quais as reações ocorrem na ausência de células vivas, ou seja, são tipicamente os reatores enzimáticos;

2: Biorreatores nos quais as reações se processam na presença de células vivas.

3.6.1 Tipos de biorreatores com base no tipo de operação

De acordo com Schmidell (2001), existem diversas formas de classificação de biorreatores, porém, neste trabalho será classificado com base no processo fermentativo, ou seja, do seu tipo de operação. Assim, um reator biológico pode ser operado nas seguintes formas:

- Descontínuo
 - Com um inóculo por tanque
 - com recirculação de células
- Semicontínuo
 - sem recirculação de células
 - com recirculação de células
- Descontínuo Alimentado
 - sem recirculação de células
 - com recirculação de células
- Contínuo
 - executado em um reator (com ou sem recirculação de células)
 - executado em vários reatores (com ou sem recirculação de células)

3.6.2 Biorreatores em série

De acordo com Facciotti (2001) a operação do sistema contínuo em múltiplos estágios, isto é, com n-reactores acoplados em série, conhecido também como sistema em “cascata”, pode ter diversas opções de condução do processo, tais como:

- Sistema com uma única alimentação (single-stream multi-stage)
- sistema com múltiplas alimentações (multi-stream multi stage)
- sistema com reciclo de células, com uma ou múltiplas alimentações

Biorreatores em série é um sistema contínuo, constituído por vários reatores, no qual a alimentação de um dado reator da série é o efluente do reator anterior, visa o estabelecimento de diferentes condições nos vários biorreatores da série. Os biorreatores em séries estão descritos na literatura como melhores em produção do que os biorreatores usados em produção única.

De acordo com Santos (2020), a desnitrificação é uma etapa anóxica e heterotrófica usada para redução biológica do nitrato a nitrogênio gasoso por bactérias desnitrificantes. O emprego de dois biorreatores em série, ou de um único reator com zonas de nitrificação e desnitrificação têm sido os principais arranjos operacionais deste sistema, pois as condições ambientais necessárias para cada etapa são diferentes.

3.7 Simulação computacional

O uso de ferramentas *in silico*, ou seja, aquele realizado via simulação em computador, possibilita a avaliação de diferentes cenários em questão de desempenho técnico e de viabilidade econômica. A modelagem matemática pode ser entendida como um conjunto de etapas que tem como objetivo final fornecer uma descrição matemática de um fenômeno, e seu entendimento.

A modelagem de processos e bioprocessos é uma ferramenta utilizada na engenharia química, biotecnologia e engenharia de bioprocessos, devido à possibilidade de prever condições operacionais ou simular equipamentos. Os modelos matemáticos dos processos fermentativos tentam, por meio de equações matemáticas, representar da maneira mais próxima à real, os balanços de massa para cada componente no biorreator, relacionados às velocidades e complexidades que as transformações bioquímicas apresentam (SCHMIDELL; FACCIOTTI, 2001).

Na prática de engenharia, muitas vezes deve-se simular computacionalmente um sistema complexo. Para engenheiros químicos, isso pode incluir modelagem de processos de produção química, problemas de programação ou termodinâmica complexa. Essas simulações de computador ajudam a reunir informações valiosas sobre o processo e evitam investigações experimentais impraticáveis ou impossíveis (MCBRIDE; SUNDMACHER, 2019).

Por vezes os programas de modelagem também apresentam desvantagens inerentes, principalmente em aplicações comerciais, como custo moderado a alto e o código-fonte não está disponível e, portanto, não é possível modificar o sistema de simulação. Além disso, exigem também a modelagem precisa do sistema a ser simulado, necessitando de algumas habilidades de programação (MOLINA et al, 2021).

A partir de conceitos de cinética da atividade microbiana e de balanços materiais, pode-se prever variações das concentrações celulares, de substrato e de produto ao longo do tempo de cultivo para processos em regime transiente, ou nas diferentes correntes de processos contínuos em estado estacionário (BADINO JUNIOR; CRUZ, 2012).

A modelagem matemática ocorre em cinco etapas:

1. Descrição do Sistema Físico;
2. Elaboração do modelo matemático;
3. Solução das equações do modelo matemático;
4. Simulação;
5. Predição;

3.8 Software GNU Octave[®]

Programas de uso geral, como Matlab[®], MathCad[®], Octave[®] ou Excel[®], são amplamente utilizados no ensino de engenharia química, pois apenas habilidades de programação moderadas são necessárias e são relativamente fáceis de usar, rápidos de simular e obter resultados (MOLINA et al, 2021) .

O software Octave[®], é uma linguagem de alto nível, construída inicialmente para computação numérica. Ela provê uma interface de linha de comando para resolver problemas lineares e não lineares numericamente. Faz parte do projeto GNU, é um software livre sob os termos da licença GPL (General Public License) como é publicada pela Free Software Foundation.

Figura 6 - Logo do software GNU Octave



Fonte: GNU, 2020

O octave foi criado em 1988 por John Eaton e outros colaboradores sendo inicialmente para resolver problemas relacionados a reações químicas e para computação numérica e, mais tarde, estendeu-se para problemas de álgebra linear, equações diferenciais, dentre outros.

A linguagem do Octave[®] é compatível com o MATLAB[®] e proporciona ferramentas para a resolução de problemas matemáticos diversos, desde operações algébricas comuns até equações diferenciais e plotagem de gráficos, outrossim, também permite a criação de scripts através de seus diversos operadores lógicos e relacionais (GNU, 2020).

Além da linguagem própria do software, ele ainda permite o uso de outras linguagens em extensão, como C++, C e Fortran. É uma linguagem de alto nível que possui uma boa interface para a resolução de problemas numéricos lineares e não lineares com base na linguagem compatível com a utilizada no MATLAB[®].

4 MATERIAL E MÉTODOS

4.1 Obtenção dos dados experimentais

Os artigos contendo os dados experimentais foram obtidos na plataforma de base de dados Elsevier, uma empresa global de informações analíticas que contribui com instituições de ensino e pesquisa, e profissionais para o progresso da ciência melhorando seu desempenho em benefício da humanidade (ELSEVIER, 2022).

Foram selecionados três artigos, um para cada tipo de resíduo a ser estudado. Os dados experimentais extraídos dos artigos podem ser consultados nos Anexos A, B e C. Os artigos tem por títulos:

1. *Artigo 1: Cocoa residues as viable biomass for renewable energy production through anaerobic digestion*
2. *Artigo 2: Bottom ash from smoldered digestate and coconut coir as an alkalinity supplement for the anaerobic digestion of fruit waste*
3. *Artigo 3: Integration of subcritical water pretreatment and anaerobic digestion technologies for valorization of açai processing industries residues*

4.1.1 Visão geral do artigo 1: Cocoa residues as viable biomass for renewable energy production through anaerobic digestion

O artigo de Acosta (2018), publicado pela *Bioresource Technology* em outubro de 2018, teve como objetivo avaliar o potencial bioenergético do resíduo de cacau via digestão anaeróbica. Para isso, os reatores em escala de laboratório de batelada foram operados sob condições de baixo e alto teor de sólidos. Nos testes de lote, $59 \pm 4\%$ da Demanda Química de Oxigênio (DQO) foi recuperada como metano. Este estudo de caso comprova o potencial dos resíduos de cacau como fonte de energia renovável em áreas rurais.

4.1.2 Visão geral do artigo 2: Bottom ash from smoldered digestate and coconut coir as an alkalinity supplement for the anaerobic digestion of fruit waste

O artigo de Ezieke (2022), teve como objetivo avaliar o uso de cinzas residuais da combustão da fibra de coco. O rendimento de metano nos níveis ótimos de tamponamento com NaHCO_3 como agente tamponante foi de $233 \pm 12 \text{ NmL}_{\text{CH}_4/\text{g}}$ VS. O rendimento de metano

em uma adição de alcalinidade como cinzas foi significativamente menor ($124 \pm 3 \text{ NmL}_{\text{CH}_4/\text{g VS}}$), mas ainda benéfico em comparação com o rendimento de metano obtido a partir de experimentos sem alcalinidade adicionada ($40 \pm 1 \text{ NmL}_{\text{CH}_4/\text{g VS}}$).

4.1.3 Visão geral do artigo 3: Integration of subcritical water pretreatment and anaerobic digestion technologies for valorization of açai processing industries residues

O trabalho de Maciel-Silva (2019), teve como objetivo estudar a valorização da biomassa residual e efluente do processamento do açai para obtenção de produtos energéticos e de maior valor agregado a partir desses resíduos, por meio da integração entre tecnologias de pré-tratamento subcrítico com água e digestão anaeróbia. A tecnologia de água subcrítica foi realizada para tratar a biomassa residual. A composição de metano no biogás para o reator ficou na faixa entre 40 e 60%. O rendimento acumulado de biogás foi de $7,79 \text{ L}_{\text{kgTVS}}^{-1}$.

4.2 Sistemas de biodigestão

4.2.1 Sistema em fase única

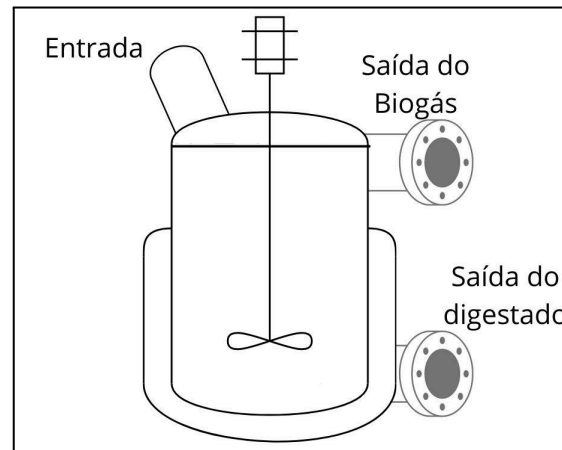
O sistema em fase única (Figura 7) é uma abordagem comum para a digestão anaeróbica, na qual todo o processo de decomposição da matéria orgânica ocorre em um único tanque ou reator. Nesse sistema, os resíduos orgânicos são adicionados ao reator, onde são degradados por uma comunidade microbiana anaeróbica. Durante a digestão anaeróbica em fase única, a matéria orgânica é convertida em biogás, que consiste principalmente em metano (CH_4) e dióxido de carbono (CO_2), além de outros compostos como o sulfeto de hidrogênio (H_2S) (LEITE, 2021).

O sistema em fase única oferece algumas vantagens, como simplicidade de operação e menor investimento inicial em comparação com sistemas em múltiplas fases. A ausência de separação das etapas de hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese em reatores diferentes simplifica o projeto e a operação do sistema. Além disso, a produção de biogás e a decomposição da matéria orgânica ocorrem simultaneamente no reator em fase única.

No entanto, esse sistema também apresenta algumas limitações. A falta de controle sobre as etapas individuais do processo pode resultar em menor eficiência na conversão da matéria orgânica em biogás. Além disso, a presença de substâncias inibidoras no reator, como

compostos ácidos ou produtos tóxicos, pode prejudicar a atividade microbiana e reduzir a produção de biogás.

Figura 7 - Exemplificação do sistema em fase única para biodigestão



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

4.2.2 Sistema em série

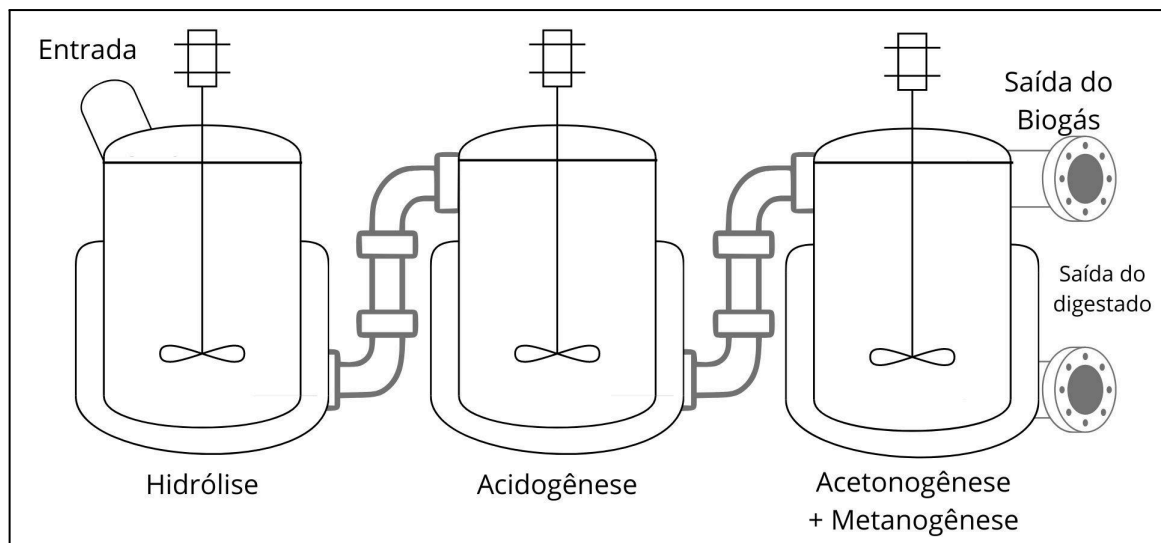
O esquema de biodigestão em série possui um tanque de armazenamento, onde a biomassa é depositada. Possui três biodigestores onde acontecem, respectivamente, a hidrólise, acidogênese e, no último, acetogênese e metanogênese. O sistema tem dois reservatórios finais, um para o biogás e outro para o biofertilizante. O processo descrito em mais de uma etapa é preferível, pois há melhor aproveitamento dos resíduos em cada biodigestor, maior eficiência no processo e maior rentabilidade na produção.

O modelo possui um sistema com 3 reatores em série, para cada tipo de resíduo, ou seja, um balanço de massa para o substrato em cada recipiente reativo. Os dois primeiros reatores em fase líquida, e último reator em duas fases, líquido e gás. A região do reator 3 que compreende a fase gás é comumente chamada de head space. A exemplificação desse tipo de sistema pode ser vista na Figura 8.

A escolha entre um sistema em fase única e um sistema em múltiplas fases depende das características dos resíduos, das metas de produção de biogás e das condições operacionais desejadas.

Para alguns tipos de resíduos, um sistema em fase única pode ser suficiente e economicamente viável.

