

GUSTAVO CHAVES TANAKA

Modelagem matemática da biodigestão anaeróbica em um
biodigestor indiano, análise de estabilidade assintótica e otimização
de variáveis de controle através da heurística VNS

BAURU/SP

Julho/2024

GUSTAVO CHAVES TANAKA

Modelagem matemática da biodigestão anaeróbica em um
biodigestor indiano, análise de estabilidade assintótica e otimização
de variáveis de controle através da heurística VNS

Texto de Tese de Doutorado apresentado ao
Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Elétrica, da Universidade Estadual Paulista
“Júlio de Mesquita Filho“, Campus de Bauru,
como requisito para a obtenção do título de
Doutor em Engenharia Elétrica.

Linha de Pesquisa: Sistemas de Energia.

Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"- Faculdade de Engenharia de
Bauru – FEB - Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica

Orientador: Prof. Adj. Antonio Roberto Balbo

Co-Orientadora: Profa. Dra. Célia Aparecida dos Reis

BAURU/SP

Julho/2024

Tanaka, Gustavo Chaves.

Modelagem matemática da biodigestão anaeróbica em um biodigestor indiano, análise de estabilidade assintótica e otimização de variáveis de controle através da heurística VNS / Gustavo Chaves Tanaka. - Bauru, 2024 78 f. : il.

Tese (Doutorado) - Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia, Bauru, 2024

Orientador: Antonio Roberto Balbo

Co-orientadora: Célia Aparecida dos Reis

1. Biodigestão. 2. Biodigestor Indiano. 3. Biogás. 4. Estabilidade Assintótica. 5. Teoria de Lyapunov. 6. Otimização de Variáveis de Controle. 7. Heurística VNS. I. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia. II. Título.

AGRADECIMENTOS

A realização deste trabalho não teria sido possível sem o apoio incondicional e as bênçãos que recebi ao longo desta inspiradora jornada. Em primeiro lugar, sou profundamente grato a Deus, cuja presença constante em minha vida me proporcionou a condição de existir e uma infinidade de ensinamentos que têm sido fundamentais para a minha trajetória

Agradeço de coração à minha mãe, Luiza Maria Chaves Tanaka, por ser um firme pilar de apoio em todos os momentos, por me inculcar valores essenciais e por sempre manter a crença em meu potencial, mesmo nos períodos de dúvida. Ao meu pai, Luis Tanaka, sou igualmente grato por sua dedicação e pelo suporte emocional e financeiro que foram imprescindíveis para a realização da minha formação. Minhas irmãs, Carla e Camila, igualmente merecem reconhecimento, pois seu carinho e apoio nas decisões que tomei foram determinantes para que eu pudesse avançar confiantemente.

Dirijo um agradecimento especial ao meu orientador, Professor Dr. Antonio Roberto Balbo, cuja paciência, sabedoria e cuidado proporcionaram um ambiente seguro e otimista para o meu desenvolvimento acadêmico e profissional. Da mesma forma, expresso minha gratidão à minha co-orientadora, Professora Dra. Célia Aparecida dos Reis, cujos ensinamentos teóricos e práticos enriqueceram minha formação.

Não posso deixar de mencionar a colaboradora Helenice Florentino da Silva, cuja capacidade de compartilhar ideias valiosas foi um acréscimo significativo ao meu trabalho. Agradeço também aos meus amigos, que sempre torceram por mim e mantiveram viva a chama da motivação, com um agradecimento especial ao Felipe Telles, pela inestimável assistência ao longo do desenvolvimento da minha pesquisa.

Por fim, expresso minha sincera gratidão ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e a todos os professores que contribuíram para a minha formação. As oportunidades e os conhecimentos adquiridos durante este percurso foram essenciais para o meu crescimento acadêmico e profissional.

A todos que, de alguma forma, fizeram parte desta jornada, deixo meu mais sincero agradecimento.

"Cada tentativa. Cada falha. Não importa. Tente de novo. Falhe de novo. Falhe melhor."

(Samuel Beckett)

IMPACTO POTENCIAL DESSA PESQUISA

A pesquisa em questão estabelece uma conexão entre as áreas de engenharia elétrica em sistemas de energia e a bioengenharia, oferecendo contribuições para os avanços na modelagem matemática e na otimização de processos biotecnológicos. O emprego de técnicas importantes, como a teoria de Lyapunov voltada para a análise de estabilidade e a heurística de VNS (Variable Neighborhood Search) para a otimização do sistema de biodigestores, ressalta a natureza interdisciplinar deste trabalho, que reúne conhecimentos provenientes da matemática aplicada, engenharia elétrica e biotecnologia.

Além de sua relevância, a pesquisa fornece uma base sólida para futuras investigações relacionadas à otimização de sistemas de energia renovável associada a biodigestores e à gestão de resíduos, áreas de crescente importância no contexto das necessidades energéticas globais e da sustentabilidade ambiental. Nesse sentido, as implicações às quais este trabalho se propõe são relevantes, visto que a busca por fontes de energia limpa e a gestão eficiente de resíduos são desafios cruciais na contemporaneidade.

O trabalho realizado oferece uma análise detalhada da biodigestão anaeróbica em biodigestores indianos, abordando aspectos que vão desde a modelagem matemática até a otimização das variáveis de controle envolvidas no processo. Essa abordagem é abrangente e estruturada, evidenciando uma fundamentação teórica sólida, que é complementada pela validação dos resultados através de simulações computacionais realizadas. Os métodos de validação são essenciais para garantir a confiabilidade das conclusões, permitindo que os resultados encontrados sejam reproduzidos e aplicados em cenários práticos.

A aplicação prática desta pesquisa demonstra um potencial significativo que contribui para a eficiência energética e para a produção sustentável de biogás. A eficiência energética, particularmente em sistemas de biodigestão, é um aspecto importante para a viabilidade econômica e ambiental dos processos biotecnológicos. Ao otimizar as variáveis de controle e implementar técnicas de modelagem matemática pode-se maximizar a produção de biogás através do reaproveitamento dos resíduos gerados, promovendo assim uma abordagem sustentável. A abordagem matemática e computacional apresentada oferece uma ferramenta de interesse para a melhoria da eficiência de biodigestores, com os seguintes impactos:

- **Econômico:** Redução de custos de produção de energia através da otimização dos processos de biodigestão, tornando a geração de biogás mais eficiente e competitiva.
- **Ambiental:** Redução das emissões de poluentes e aproveitamento de resíduos orgânicos, contribuindo para a sustentabilidade e a preservação ambiental.
- **Social:** Promoção do uso de tecnologias limpas e renováveis, melhorando a qualidade de vida das comunidades que adotam biodigestores para a geração de energia e gestão de resíduos.

Ao propor a geração de energia a partir de biodigestores indianos, através de um modelo baseado em sistemas de equações diferenciais ordinárias, busca-se auxiliar na melhoria da eficiência energética e na produção de energia limpa, que pode ser uma alternativa à geração térmica, impactando em uma redução de custos de produção enquanto se atende à demanda de energia, bem como ao meio ambiente, com a redução de poluentes emitidos na natureza. Em síntese, este trabalho interrelaciona as áreas de engenharia elétrica em sistemas de energia e a biotecnologia, unindo teoria, prática e inovação, objetivando a gestão de resíduos sólidos, a produção de biogás, a sustentabilidade e a eficiência energética, que possibilitam uma alternativa sustentável para a produção e consumo de energia.

POTENTIAL IMPACT OF THIS RESEARCH

The research in question establishes a connection between the fields of electrical engineering in energy systems and bioengineering, offering contributions to advances in mathematical modeling and the optimization of biotechnological processes. The application of significant techniques, such as Lyapunov theory for stability analysis and Variable Neighborhood Search (VNS) heuristics for optimizing biodigester systems, highlights the interdisciplinary nature of this work, which integrates knowledge from applied mathematics, electrical engineering, and biotechnology.

In addition to its relevance, the research provides a solid foundation for future investigations related to the optimization of renewable energy systems associated with biodigesters and waste management, areas becoming increasingly important in the context of global energy needs and environmental sustainability. In this regard, the implications posed by this work are significant, as the search for clean energy sources and efficient waste management are critical challenges in contemporary society.

