

Modelagem e simulação cinética da produção metanogênica em um reator operado em batelada

Kinetic modeling and simulation of methanogenic production in a batch reactor

Modelado y simulación cinética de la producción metanogénica en un reactor operado por lotes

Recebido: 18/10/2025 | Revisado: 18/11/2025 | Aceitado: 19/11/2025 | Publicado: 21/11/2025

Venancio Vitor Lima da Silva Bezerra¹

ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-0982-6030>

Universidade Federal de Alagoas, Brasil

E-mail: venancio.bezerra@ctec.ufal.br

Maria Kelyane Miguel da Silva¹

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4169-3988>

Universidade Federal de Alagoas, Brasil

E-mail: maria.miguel@ctec.ufal.br

Jonathan da Cunha Teixeira¹

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4271-1479>

Universidade Federal de Alagoas, Brasil

E-mail: jonathan.teixeira@ctec.ufal.br

Resumo

Os ensaios de Potencial Bioquímico de Metano são utilizados para avaliar o potencial de produção de metano de substratos específicos, visto que monitora o volume de biogás gerado a partir de resíduos, avaliando sua capacidade de biodegradação pela produção total de metano. A modelagem de reatores, por sua vez, permite simular processos ao prever o consumo de substratos, o crescimento microbiano e a formação de produtos. O objetivo central deste estudo foi prever o comportamento da reação ao longo do tempo, com base na concentração da reação heterogênea, além de validar o modelo por meio da comparação com dados experimentais. Os resultados indicaram que a reação segue uma cinética de primeira ordem, com coeficiente de determinação próximo a 1, evidenciando a precisão do modelo matemático. As simulações reproduziram o comportamento experimental, validaram a constante de velocidade e possibilitaram extrapolações para condições distintas, viabilizando aplicações práticas. Concluiu-se que a modelagem é eficaz para prever o comportamento do sistema em diferentes condições, contribuindo para o desenvolvimento de tecnologias voltadas à geração sustentável de energia.

Palavras-chave: Biometanização; Modelagem; Cinética de reação; Produção de biogás.

Abstract

Biochemical Methane Potential (BMP) assays are employed to assess the methane production potential of specific substrates, as they monitor the volume of biogas generated from organic waste, thereby evaluating its biodegradability through the total methane (CH_4) yield. Reactor modeling, in turn, enables the simulation of processes by predicting substrate consumption, microbial growth, and product formation. The main objective of this study was to predict the reaction behavior over time based on the concentration profile of a heterogeneous reaction, as well as to validate the model through comparison with experimental data. The results indicated that the reaction follows first-order kinetics, with a coefficient of determination close to 1, highlighting the accuracy of the mathematical model. The simulations successfully reproduced experimental behavior, validated the rate constant, and allowed extrapolations under different conditions, enabling practical applications. It was concluded that modeling is an effective tool for predicting system behavior under varying conditions, contributing to the advancement of technologies aimed at sustainable energy generation.

Keywords: Biomethanation; Mathematical modeling; Reaction kinetics; Biogas production; Anaerobic digestion.

Resumen

Los ensayos de Potencial Bioquímico de Metano (PBM) se utilizan para evaluar el potencial de producción de metano de sustratos específicos, dado que permiten monitorear el volumen de biogás generado a partir de residuos orgánicos, evaluando su capacidad de biodegradación mediante la producción total de metano (CH_4). El modelado de reactores, por su parte, permite simular procesos al predecir el consumo de sustratos, el crecimiento microbiano y la formación de productos. El objetivo central de este estudio fue predecir el comportamiento de la reacción a lo largo del tiempo,

¹ Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas, Brasil.

con base en la concentración de una reacción heterogénea, además de validar el modelo mediante la comparación con datos experimentales. Los resultados indicaron que la reacción sigue una cinética de primer orden, con un coeficiente de determinación próximo a 1, lo que evidencia la precisión del modelo matemático. Las simulaciones reprodujeron adecuadamente el comportamiento experimental, validaron la constante de velocidad y permitieron extrapolaciones a diferentes condiciones, posibilitando aplicaciones prácticas. Se concluyó que el modelado constituye una herramienta eficaz para prever el comportamiento del sistema bajo distintas condiciones, contribuyendo al desarrollo de tecnologías orientadas a la generación sostenible de energía.