Figura 8 - Exemplificação do Sistema em série para biodigestão



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

No entanto, para resíduos mais complexos ou para otimizar a produção de biogás, um sistema em múltiplas fases pode ser mais adequado, permitindo um controle mais preciso das etapas do processo e aumentando a eficiência global do sistema.

4.3 Modelo matemático para simulação

Para desenvolver o modelo matemático, foram utilizadas equações gerais de conservação de espécies que descrevem a conversão do substrato, as equações foram adaptadas de Balmant (2014). A implementação do modelo matemático foi realizada no software Octave, com uso de dados experimentais e das equações teóricas. O estudo foi dividido da seguinte forma:

- **Estudo da produção de biogás em sistema em fase única e em série para o resíduo cacau;**
- **Estudo da produção de biogás em sistema em fase única e em série para o resíduo açaí;**
- **Estudo da produção de biogás em sistema em fase única e em série para o resíduo coco verde.**

Para a simulação foram admitidos as seguintes hipóteses:

- Três reatores tanque agitado em série;
- Foi assumido vazão constante entre as misturas na fase líquida nos reatores 1 e 2, ou seja, Q_0 , Q_1 e Q_2 em ml/dia;
- A vazão do biogás produzido Q_3 em ml/dia;
- A vazão do digestado Q_4 em ml/dia; sendo $Q_4 = Q_2 - Q_3$;

Os processos envolvidos na produção de biogás observados foram:

4.3.1 Degradação da matéria orgânica

A degradação da matéria orgânica na produção de biogás é um processo complexo que envolve a decomposição anaeróbica de resíduos orgânicos por microrganismos, resultando na produção de biogás. Essa conversão bioquímica é influenciada por vários fatores, incluindo a composição do substrato, a temperatura, a relação carbono/nitrogênio (C/N), o pH e o tempo de retenção hidráulica (TRH).

O cálculo para a concentração de matéria orgânica em única fase utilizado foi:

$$\frac{dS}{dt} = -K \times S (i - 1) \quad (\text{Eq. 1})$$

As equações para a concentração de matéria orgânica na produção de biogás em múltiplas fases são três, uma para cada biodigestor:

$$\frac{dS_1}{dt} = -K_1 \times S (i - 1) \quad (\text{Eq. 2})$$

$$\frac{dS_2}{dt} = -K_2 \times S (i - 1) \quad (\text{Eq. 3})$$

$$\frac{dS_3}{dt} = -K_3 \times S (i - 1) \quad (\text{Eq. 4})$$

As equações 1, 2, 3 e 4 são equações diferenciais de primeira ordem, onde S representa a concentração de substrato orgânico ao longo do tempo (t), e K é uma constante de taxa de degradação do substrato.

4.3.2 Etapa de produção de ácidos orgânicos

Durante a produção de biogás, a matéria orgânica é quebrada em várias etapas, e uma das primeiras etapas é a acidogênese. Nessa fase, as bactérias acidogênicas convertem os compostos orgânicos complexos, como carboidratos, gorduras e proteínas, em ácidos orgânicos de cadeia curta. Esses ácidos incluem ácido acético, ácido propiônico e ácido butírico, entre outros.

O conhecimento sobre a produção de ácidos é fundamental para garantir a eficiência do processo de produção de biogás. Os ácidos orgânicos de cadeia curta são intermediários na produção de biogás, sendo convertidos em ácidos graxos voláteis (AGVs) e, em seguida, em metano e dióxido de carbono. Compreender as condições ideais para a produção e metabolismo dos ácidos é essencial para maximizar a produção de biogás.

As equações da produção de ácidos na formação de biogás em uma única fase está descrito a seguir:

- Cálculo da produção de ácido acético

$$\frac{dS}{dt} \text{Acético} = Y (\text{acético}) + \frac{dS}{dt} \quad (\text{Eq. 5})$$

- Cálculo da produção de ácido butírico

$$\frac{dS}{dt} \text{Butírico} = Y (\text{butírico}) + \frac{dS}{dt} \quad (\text{Eq. 6})$$

- Cálculo da produção de ácido propiônico

$$\frac{dS}{dt} \text{Propiônico} = Y (\text{Propiônico}) + \frac{dS}{dt} \quad (\text{Eq. 7})$$

Para a quantificação dos ácidos na produção de biogás em múltiplas fases, foram utilizadas as seguintes equações:

- Cálculo da produção de ácido acético

$$\frac{dS}{dt} \text{Acético} = Y_1 (\text{acético}) + \frac{dS_2}{dt} + V_2 \quad (\text{Eq. 8})$$

- Cálculo da produção de ácido butírico

$$\frac{dS}{dt} \text{Butírico} = Y_2 (\text{butírico}) + \frac{dS_2}{dt} + V_2 \quad (\text{Eq. 9})$$

- Cálculo da produção de ácido propiônico

$$\frac{dS}{dt} \text{Propiônico} = Y_3 (\text{propiônico}) + \frac{dS_2}{dt} + V_2 \quad (\text{Eq. 10})$$

4.3.3 Produção de Biogás

A produção de biogás é um processo biológico que envolve a decomposição anaeróbica de matéria orgânica por microrganismos, resultando na produção de uma mistura de gases, principalmente metano (CH_4) e dióxido de carbono (CO_2).

Através da simulação computacional e do ajuste das constantes cinéticas, é possível prever a produção de biogás ao longo do tempo, otimizar as condições operacionais e realizar estudos de sensibilidade para entender como diferentes parâmetros afetam a produção de biogás.

A equação da produção de biogás em uma única fase pode ser descrita da seguinte forma:

$$\frac{dS}{dt} \text{Biogás} = Y + \frac{dS}{dt} + V \quad (\text{Eq. 11})$$

A equação apresentada é uma forma simplificada da equação geral de balanço de biogás em um sistema de digestão anaeróbica:

Y: é a taxa de produção específica de biogás (volume de biogás produzido por unidade de substrato consumido).

$\frac{dS}{dt}$: é a taxa de consumo de substrato (matéria orgânica) no tempo "t" (massa por unidade de tempo).

V: é o volume do reator de digestão anaeróbica (ou volume do sistema) no qual o biogás está sendo produzido.

Para a produção de biogás em múltiplas fases, foi utilizada a seguinte equação:

$$\frac{dS}{dt} \text{Biogás} = Y_1 + \frac{dS1}{dt} + V_1 * Y_2 + \frac{dS2}{dt} + V_2 * Y_3 + \frac{dS3}{dt} + V_3 \quad (\text{Eq. 12})$$

No qual:

Y_1, Y_2, Y_3 : são as taxas de produção específicas de biogás para cada componente. Cada taxa representa a quantidade de biogás produzida por unidade de substrato consumido para o componente correspondente.

$\frac{dS1}{dt}, \frac{dS2}{dt}, \frac{dS3}{dt}$: são as taxas de consumo de substrato (matéria orgânica) para cada componente no tempo "t" (massa por unidade de tempo).

V_1, V_2, V_3 : são os volumes dos reatores.

4.3.4 Composição do biogás

A composição do biogás pode variar dependendo dos tipos de resíduos orgânicos utilizados, do processo de digestão e das condições de operação. No entanto, os principais componentes do biogás são o metano (CH_4) e o dióxido de carbono (CO_2).

Metano (CH_4): É o componente mais abundante do biogás e é responsável pelo seu potencial como fonte de energia. O metano é um gás incolor, inodoro e inflamável. É o principal componente do biogás que é queimado para a produção de calor, eletricidade ou para uso direto como combustível em veículos.

Dióxido de carbono (CO_2): É o segundo componente mais abundante do biogás. O dióxido de carbono é um subproduto da digestão anaeróbica e está presente em quantidades significativas. Em algumas aplicações, como a produção de biometano para injeção na rede de gás natural, é necessário remover uma porcentagem considerável de CO_2 para atingir as especificações de qualidade.

O cálculo das concentrações de produtos para produção em fase única está exemplificado a seguir:

$$\frac{dS}{dt} \text{CO}_2 = 0.2 + (1^{-0.03 \times V \times \frac{t}{V}}) \times 0.1 + \frac{(1^{-0.02 \times V \times (t_i - t_f)})}{V} + 0.3 + \frac{(1^{-0.01 \times V \times \frac{t}{V}})}{V} \quad (\text{Eq. 13})$$

Onde:

V: é o parâmetro que representa o volume do reator.

t_i e t_f : são parâmetros que representam o tempo inicial e final do processo.

0.2, 0.1 e 0.3 são valores constantes que representam contribuições fixas de CO_2 no biogás.

$$\frac{dS}{dt}\text{CH}_4 = 0.3 + (1^{-0.01 \times V \times \frac{t}{V}}) \times 0.6 + \frac{(1^{-0.02 \times V \times (t_i - t_f)})}{V} + 0.2 \times \frac{(1^{-0.03 \times V \times (t_i - t_f)})}{V} \quad (\text{Eq. 14})$$

Essa equação modela a porcentagem de CH_4 no biogás, seguindo uma lógica semelhante à equação do CO_2 . Novamente, são utilizados diferentes termos multiplicados por fatores que dependem do volume do reator (V), tempo (t) e intervalo de tempo ($t_i - t_f$). Enquanto, 0.3, 0.6 e 0.2 são valores constantes que representam contribuições fixas de CH_4 no biogás.

Para a produção de biogás em múltiplas fases foram utilizadas as seguintes equações:

$$\frac{dS}{dt}\text{CO}_2 = 0.2 + (1^{-0.03 \times V1 \times \frac{t}{V1}}) \times 0.1 + \frac{(1^{-0.02 \times V2 \times (t_i - t_f)})}{V2} + 0.3 + \frac{(1^{-0.01 \times V3 \times (t_i - t_f)})}{V3} \quad (\text{Eq. 15})$$

Para a produção de metano em múltiplas fases:

$$\frac{dS}{dt}\text{CH}_4 = 0.3 + (1^{-0.01 \times V1 \times \frac{t}{V1}}) \times 0.6 + \frac{(1^{-0.02 \times V2 \times (t_i - t_f)})}{V2} + 0.2 \times \frac{(1^{-0.03 \times V3 \times (t_i - t_f)})}{V3} \quad (\text{Eq. 16})$$

4.3.5 Vazão de biogás e do digestato

A vazão do biogás refere-se à quantidade de gás produzida pelo processo de digestão anaeróbica. O digestato é um subproduto líquido ou semi sólido que possui nutrientes e pode ser utilizado como fertilizante orgânico. É importante monitorar e controlar a vazão do biogás e do digestato para garantir a eficiência do processo de digestão anaeróbica. Isso pode envolver a medição contínua da vazão e o ajuste dos parâmetros operacionais do biodigestor para otimizar a produção de biogás e a qualidade do digestato. Além disso, a gestão adequada desses dois parâmetros é essencial para evitar problemas ambientais, como a contaminação de corpos d'água ou a sobrecarga de nutrientes no solo, quando utilizado como fertilizante.

Para calcular a vazão do biogás em fase única foi utilizada a seguinte equação:

$$\text{Vazão Biogás} = \frac{dS}{dt} \text{Biogás} \times V \quad (\text{Eq. 17})$$

A equação 17 multiplica o fluxo de biogás pelo volume do reator para obter a vazão de biogás. A vazão é expressa em unidades de volume por unidade de tempo.

Para o cálculo da vazão de digestato em fase única, a equação correta é:

$$\text{Vazão do digestato} = \left(\frac{dS}{dt} + V \right) \times V \quad (\text{Eq. 18})$$

A equação acima considera a taxa de produção de digestato adicionada ao volume do reator, e então multiplica o resultado pelo volume do reator novamente para obter a vazão.

Para o sistema em múltiplas fases as equações de vazões foram:

$$\text{Vazão biogás} = \frac{dS}{dt} \text{Biogás} \times V_1 + \frac{dS}{dt} \text{Biogás} \times V_2 + \frac{dS}{dt} \text{Biogás} \times V_3 \quad (\text{Eq. 19})$$

A equação da vazão de biogás assume que a taxa de produção de biogás é constante e igual para todas as fontes de produção. Portanto, o mesmo valor de biogás é multiplicado pelo volume de cada biorreator, para calcular a contribuição de cada fonte para a vazão total de biogás.

$$\text{Vazão do digestato} = V_1 \left(\frac{dS_1}{dt} + V_1 \right) + V_2 \left(\frac{dS_2}{dt} + V_2 \right) + V_3 \left(\frac{dS_3}{dt} + V_3 \right) \quad (\text{Eq. 20})$$

A equação para vazão do digestato soma e depois multiplica as taxas de consumo de substrato (matéria orgânica) para cada componente no tempo "t" pelo volume de cada biorreator.

4.4 Modelo matemático para simulação

O código em Octave simula um processo de degradação de substrato e formação de gás metano. Ele é dividido em várias seções, cada uma com uma função específica.

Na seção de definição dos parâmetros do processo, os parâmetros, como as taxas de degradação do substrato em cada biorreator, os rendimentos em ácidos e biogás, as concentrações iniciais de substrato e os volumes dos biorreatores, são definidos.

Em seguida, os parâmetros do sistema, como o tempo total de simulação e o vetor de tempo, são definidos. O vetor de tempo é criado usando a função "**linspace**" para criar um vetor linearmente espaçado com base no tempo total de simulação.

A seção de simulação do processo inicia os vetores para armazenar os resultados da simulação, como a concentração de substrato, a vazão de biogás e a vazão de digestato. Esses vetores têm o mesmo comprimento do vetor de tempo. Depois disso, as condições iniciais são definidas, atribuindo a concentração inicial de substrato à primeira posição do vetor de concentração de substrato.

O código entra em um laço de simulação, onde itera sobre o vetor de tempo (exceto a primeira posição) e calcula as taxas de degradação do substrato em cada biorreator, a produção de biogás, a produção de digestato e atualiza a concentração de substrato. Em seguida, as concentrações de ácidos são calculadas com base nas taxas de degradação do substrato e nos volumes dos biorreatores. Posteriormente, as concentrações de gases, como dióxido de carbono e metano no biogás, são calculadas com base nos volumes dos biorreatores e no tempo.