The conducted work offers a detailed analysis of anaerobic digestion in Indian biodigesters, addressing aspects ranging from mathematical modeling to the optimization of the control variables involved in the process. This approach is comprehensive and structured, demonstrating a solid theoretical foundation, which is further complemented by the validation of results through conducted computer simulations. Validation methods are essential to ensure the reliability of the conclusions, allowing the findings to be replicated and applied in practical scenarios.

The practical application of this research demonstrates significant potential that contributes to energy efficiency and sustainable biogas production. Energy efficiency, particularly in anaerobic digestion systems, is an important aspect for the economic and environmental viability of biotechnological processes. By optimizing control variables and implementing mathematical modeling techniques, biogas production can be maximized through the reuse of waste generated, thus promoting a sustainable approach. The mathematical and computational approach presented offers a tool of interest for improving the efficiency of digesters, with the following impacts:

- **Economic:** Reduction of energy production costs through the optimization of digestion processes, making biogas generation more efficient and competitive.
- **Environmental:** Reduction of pollutant emissions and utilization of organic waste, contributing to sustainability and environmental preservation.

- Social: Promotion of the use of clean and renewable technologies, improving the quality of life for communities that adopt digesters for energy generation and waste management.

By proposing energy generation from Indian digesters, through a model based on systems of ordinary differential equations, this work seeks to assist in improving energy efficiency and producing clean energy, which can be an alternative to thermal generation, impacting cost reduction while meeting energy demand and benefiting the environment by reducing pollutants emitted into nature. In summary, this work interrelates the fields of electrical engineering in energy systems and biotechnology, combining theory, practice, and innovation, aiming at solid waste management, biogas production, sustainability, and energy efficiency, which provide a sustainable alternative for energy production and consumption.

Bauru, 04 de dezembro de 2024.

Prezado Coordenador,

Encaminho a Vossa Senhoria, os exemplares da versão final da Tese de Doutorado do(a) aluno(a) **Gustavo Chaevs Tanaka**, RG 43.715.071-9, do Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica, no Curso de Doutorado, intitulado "**Modelagem matemática da biodigestão anaeróbica em um biodigestor indiano, análise de estabilidade assintótica e otimização de variáveis de controle através da heurística VNS**", com as devidas alterações solicitadas pela Banca Examinadora.

Sem mais para o momento, aproveito a oportunidade para renovar protestos de consideração.

Atenciosamente,

Documento assinado digitalmente
 **ANTONIO ROBERTO BALBO**
Data: 04/12/2024 18:00:47-0300
Verifique em <https://validar.ti.gov.br>

Antonio Roberto Balbo
Orientador(a)

Ilmo Senhor

Coordenador do Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica.

RESUMO

Atualmente, a pesquisa sobre fontes de energia limpa e renovável tem se destacado na busca por alternativas que auxiliem no atendimento da demanda crescente de energia, bem como à preservação ambiental, principalmente para a diminuição dos impactos ambientais causados por fontes de energia que exploram combustíveis fósseis. A geração de energia que utiliza resíduos sólidos, através do processo de biodigestão da matéria orgânica e produção do biogás, apresenta-se como uma dessas alternativas. Inserem-se nesse contexto, os biodigestores indianos, que são estruturas projetadas para facilitar a conversão de resíduos orgânicos em biogás e biofertilizantes através da ação de um consórcio microbiológico. No bioprocesso, a biodigestão anaeróbia desempenha um papel fundamental, não apenas proporcionando uma alternativa viável aos combustíveis fósseis, mas também contribuindo significativamente para a minimização do impacto ambiental. Este trabalho apresenta uma investigação sobre a modelagem matemática da biodigestão anaeróbica em um biodigestor indiano, explorando metodologias qualitativa e quantitativa, que incluem uma análise de estabilidade assintótica e a otimização de variáveis de controle. A modelagem é fundamentada em um sistema de equações diferenciais ordinárias, que captura dinamicamente o processo de biodigestão anaeróbica e, a partir desta propõe-se um modelo de otimização que maximiza a produtividade de biogás. Para a análise qualitativa, utiliza-se a teoria de Lyapunov, que possibilita a determinação da estabilidade assintótica dos pontos de equilíbrio do sistema e a análise da não negatividade na vizinhança desses pontos. Para a análise quantitativa e validação dos modelos, os resultados numéricos obtidos para a determinação dos pontos críticos, através do software Restudio e para a otimização da produtividade do biogás, através da heurística VNS, mostram a viabilidade destes. O software e a heurística utilizadas caracterizam-se como ferramentas eficientes para identificar soluções de equilíbrio e otimizadas no processo de biodigestão. Assim, as análises performadas confirmam a eficiência da modelagem matemática proposta e dos resultados numéricos obtidos, enquanto a pesquisa realizada contribui para a produção de uma fonte de energia renovável, que se baseia em biodigestores indianos e na produção de biogás.

Palavras-chave: Biodigestão, Biodigestor Indiano, Biogás, Estabilidade Assintótica, Teoria de Lyapunov, Otimização de Variáveis de Controle, Heurística VNS.

ABSTRACT

Currently, research on clean and renewable energy sources is gaining prominence in the search for alternatives to meet the growing energy demand while also preserving the environment, particularly in reducing the environmental impacts caused by energy sources that exploit fossil fuels. Energy generation that utilizes solid waste through the process of anaerobic digestion of organic matter and biogas production stands out as one of these alternatives. In this context, Indian biodigesters are structures designed to facilitate the conversion of organic waste into biogas and biofertilizers through the action of a microbiological consortium. In the bioprocess, anaerobic digestion plays a crucial role, not only providing a viable alternative to fossil fuels but also significantly contributing to minimizing environmental impact. This work presents an investigation into the mathematical modeling of anaerobic digestion in an Indian biodigester, exploring both qualitative and quantitative methodologies, which include an analysis of asymptotic stability and the optimization of control variables. The modeling is based on a system of ordinary differential equations that dynamically captures the process of anaerobic biodigestion, and from this, an optimization model is proposed to maximize biogas productivity. For qualitative analysis, Lyapunov's theory is employed, which allows for the determination of the asymptotic stability of the system's equilibrium points and the analysis of non-negativity in the vicinity of these points. For quantitative analysis and validation of the models, the numerical results obtained for determining critical points, using the Restudio software, and for optimizing biogas productivity through the VNS heuristic, demonstrate their viability. The software and the heuristic utilized are characterized as efficient tools for identifying optimized equilibrium solutions in the biodigestion process. Thus, the analyses conducted confirm the effectiveness of the proposed mathematical modeling and the obtained numerical results, while the research contributes to the production of a renewable energy source based on Indian biodigesters and biogas production.

Keywords: Biodigestion, Indian Biodigester, Biogas, Asymptotic Stability, Lyapunov Theory, Control Variable Optimization, VNS Heuristic.

SUMÁRIO

Introdução	1
Revisão da Literatura	4
Capítulo 1 - Descrição do processo de fermentação e modelagem matemática para a biodigestão em um biodigestor indiano de modo contínuo	11
1.1. Descrição do Processo de biodigestão.....	11
1.2. Descrição do Modelo	16
Capítulo 2 - Análise qualitativa do modelo.....	20
2.1. Lema	20
2.2. Lema	22
2.3. Lema	24
Capítulo 3 - Simulações computacionais	27
Capítulo 4 - Modelo de Otimização	35
4.1. Algoritmo VNS e Resultados Preliminares de Otimização.....	36
Conclusão.....	39
Trabalhos publicados	43
Bibliografia.....	44
Apêndice A - Sistemas autônomos	49
A.1.1 Conceitos básicos: plano de fase, caminhos e pontos críticos.....	49
A.1.2 Tipos de pontos críticos.....	51
A1.3 A estabilidade e a estabilidade assintótica.....	55
A1.4 Pontos críticos e caminhos de sistemas não lineares.	58
A1.5 Teoria de Lyapunov para sistemas não lineares	62
A1.5.1 Linearização de sistemas autônomos.....	63
A1.5.2 Método da linearização de Lyapunov	63
Apêndice B - Heurística VNS.....	65