Palavras clave: Biometanización; Modelado matemático; Cinética de reacción; Producción de biogás; Digestión anaerobia.

1. Introdução

Os reatores anaeróbios são utilizados nos processos de digestão anaeróbia, em virtude da simplicidade, rapidez e baixo custo (Ward *et al.*, 2008). Contudo, configurações operacionais em batelada sequencial possuem limitações quanto à estabilidade do sistema, como altas flutuações na taxa de geração e na composição do biogás, além de perdas volumétricas durante as fases de esvaziamento dos reatores, comprometendo, assim, a eficiência global do processo (Khalid *et al.*, 2011).

Na quantificação do potencial metanogênico de substratos orgânicos, os ensaios de Potencial Bioquímico de Metano (BMP) permitem o monitoramento da produção de biogás oriunda da digestão anaeróbia. Por conseguinte, é o principal indicador a geração acumulada de metano (CH_4), visto que corresponde diretamente a biodegradabilidade do material em avaliação (Magalhães, 2018).

Nesse contexto, a modelagem dos reatores permite simular processos, viabilizando recursos financeiros, ao prever o consumo de substratos, crescimento microbiano e formação de produtos (Couto, 2021). Cabe salientar, que os modelos cinéticos são capazes de simular o crescimento microbiano, a conversão de matéria orgânica em biogás e a formação de produtos intermediários (Silva, 2019).

Conforme apontado por Silva (2019) o modelo matemático da digestão anaeróbia é formulado com base na representação das reações químicas envolvidas no mecanismo global do processo, o qual é composto sequencialmente pelas etapas de hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese. Neste estudo, a produção de CH_4 foi modelada por uma equação cinética, com parâmetros determinados experimentalmente por Silva (2024).

Silva (2024) conduziu experimentos em reatores operados em batelada, sob condições mesofílicas, utilizando como substrato a biomassa residual de *Eichhornia crassipes*. A quantificação metanogênica realizada por Silva (2024) foi baseada no modelo de *Gompertz* modificado por Lay, Lee e Noike (1997), para ajustar os dados relativos à produção acumulada em cada reator.

$$M = P \cdot \exp \left[-\exp \left\{ \frac{R \cdot e}{P} \cdot (\lambda - t) + 1 \right\} \right] \quad (1)$$

Onde M : produção acumulada de metano (mL); P : potencial de produção de metano (mL); R : taxa de produção de metano (mL/h); t : tempo de incubação dos reatores (h); e : número de Euler ($\sim 2,71828$); e λ : fase lag (h).

Os dados obtidos em laboratórios, foram utilizados para determinar os parâmetros cinéticos da reação, como velocidade específica (k) e ordem de reação (α), que leva à determinação da lei de velocidade (r_A), todos relacionados à concentração do reagente ou produto de referência (A), conforme Fogler (2009).

$$r_{\text{CH}_4} = k C^{\alpha} \text{CH}_4 \quad (2)$$

Ao efetuar o balanço de massa no reator operado em batelada e incorporá-lo à Equação 3, obtém-se a Equação 4.

$$\frac{dC_{CH_4}}{dt} = r_{CH_4} \quad (3)$$

$$\frac{dC_{CH_4}}{dt} = k C^\alpha_{CH_4} \quad (4)$$

Onde $\frac{dC_{CH_4}}{dt}$ é a taxa de acúmulo de CH₄.

Ao diferenciar a equação em função do tempo, dividi-la por $C^\alpha_{CH_4}$, e integrá-la tendo em vista as condições de contorno ($t = 0 \rightarrow C_{CH_4} = 0$; $t = t \rightarrow C_{CH_4} = C_{CH_4}$), alcança-se a Equação 5.

$$\int_0^{C_{CH_4}} C^{-\alpha}_{CH_4} \frac{dC_{CH_4}}{dt} dt = \int_0^t k dt \quad (5)$$

A posteriori, resolvendo a integral, chega-se à Equação 6, válida para todo valor de α diferente de 1, caso contrário, o resultado da integração será correspondente a Equação 7.

