# Relatório descritivo do modelo cinético

Como versão inicial da estruturação matemática, tem-se um modelo que considera três componentes: substrato, biomassa e produto (*S, X* e *P*). Destaca-se aqui que, embora saiba-se que, na realidade, a composição do substrato seja variada, contendo diferentes elementos como açúcares, lipídios, proteínas, sólidos e minerais, na interpretação do modelo, o substrato é considerado como um componente único e homogêneo, caracterizando o substrato *S* como uma variável .

Essa mesma noção é aplicada à variável de estado que representa a biomassa *X*, visto que as três populações microbianas participantes do processo de digestão anaeróbica – acidogênicos, acetogênicos e metanogênicos- são agregados em uma única variável de estado.

Por fim, essa estruturação ignora os produtos intermediários formados no processo, focando apenas em descrever a geração de biogás no sistema. A Figura 1 apresenta o diagrama simplificado das reações consideradas no modelo, onde a adição de substrato e biomassa resulta na produção de mais biomassa e produto.

**Figura 1 –** Diagrama de reações simplificado.

Substrato

Biomassa

Biomassa

Produto

Dessa forma, a partir da consideração de um sistema isotérmico, homogêneo, em processo contínuo operado em um quimiostato, o balanço dos componentes do modelo é descrito pelas Equações 1, 2 e 3:

( )

( )

( )

onde Q é a vazão no reator, V é o volume de operação no reator, os termos S0, X0 e P0 com o subscrito 0 representam a concentração de substrato, biomassa e produto na corrente de alimentação, enquanto as variáveis S1, X1 e P1 são a concentração de substrato, biomassa e produto dentro do reator. Já os termos e representam, respectivamente, o somatório das reações de geração e destruição de cada um dos componentes.

No balanço de substrato, desconsidera-se o termo de geração, enquanto o termo de destruição é descrito através da cinética de Monod, conforme apresentada na Equação 4, onde μ é a taxa específica de crescimento celular, μmax é o parâmetro que representa a taxa máxima de crescimento e Ks é uma constante de saturação de Monod, uma constante empírica que representa a concentração de substrato para qual .

( )

Destaca-se aqui que apesar de extensivamente utilizada pela sua praticidade, a equação de Monod é uma formulação empírica, baseada na consideração de crescimento baseado no consumo de um único substrato limitante, descrevendo apenas as fases exponencial e estacionária do crescimento.

Sendo μ uma taxa específica, o crescimento celular pode ser modelado pela Equação 5, ao passo que essa formulação permite descrever a taxa de variação na concentração do substrato segundo a Equação 6, onde o parâmetro YX/S representa o rendimento de biomassa por unidade de substrato consumida.

( )

( )

Substituindo a Equação 6 como o termo de geração na Equação 1, obtém-se a Equação 7.

( )

Por vez, no balanço de biomassa, optou-se por descrever a reação de geração em função de dois processos: o consumo de substrato e o decaimento celular. Tal qual feito no balanço anterior, a taxa de consumo de substrato foi modelada através da equação de Monod, substituindo a Equação 4 na Equação 5. Já o processo de decaimento de biomassa é descrito através de uma reação de primeira ordem que depende apenas da concentração de biomassa presente no reator, conforme apresentado na Equação 8.

( )

Dessa forma, substituindo os processos de consumo de substrato e decaimento celular como termos de geração e destruição na Equação 2, respectivamente, obtém-se a Equação 9, que pode ser simplificada na Equação 10.

( )

( )

Por fim, no balanço do componente *P*, não são consideradas reações de destruição e descreve-se a geração de produto associado ao crescimento celular com a introdução de um parâmetro de rendimento de biogás por substrato consumido, *YP/S*, obtendo-se a Equação 7:

( )

Com o intuito de diminuir o número de parâmetros necessários para descrição do modelo, considerou-se volume constante no reator, possibilitando a substituição da razão entre vazão e volume (*Q/V)* por um parâmetro de diluição (*D*), resultando no seguinte sistema de equações:

( )

Dessa forma, a estruturação matemática do modelo trata-se de um sistema de equações diferenciais ordinárias para três componentes (*S*, *X* e *P*), utilizando seis parâmetros: *μmax*, *KS*, *YX/S*, *YP/S*, *kd* e *D*

A Tabela 1 apresenta a Matriz de Petersen para as reações ocorrentes no sistema. Dessa forma, pode-se escrever as equações de balanço de forma resumida tal qual na Equação 13. Por fim, a partir da consideração de concentrações nulas de biomassa e produto na corrente de entrada, pode-se reescrever o sistema de equações conforme apresentado na Equação 14.

Tabela 1 – Matriz de Petersen do sistema

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Componente → | i  j | 1 | 2 | 3 | Taxa *ρj* |
| Reação ↓ | S | X | P |
| Consumo de substrato | 1 |  |  |  |  |
| Decaimento de biomassa | 2 |  |  |  |  |

( )

( )

A Figura 2 apresenta um fluxograma conceitual detalhado das reações consideradas no sistema.

**Figura 2 –** Fluxograma de reações do modelo.

Substrato

Biomassa

Biomassa

Produto

## Fluxo computacional

Para a construção do código do modelo proposto em linguagem *python*, utilizou-se das seguintes bibliotecas: ...

O fluxo computacional a ser seguido é definido na função *main*, sendo que inicialmente os dados experimentais são importados do arquivo .xlsx por meio da chamada da função ‘ajustarXlsx’, a qual recebe como argumentos o caminho do arquivo e uma lista de parâmetros para tratamento dos dados (tempo inicial e final, número de pontos e algarismos significativos) e retorna um *DataFrame* com os dados importados do arquivo *excel* e de tempos.

Em seguida são definidas as condições iniciais das variáveis dos balanços, o intervalo de integração, o método de integração a ser usado para a resolução do modelo matemático e as tolerâncias relativas e absolutas (*rtol* e *atol*). São também definidos os parâmetros para o ajuste das curvas do modelo, sendo esses armazenados em uma variável do tipo *Parameters*, contendo para cada parâmetro seu nome, valor inicial e, para o caso de possibilidade de variação deste parâmetro, a faixa de valores aceitável – mínimo e máximo). Define-se então o método de minimização a ser utilizado e, a partir deste ponto, é realizada a modelagem propriamente dita para três casos: otimizando os dados para produto, otimizando os dados para substrato e otimizando os dados para ambos produto e substrato.