Finalmente, são gerados gráficos dos resultados usando a função "**plot**". As figuras mostram a concentração de substrato, a concentração de ácidos, a produção de biogás e as vazões de biogás e digestato ao longo do tempo. Cada figura é personalizada com rótulos de eixos, legendas e uma grade de fundo para melhorar a legibilidade. Os códigos do modelo implantado no Octave estão disponíveis no Apêndice 1.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Degradação de substratos

A degradação de substratos na produção de biogás é um processo essencial, no qual a matéria orgânica é convertida em componentes gasosos, como metano (CH_4) e dióxido de carbono (CO_2), por meio da atividade microbiana anaeróbica.

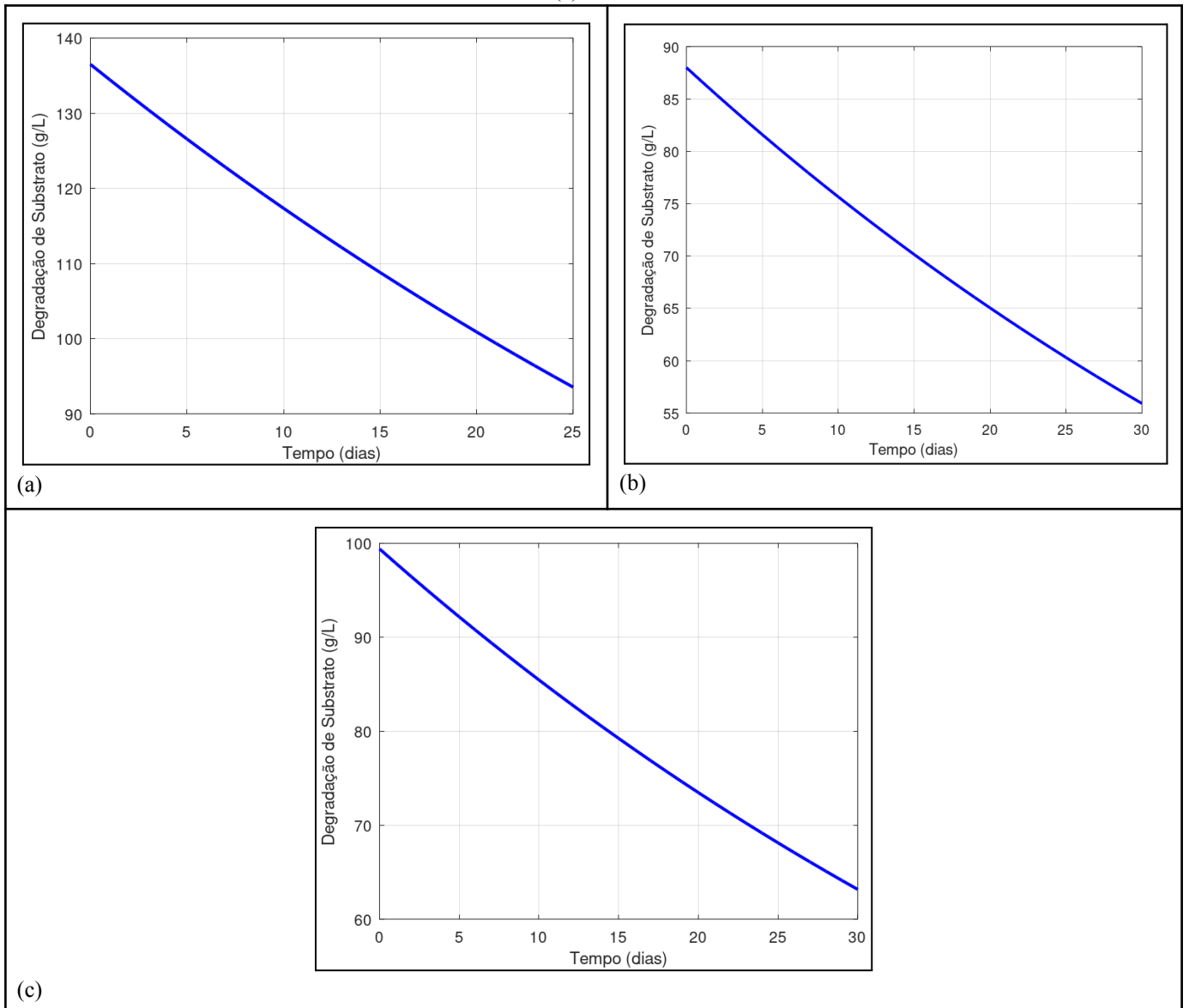
No experimento de simulação da degradação de substratos na produção de biogás em uma única fase (Figura 9), foi observado um processo de degradação lento e incompleto. O substrato de cacau apresentou uma redução (Figura 9a) de 136,5 g/L para 93,5 g/L. Enquanto o substrato de açaí teve sua degradação (Figura 9b) partindo de uma concentração inicial de 88,51 g/L e atingindo uma concentração de 55,9 g/L no 30º dia. Por fim, o substrato de coco (Figura 9c) reduziu de 99,4 g/L para 63,1 g/L.

A falta de degradação da biomassa pode ser explicada pelo sistema em fase única associado aos resíduos lignocelulósicos, conforme discutido no estudo de Gueri et al (2021). Este trabalho relata que as características químicas e estruturais das cadeias lignocelulósicas são específicas para cada biomassa. Tais características conferem recalcitrância à estrutura da biomassa, o que dificulta o acesso enzimático e microbiológico aos açúcares presentes em sua composição.

O estudo de Costa (2018) concluiu que houve diferenças significativas na análise de lignina total entre as biomassas. Os maiores valores foram encontrados na casca do coco e na casca do cacau. O caroço de açaí apresentou o maior conteúdo quantitativo de celulose (32,8%), seguido da casca do cacau (31,99%) e da casca do coco (27,91%). Por outro lado, a casca do cacau teve o maior índice de extrativos (20,07%). De acordo com Dermibas et al (2000), a presença de elevados teores de extrativos pode ser vantajosa para a produção de energia, já que essa presença afeta positivamente o conteúdo energético das biomassas.

Portanto, apesar das dificuldades na degradação, as biomassas estudadas ainda têm grande potencial como fontes promissoras de energia.

Figura 9 - Degradação de substratos na produção de biogás em única fase a partir do (a) Cacau, (b) Açaí e (c) Coco

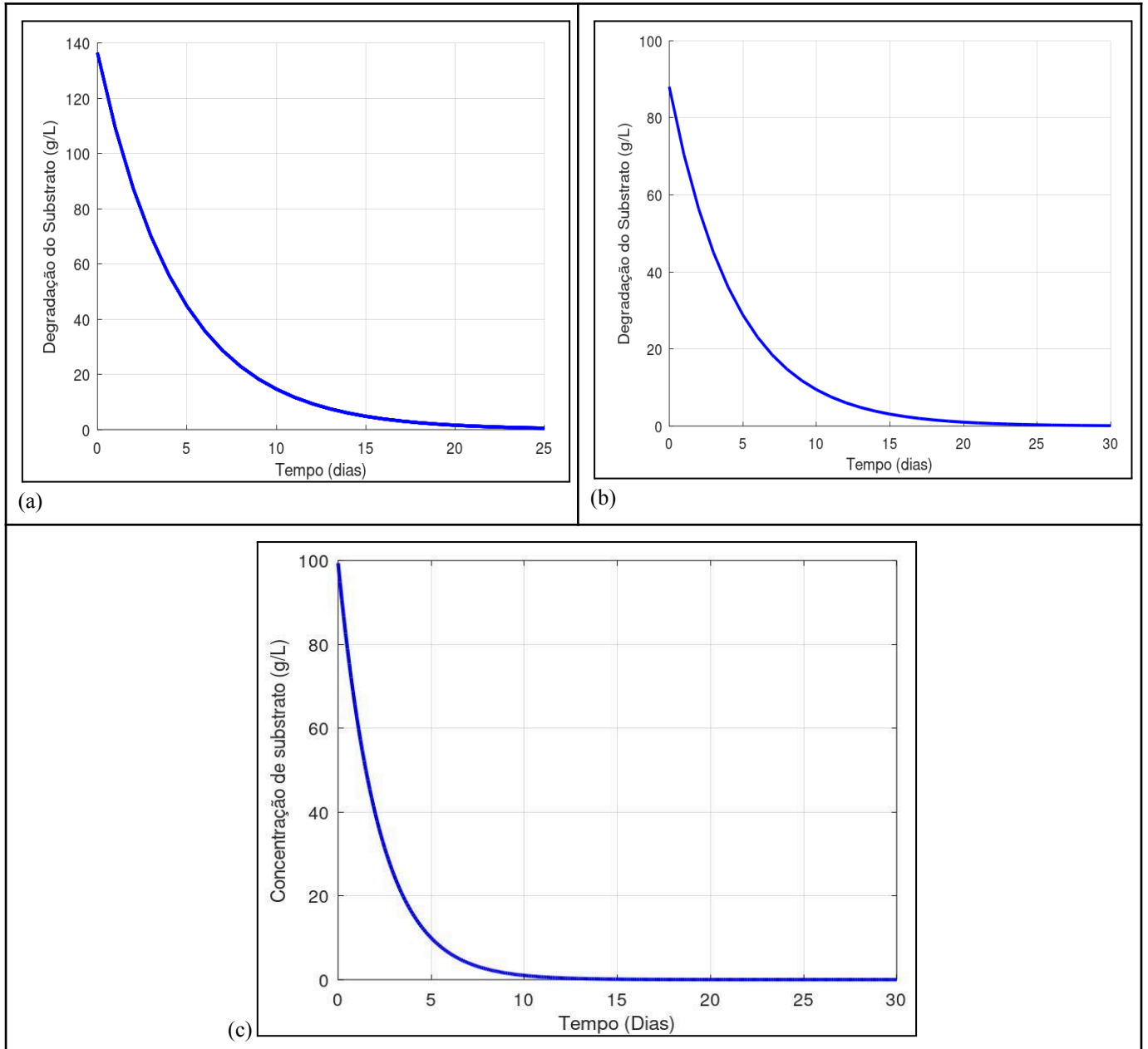


Fonte: Elaborado pela autora (2023)

Quando a simulação é modificada para múltiplos estágios (Figura 10), observa-se mudança na decomposição dos substratos que agora se degradam quase totalmente. A hidrólise do substrato de cacau (Figura 10a) e do açaí (Figura 10b) ocorrem ao longo de um período de aproximadamente 20 dias, reduzindo a 0,64 g/L e 0,11 g/L, respectivamente. Quanto ao substrato de coco (Figura 10c), a decomposição ocorre em um período de aproximadamente 10 dias.

Portanto, apesar de estarem sob as mesmas condições da simulação em única fase, quando submetido a uma biodigestão em múltiplas fases, a biomassa tem um desempenho melhor em questões de decomposição.

Figura 10 - Degradação de substratos na produção de biogás em múltiplas fases a partir do (a) Cacau, (b) Açaí e (c) Coco



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

Ao comparar os resultados obtidos nessas duas abordagens, podemos observar diferenças significativas no padrão de degradação dos substratos e na estabilidade do processo.

A simulação em múltiplas fases mostrou um padrão de degradação mais prolongado e variável. A hidrólise do substrato de cacau ocorreu ao longo de um período mais prolongado, sugerindo uma degradação mais gradual dos compostos complexos em moléculas menores.

O estudo realizado por Amaral et al. (2019) demonstrou que a velocidade da degradação dos substratos impacta na taxa de conversão de matéria orgânica em biogás, resultando em

uma produção de energia mais eficiente. A rápida e total degradação dos substratos auxilia na prevenção da acumulação excessiva de matéria orgânica não digerida no sistema, evitando problemas como acidificação e inibição do processo.

5.2 Produção de ácidos orgânicos

Na produção de biogás, a formação de ácidos orgânicos é um fenômeno comum que ocorre durante a digestão anaeróbica dos substratos orgânicos. Esses ácidos são produtos intermediários do processo de degradação da matéria orgânica e desempenham um papel crucial na produção de biogás. Esses ácidos representam metabólitos essenciais, fornecendo energia para as bactérias metanogênicas responsáveis pela produção do metano, principal componente do biogás.

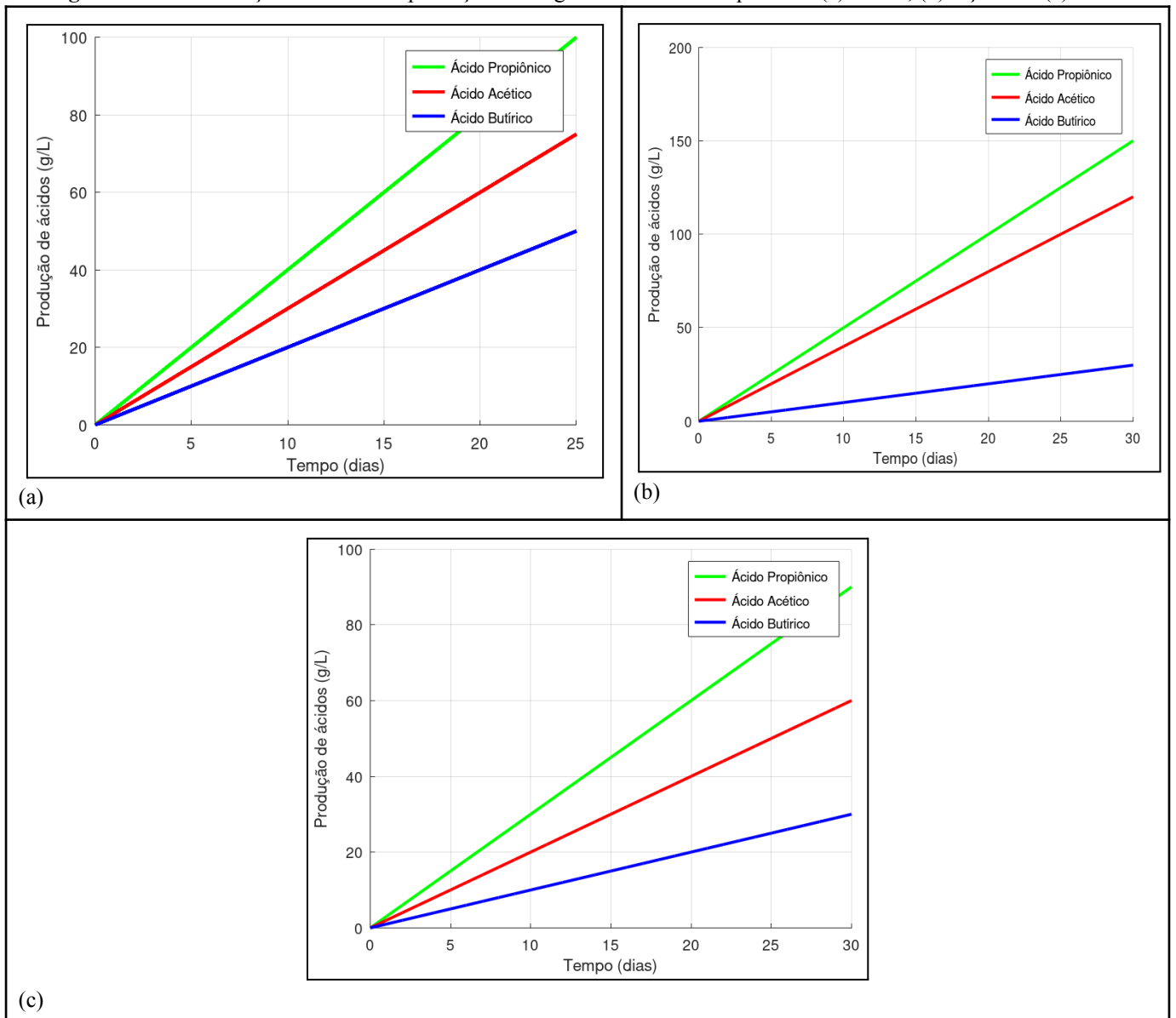
Quando se trata da produção de biogás a partir das três matrizes orgânicas, o ácido propiônico foi o que se apresentou mais proeminente na simulação de uma única fase (Figura 11), seguido pelo ácido acético e pelo ácido butírico.