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Biodigestor canadense.....	13
Figura 2: Biodigestor chinês.....	14
Figura 3: Representação de um biodigestor indiano.....	14
Figura 4: Diagrama de bifurcação do parâmetro ρ_1 em relação à vazão mássica F.....	27
Figura 5: Diagrama de bifurcação do parâmetro ρ_2 em relação à vazão mássica F.....	29
Figura 6: Dinâmica de concentração do substrato durante a biodigestão em diferentes cenários.....	30
Figura 7: Dinâmica de concentração do biogás durante a biodigestão em diferentes cenários.....	31
Figura 8: Dinâmica de concentração do consórcio anaeróbio durante a biodigestão em diferentes enários.....	31
Figura A1.1: Ponto de Centro.....	52
Figura A1.2: O ponto de sela.....	53
Figura A1.3: Ponto de espiral.....	54
Figura A1.4: Os diferentes tipos de pontos em nó: a) plano de fase autovalores negativos. b) autovalores repetidos. c) autovetor repetido com um autovetor associado.....	54
Figura A1.5: Conceito de estabilidade, mas não assintoticamente estável.....	55
Figura A1.6: O conceito estabilidade assintótica.....	56
Figura A1.7: O conceito de instabilidade.....	57
Figura B.1 – Esquema básico do algoritmo VNS.....	65

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Condições iniciais e valores dos parâmetros para o 4º método de Runge-Kutta-Fehlberg.....	29
Tabela 2 - Definição dos parâmetros do Modelo (45) - (51).....	36
Tabela 3 - Valores dos parâmetros do Modelo (45) - (51).....	36
Tabela 4 - Sumário dos resultados obtidos através do VNS para o Modelo (45) - (51).....	37

Introdução

Nos dias atuais o mercado de energia limpa e renovável vem crescendo cada vez mais. Esse movimento ascendente se deve à grande demanda da ciência e da tecnologia em fontes de energia não fósseis, bem como a preservação do meio ambiente e o gerenciamento de resíduos sólidos. Em meio a tantas possibilidades, surge a produção de energia via biogás, oriunda da biodigestão de matéria orgânica. Um meio eficiente e muito utilizado para se obter o biogás é através de biodigestores, os quais são recipientes onde há conversão de um resíduo orgânico em biogás e biofertilizante por um consórcio microbiológico. Neste bioprocessos, a biodigestão anaeróbia é importante e contribui para a produção de biogás como alternativa aos combustíveis fósseis, bem como à preservação ambiental, pois o resíduo ao final da reação tem sua carga orgânica reduzida, menor toxicidade e pode ser descartado com menor impacto no meio ambiente. Atualmente o setor produtivo e o meio acadêmico vêm enfatizando suas pesquisas à produção de energia eficiente e, ao mesmo tempo, com o menor impacto ambiental possível. Esta questão é relevante e de interesse ambiental, social e econômico, além de propiciar pesquisas e trabalhos científicos. Esse tema também é de interesse mundial e influencia o mercado energético, fazendo com que empresas de engenharia e corporativas invistam fundos para a melhoria da qualidade energética de sua produção e distribuição destinada à comunidade. Neste contexto a busca por energias renováveis, na qual é incluído o estudo de biodigestores, tem relevância como fonte de energia limpa, pois, além de ajudar na preservação do meio ambiente, está diretamente associado à produção de bioenergia e biofertilizantes (ANDRADE, 2002; BISCARO, 2008; PORTES, 2005; TANAKA, 2018).

A biodigestão é um sistema bioquímico no qual os microrganismos consomem substratos orgânicos complexos sob condições anóxicas dentro de um reator de diferentes tamanhos e geometrias, denominado biodigestor (ZHANG et al, 2016; ROMERO-GÜIZA et al, 2016; FAGBOHUNGBE et al, 2017).

Este bioprocessos desempenha um papel importante no tratamento biológico de resíduos orgânicos, pois os consórcios microbianos no biodigestor podem reduzir a carga orgânica do efluente, evitando os efeitos de

eutrofização quando o resíduo processado é lançado no meio ambiente (MEIER et al, 2020; SHEN et al, 2016).

O bioprocesso representa uma alternativa importante para a geração de energia renovável, uma vez que o biogás produzido no biodigestor é rico em metano, hidrogênio, dióxido de carbono e outras substâncias que juntas formam um gás combustível que pode alimentar um gerador (Ho et al, 2018). O impacto desta tecnologia no campo energético é notório, principalmente devido à falta de combustíveis fósseis e à necessidade de substituição da matriz energética por fontes de energia renováveis e limpas.

A produção de biogás via digestão anaeróbica é auspiciosa, pois este bioprocessos requer insumos de baixo valor agregado, é realizado à temperatura e pressão ambiente e os resíduos da fermentação podem ser utilizados como biofertilizante. O substrato, ou insumo, é qualquer matéria orgânica, por exemplo, lixo doméstico, restos de comida (WANG et al, 2018; ZHANG et al, 2016), águas residuais, resíduos da indústria de laticínios (FONTANA et al, 2018), esterco animal) bagaços e vinhaça. O consumo dos substratos é realizado por diversos grupos de microrganismos em uma sequência de reações, como hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese, dentro do biodigestor (FONTANA et al, 2018; LI, 2019; BATSTONE, 2014).

Vários tipos de biodigestores podem ser utilizados para geração de biogás. Dentre os tipos de biodigestores comercializados, o indiano está mais relacionado à produção de energia em pequenas propriedades, como chácaras e vilas, lugares em que o biogás é frequentemente utilizado para gerar eletricidade ou para consumo. Este modelo de biodigestor difere dos demais por conter uma parede divisória dentro do fermentador, que garante que a biomassa fermentada saia do reator, devido à perda de densidade (BISCARO, 2008). O biodigestor indiano geralmente não possui sistema de agitação mecânica e depende da movimentação natural dos resíduos para promover a digestão anaeróbica, caracterizando-o como menos complexo que outros modelos que necessitam de mistura e agitação. De acordo com Moura et al (2017), este modelo é construído em formato cilíndrico, feito de alvenaria ou pedra e um gasômetro flutuante de aço é fixado na parte superior do tanque. Acima do solo existe uma

caixa de entrada que recebe os resíduos para tratamento biológico e uma caixa de saída que recebe o biofertilizante.

Para controlar e aumentar a eficiência da digestão anaeróbica, a modelagem matemática e simulação computacional representam uma importante alternativa e ferramenta de análise, pois evita o excesso de ensaios experimentais e, portanto, reduz o custo de produção. Diferentes técnicas e abordagens podem ser aplicadas para desenvolver modelos matemáticos para o problema da biodigestão e definir as melhores condições para operação, como redes neurais artificiais, algoritmo genético, estimativa de parâmetros e sistemas dinâmicos (KANA et al, 2012; NEBA et al, 2020; ORDINEZ et al, 2013; QDAIS et al, 2010). Essas técnicas avançadas oferecem uma abordagem robusta para investigar e decifrar as complexidades inerentes ao processo de biodigestão. Elas permitem aos cientistas e engenheiros não apenas analisar os mecanismos subjacentes que regem o bioprocesso, mas também interpretar de maneira eficaz os dados resultantes de experimentos. Mais do que isso, essas técnicas possibilitam a previsão do comportamento do processo de biodigestão com base nos dados experimentais coletados, contribuindo para uma compreensão mais profunda e aplicação mais eficiente do processo.

Do ponto de vista teórico, é igualmente crucial demonstrar que um modelo matemático proposto é capaz de capturar com precisão as nuances de um processo biológico. Isso envolve a realização de análises matemáticas detalhadas, que incluem, mas não se limitam a examinar as propriedades de estabilidade do sistema modelado. Essas propriedades são essenciais para entender como o sistema responde a perturbações e se ele é capaz de retornar a um estado de equilíbrio após tais perturbações.

Além disso, a análise do controle do sistema é importante para determinar como diferentes parâmetros influenciam o processo de biodigestão e como esses parâmetros podem ser ajustados para otimizar o bioprocesso. Por fim, é vital garantir que as soluções matemáticas obtidas sejam fisicamente plausíveis, o que significa que elas devem sempre ser não negativas, já que representam quantidades biológicas que não podem ser negativas na realidade, como concentrações de biomassa, substratos e produtos. Ao garantir a não negatividade dessas soluções, os

modelos tornam-se representações mais confiáveis e aplicáveis do processo biológico em questão (JIANG ET AL, 2015).