$$C^{1-\alpha}_{CH_4} = (1-\alpha)kt \quad (6)$$

$$\ln C_{CH_4} = kt \quad (7)$$

O objetivo central deste estudo foi prever o comportamento da reação ao longo do tempo, com base na concentração da reação heterogênea, além de validar o modelo por meio da comparação com dados experimentais

2. Metodologia

A determinação dos parâmetros cinéticos de reação foi conduzida a partir da elaboração de um algoritmo em linguagem de programação *Python*, no qual foram atribuídos valores hipotéticos para α , tomando por premissa que o melhor ajuste de curva dos valores obtidos experimentalmente. A confirmação do melhor ajuste foi realizada por meio da quantificação do coeficiente de determinação (R^2) (Equação 8), do Desvio Padrão Médio (SD) (Equação 9) e da Soma dos Quadrados Residuais (RSS) (Equação 10).

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i^{exp} - y_i^{cal})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i^{exp} - \bar{y}_i^{exp})^2} \quad (8)$$

$$SD = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i^{exp} - y_i^{cal}}{y_i^{cal}} \right| \quad (9)$$

$$RSS = \sum_{i=1}^n (y_i^{exp} - y_i^{cal})^2 \quad (10)$$

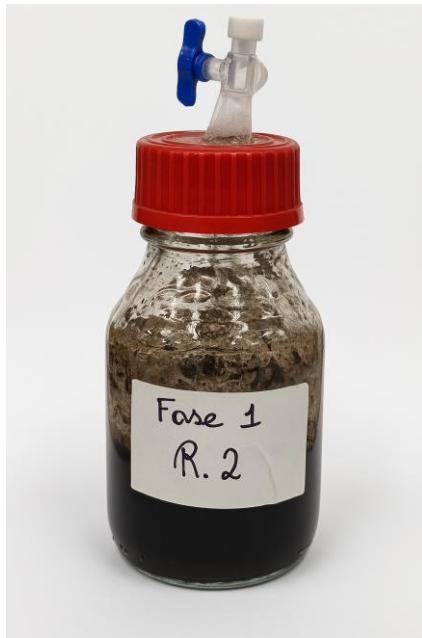
A partir da determinação dos parâmetros cinéticos, foi elaborada uma modelagem de reator contínuo, a partir do balanço de massa do CH₄, disposto na Equação 11.

$$kC_{CH_4}^\alpha - \frac{v}{V} C_{CH_4} = \frac{dC_{CH_4}}{dt} \quad (11)$$

3. Resultados e Discussão

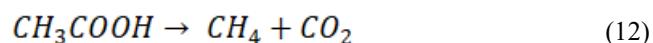
Ao analisar os resultados obtidos por Silva (2024) nos reatores anaeróbios, o Reator 2, disposto na Figura 1, foi selecionado para os ensaios de modelagem, por ter apresentado a maior média de produção de metano, atingindo um volume acumulado de 408,04 mL CH₄ ao longo de 37 dias de fermentação anaeróbia.

Figura 1. Ilustração do Reator 2 com volume reacional de 185 mL.



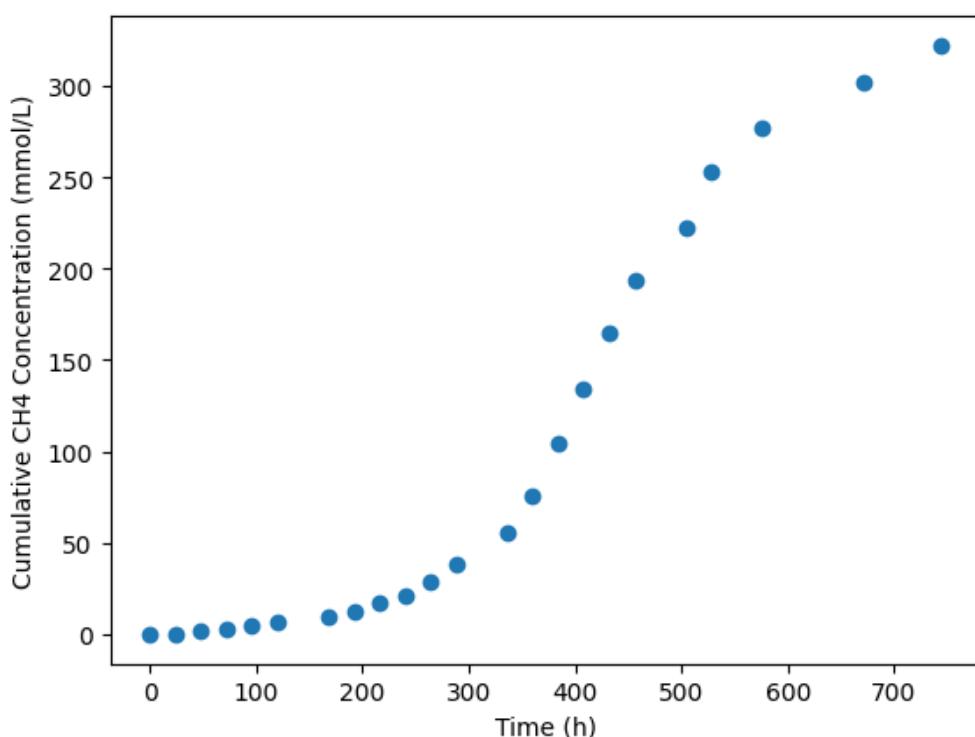
Fonte: Adaptado de Silva (2024).