Ao analisar a simulação com base no cacau (Figura 11a), observou-se a formação de 100 g/L de ácido propiônico, 75 g/L de ácido acético e 50 g/L de ácido butírico. Para o açaí (Figura 11b), foram registrados 150 g/L de ácido propiônico, 120 g/L de ácido acético e 30 g/L de ácido butírico. Enquanto, no caso do coco (Figura 11c), foram observados os menores valores de formação: 90 g/L de ácido propiônico, 60 g/L de ácido acético e 30 g/L de ácido butírico.

De acordo com Drog (2013), concentrações de ácido acético, propiônico e butírico superiores a 4000 mg/L, 1000 mg/L e 50 mg/L, respectivamente, sinalizam uma probabilidade significativa de instabilidade no sistema.

Vale ressaltar que o ácido propiônico demonstrou uma produção expressiva em todos os substratos, indicando uma possível tendência dessa bactéria produtora de ácido propiônico em ambientes de digestão anaeróbica.

Figura 11 - Concentração de ácidos na produção de biogás em única fase a partir do (a) Cacau, (b) Açaí e do (c) Coco.



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

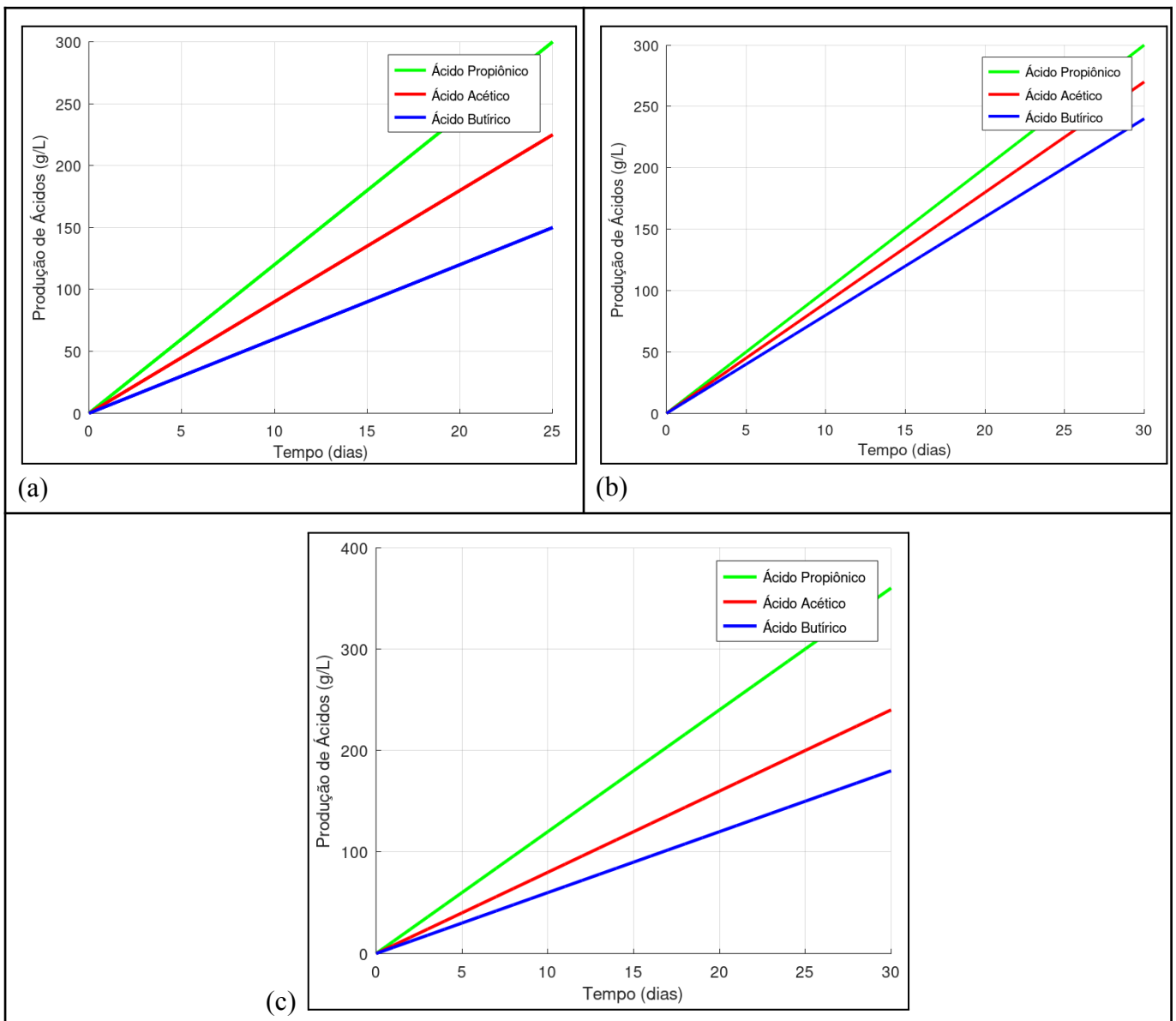
Os resultados da formação de ácidos na produção de biogás em múltiplas fases são comparáveis aos obtidos em uma única fase. No caso dos resíduos de cacau (Figura 12a), ocorreu a formação de 300 g/L de ácido propiônico, 225 g/L de ácido acético e 150 g/L de ácido butírico. Para os resíduos de açaí (Figura 12b), foram registrados 300 g/L de ácido propiônico, 270 g/L de ácido acético e 150 g/L de ácido butírico. Enquanto nos resíduos de coco (Figura 12c), as concentrações foram de 360 g/L de ácido propiônico, 240 g/L de ácido acético e 180 g/L de ácido butírico.

De acordo com o estudo realizado por Dareioti et al. (2009), no qual se investigou a biodigestão anaeróbia em dois estágios utilizando diversos resíduos agroindustriais, como efluente do processamento de azeitona, esterco líquido de vaca e soro de queijo, a presença de

concentrações elevadas de ácido acético e ácido butírico sugere uma degradação eficiente do substrato, com uma produção robusta de ácidos orgânicos intermediários.

Por outro lado, o ácido propiônico é considerado o intermediário mais significativo da digestão anaeróbia de resíduos orgânicos complexos, sendo um dos melhores indicadores de estabilidade do processo, como destacado por Borowski & Kubacki (2015).

Figura 12 - Concentração de ácidos na produção de biogás em múltiplas fases a partir do (a) Cacau, (b) Açai e do (c) coco.

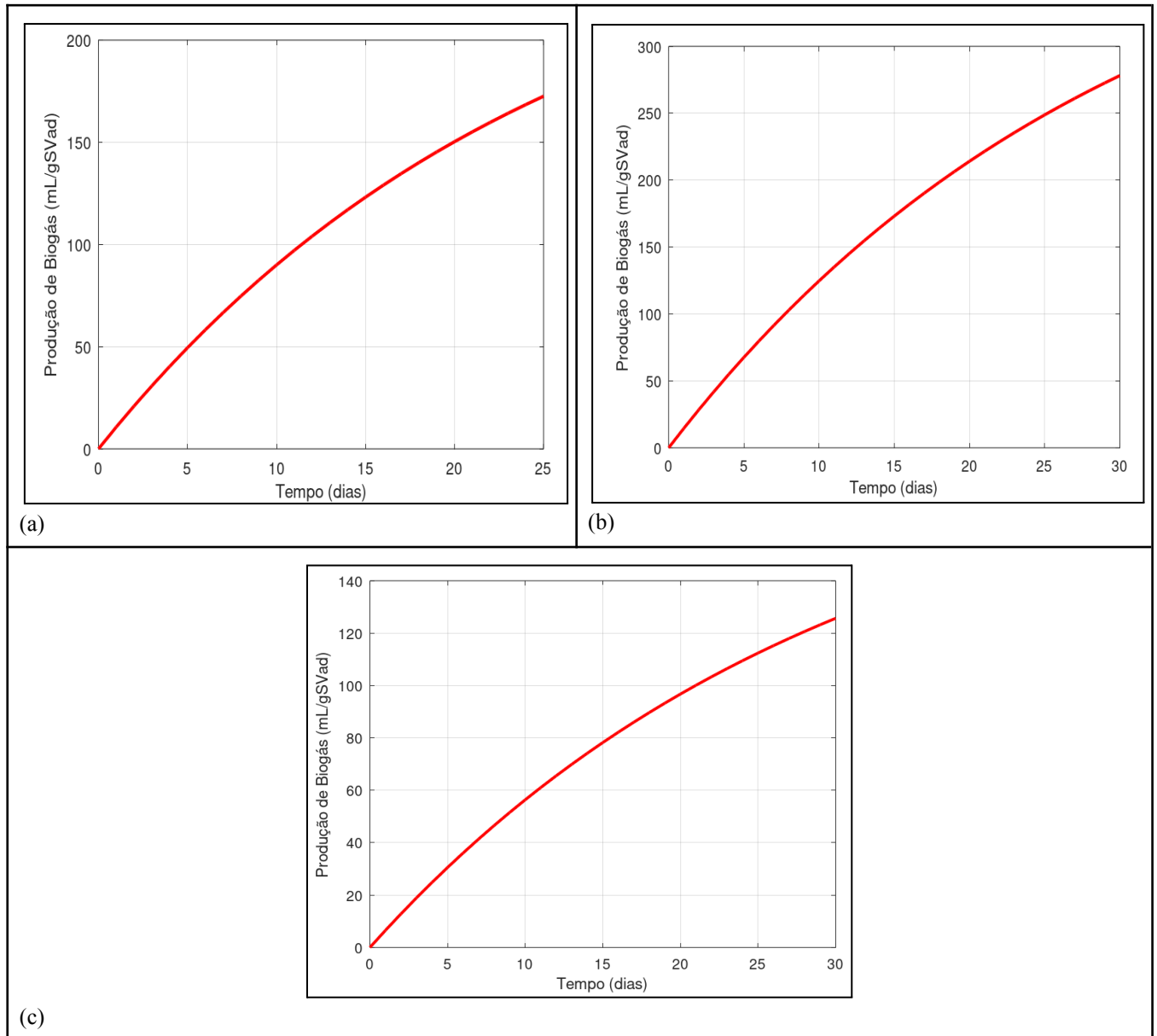


Fonte: Elaborado pela autora (2023)

5.3 Produção de biogás

A produção de biogás é um processo que envolve a conversão de resíduos orgânicos em uma fonte de energia renovável. Esse processo ocorre por meio da digestão anaeróbica, onde bactérias específicas degradam a matéria orgânica em condições ausentes de oxigênio.

Figura 13 - Produção de biogás em única fase a partir do (a) Cacau, (b) Açai e (c) Coco.