Nesse sentido, este trabalho propõe uma análise mais detalhada e completa sobre o modelo proposto em Tanaka (2018) sobre o modelo matemático que descreve o processo de fermentação de resíduos orgânicos em biogás via biodigestão e sua análise de propriedades calóricas, como a estabilidade de suas soluções de equilíbrio e a análise de autovalores do modelo para a determinação de soluções de equilíbrio deste. Os resultados apresentados aqui fornecem *insights* sobre a dinâmica do bioprocesso, além de informações para o planejamento do processo e controle e otimização da produção de biogás.

Baseando-se em Balmant (2009), Biscaro (2012), Bassanezi & Ferreira Junior (1988), Khan (2013), Schmidell (2001) e Tanaka (2018), nesse trabalho é analisado um modelo matemático não linear de biodigestão em um biodigestor indiano, que relaciona produção de biogás, concentração de bactérias e a variação de substrato dentro do reator, considerando o processo de biodigestão anaeróbica, a ação de bactérias nos substratos ao longo do tempo e a produção de biogás no interior deste. Essa análise se diferencia do trabalho realizado em Tanaka (2018) devido às análises da não negatividade das soluções do sistema de equações, cálculo dos limitantes e do terceiro ponto crítico, validação numérica das condições de estabilidade do sistema e uma proposta de modelo para otimizar a produção de biogás.

Revisão da Literatura

Nesta seção, apresentamos uma revisão aprofundada de vários artigos científicos focados na modelagem matemática da digestão anaeróbica (AD) e na análise de estabilidade em sistemas dinâmicos não lineares. Esta revisão tem como objetivo explorar diferentes abordagens e avanços na área, fornecendo uma fundamentação sólida sobre como a modelagem matemática pode otimizar a produção de biogás e melhorar a eficiência dos processos de digestão anaeróbica.

De acordo com o estudo realizado por Moura et al. (2017), o desenvolvimento de um sensor inovador baseado em um observador de estado adaptativo e sensores de pressão física para a avaliação precisa de biomassa em

reatores anaeróbios. O sensor desenvolvido permite uma análise detalhada das condições de operação dos biodigestores, facilitando a simulação precisa das concentrações de biomassa e contribuindo para a validação experimental do modelo matemático proposto. Este avanço é crucial para monitorar e ajustar as condições do processo em tempo real, melhorando a eficiência e estabilidade do sistema de digestão anaeróbica.

O estudo realizado por Moura et al. (2017) investiga a relevância dos biodigestores na produção de biogás e biofertilizantes. A pesquisa utiliza um protótipo de biodigestor indiano e analisa sua eficácia na produção de biogás e biofertilizantes. Os experimentos conduzidos demonstram que o biofertilizante produzido no biodigestor tem um impacto significativo no crescimento de girassóis, evidenciando o potencial de biodigestores não apenas na geração de energia, mas também na recuperação de resíduos e na agricultura sustentável.

No trabalho de Schmaedecke et al. (2021) é apresentado um estudo focado na modelagem matemática e computacional de um biodigestor, utilizando o modelo matemático contínuo adaptado para uso em batelada. O objetivo é ampliar os parâmetros aplicáveis e explorar diferentes espécies de digestores. O modelo considera variáveis como a composição da matéria orgânica, tempo de alimentação inicial, tempo de retenção e produção de biogás em intervalos específicos. A adaptação do modelo contínuo ao modo em batelada permite uma flexibilidade maior no estudo de diferentes condições operacionais e matérias-primas, maximizando o rendimento de biogás.

No artigo de Freitas et al. (2019) são discutidas as principais tecnologias empregadas na produção de biogás, incluindo o uso de biodigestores para extrair biogás de resíduos orgânicos. O artigo realiza uma comparação entre diferentes tecnologias de geração distribuída de energia elétrica a partir de biogás no mercado brasileiro, apresentando um estudo de caso da usina de biogás na Fazenda Colombari e sua integração com a rede elétrica. O estudo destaca a importância da recuperação de resíduos de biomassa e da digestão anaeróbica para a geração de eletricidade, contribuindo para a implementação de políticas ambientais e sociais no Brasil.

A análise comparativa destes estudos com trabalhos específicos sobre a utilização do método de Lyapunov na análise de estabilidade de biodigestores anaeróbicos, como o estudo de Machado-Higuera (2021), aprimora nossa compreensão da modelagem matemática e estabilidade dos processos de digestão anaeróbica. Machado-Higuera utiliza o método de Lyapunov para analisar a estabilidade de sistemas de biodigestão, proporcionando uma nova perspectiva sobre como garantir a operação estável e eficiente dos biodigestores.

A combinação dessas abordagens permite uma visão mais holística do processo de digestão anaeróbica, enfatizando a importância de modelos matemáticos robustos e técnicas de monitoramento avançadas para o sucesso da produção de biogás. A integração de diferentes métodos e conhecimentos adquiridos por meio desses estudos é fundamental para desenvolver sistemas de produção de biogás mais eficientes e sustentáveis, que são vitais para um futuro energeticamente sustentável.

Em resumo, os artigos revisados sublinham a importância da modelagem matemática precisa e da análise de estabilidade para otimizar o processo de digestão anaeróbica. Eles fornecem insights valiosos sobre diferentes tipos de matéria-prima, processos microbianos e modelos matemáticos que podem ser usados para simular e otimizar a produção de biogás. A aplicação dessas modelagens pode resultar em sistemas de biodigestão mais eficientes, permitindo uma melhor recuperação de resíduos e maior produção de energia renovável. Este conhecimento é essencial para promover a sustentabilidade e enfrentar os desafios ambientais atuais, contribuindo para a implementação de políticas energéticas e ambientais mais eficazes.

Com base no estudo de Freitas et al. (2019), o biodigestor indiano tem sido amplamente adotado para a produção de biogás no Brasil, especialmente nas regiões nordeste e sudeste. Devido ao seu uso extensivo e influência, este biodigestor foi selecionado como foco para a modelagem de produção de biogás proposta neste estudo.

Os parâmetros de dimensionamento dos biodigestores utilizados nesta pesquisa foram derivados de práticas observadas no Brasil, conforme documentado por Calza et al. (2015). Essas práticas foram ajustadas para quatro diferentes

capacidades de biofertilizante (20, 40, 80 e 120 m³), frequentemente empregadas no contexto brasileiro.

De acordo com BGS Equipamentos (2024), biodigestores são amplamente utilizados em todo o mundo. Na Alemanha, a planta de biogás em Könnern é um projeto significativo que distribui biometano para áreas remotas. A planta colabora com agricultores e pecuaristas locais para gerar biogás a partir de resíduos agrícolas e animais. A Alemanha objetiva substituir usinas nucleares por fontes renováveis, incluindo biogás. Em Santiago, Chile, La Farfana opera a maior estação privada de tratamento de efluentes, produzindo biogás utilizado para aquecimento e como gás natural. A empresa planeja expandir o uso de gás natural em veículos, visando abastecer 2.700 veículos, representando cerca de 80% da frota de veículos movidos a gás natural em Santiago. A planta de biogás Tuviya em Israel gera eletricidade a partir de resíduos animais e produz biofertilizante. A planta melhorou as condições socioambientais da região e é a mais nova e maior planta de biogás em Israel. Na Austrália, a planta Tatura gera eletricidade a partir de esgoto e reduziu significativamente as emissões de gases de efeito estufa. O projeto foi desenvolvido através de uma parceria entre o governo e a iniciativa privada. No Quênia, uma ONG local, em parceria com a ONU, está construindo pequenos edifícios com instalações sanitárias em Kimera. Os resíduos humanos são coletados e usados para produzir biogás para cozimento. A iniciativa contribuiu para a conscientização sobre a geração de biogás e melhorou as condições insalubres dos espaços públicos. Na China, há dois projetos notáveis de biodigestores. A planta de GNC da Aning Starch em Naning produz biogás a partir de amido e efluentes de processamento de amido, fornecendo combustível para táxis. O Eco-Garden 2 de Beijing Yanqing Deqingyuan recebe diariamente resíduos de aves e fornece biogás para cocção às famílias locais.

Além da importância dos biodigestores para a produção de biogás e biofertilizantes no Brasil, todos os países mencionados de diversos continentes do planeta que exploram biodigestores demonstram a relevância desses sistemas para a produção de energia limpa. Isso justifica a modelagem proposta neste trabalho e sua análise para a produção de biogás, considerando os biodigestores indianos.

