# 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:

Equação 1 Equação 2 Equação 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:

Equação 4

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

Equação 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.

Equação 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:

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*

## Fluxo computacional

A primeira função definida é a modelo(), que recebe três argumentos: t, x e parâmetros. Dentro desse bloco de código são declaradas as variáveis dS\_dt, dX\_dt e dP\_dt, sendo calculadas