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

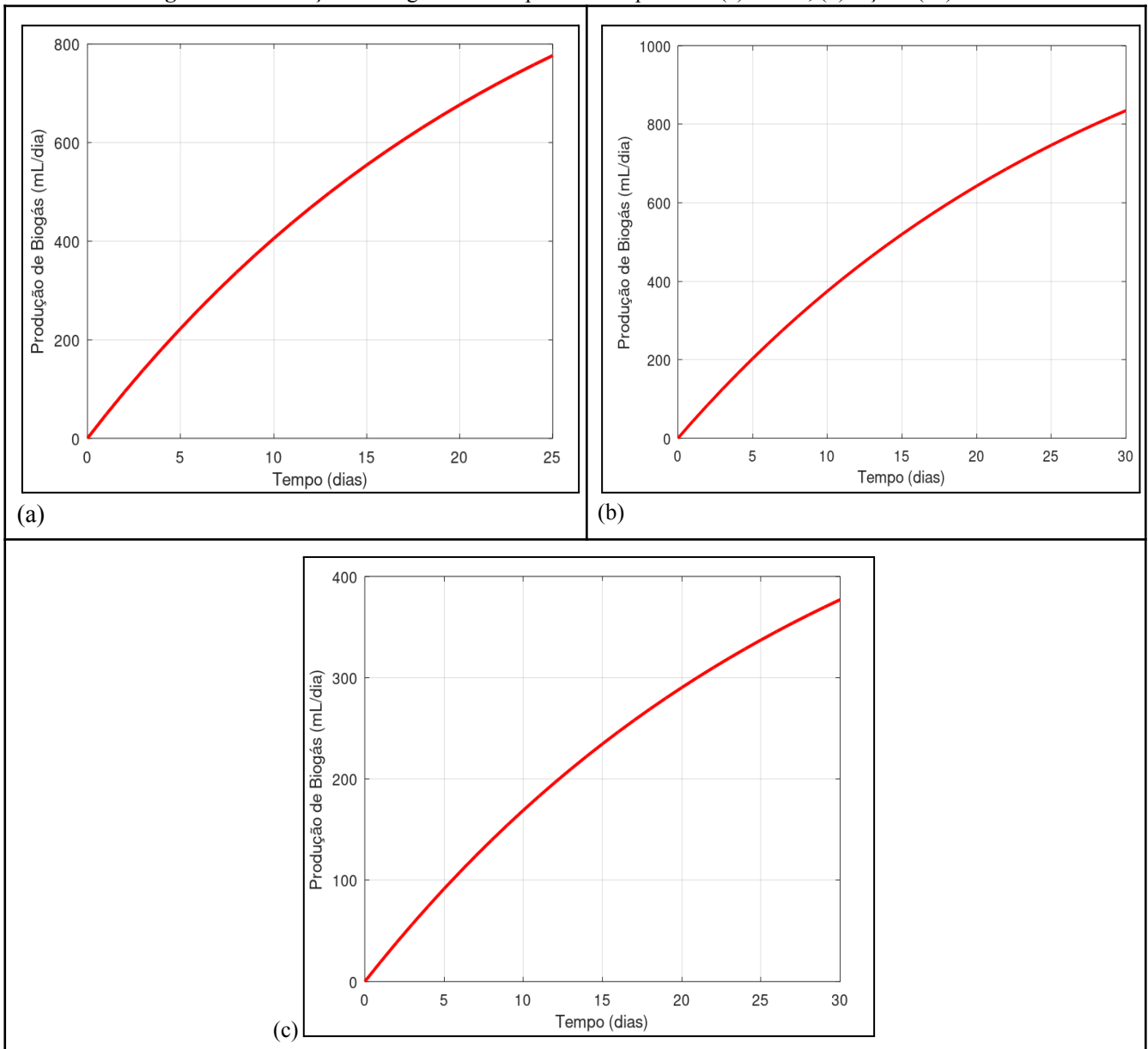
A produção de biogás em fase única (Figura 13) é medida em termos de volume de biogás produzido por grama de sólidos voláteis adicionados (mL/gSVad) durante um determinado período de tempo. Com base nas informações fornecidas, temos as seguintes taxas de produção de biogás: os resíduos de cacau (Figura 13a) produziram 172,56 mL/gSVad. Os

resíduos de açaí (Figura 13b) formaram 278,2 mL/gSVad e os resíduos de coco (Figura 13c) produziram 125,66 mL/gSVad. Esses valores indicam a quantidade de biogás gerada por unidade de massa de sólidos voláteis adicionados e podem ser usados para avaliar a eficiência da produção de biogás a partir desses resíduos.

No sistema em múltiplas fases (Figura 14), têm-se os seguintes rendimentos de biogás:

- Resíduos de cacau (Figura 14a): 776,56 mL/gSVad.
- Resíduos de açaí (Figura 14b): 834,4 mL/gSVad.
- Resíduos de coco (Figura 14c): 376,9 mL/gSVad.

Figura 14 - Produção de biogás em múltiplas fases a partir do (a) Cacau, (b) Açaí e (c) Coco



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

Com base nos resultados deste estudo, é evidente que a produção de biogás em múltiplas fases oferece vantagens significativas em relação à produção em fase única para os resíduos de cacau, açaí e coco. Essa abordagem resultou em rendimentos de biogás mais elevados, indicando uma maior eficiência do processo. Em ambos os sistemas o açaí foi o que demonstrou maior produção de biogás.

Esse fenômeno pôde ser observado também no estudo de Castro e Neto (2021), “*Modeling and simulation of serial bioreactors for obtaining ethanol using the Tosetto equation*”, no qual a operação em três estágios tornou o processo de produção de etanol mais eficiente em comparação com o uso de apenas um biorreator. Além disso, constatou-se que a concentração do produto etanol não é significativamente afetada pela inibição do substrato, o que possibilita obter o etanol de forma satisfatória.

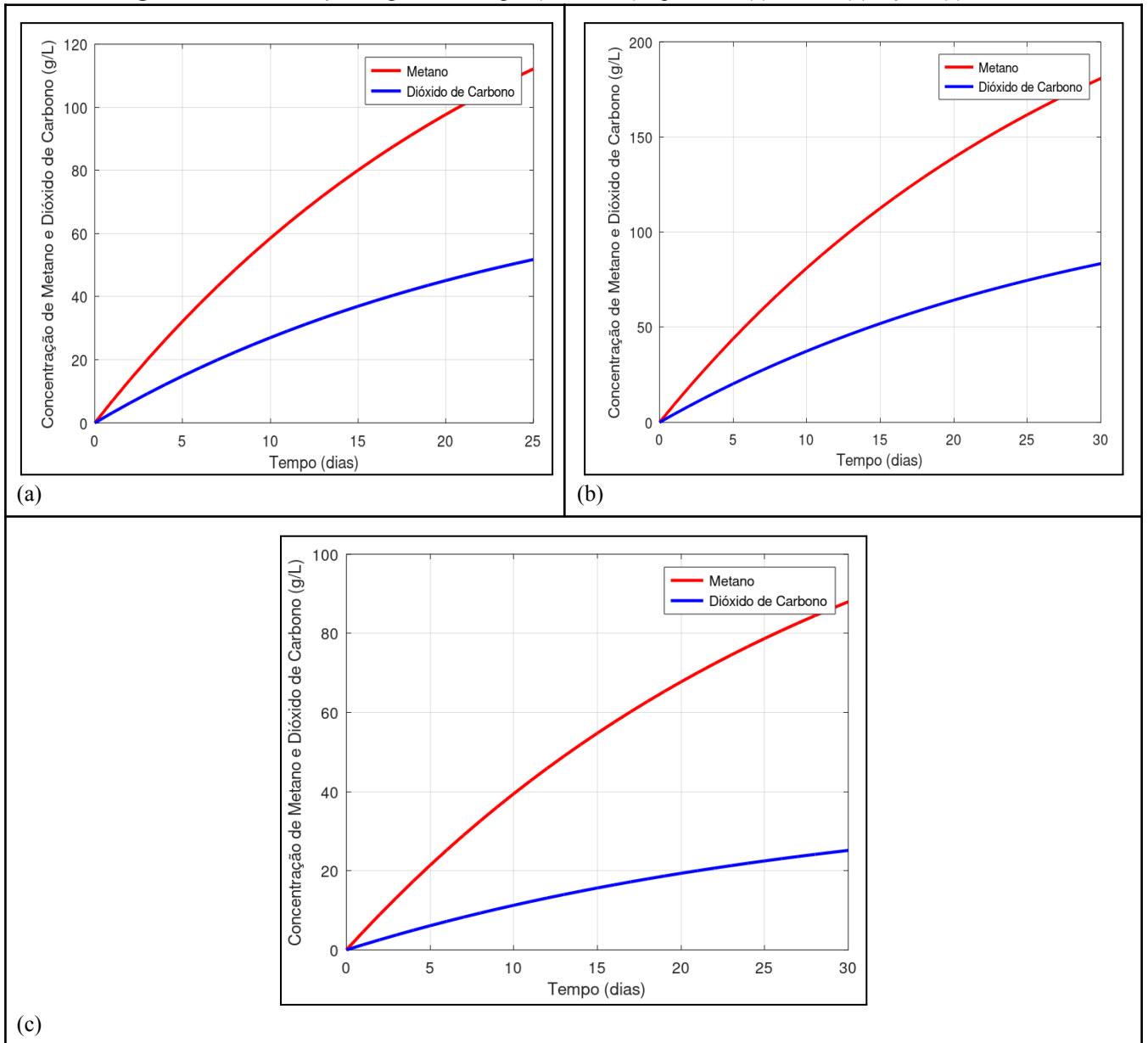
Da mesma forma para Álvarez-Cáliz (2020), no trabalho “*Modelling of the Acetification Stage in the Production of Wine Vinegar by Use of Two Serial Bioreactors*”, que estudou a modelagem da acetificação na produção de vinho utilizando dois biorreatores em série, os autores concluíram que o uso desse método resultou em cargas e descargas dos biorreatores altamente reprodutíveis, e na aquisição eficiente de dados.

5.4 Composição do biogás

A composição básica do biogás é principalmente metano (CH_4) e dióxido de carbono (CO_2), juntamente com traços de outros gases. Partindo desse conceito na produção em fase única para os resíduos de cacau (Figura 15a), obteve-se uma concentração de 112,16 g/L de metano e 51,77 g/L de dióxido de carbono. Enquanto o biogás proveniente dos resíduos de açaí (Figura 15b), resultou em uma concentração de 180,7 g/L de metano e 83,4 g/L de CO_2 , para o biogás a partir do coco (Figura 15c) resultou em uma concentração com 87,9 g/L de metano e 25,13 g/L de dióxido de carbono.

O biogás é formado por cerca de 60% de metano, 35% de dióxido de carbono e 5% de uma mistura de hidrogênio, nitrogênio, amônia, ácido sulfídrico, monóxido de carbono, aminas voláteis e oxigênio (WEREKO-BROBBY; HAGEN, 2000 apud COELHO et al., 2006). Dependendo da eficiência do processo, influenciado por fatores como carga orgânica, pressão e temperatura durante a fermentação, o biogás pode conter entre 40% e 80% de metano (COELHO et al, 2006).

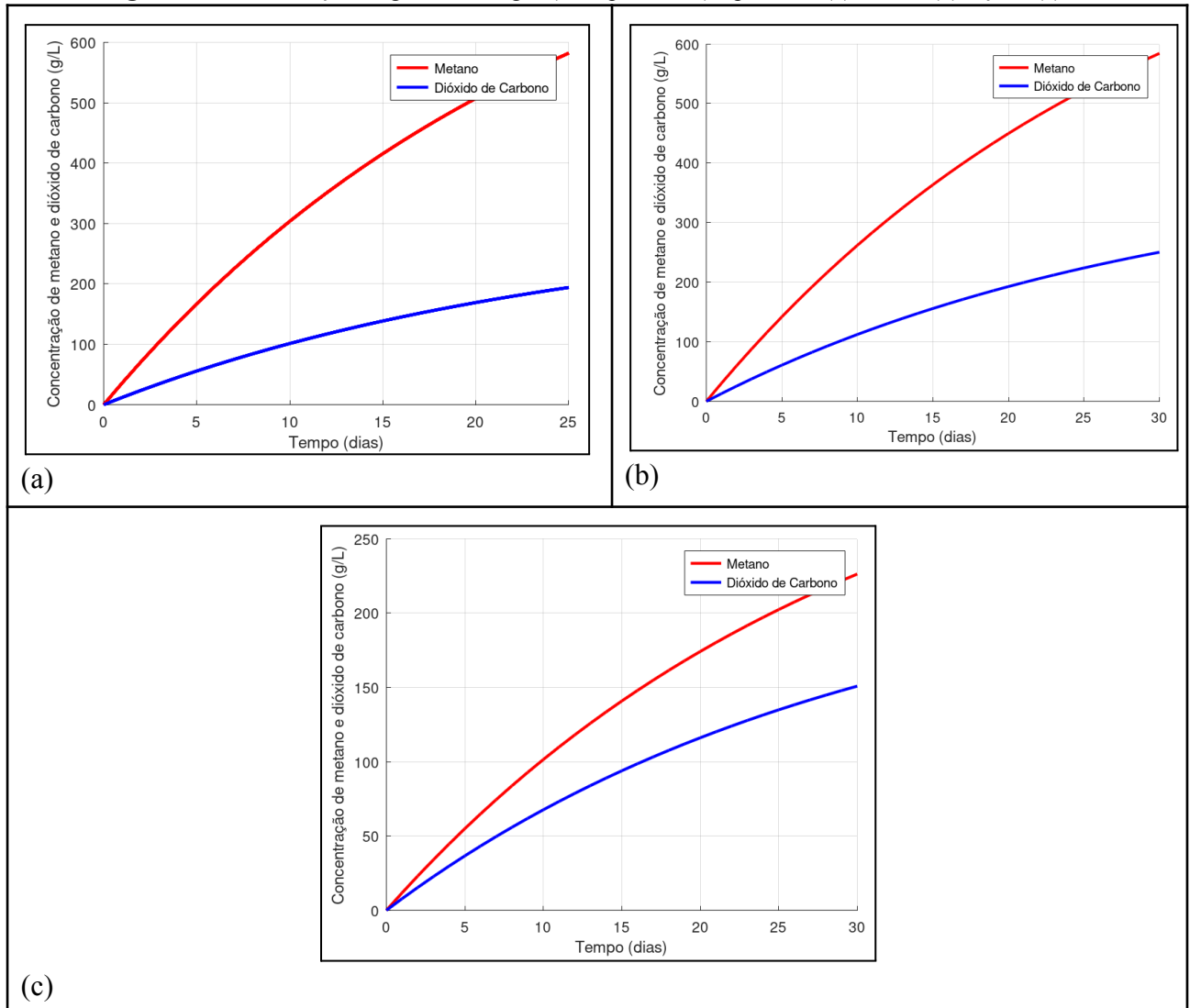
Figura 15 - Concentração de gases no biogás (única fase) a partir do (a) Cacau, (b) Açai e (c) Coco.



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

Na produção de biogás em múltiplas fases (Figura 16) foi obtido 582 g/L de metano e 194,14 g/L de dióxido de carbono, a partir dos resíduos do cacau (Figura 16a). A partir dos resíduos do açai (Figura 16b), foi obtido 572 g/L e 250 g/L de metano e dióxido de carbono, respectivamente. O biogás proveniente da biomassa do coco (Figura 16c), foram obtidos 226,19 g/L de metano e 150 g/L de dióxido de carbono.

Figura 16- Concentração de gases no biogás (múltiplas fases) a partir do (a) Cacau, (b) Açai e (c) Coco.