O modelo matemático que descreve o processo de biodigestão anaeróbica em biodigestores pode ser representado através de um sistema dinâmico de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's) (TANAKA, 2018). Para a investigação e análise de soluções exatas do modelo, utilizou-se como ferramenta matemática a teoria de sistemas dinâmicos, estudando-se os conceitos básicos de sistemas dinâmicos autônomos e a investigação de seus pontos críticos de acordo com a teoria de Lyapunov, revista em Monteiro (2006), Silva (2003) e Slotine (1991).

Para a validação numérica dos resultados obtidos ao modelo proposto e de simulações numéricas foi utilizado o pacote computacional RStudio (MLADENOVIC & HANSEN, 1997). Essas possibilitaram a construção e análise do espaço de fase e do histórico no tempo relativo às variáveis de estado do modelo, as quais são: concentração de bactérias, produção de biogás e concentração de substrato. Para o modo de otimização, foi realizada a aproximação da curva solução da produtividade de biogás pelo método do trapézio, baseado no trabalho de co-autoria apresentado em Teles & Tanaka et al (2019).

Os objetivos principais desta pesquisa são: i) a análise qualitativa do modelo proposto em Tanaka (2018). Tal análise consiste na determinação do terceiro ponto crítico, na análise de sua estabilidade assintótica via técnica de Lyapunov e prova da não negatividade das soluções das equações de estado do sistema; ii) a análise quantitativa de um modelo matemático que explora a relação entre concentração de bactérias, produção de biogás e concentração de substrato; iii) a proposta de um modelo de otimização da variável de controle relativa à produtividade do biogás e a sua resolução por meio da heurística VNS (Variable Neighborhood Search, Mladenovic & Hansen). Métodos de integração numérica, tal como a regra do trapézio, para a aproximação da função objetivo de produtividade de biogás, foram utilizados associados à heurística citada para a obtenção de resultados preliminares do modelo de otimização proposto.

A estrutura da pesquisa é dividida em etapas, começando com uma análise qualitativa do modelo proposto. Esta fase examina as variáveis de estado, como a concentração de substrato (S), a concentração de microrganismos (X) e a produção de biogás (P). O modelo de Monod, que descreverá a taxa de crescimento dos microrganismos em função da concentração de substrato, servirá como uma base

crucial para entender as interações no ambiente do biodigestor. As equações que compõem esse modelo são elaboradas para capturar a complexidade das interações microbiológicas e os fluxos de massa envolvidos no processo.

O primeiro capítulo detalha o modelo matemático, onde se discute a implementação das EDO's para mapear a dinâmica dentro do biodigestor. Este modelo não linear é uma representação aproximada da realidade, que permite explorar a relação entre as variáveis que influenciam a produção de biogás. Durante essa fase, a rigidez do sistema e a natureza não linear das equações são investigadas, possibilitando uma compreensão das interações que regem a biodigestão anaeróbica.

No segundo capítulo, a análise qualitativa do modelo é realizada minuciosamente. Essa análise permite assegurar que as concentrações das variáveis de estado se mantenham dentro de limites viáveis, evitando resultados fisicamente não plausíveis, como concentrações negativas. Adicionalmente, os pontos de equilíbrio são identificados e classificados, permitindo uma compreensão das condições sob as quais o sistema pode operar de forma estável. A teoria de Lyapunov é aplicada para investigar a estabilidade das soluções de equilíbrio, trazendo uma perspectiva rigorosa sobre a confiabilidade do modelo.

Como uma continuidade necessária para o avanço da pesquisa, o terceiro capítulo se dedica a experimentos computacionais, os quais utilizam o método de Runge-Kutta-Fehlberg de quarta ordem implementado no software Restúdio. Estes experimentos são fundamentais, pois possibilitam a validação numérica das soluções analíticas encontradas anteriormente. A eficácia do modelo é testada em condições diversas, analisando como os parâmetros influenciam as soluções de equilíbrio e a produtividade do biogás.

A partir da validação do modelo, o quarto capítulo introduz uma abordagem de otimização utilizando a heurística de Busca em Vizinhança Variável (VNS). Essa metodologia é aplicada para ajustar as variáveis de controle do sistema, visando maximizar a produção de biogás. Os resultados preliminares sugerem que a utilização da heurística VNS mostra-se eficaz na identificação de configurações que favorecem a otimização do processo de biodigestão, evidenciando a flexibilidade e confiabilidade do modelo estabelecido.

A metodologia aplicada pela pesquisa combina a modelagem matemática com técnicas analíticas e computacionais de interesse. Ao adotar um sistema de EDO's para descrever a dinâmica do biodigestor, aliado a análises de estabilidade e otimização, a pesquisa estabelece uma fundamentação sólida para futuras investigações na área. As simulações numéricas não apenas validam o modelo, mas também oferecem informações valiosas sobre as interações dinâmicas que ocorrem no bioprocessos.

Os resultados alcançados revelam não apenas a viabilidade do modelo matemático proposto, mas também a eficácia das abordagens de análise, via teoria de Lyapunov, e otimização implementadas. As conclusões obtidas através da análise de estabilidade oferecem *insights* sobre as condições que garantem soluções de equilíbrio estáveis e sustentáveis. Ademais, a otimização das variáveis de controle, embasada na heurística VNS, proporciona um caminho promissor para maximizar a produtividade de biogás, contribuindo assim para a ampliação do uso de fontes de energia renovável.

Capítulo 1 - Descrição do processor de fermentação e modelagem matemática para a biodigestão em um biodigestor indiano de modo contínuo

Nesta seção, será apresentada uma descrição do processo de biodigestão anaeróbica em biodigestores, justificando sua importância para a modelagem matemática que será desenvolvida, com sutis alterações, sobre o modelo proposto em Tanaka (2018) de biodigestão anaeróbica em um biodigestor indiano que se apoia na estrutura e nas condições de um reator de modo contínuo. A compreensão do processo de biodigestão anaeróbica é fundamental para o entendimento das reações químicas e biológicas que ocorrem dentro do biodigestor, o que será essencial para a criação de um modelo matemático que possa prever e otimizar o desempenho do biodigestor. Além disso, a biodigestão anaeróbica é uma tecnologia que ganha cada vez mais importância nos últimos anos devido à sua capacidade de produzir biogás, um combustível renovável e não poluente, a partir de resíduos orgânicos.

1.1. Descrição do Processo de biodigestão

O processo de biodigestão anaeróbica representa uma estratégia eficiente para a degradação de materiais orgânicos em um ambiente isento de oxigênio. Esse método microrganismos promove a conversão de resíduos orgânicos em biogás, composto principalmente por metano (CH_4) e dióxido de carbono (CO_2). Além da produção de biogás, um dos resultados desse processo é a formação de biofertilizante, que é um composto rico em nutrientes, contribuindo para a melhoria da qualidade do solo e a redução de resíduos. Conforme destacado por Santos et al. (2020), a biodigestão anaeróbica é um processo que ocorre em quatro etapas fundamentais: hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese.

Durante a etapa de hidrólise, os microrganismos atuam na decomposição dos materiais orgânicos, transformando-os em moléculas mais simples, como açúcares e aminoácidos, que são essenciais para as fases subsequentes do processo. Cada etapa subsequente do processo de biodigestão constrói-se sobre os produtos gerados na fase anterior, resultando em um ciclo eficiente de conversão de biomassa em energia e nutrientes. Essa sequência de reações não apenas maximiza a

recuperação de energia por meio da produção de biogás, mas também garante a minimização de resíduos orgânicos, promovendo práticas sustentáveis que podem ser benéficas tanto ambientalmente quanto economicamente. (Angelidaki et al., 2018). Assim como explica o esquema a seguir:

