# 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.

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

( 1 )

( 2 )

( 3 )

No balanço de substrato, não há termo de geração e o consumo é descrito através da cinética de Monod, conforme apresentada na Equação 4:

( 4 )

Assim, substituindo a Equação 4 na Equação 1, introduzindo um parâmetro de rendimento de biomassa por substrato consumido, *YX/S*, obtém-se:

( 5 )

Por vez, no balanço de biomassa, optou-se por descrever a reação de geração em função do consumo de substrato. Introduziu-se também um termo de consumo representando o decaimento de biomassa através de uma reação de primeira ordem, resultando na Equação 6.

( 6 )

Por fim, no balanço do componente *P*, não há termo de consumo e descreve-se a geração de produto com a introdução de um parâmetro de rendimento de biogás por substrato consumido, *YP/S*, obtendo-se a Equação 7:

( 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:

( 8 )

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 9. 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 10.

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 |  |  |  |  |

( 9 )

( 10 )

## Fluxo computacional

A primeira função definida é a modelo(), que recebe três argumentos: t, x e parâmetros. Essa função retorna um vetor contendo as variáveis *dS\_dt*, *dX\_dt* e *dP\_dt*, que são calculadas a partir do balanço de componentes do modelo em processo contínuo. Para esse cálculo, utiliza-se o vetor **x**, que contém as condições iniciais de cada componente e o vetor **parâmetros**, que contém os valores dos parâmetros. Destaca-se aqui que a concentração de substrato na corrente de entrada foi incluída no vetor **parâmetros** como *S\_in*.