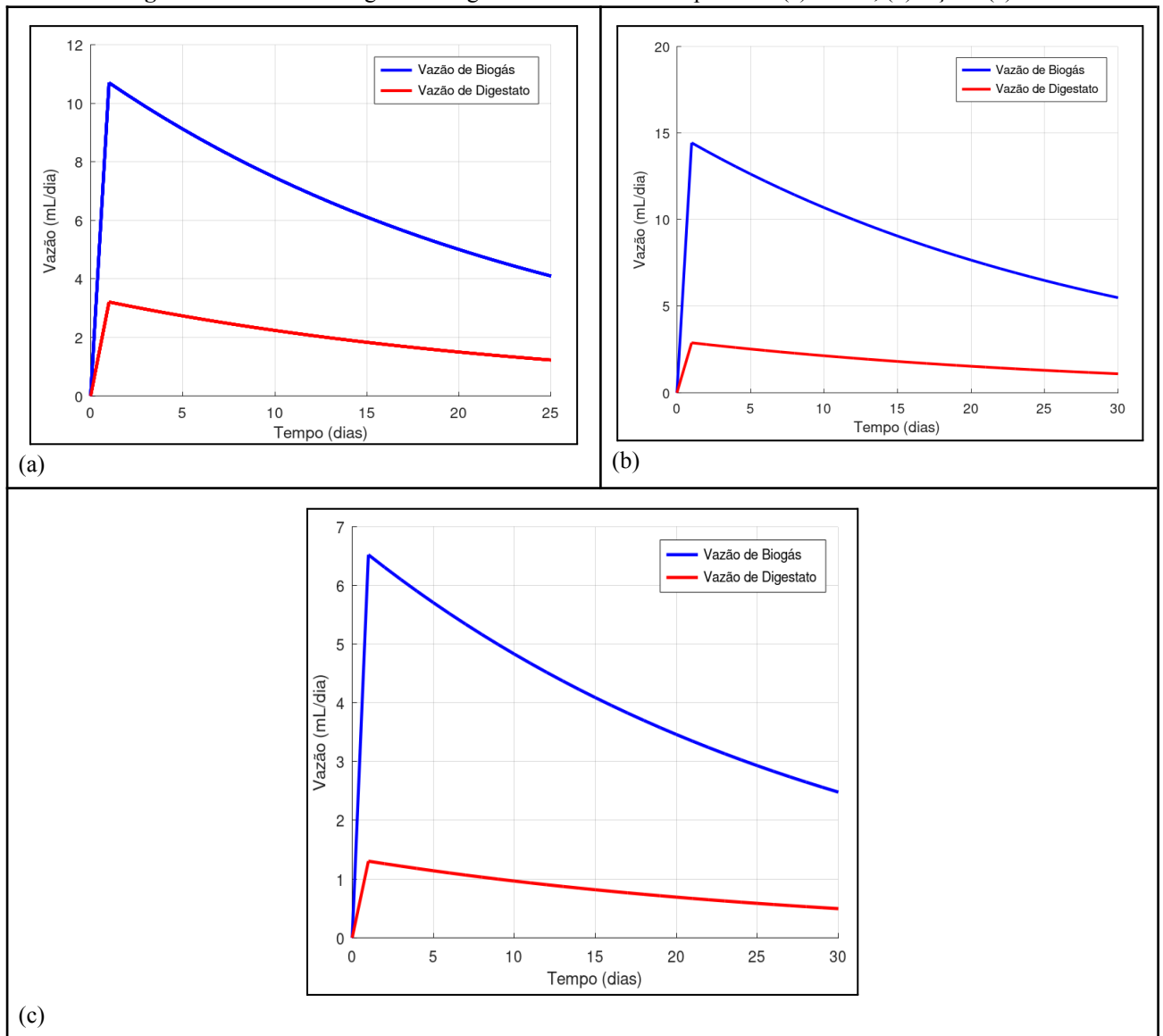


Fonte: Elaborado pela autora (2023)

5.5 Vazão do biogás e do digestato

A vazão de biogás e do digestato -subproduto da digestão anaeróbia, que pode ser utilizado como fertilizante (MILANEZ et al. 2018)- são parâmetros fundamentais para avaliar o desempenho de um sistema de biodigestão anaeróbia. O monitoramento dessas vazões permite controlar e otimizar o processo, garantindo a eficiência na produção de biogás e o tratamento adequado dos resíduos orgânicos.

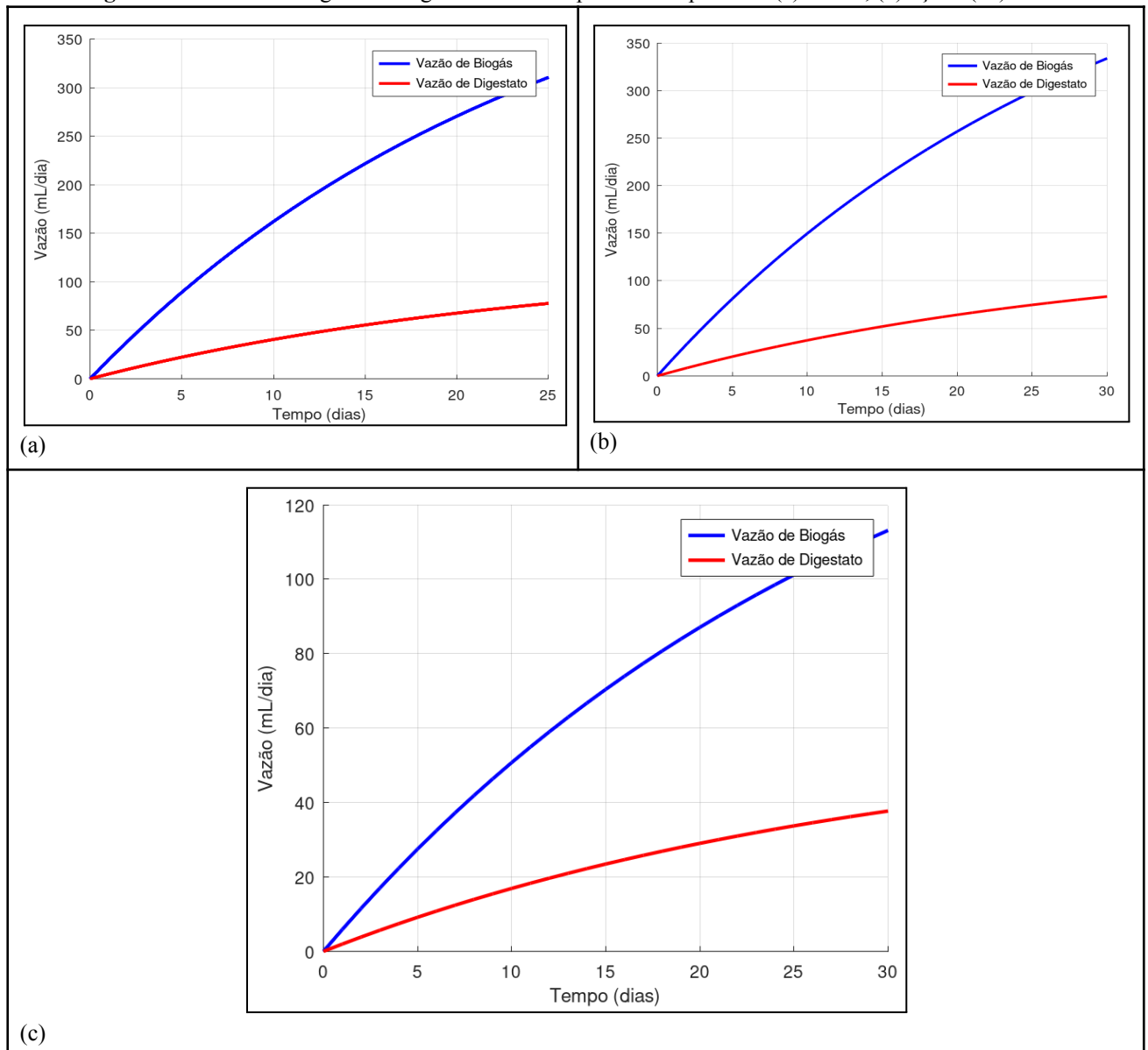
Figura 17 - Vazão de biogás e do digestato em única fase a partir do (a) Cacau, (b) Açaí e (c) Coco.



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

Assim, observou-se que a vazão de biogás em única fase proveniente dos resíduos do cacau (Figura 17a) foi de 10,7 mL/dia, enquanto a vazão do digestato alcançou 3,21 mL/dia. Por outro lado, os resíduos de açaí (Figura 17b) revelaram uma vazão de biogás significativamente mais elevada, atingindo 14,4 mL/dia, acompanhada de uma vazão de digestato de 2,88 mL/dia. Essa diferença sugere uma maior capacidade de produção energética a partir dos resíduos de açaí, em comparação com os resíduos de cacau. Em relação aos resíduos de coco (Figura 17c), identificou-se uma vazão de biogás de 6,51 mL/dia, e o digestato alcançou uma vazão de 1,03 mL/dia.

Figura 18 - Vazão de biogás e do digestato em múltiplas fases a partir do (a) Cacau, (b) açai e (c) Coco.



Fonte: Elaborado pela autora (2023)

As vazões de biogás e digestato para diferentes tipos de resíduos na digestão anaeróbica em múltiplas fases estão dispostos na figura 18:

- Resíduos de cacau (Figura 18a): A vazão de biogás máxima foi de 310,6 mL/dia, enquanto a vazão do digestato foi de 77,6 mL/dia.

- Resíduos de açai (Figura 18b): A vazão de biogás máxima foi de 333,8 mL/dia, com aproximadamente 80,43 mL/dia para o digestato.

- Resíduos de coco (Figura 18c): A vazão de biogás máxima foi de 113,09 mL/dia, e a vazão do digestato foi de 37,69 mL/dia.

Essas informações indicam a quantidade de biogás e digestato produzidos por dia para cada tipo de resíduo. É importante notar que esses valores são específicos para as condições mencionadas e podem variar em diferentes sistemas de digestão anaeróbica.

A comparação entre a vazão de biogás em múltiplas fases e em uma única fase para os diferentes tipos de resíduos revela que a digestão em múltiplas fases apresentou melhores resultados. Além disso, é esperado que o digestato tenha uma vazão menor na simulação em múltiplas fases, uma vez que parte da matéria orgânica é convertida em biogás durante as etapas anteriores do processo.

Esses resultados indicam que a utilização de múltiplas fases na digestão anaeróbica é uma estratégia eficaz para aumentar a produção de biogás a partir dos resíduos. Ao dividir o processo em etapas, é possível obter uma melhor conversão da matéria orgânica em biogás, aumentando assim a eficiência do sistema.

6 CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho foi realizar a simulação computacional, utilizando o software Octave, de biodigestores em série para a produção de biogás, a partir de três biomassas: açaí, cacau e coco. A simulação em única fase foi utilizada para comparação.

É importante ressaltar que a escolha entre uma única fase e múltiplas fases na produção de biogás depende de vários fatores, incluindo a natureza dos substratos, as características dos microrganismos envolvidos, as condições operacionais e os objetivos específicos do processo. Cada abordagem possui vantagens e desvantagens, e a seleção adequada depende das necessidades e limitações do sistema em questão.

Com a comparação entre a simulação em uma única fase e em múltiplas fases na produção de biogás foi possível observar diferenças nos padrões de degradação dos substratos e na estabilidade do processo. Enquanto a fase única apresentou uma degradação incompleta, a abordagem de múltiplas fases mostrou um padrão mais prolongado e completo. A escolha entre as abordagens deve considerar as características específicas do sistema e os objetivos desejados para a produção de biogás. O caroço de açaí se mostrou o resíduo com a maior produção de biogás em múltiplas fases.

A simulação da biodigestão em múltiplas fases mostra uma abordagem superior em comparação com a utilização de uma única fase para a produção de biogás. Existem diversos motivos que sustentam essa afirmativa.

Em primeiro lugar, a biodigestão em múltiplas fases permite um melhor controle e otimização do processo. Ao dividir a biodigestão em diferentes fases, é possível criar condições específicas para cada etapa do processo, o que resulta em uma decomposição mais eficiente dos substratos orgânicos. Essa abordagem permite a utilização de diferentes microrganismos em cada fase, promovendo a degradação mais completa da matéria orgânica e, conseqüentemente, aumentando a produção de biogás.

Além disso, a biodigestão em múltiplas fases proporciona uma maior flexibilidade na escolha dos substratos. Diferentes tipos de resíduos orgânicos possuem características distintas e requerem condições específicas para sua degradação. Com a utilização de múltiplas fases, é possível adaptar o processo para diferentes tipos de substratos, maximizando a produção de biogás e evitando problemas como a inibição do processo devido a determinados componentes presentes nos resíduos.

Como sugestão para trabalhos futuros, é possível a realização de estudos adicionais para aprimorar a compreensão e o controle das diferentes fases da biodigestão. Pesquisas podem

ser direcionadas para a identificação e seleção de microrganismos mais eficientes em cada etapa, otimização das condições de temperatura e pH em cada fase, bem como o desenvolvimento de sistemas de monitoramento avançados para garantir um controle preciso e eficiente do processo.

A simulação da biodigestão em múltiplas fases apresenta vantagens significativas em relação à biodigestão em uma única fase, proporcionando um maior controle do processo, flexibilidade na escolha dos substratos e aprimoramento da estabilidade operacional. Essa abordagem promissora tem o potencial de impulsionar ainda mais a produção de biogás como uma fonte renovável de energia e contribuir para a sustentabilidade ambiental.

7 REFERÊNCIAS

ACOSTA, N.; DE VRIEZE, J.; SANDOVAL, V.; SINCHE, D.; WIERINCK, I.; RABAEY, K. **Cocoa residues as viable biomass for renewable energy production through anaerobic digestion.**, *Bioresource Technology*, v. 265, p. 268 - 272. 2018.

AJEWOLE, Titus O. et al. **Agro-residues for clean electricity: A thermo-property characterization of cocoa and kolanut waste blends.** *Heliyon*, v. 7, n. 9, p. e08055, 2021.

ÁLVAREZ-CÁLIZ, Carmen M. et al. Modelling of the acetification stage in the production of wine vinegar by use of two serial bioreactors. **Applied Sciences**, v. 10, n. 24, p. 9064, 2020.

Amaral, A. C., Steinmetz, R. L. R., & Kunz, A. **O processo de biodigestão.** 2019.