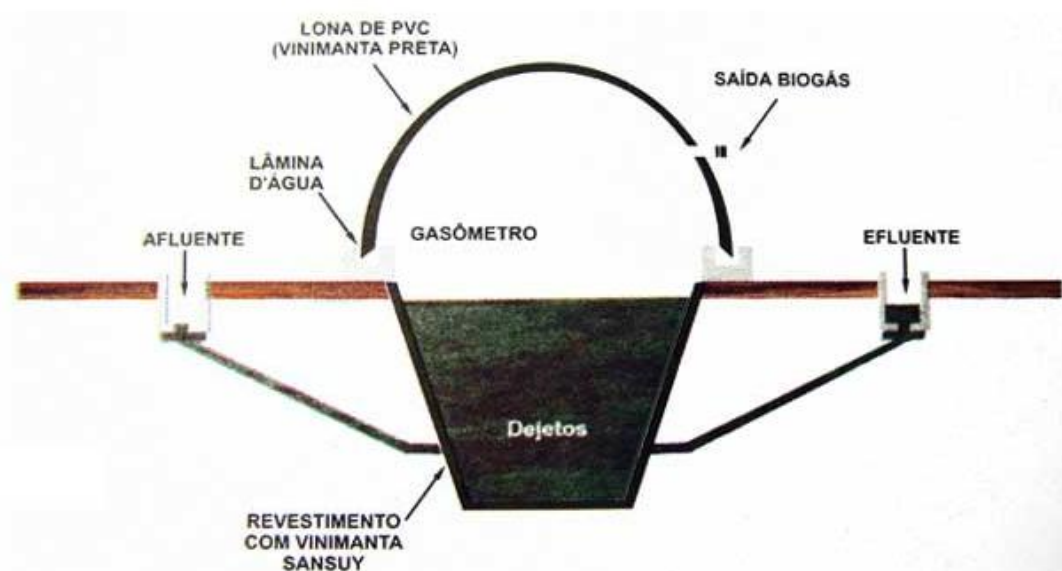
1. **Atividade Microbiana:** Dentro do biodigestor, microrganismos anaeróbicos começam a decompor a matéria orgânica. Este processo envolve várias etapas, incluindo a hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese:
 - **Hidrólise:** A matéria orgânica complexa é quebrada em compostos mais simples, como açúcares e aminoácidos.
 - **Acidogênese:** Os compostos simples são convertidos em ácidos voláteis, hidrogênio e dióxido de carbono.
 - **Acetogênese:** Os ácidos voláteis são convertidos em acetato, hidrogênio e dióxido de carbono.
 - **Metanogênese:** Os metanogênicos convertem o acetato e o hidrogênio em metano e dióxido de carbono.
2. **Produção de Biogás:** O biogás gerado, que contém metano, pode ser utilizado como fonte de energia. A quantidade de biogás produzido depende da composição do substrato e das condições operacionais do biodigestor.
3. **Digestato:** O material restante após a digestão é chamado de digestato, que pode ser utilizado como fertilizante.

Existem vários tipos de biodigestores, cada um com suas características e aplicações específicas. Os biodigestores podem ser classificados em dois grupos principais: os biodigestores de batelada e os biodigestores contínuos. Os biodigestores de batelada são projetados para operar em lotes, onde o substrato é adicionado e retido no biodigestor por um período prolongado, antes de ser substituído por um novo lote. Já os biodigestores contínuos são projetados para operar de forma contínua, onde o substrato é adicionado e o biogás é coletado de forma contínua (Liu et al., 2020). Além disso, os biodigestores podem ser classificados em dois tipos principais: os biodigestores de fluxo vertical e os biodigestores de fluxo horizontal. Os biodigestores de fluxo vertical são projetados

para operar em regime de fluxo vertical, onde o substrato é adicionado no topo e o biogás é coletado na parte inferior. Já os biodigestores de fluxo horizontal são projetados para operar em regime de fluxo horizontal, onde o substrato é adicionado em um extremo e o biogás é coletado no outro extremo.

Um exemplo bem utilizado de biodigestor de modo batelada é o Biodigestor Canadense que é essencialmente composto por um corpo cilíndrico, um gasômetro flutuante e uma estrutura de suporte para o gasômetro. Esse sistema pode incluir um mecanismo de trave e roldana, caracterizando uma solução simples que não demanda grandes preocupações operacionais, conforme ilustrado na Figura 1 (PORTES, 2005).

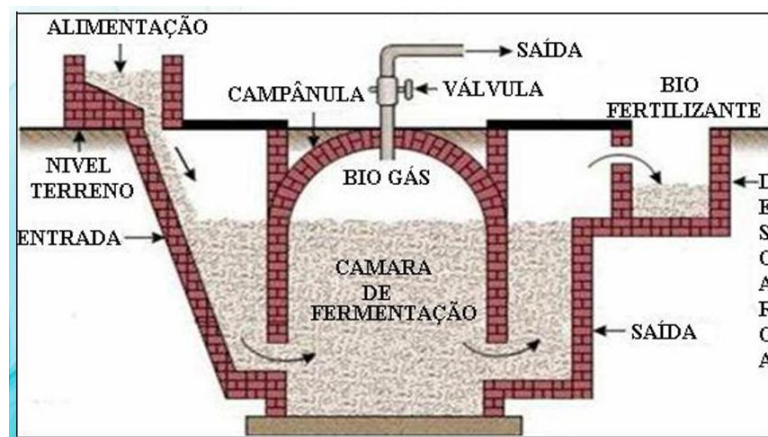
Figura 1: Biodigestor canadense



Fonte: (BALMANT, 2009)

Já os exemplos de biodigestores em modo contínuo mais utilizados são os chineses e os indianos. Segundo Portes (2005), o biodigestor chinês é constituído de um tanque cilíndrico de alvenaria, duas calotas esféricas, caixa de entrada, caixa de saída e uma boca de inspeção, veja Figura 2.

Figura 2: Biodigestor chinês

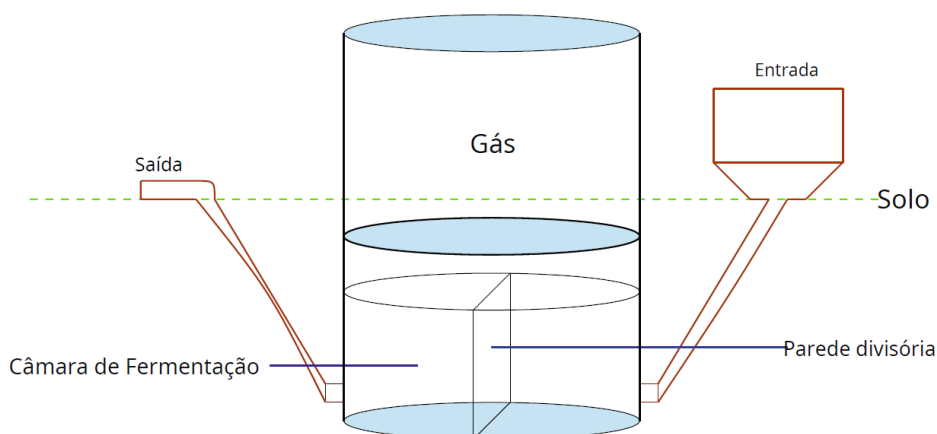


(JUNQUEIRA, 2014)

Seu processo de produção se difere do modelo indiano, por trabalhar com pressão variável, com isso ele não possui saída automática do efluente e também apresenta fluxo e refluxo do substrato, pela tubulação de saída (PORTES, 2005).

O biodigestor indiano de modo contínuo é um tipo de biodigestor que é amplamente utilizado em países em desenvolvimento devido à sua simplicidade e baixo custo (Singh et al., 2020). Esse biodigestor é projetado para operar em regime de fluxo horizontal. Como mostra a Figura 3.

Figura 3 – Representação de um biodigestor indiano



Fonte: Tanaka (2024)

O biodigestor indiano de modo contínuo é composto por uma câmara de digestão, uma câmara de gasificação e um sistema de coleta de biogás. A câmara

de digestão é responsável por realizar a biodigestão anaeróbica, onde os micro-organismos decompõem o substrato em biogás, e ela conta com uma parede divisória que separa a biomassa mais fermentada da biomassa menos fermentada, uma vez que a biomassa já processada pelo consórcio de bactérias perde densidade e consegue emergir na água superando a altura da parede divisória e se realocando no outro lado do tanque pronta para sair pela tubulação de saída do mesmo. Logo após a geração de biogás, que se armazena na parte superior do biodigestor chamada de câmara de gasificação que é responsável por realizar a gasificação do biogás, onde o biogás é coletado e armazenado. O sistema de coleta de biogás é responsável por coletar o biogás produzido e transferi-lo para um tanque de armazenamento.

De acordo com Kumar (2017), as temperaturas ideais para o funcionamento do biodigestor indiano variam de acordo com a região e a época do ano. Em geral, as temperaturas entre 20°C e 35°C são consideradas ideais para o processo de biodigestão. Temperaturas abaixo de 15°C podem reduzir a atividade microbiana, enquanto temperaturas acima de 40°C podem causar a morte dos microorganismos.