Na metanogênese acetoclástica o acetato é convertido em metano e gás carbônico, visto que “[...] as bactérias homoacetogênicas competem com as arqueas hidrogenotróficas pelo hidrogênio e as bactérias oxidadoras de acetato (que atuam em sintrofismo com as arqueas metanogênicas hidrogenotróficas) competem com as arqueas acetoclásticas” (Couto, 2021, p. 67).



A concentração acumulada do metano foi registrada por Silva (2024) após 48 horas de operação, em decorrência da fase *lag*, onde os microrganismos estão adaptando-se ao meio, antes que ocorram a divisão celular e a produção significativa de biomassa (Metcalf; Eddy, 2016). Conforme esperado, observou-se por meio da Figura 2 que, com o passar do tempo, a concentração do reagente aumenta até alcançar um ponto em que não há mais formação de produto, indicando o estado estacionário.

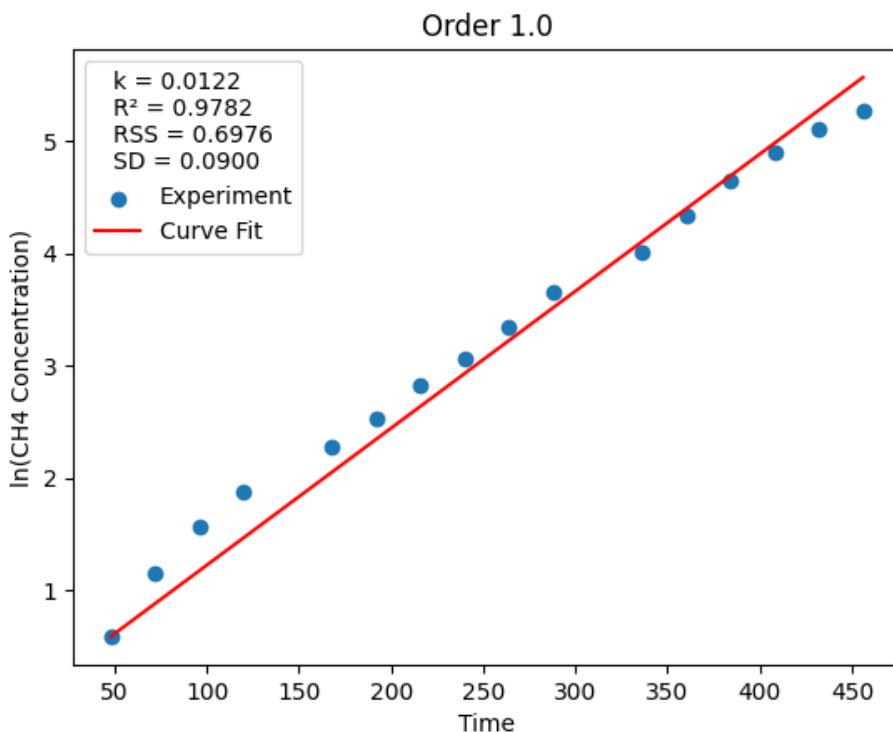
Figura 2. Concentração acumulada de metano.



Fonte: Autores (2025).