ANTWI, E.; ENGLER, N.; NELLES, M.; SCHÜCH, A. **Anaerobic digestion and the effect of hydrothermal pretreatment on the biogas yield of cocoa pods residues.** *Waste Management*, v. 88, pag. 131–140, 2019.

ARIF, Sania; LIAQUAT, Rabia; ADIL, Manal. **Applications of materials as additives in anaerobic digestion technology.** *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 97, p. 354-366, 2018.

BADINO JUNIOR, A. C.; CRUZ, A. J. G. da. **Reatores químicos e bioquímicos.** In: Coleção UAB-UFSCar. São Carlos, SP, Brasil: Universidade Federal de São Carlos, 2012.

BALMANT, W. et al. **Optimal operating conditions for maximum biogas production in anaerobic bioreactors.** *Applied Thermal Engineering*, v. 62, n. 1, p. 197–206, 2014.

BARRERA, P. **Biodigestores: energia, fertilidade e saneamento para a zona rural.** São Paulo: Ícone, 1993. 106 p.

Borowski, S., & Kubacki, P. (2015). Co-digestion of pig slaughterhouse waste with sewage sludge. *Waste Management*, Elsevier, 119-125.

Brasil 2010. Lei nº 12.305. Institui a Política Nacional de Resíduos Sólidos; altera a Lei nº 9.605, de 12 de fevereiro de 1998; e dá outras providências.

CALBRY-MUZYKA, Adelaide et al. **Biogas composition from agricultural sources and organic fraction of municipal solid waste.** *Renewable Energy*, v. 181, p. 1000-1007, 2022.

CASTRO, João Victor Sales; NETO, Juan Canellas Bosch. Modelagem e simulação de biorreatores em série para a obtenção de etanol usando a equação de Tosetto. **The Journal of Engineering and Exact Sciences**, v. 7, n. 2, p. 12228-01-08e, 2021.

CCEE. Boletim de Dados de Geração 04/2022. Câmara de Comercialização de Energia Elétrica. Disponível em: <<https://www.ccee.org.br/web/guest/dados-e-analises/dados-geracao>>.

COELHO, S. T., et al. A conversão da fonte renovável biogás em energia. Congresso Brasileiro de Planejamento Energético. Brasília, 2006

CORDEIRO, Marcio de Andrade et al. **Hidrólise enzimática do caroço de açaí (*Euterpe oleracea* mart) para a produção de etanol.** Revista Brasileira de Energias Renováveis, v. 8, n. 1, 2019.

COSTA, Jéssica Saraiva da. Biomassa residual para uso energético no Estado do Pará. 2018. Tese de Doutorado. UFRA.

DAHUNSI, S. O.; ADESULU-DAHUNSI, A. T.; IZEBERE, J. O. **Cleaner energy through liquefaction of Cocoa (*Theobroma cacao*) pod husk: Pretreatment and process optimization.** Journal of Cleaner Production, v. 226, p. 578-588, 2019.

DAREIOTI, M. A. et al. Biogas production from anaerobic co-digestion of agroindustrial wastewaters under mesophilic conditions in a two-stage process. **Desalination**, v. 248, n. 1–3, p. 891–906, 2009.

DE AZEVEDO, A. R. G. et al. **Technological performance of açaí natural fibre reinforced cement-based mortars.** Journal of Building Engineering, v. 33, p. 101675, 2021.

DEMİRBAŞ, A. Biomass resource facilities and biomass conversion processing for fuels and chemicals. *Energy conversion and Management*, v. 42, n. 11, p. 1357-1378. 2000.

DJUIDEU, Christian T.L. et al. **Rehabilitation practices in cocoa agroforestry systems mitigate outbreaks of termites and support cocoa tree development and yield.** *Agriculture, Ecosystems & Environment*, v. 311, p. 107324, 2021.

Drosg, B. (2013). Process monitoring in biogas plants. (IEABioenergy, Ed.) IEABioenergy, pp. 9-32.

ELSEVIER. **Sobre a Elsevier.** 2022. Disponível em: <https://www.elsevier.com/pt-br/about>. Acesso em: 15 Dez. 2022.

EZIEKE, Arinze Hycienth et al. **Bottom ash from smouldered digestate and coconut coir as an alkalinity supplement for the anaerobic digestion of fruit waste.** *Chemosphere*, v. 296, p. 134049, 2022.

FACCIOTTI, Maria Cândida Reginato. Fermentação contínua. **Biotecnologia industrial: engenharia bioquímica**. Tradução . São Paulo: Edgard Blucher, 200. v. 2, cap. 12, p. 223-246.

FAOSTAT - Food And Agriculture Organization Of The United Nations (Organização das Nações Unidas para Alimentação e Agricultura). Crops and livestock products, 2021. Disponível em: [https:// www.fao.org/faostat/en/#data/](https://www.fao.org/faostat/en/#data/). Acesso em: 20 Mai. 2022.

FREITAS, F. F. et al. **The Brazilian market of distributed biogas generation: Overview, technological development and case study**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 101, p. 146-157, 2019.

GIRELLI, S.; PIT DAL MAGRO, M. **Saúde do trabalhador e economia solidária: estudo de uma cooperativa de construção civil**. Revista Psicologia. v.29, n.1, p.9-16, 2017.

GNU. GNU Octave. Scientific Programming Language. [S. l.]. GNU Octave, 2020.

GUERI, Matheus Vitor Diniz et al. Pré-tratamentos de resíduos lignocelulósicos visando ao aumento da geração de metano nos processos de digestão anaeróbia: uma revisão. Revista Geama, v. 7, n. 3, p. 13-27, 2021.

IDOWU, Gideon Aina; AIYESANMI, Ademola Festus; OYEGOKE, Funke Olawumi. **Organochlorine pesticide residues in pods and beans of cocoa (*Theobroma cacao* L.) from Ondo State Central District, Nigeria**. Environmental Advances, v. 7, p. 100162, 2022.

IEA, 2005, Biogas production and utilisation, Disponível em <www.novaenergie.ch> .

IOANNOU-TTOFA, L.; FOTEINIS, S.; MOUSTAFA, A. S.; ABDELSALAM, E.; SAMER, M.; FATTA-KASSINOS, D. Life cycle assessment of household biogas production in Egypt: Influence of digester volume, biogas leakages, and digestate valorization as biofertilizer. **Journal of Cleaner Production**, v. 286, p. 125468, 2021.

KARLSSON, TOMMY et al. Manual básico de biogás. 1ª edição. **Univates**, 2014.

KATUWAL, H., & BOHARA, A. K. **Biogas: A promising renewable technology and its impact on rural households in Nepal**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2009, 13(9), 2668–2674.

LANTZ, M., SVESSON, M., BJÖRNSSON L., BJÖRNSSON, P., 2006, “The prospects for an expansion of biogas systems in Sweden-Incentives, barriers and potentials”, **Energy Policy**, v. 35, pp. 1830–1843.

LEITE, Juliana Gomes Barreto Souza et al. Co-digestão anaeróbia de manipueira, casca de café e esterco bovino: Um estudo de otimização do processo de metanização. **Brazilian Journal of Development**, v. 7, n. 1, p. 1334-1355, 2021.

LIMA, Rodolfo M. et al. **Spatially distributed potential of landfill biogas production and electric power generation in Brazil**. Waste Management, 2017.

MACIEL-SILVA, Francisco W.; MUSSATTO, Solange I.; FORSTER-CARNEIRO, Tânia. **Integration of subcritical water pretreatment and anaerobic digestion technologies for valorization of açai processing industries residues**. Journal of Cleaner Production, v. 228, p. 1131-1142, 2019.

MARIANO, Alissandra Pauline B.; UNPAPROM, Yuwalee; RAMARAJ, Rameshprabu. **Hydrothermal pretreatment and acid hydrolysis of coconut pulp residue for fermentable sugar production**. Food and Bioproducts Processing, v. 122, p. 31-40, 2020.

MATTOS, A. L. A.; ROSA, M. F. CRISÓSTOMO, L. A.; BEZERRA, F. C.; CORREIA, D.; VERAS, L. G. C. **Beneficiamento da Casca de Coco Verde**. Fortaleza: Embrapa Agroindústria Tropical, 2011. 38 p. Apostila.

MCBRIDE, Kevin; SUNDMACHER, Kai. **Overview of surrogate modeling in chemical process engineering**. Chemie Ingenieur Technik, v. 91, n. 3, p. 228-239, 2019.

MILANEZ et al. Biogás de resíduos agroindustriais: Panorama e Perspectivas. BNDES Setorial 47, p. 221-276, 2018.

MOLINA, Raúl et al. **KMS platform: A complete tool for modeling chemical and biochemical reactors**. Education for Chemical Engineers, v. 34, p. 127-137, 2021.

MONTEIRO, S.D.S.C. Produção de biometano: análise de mercado e estudo da Separação por PSA. Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto 2011.

NASCIMENTO, R. S.; ALVES, G. M. **Fontes Alternativas E Renováveis De Energia No Brasil: Métodos E Benefícios Ambientais**. Educação e Ciência para a Cidadania Global, UNIVAP, 2016.

NI, X., WANG, Z., AKBAR, A., ALI, S. **Natural resources volatility, renewable energy, R&D resources and environment: Evidence from selected developed countries**. Resources Policy, V. 77, 2022.

NIST STANDARD REFERENCE DATABASE 121. CODATA. **Internationally recommended 2018 values of the Fundamental Physical Constants**.

RAMÍREZ-GUILLERMO, Miguel Á. et al. **Variación morfológica de frutos y semillas de cacao (*Theobroma cacao* L.) de plantaciones en Tabasco, México.** Revista fitotecnia mexicana, v. 41, n. 2, p. 117-125, 2018.

SANTOS, Aline Meireles dos, et al. **Biorreatores heterotróficos microalgais aplicados ao tratamento de efluentes agroindustriais.** 2020. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Santa Maria.

SCHMIDELL, W.; FACCIOTTI, M. C. R. **Biorreatores e processos fermentativos.** In: . Biotecnologia Industrial. 1. ed. São Paulo: Edgard Blücher, 2001. v. 2, cap. 8, p. 179–192.

SEDAP. Panorama Agrícola do Pará 2015/2020. Secretaria de Estado de Desenvolvimento Agropecuário e da Pesca. Disponível em: <<http://www.sedap.pa.gov.br/dados-agropecuarios/agropecuaria>>. Acesso em: 20/04/2022.

SGANZERLA, William G. et al. **Process intensification for the recovery of methane-rich biogas from dry anaerobic digestion of açai seeds.** Biomass Conversion and Biorefinery, p. 1-14, 2021.

SHAHZADI, Irum et al. **The nexus between research and development, renewable energy and environmental quality: Evidence from developed and developing countries.** Renewable Energy, v. 190, p. 1089-1099, 2022.

SOUSA, Izabelle de P. et al. **Energy potential of biogas from pig farms in the state of minas gerais, brazil.** Eng. Agríc., Jaboticabal, v. 40, n. 3, p. 396-404, 2020.

UNIÃO EUROPEIA. DIRETIVA (UE) 2018/2001 DO PARLAMENTO EUROPEU E DO CONSELHO de 11 de dezembro de 2018 relativa à promoção da utilização de energia de fontes renováveis (reformulação). Disponível em: <<https://www.europarl.europa.eu/factsheets/pt/sheet/70/renewable-energy>>.

VÁSQUEZ, Zulma S. et al. **Biotechnological approaches for cocoa waste management: A review.** Waste Management, v. 90, p. 72-83, 2019.

VERONEZE, M. L.; SCHWANTES, D.; GONÇALVES, A. C.; RICHART, A.; MANFRIN, J.; DA PAZ SCHILLER, A.; SCHUBA, T. B. Production of biogas and biofertilizer using anaerobic reactors with swine manure and glycerin doses. **Journal of cleaner production**, v.213, p.176-184, 2019.

YONG, Z. J.; BASHIR, M. J. K.; HASSAN, M. S. Biogas and biofertilizer production from organic fraction municipal solid waste for sustainable circular economy and environmental protection in Malaysia. **Science of The Total Environment**, v. 776, p. 145961, 2021.

ZANETTE, A. L. Potencial de aproveitamento energético do biogás no Brasil. Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2009.

ZINLA, Désiré et al. **Characterization of rice, coffee and cocoa crops residues as fuel of thermal power plant in Côte d'Ivoire.** Fuel, v. 283, p. 119250, 2021.