A matéria orgânica de alimentação utilizada no biodigestor indiano deve ser rica em carbono e nitrogênio. Alguns exemplos de materiais orgânicos adequados incluem:

- Esterco de animais (bovinos, suínos, aves)
- Resíduos de alimentos (frutas, legumes, grãos)
- Biomassa vegetal (capim, palha)
- Resíduos orgânicos de restaurantes e mercados

O tempo de fermentação no biodigestor indiano pode variar de acordo com a quantidade e a qualidade da matéria orgânica de alimentação. Em geral, o tempo de fermentação é de 30 a 60 dias. Durante esse período, a matéria orgânica é completamente decomposta e o biogás é produzido. O biodigestor indiano pode ser operado em modo contínuo, o que significa que a matéria orgânica é adicionada e removida continuamente do sistema. Isso permite que o biodigestor produza biogás e nutrientes líquidos de forma contínua. Em modo contínuo, o tempo de fermentação é ajustado para garantir que a matéria orgânica seja completamente decomposta e que o biogás seja produzido de forma eficiente.

Em resumo, o biodigestor indiano é um sistema eficiente e compacto para a produção de biogás e nutrientes líquidos a partir de matéria orgânica. As temperaturas ideais para o funcionamento do biodigestor variam de 20°C a 35°C, e a matéria orgânica de alimentação deve ser rica em carbono e nitrogênio. O tempo de fermentação é de 30 a 60 dias, e o biodigestor pode ser operado em modo contínuo para produzir biogás e nutrientes líquidos de forma contínua (Porte, 2005; Kuma, 2017; Singh et al., 2020; Liu et al., 2020; Santos et al., 2020; Angelidaki et al., 2018)

A descrição detalhada do processo de biodigestão anaeróbica em biodigestores e a caracterização do biodigestor indiano de modo contínuo apresentadas neste capítulo fornecerão uma base fundamental para o desenvolvimento de um modelo matemático que será apresentado na próxima seção. Esse modelo matemático será capaz de prever e otimizar o desempenho do biodigestor indiano de modo contínuo, permitindo uma gestão mais eficiente dos recursos e uma maior produção de biogás.

1.2. Descrição do Modelo

A biodigestão anaeróbica é um bioprocesso complexo no qual diferentes tipos de microrganismos consomem um substrato orgânico em condições anóxicas para crescer e, conseqüentemente, o biogás é gerado (FAGBOHUNGBE et al, 2017; SCHMIDELL et al, 2001). Uma cultura mista (ou sortium) de microrganismos degrada substâncias orgânicas em uma sequência de reações, convertendo substâncias complexas, como amido, celulose, proteínas e outros hidratos de carbono, em metano, dióxido de carbono, hidrogênio e vestígios de outros produtos químicos.

Nesse sentido, seja S a concentração de um substrato orgânico (em g/L) que é consumido por um consórcio de microrganismos, com concentração X (em g/L). Enquanto o consórcio decompõe as moléculas complexas do substrato, o biogás é produzido, com concentração P (em mL/L), e os microrganismos usam a energia das reações de biodigestão para crescer, com velocidade específica μ (em h^{-1}).

As reações de biodigestão em um biodigestor indiano ocorrem em modo contínuo. Nesse sentido, nos limites do reator o fluxo de entrada/saída não é nulo, portanto, o volume V (em L) do biodigestor é incrementado com a entrada Q_0 (em L/h) e decrementado com a saída Q (em L/h) durante a fermentação

Os balanços de fluxo de massa (fluxo) podem fornecer informações sobre a dinâmica da concentração total de biogás, bem como o consumo de matéria orgânica. Para desenvolver o balanço de fluxo de massa para o problema atual, seja $\dot{m}$ (a partir de agora a derivada do tempo $\frac{d}{dt}$ será indicado como “ $\dot{}$ ”) a vazão de massa, descrita como:

$$\dot{m} = \frac{dm}{dt} = Q_0 C_0 - Q C + r_g V - r_c V, \quad (1)$$

no qual C_0 é a concentração de entrada de uma espécie química, C é a tomada de concentração, r_g e r_c são as taxas de reação relacionadas à geração e ao consumo de massa no sistema, respectivamente.

O modo contínuo requer que o volume no sistema permaneça constante durante todo o tempo. Nesse sentido, uma vez que uma concentração C é a razão entre a massa m e o volume V que uma espécie química ocupa e $Q_0 = Q$ para cada tempo de fermentação. Logo, a Equação (1) se torna:

$$\dot{C} = F(C_0 - C) + r_g - r_c, \quad (2)$$

em que $F = Q/V$ é a vazão mássica de entrada/saída de uma espécie química.

As taxas de geração e consumo estão relacionadas com o crescimento de micro-organismos que catalisam a reação. Uma taxa de reação em relação à geração ou consumo de uma espécie química com concentração C é:

$$r_c = \frac{\mu}{S_{X/C}}, \quad (3)$$

em que $S_{X/C}$ é o rendimento de geração/consumo da espécie com consumo centralização C pelo microrganismo com concentração X . Escrevendo os rendimentos como $S_S = \frac{1}{Y_{X/S}}$ e $S_P = \frac{1}{Y_{X/P}}$, a taxa de consumo de substrato e a taxa de geração de biogás são, respectivamente:

$$r_S = \mu XY_S, \quad (4)$$

$$r_P = \mu XY_P. \quad (5)$$

Em relação ao balanço de fluxo de massa para o substrato em um biodigestor indiano, é importante destacar que:

- (i) não há geração deste componente durante a biodigestão;
- (ii) este reator é alimentado por sua entrada com concentração S_0 ;
- (iii) há saída de algum substrato durante a biodigestão, com concentração S .

Aplicando essas hipóteses e a Equação (4) à Equação (2), o balanço de fluxo de massa para o substrato é:

$$\dot{S} = F(S_0 - S) - \mu XY_S. \quad (6)$$

Com relação ao balanço de biogás:

- (iv) este componente não é consumido durante a fermentação;
- (v) não há entrada de biogás;
- (vi) há saída deste componente, com concentração P .

Dadas essas hipóteses e a Equação (5), o balanço de fluxo de massa para o biogás é:

$$\dot{P} = -FP + \mu XY_P. \quad (7)$$

Com relação à variação da concentração do consórcio durante a biodigestão, assume-se que:

- (vii) não há entrada do consórcio;
- (viii) concentração X aumenta devido aos efeitos da velocidade de crescimento específica μ ;
- (ix) há consórcio de saída devido aos efeitos de lavagem e diluição.

Assim, o balanço de fluxo de massa para microorganismos é:

$$\dot{X} = (\mu - F)X. \quad (8)$$

A velocidade específica de crescimento do consórcio está relacionada com a concentração de substrato e considera-se que μ segue o modelo Monod

(FONTANA et al, 2018; LI, 2019; BATSTONE, 2014; BISCARO, 2008), pois é apresentado na Equação (9):

$$\mu = \frac{\mu_{max}S}{k_s+S}, \quad (9)$$

no qual μ_{max} é a velocidade de crescimento específica máxima e k_s é a saturação constante em relação a este bioprocesso. Nesse sentido, este trabalho propõe o seguinte modelo matemático para representam a dinâmica da biodigestão em relação ao seu fluxo de massa:

$$\begin{cases} \dot{X} = (\mu - F)X \\ \dot{P} = -FP + \mu XY_p \\ \dot{S} = F(S_0 - S) - \mu XY_s, \\ \mu = \frac{\mu_{max}S}{k_s+S} \end{cases} \quad (10)$$

no qual $F, Y_p, Y_s, S_0, \mu_{max}$ e k_s são constantes reais positivas, $S = S(t), P = P(t)$ e $X = X(t)$ são variáveis de estado relacionadas com as concentrações de componentes materiais deste bioprocesso e $\mu = \mu(t, S(t))$ é a resposta funcional do crescimento bacteriano em relação ao consumo de substrato.

Propriedades qualitativas do modelo descrito, como a não negatividade de suas soluções, existência de pontos de equilíbrio e sua estabilidade, foram analisadas via métodos padrão. Mais precisamente, a análise de estabilidade dos pontos de equilíbrio para o Modelo (10) foi realizada pela técnica de Lyapunov.