A seguir, a Figura 3 apresenta o melhor ajuste de curva dos dados experimentais obtidos. Uma vez que o ajuste para cinética de primeira ordem apresentou maior valor de R^2 , e menores valores de RSS e SD frente as outras hipóteses de ordem, definiu-se que a cinética de reação de metano apresenta ordem 1.0, com velocidade específica de reação (k) de 0.0122h^{-1} .

Figura 3. Ajuste de curva de cinética de primeira ordem para reação de metanação.



Fonte: Autores (2025).

Por conseguinte, a lei de velocidade de reação foi determinada, sendo descrita pela Equação 13.

$$r_{CH_4} = 0.0122 C_{CH_4} \text{ (mol L}^{-1}\text{h}^{-1}) \quad (13)$$

A partir dos resultados obtidos, torna-se evidente que a formação de CH₄ apresenta perfil linear, sendo 0.0122 h⁻¹ o valor da velocidade específica de reação entre a velocidade de reação e a concentração de CH₄ na temperatura em que o experimento foi realizado. Dessa forma, deve-se considerar que o mesmo processo seja feito numa temperatura distinta a do experimento, *a posteriori*, o valor anteriormente citado deverá ser ajustado, obedecendo a equação de Arrhenius (Fogler, 2009).

Com a determinação da velocidade específica e da ordem de reação de metano pode ser reescrita, obtendo-se, assim, a Equação 14.

$$\frac{dC_{CH_4}}{dt} = \left(0.0122 h^{-1} - \frac{v_0}{V} \right) C_{CH_4} \quad (14)$$

À vista disso, pressupõe-se que a concentração dentro do reator é uniforme devido à agitação contínua, e as equações descrevem a relação entre as vazões de entrada e saída, a taxa de reação e as concentrações das espécies químicas envolvidas.

4. Conclusão

O estudo apresentou resultados consistentes, evidenciando a concordância entre os dados experimentais e as simulações. Constatou-se que as simulações realizadas reproduziram o comportamento operacional, permitindo prever o comportamento do sistema sob condições diferentes das testadas em laboratório. À vista disso, ao combinar fundamentos teóricos com análise numérica, é possível avançar no desenvolvimento de tecnologias e contribuir para a geração de energia de forma sustentável.

Referências

- Couto, P. T. (2021). Estudo da utilização do ADM1 como plataforma de modelagem para reatores em batelada empregados no processamento anaeróbio da vinhaça de cana-de-açúcar (Tese de doutorado). Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos.
- Fogler, H. S. (2009). Elementos de engenharia das reações químicas (4^a ed.). Rio de Janeiro: LTC.
- Khalid, A., Arshad, M., Anjum, M., Mahmood, T., & Dawson, L. (2011). The anaerobic digestion of solid organic waste. *Waste Management*, 31(8), 1737–1744. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2011.03.021>.
- Lay, J. J., Lee, Y. J., & Noike, T. (1997). Feasibility of biological hydrogen production from organic fraction of municipal solid waste. *Water Research*, 31(6), 1518–1524. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(96\)00413-7](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(96)00413-7).
- Magalhães, G. V. V. (2018). Avaliação da biodigestão anaeróbia de resíduos orgânicos: ensaios de potencial bioquímico de metano (BMP) e projeto piloto de um biodigestor em escala real (Tese de doutorado, Universidade Federal do Ceará). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil: Saneamento Ambiental. <https://repositorio.ufc.br/handle/riufc/32139>.
- Metcalf, L., & Eddy, P. (2016). Tratamento de efluentes e recuperação de recursos (4^a ed.). McGraw-Hill Brasil.
- Silva, M. I. (2019). Modelagem e simulação numérica da digestão anaeróbia. Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS.
- Silva, M. K. M. da. (2024). Produção metanogênica a partir da biomassa residual da macrófita aquática *Eichhornia crassipes* (Monografia de Conclusão de Curso em Engenharia Química). Universidade Federal de Alagoas, Centro de Tecnologia. Maceió, AL.
- Ward, A. J., Hobbs, P. J., Holliman, P. J., & Jones, D. L. (2008). Optimisation of the anaerobic digestion of agricultural resources. *Bioresource Technology*, 99(17), 7928–7940. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.02.044>.