APÊNDICES E ANEXOS

APÊNDICE A - CÓDIGO USADO NO OCTAVE PARA SIMULAÇÃO

Única fase

```

clc; % Limpa a tela do Octave
clear all; % Limpa todas as variáveis do Octave
% Parâmetros do processo
K = ; % Taxa de degradação do substrato (h^-1)
Y_acetico = ; % Rendimento em ácido acético (L/g)
Y_butirico = ; % Rendimento em ácido butírico (L/g)
Y_propionico = ; % Rendimento em ácido propiônico (L/g)
S0 = ; % Concentração inicial de substrato (g/L)
V = ; % Volume do biorreator (L)
Y = ; % Rendimento em biogás (L/g)
% Parâmetros do sistema
t_total = 30; % Tempo total de simulação (dias)
t = linspace(0, t_total, t_total* 30); % Vetor de tempo (Dias)
% Simulação do processo
S = zeros(1, length(t)); % Vetor de concentração de substrato
Acetico = zeros(1, length(t)); % Vetor de produção de ácido acético
Butirico = zeros(1, length(t)); % Vetor de produção de ácido butírico
Propionico = zeros(1, length(t)); % Vetor de produção de ácido propiônico
Biogas = zeros(1, length(t)); % Vetor de produção de biogás
X = zeros(1, length(t)); % Vetor de concentração de bactérias
% Vazões
Vazao_biogas = zeros(1, length(t)); % Vetor de vazão de biogás
Vazao_digestado = zeros(1, length(t)); % Vetor de vazão do digestado
% Condições iniciais
S(1) = S0;
% Laço de simulação
for i = 2:length(t)
    % Cálculo da concentração de substrato
    dSdt = -K * S(i-1);

    % Cálculo da produção de biogás
    Biogas(i) = Y + dSdt * V;

    % Atualização da concentração de substrato
    S(i) = S(i-1) + dSdt;

    % Cálculo da produção de ácido acético
    Acetico(i) = Y_acetico + dSdt;

    % Cálculo da produção de ácido butírico
    Butirico(i) = Y_butirico;

    % Cálculo da produção de ácido propiônico
    Propionico(i) = Y_propionico;

    % Cálculo da vazão de biogás
    Vazao_biogas(i) = Biogas(i) * V;

    % Cálculo da vazão do digestado
    Vazao_digestado(i) = (dSdt + V) * V;

    % Cálculo das concentrações de substrato e produtos

```

```

CO2 = 0.2 + (1 - exp(-0.03 * V * t / V)) * 0.1 + (1 - exp(-0.02 * V * (t - t(end)) / V)) + 0.3 * (1 - exp(-0.01 * V * (t - t(end)) / V)); % Dióxido de carbono
CH4 = 0.3 + (1 - exp(-0.01 * V * t / V)) * 0.6 + (1 - exp(-0.02 * V * (t - t(end)) / V)) + 0.2 * (1 - exp(-0.03 * V * (t - t(end)) / V)); % Metano
end

```

```

% Plot dos resultados
figure(1);
plot(t, S, 'b', 'LineWidth', 2);
xlabel('Tempo (dias)');
ylabel('Concentração de Substrato (g/L)');
grid on; % Exibe grade no gráfico
figure(2)
plot(t, Acetico, 'r-', 'LineWidth', 2);
hold on;
plot(t, Butirico, 'b-', 'LineWidth', 2, 'MarkerSize', 2);
plot(t, Propionico, 'g-', 'LineWidth', 2, 'MarkerSize', 2);
xlabel('Tempo (Dias)'); % Rótulo do eixo x
ylabel('Concentração de Ácidos (g/L)'); % Rótulo do eixo y
legend('Ácido Acético', 'Ácido Butírico', 'Ácido Propiônico'); % Legenda
grid on; % Exibe grade no gráfico
figure(3)
plot(t, Biogas, 'r', 'LineWidth', 2);
xlabel('Tempo (dias)');
ylabel('Produção de Biogás (mL/gSVad)');
grid on; % Exibe grade no gráfico
figure(4)
plot(t, CO2, 'm-', 'LineWidth', 2, 'DisplayName', 'Dióxido de Carbono');
hold on;
plot(t, CH4, 'r-', 'LineWidth', 2, 'DisplayName', 'Metano');
xlabel('Tempo (Dias)'); % Rótulo do eixo x
ylabel('Concentração de gases no biogás (g/L)'); % Rótulo do eixo y
legend('Dióxido de Carbono', 'Metano'); % Legenda
grid on; % Exibe grade no gráfico
figure(5)
plot(t, Vazao_biogas, 'r', 'LineWidth', 2);
hold on;
plot(t, Vazao_digestado, 'b', 'LineWidth', 2);
xlabel('Tempo (dias)');
ylabel('Vazão (mL/dia)');
legend('Vazão de Biogás', 'Vazão do Digestado');
grid on; % Exibe grade no gráfico

```

Múltiplas Fases

```

clc; % Limpa a tela do Octave
clear all; % Limpa todas as variáveis do Octave
% Parâmetros do processo
K1 = ; % Taxa de degradação do substrato no primeiro biorreator (h^-1)
K2 = ; % Taxa de degradação do substrato no segundo biorreator (h^-1)
K3 = ; % Taxa de degradação do substrato no terceiro biorreator (h^-1)
Y1_acetico = ; % Rendimento em ácido acético do primeiro biorreator (L/g)
Y2_butirico = ; % Rendimento em ácido butírico do segundo biorreator (L/g)
Y3_propionico = ; % Rendimento em ácido propiônico do terceiro biorreator (L/g)
S0 = ; % Concentração inicial de substrato (g/L)
V1 = ; % Volume do primeiro biorreator (L)
V2 = ; % Volume do segundo biorreator (L)
V3 = ; % Volume do terceiro biorreator (L)
Y1 = ; % Rendimento em biogás do primeiro biorreator (L/g)
Y2 = ; % Rendimento em biogás do segundo biorreator (L/g)

```

```

Y3 = ; % Rendimento em biogás do terceiro biorreator (L/g)
V = [ , , ]; % Volumes dos biorreatores em litros
n_biorreatores = ; % Número de biorreatores em série
V_total = sum(V); % Volume total do sistema (L)
k = [ , , ]; % Taxa de degradação dos substratos em cada biorreator
% Parâmetros do sistema
t_total = ; % Tempo total de simulação (dias)
t = linspace(0, t_total, t_total*); % Vetor de tempo (Dias)
% Simulação do processo
S = zeros(1, length(t)); % Vetor de concentração de substrato
Biogas = zeros(1, length(t)); % Vetor de vazão de biogás
Digestado = zeros(1, length(t)); % Vetor de vazão de digestado
% Condições iniciais
S(1) = S0;
% Laço de simulação
for i = 2:length(t)

    % Cálculo da concentração de substrato no primeiro biorreator
    dS1dt = -K1 * S(i-1);

    % Cálculo da concentração de substrato no segundo biorreator
    dS2dt = -K2 * S(i-1);

    % Cálculo da concentração de substrato no terceiro biorreator
    dS3dt = -K3 * S(i-1);

    % Cálculo da produção de biogás
    Biogas(i) = Y1 + dS1dt + V1 * Y2 + dS2dt + V2 * Y3 + dS3dt + V3;

    % Cálculo da vazão de biogás
    Vazaobiogas = Biogas * V1 + Biogas * V2 + Biogas * V3;

    % Cálculo da vazão de digestado
    Digestado(i) = S(i-1) - S(i);

    % Atualização da concentração de substrato
    S(i) = S(i-1) + dS1dt + dS2dt + dS3dt;

    % Cálculo da produção de ácido acético
    Acetico(i) = Y1_acetico + dS1dt + V1;

    % Cálculo da produção de ácido butírico
    Butirico(i) = Y2_butirico + dS2dt + V2;

    % Cálculo da produção de ácido propiônico
    Propionico(i) = Y3_propionico + dS3dt + V3;

    % Cálculo das concentrações de substrato e produtos
    CO2 = 0.2 + (1 - exp(-0.03 * V(1) * t / V(1))) * 0.1 + (1 - exp(-0.02 * V(2) * (t - t(end)) / V(2))) + 0.3 * (1 - exp(-0.01 * V(3) * (t - t(end)) / V(3))); % Dióxido de carbono
    CH4 = 0.3 + (1 - exp(-0.01 * V(1) * t / V(1))) * 0.6 + (1 - exp(-0.02 * V(2) * (t - t(end)) / V(2))) + 0.2 * (1 - exp(-0.03 * V(3) * (t - t(end)) / V(3))); % Metano
end

% Plot dos resultados
figure;
plot(t, S, 'b', 'LineWidth', 2);
xlabel('Tempo (Dias)');
ylabel('Concentração de substrato (g/L)');
grid on;

```

```
figure;
plot(t, Acetico, 'r-', 'LineWidth', 2);
hold on;
plot(t, Butirico, 'b-', 'LineWidth', 2, 'MarkerSize', 2);
plot(t, Propionico, 'g-', 'LineWidth', 2, 'MarkerSize', 2);
xlabel('Tempo (Dias)'); % Rótulo do eixo x
ylabel('Concentração de ácidos (g/L)'); % Rótulo do eixo y
legend('Ácido Acético', 'Ácido Butírico', 'Ácido Propiônico'); % Legenda
grid on; % Exibe grade no gráfico
figure;
plot(t, Biogas, 'r', 'LineWidth', 2);
xlabel('Tempo (Dias)');
ylabel('Produção de biogás (mL/gSVad)');
grid on;
figure;
plot(t, CO2, 'm-', 'LineWidth', 2, 'DisplayName', 'Dióxido de Carbono');
hold on;
plot(t, CH4, 'r-', 'LineWidth', 2, 'DisplayName', 'Metano');
xlabel('Tempo (Dias)'); % Rótulo do eixo x
ylabel('Concentração de gases no biogás (g/L)'); % Rótulo do eixo y
legend('Dióxido de Carbono', 'Metano'); % Legenda
grid on; % Exibe grade no gráfico
figure;
plot(t, vazaobiogas, 'r', 'LineWidth', 2);
hold on;
plot(t, Digestado, 'b', 'LineWidth', 2);
xlabel('Tempo (dias)');
ylabel('Vazão (mL/dia)');
legend('Vazão de Biogás', 'Vazão do Digestado');
grid on; % Exibe grade no gráfico
```


ANEXO A - PARÂMETROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO PARA OS RESÍDUOS DO
CACAU

Parâmetros	Símbolo	Valor	Unidade	Ref
Concentração de entrada de substrato polimérico	S0e	136.5	g/L	1
Taxa de degradação do substrato no primeiro biorreator	K1	0,01	g/L	2
Taxa de degradação do substrato no segundo biorreator	K2	0,015	g/L	2
Taxa de degradação do substrato no terceiro biorreator	K3	0,02	g/L	2
Volume de trabalho no biodigestor 1	V1	0.2	L	1
Volume de trabalho no biodigestor 2	V2	0.2	L	1
Volume de trabalho no biodigestor 3	V3	0.2	L	1
Volume total no biodigestor 3	V3T	0.3	L	1
Rendimento de biogás no primeiro biorreator	Y1	0.6	-	2
Rendimento de biogás no segundo biorreator	Y2	0,5	-	2
Rendimento de biogás no terceiro biorreator	Y3	0,4	-	2
Rendimento em ácido acético	Y1_acetico	40	-	2
Rendimento em ácido butírico	Y2_butirico	2,56	-	2
Rendimento em ácido propiônico	Y3_propriónico	3,53	-	2
Constante de Henry para H2	H3	0,00078	g.L-1.atm-1	2
Constante de Henry para CO2	H4	0,034	g.L-1.atm-1	2
Constante de Henry para metano	H7	0,0014	g.L-1.atm-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para H2	KLA3	100	d-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para CO2	KLA4	100	d-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para metano	KLA7	48	d-1	2
Constante universal dos gases	R	0,082	atm.L	1
Temperatura	T	302,15	K	1
Massa molar do CO2	MCO2	44	g/mol	3
Massa molar do H2	MH2	2	g/mol	3
Massa molar do CH4	MCH4	16	g/mol	3
Pressão total na fase gasosa	PT	1	atm	1

Fonte:

- 1) ACOSTA et al (2018)
- 2) BALMANT et al (2014)
- 3) NIST STANDARD REFERENCE DATABASE 121

ANEXO B - PARÂMETROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO PARA OS RESÍDUOS DO
COCO

Parâmetros	Símbolo	Valor	Unidade	Ref
Concentração de entrada de substrato polimérico	S0e	99,4	g/L	1
Taxa de degradação do substrato no primeiro biorreator	K1	0,1	g/L	2
Taxa de degradação do substrato no segundo biorreator	K2	0,5	g/L	2
Taxa de degradação do substrato no terceiro biorreator	K3	0,02	g/L	2
Volume de trabalho no biodigestor 1	V1	2	L	1
Volume de trabalho no biodigestor 2	V2	2	L	1
Volume de trabalho no biodigestor 3	V3	4	L	1
Rendimento de biogás no primeiro biorreator	Y1	0.3	-	2
Rendimento de biogás no segundo biorreator	Y2	0,4	-	2
Rendimento de biogás no terceiro biorreator	Y3	0,5	-	2
Rendimento em ácido acético	Y1_acetico	4	-	2
Rendimento em ácido butírico	Y2_butirico	3	-	2
Rendimento em ácido propiônico	Y3_propriônico	2	-	2
Constante de Henry para H2	H3	0,00078	g.L-1.atm-1	2
Constante de Henry para CO2	H4	0,034	g.L-1.atm-1	2
Constante de Henry para metano	H7	0,0014	g.L-1.atm-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para H2	KLA3	100	d-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para CO2	KLA4	100	d-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para metano	KLA7	48	d-1	2
Constante universal dos gases	R	0,082	atm.L	1
Temperatura	T	302,15	K	1
Massa molar do CO2	MCO2	44	g/mol	3
Massa molar do H2	MH2	2	g/mol	3
Massa molar do CH4	MCH4	16	g/mol	3
Pressão total na fase gasosa	PT	1	atm	1

Fonte:

- 1) EZIEKE et al (2022)
- 2) BALMANT et al (2014)
- 3) NIST STANDARD REFERENCE DATABASE 121

ANEXO C - PARÂMETROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO PARA OS RESÍDUOS DO AÇAÍ

Parâmetros	Símbolo	Valor	Unidade	Ref
Concentração de entrada de substrato polimérico	S0e	88	g/L	1
Taxa de degradação do substrato no primeiro biorreator	K1	0,1	g/L	2
Taxa de degradação do substrato no segundo biorreator	K2	0,015	g/L	2
Taxa de degradação do substrato no terceiro biorreator	K3	0,02	g/L	2
Volume de trabalho no biodigestor 1	V1	3	L	1
Volume de trabalho no biodigestor 2	V2	3	L	1
Volume de trabalho no biodigestor 3	V3	3	L	1
Rendimento de biogás no primeiro biorreator	Y1	0.1	-	2
Rendimento de biogás no segundo biorreator	Y2	0.1	-	2
Rendimento de biogás no terceiro biorreator	Y3	10	-	2
Rendimento em ácido acético	Y1_acetico	10	-	2
Rendimento em ácido butírico	Y2_butirico	10	-	2
Rendimento em ácido propiônico	Y3_propriônico	10	-	2
Constante de Henry para H2	H3	0,00078	g.L-1.atm-1	2
Constante de Henry para CO2	H4	0,034	g.L-1.atm-1	2
Constante de Henry para metano	H7	0,0014	g.L-1.atm-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para H2	KLA3	100	d-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para CO2	KLA4	100	d-1	2
Coefficiente de transferência de massa gás-líquido para metano	KLA7	48	d-1	2
Constante universal dos gases	R	0,082	atm.L	1
Temperatura	T	302,15	K	1
Massa molar do CO2	MCO2	44	g/mol	3
Massa molar do H2	MH2	2	g/mol	3
Massa molar do CH4	MCH4	16	g/mol	3
Pressão total na fase gasosa	PT	1	atm	1o

Fonte:

- 1) MACIEL-SILVA et al (2019)
- 2) BALMANT et al (2014)
- 3) NIST STANDARD REFERENCE DATABASE 121