Neste capítulo, foi apresentado um modelo matemático não linear que descreve a biodigestão anaeróbica em um biodigestor indiano de operação contínua. Este modelo consiste em um sistema de equações diferenciais ordinárias que relaciona as concentrações de bactérias, substrato e biogás ao longo do tempo. Considera aspectos como a velocidade máxima de crescimento do consórcio bacteriano, a constante de saturação e os rendimentos do processo, permitindo uma análise qualitativa do funcionamento do biodigestor e dos fatores que afetam sua eficiência. Essa abordagem evidenciou a complexidade da biodigestão e ofereceu uma ferramenta valiosa para otimização e escalabilidade na gestão de resíduos orgânicos.

A análise qualitativa do modelo proposto, baseada na teoria de Lyapunov apresentada no capítulo 1, é realizada a seguir no Capítulo 2.

Capítulo 2 - Análise qualitativa do modelo

O objetivo desta seção é apresentar a análise qualitativa da dinâmica não linear de equações definidas no Capítulo 1. Para tal, iremos apresentar e provar dois lemas, que são importantes para qualificar as soluções do modelo proposto no Capítulo 1, baseando-se em resultados sobre sistemas autônomos apresentados no Apêndice A.

2.1. Lema

Qualquer solução $X(t), P(t)$ e $S(t)$ da Equação (10) permanece não negativo para cada vez t , de tal modo que $0 \leq t < \infty$, desde as condições iniciais $X(0) \geq 0, P(0) \geq 0$ e $S(0) \geq 0$.

Prova

Considere o Modelo (10) reescrito como

$$\dot{X} = \left(\frac{\mu_{max}S}{k_s + S} - F \right) X. \quad (11)$$

$$\dot{P} = -FP + \frac{\mu_{max}S}{k_s + S} XY_P. \quad (12)$$

$$\dot{S} = F(S_0 - S) - \frac{\mu_{max}S}{k_s + S} XY_S. \quad (13)$$

Da Equação (11), integrando de 0 a t , de tal modo que $t \in [0, t_f]$ e $t_f < \infty$, obtém-se o seguinte resultado:

$$X(t) = X(0) \exp \left\{ -Ft + \mu_{max} \int_0^t \frac{S(s)}{k_s + S(s)} ds \right\}. \quad (14)$$

Como a exponencial de qualquer função sempre resulta em um número positivo, $X(t)$ só pode ser negativo se sua condição inicial também for negativa. Portanto,

$$X(0) \geq 0 \Rightarrow X(t) \geq 0, \forall t \in [0, t_f], t_f < \infty. \quad (15)$$

Com relação à Equação (12), ela pode ser reescrita como:

$$\dot{P} + P(t)f(t, X(t), P(t)) = 0, \quad (16)$$

em que, $f(t, X, P) = F - \frac{\mu_{max}S(t)X(t)Y_P}{(k_s + S(t))P(t)}$.

Seja $I(t) = \exp \left\{ \int_0^t f(s, X(s), P(s)) ds \right\}$. Multiplicando a Equação (16) por $I(t)$, temos:

$$\frac{dP}{dt} I(t) + P(t) f(t, X(t), P(t)) I(t) = 0, \quad (17)$$

que é equivalente a:

$$\frac{d}{dt} [P(t) I(t)] = 0, \quad (18)$$

Ao resolver a Equação (18) com condição inicial $P(0) \geq 0$, segue que:

$$P(t) = P(0) \exp \left\{ - \int_0^t f(s, X(s), P(s)) ds \right\} \quad (19)$$

é sempre não negativo. Em outras palavras:

$$P(0) \geq 0 \Rightarrow P(t) \geq 0, \forall t \in [0, t_f], t_f < \infty. \quad (20)$$

Com relação à Equação (13), pode ser reescrita como:

$$\dot{S} = F(S_0 - S(t)) - S(t)\beta, \quad (21)$$

em que $\beta = \frac{\mu_{max} S}{k_s + S} XY_S$.

Seja $S(0) = S_0 > 0$ e suponha que existe um tempo τ , de tal modo que $S(\tau) = 0$ e $S(t) < 0$ para $t \in [\tau, \tau + \varepsilon]$ a única maneira de acontecer é quando

$$\frac{dS}{dt}(\tau) < 0. \quad (22)$$

Por outro lado, $\frac{dS}{dt}(\tau) = FS_0 - FS(\tau) - S(\tau)\beta \Leftrightarrow FS_0 > 0$, o que contradiz a hipótese da Equação (22). Portanto,

$$S(0) \geq 0 \Rightarrow S(t) \geq 0, \forall t \in [0, t_f], t_f < \infty. \quad (23)$$

Com isso podemos concluir que:

$$S(0), P(0), X(0) \geq 0 \Rightarrow S(t), P(t), X(t) \geq 0, \forall t \in [0, t_f], t_f < \infty. \quad (24)$$

■

2.2. Lema

Seja (X, P, S) uma solução qualquer para o sistema de equações do Modelo (10). Sob condições de estabilidade assintótica e considerando os parâmetros todos positivos, a Equação (10) admite as seguintes soluções:

- (I) $E_1 = (0, 0, 0)$ sempre;
- (II) $E_2 = (\alpha, \alpha Y_P, S_0 - \alpha Y_S)$, com $0 < \alpha \leq \frac{S_0}{Y_S}$;
- (III) $E_3 = (\alpha, \varphi_2 \left(\frac{S_0}{\varphi_1} + 1 \right), \varphi_1)$, com $\varphi_1 = \frac{F k_S}{\mu_{max} - F}$, $\varphi_2 = \frac{Y_P \varphi_1}{Y_S}$ e $\mu_{max} > F$

Prova.

Considerando condições iniciais nulas, isto é, $s_0 = 0$, o sistema de equações (11), (12) e (13) se escreve como:

$$\begin{cases} \dot{X} = \left(\frac{\mu_{max} S}{k_S + S} - F \right) X \\ \dot{P} = -FP + \frac{\mu_{max} S}{k_S + S} X Y_P \\ \dot{S} = -FS - \frac{\mu_{max} S}{k_S + S} X Y_S. \end{cases}, \quad (17)$$

Na determinação dos pontos críticos de (17), obtém-se:

$$X \left(\frac{\mu_{max} S}{k_S + S} - F \right) = 0, \quad (18)$$

$$-FP + \frac{\mu_{max} S}{k_S + S} X Y_P = 0, \quad (19)$$

$$-FS - \frac{\mu_{max} S}{k_S + S} X Y_S = 0. \quad (20)$$

Através das equações (18), (19) e (20), tem-se as seguintes situações:

- i) Se, em (18), $X = \alpha = 0$ então, em (19):

$$P = 0 \quad (21)$$

Se $P = 0$ tem-se que o primeiro ponto crítico, expresso por E_1 é:

$$E_1 = (0, 0, 0), \quad (22)$$

- ii) Se, em (18), $X = \alpha \neq 0$, então:

$$F = \frac{\mu_{max} S}{k_S + S} \text{ e, em (20), } S = -X Y_S. \quad (23)$$

Considerando (19) e (23) tem-se apenas uma possibilidade para $x = \alpha \neq 0$:

$$P = XY_P \quad (24)$$

Caso contrário, quando $X = \alpha = 0$, tem-se a condição $F = 0$, a qual não se verifica pois Q e V são sempre positivas. Para $X = \alpha \neq 0$ o ponto E_2 é expresso de acordo com as condições (23) e (24).

$$E_2 = (\alpha, \alpha Y_P, -\alpha Y_S); \quad (25)$$

O Modelo (10) é um modelo não linear, portanto a análise de estabilidade é realizada em relação à sua linearização em torno do ponto de equilíbrio. Nesse sentido, como E_3 é um ponto deslocado da origem do sistema, devemos realizar a sua translação por meio de mudança de variáveis de estado, como segue abaixo:

$$\bar{E}_3 = (\bar{X}_3, \bar{Y}_3, \bar{S}_3) = (X - \alpha, P + \varphi_2, S - \varphi_1). \quad (26)$$

Aplicando a Equação (26) no sistema (10), temos:

$$\begin{aligned} \dot{\bar{X}}_3 &= (\bar{\mu} - F)(\bar{X}_3 + \alpha) \\ \dot{\bar{P}}_3 &= -F(\bar{P}_3 + \varphi_2) + \mu(\bar{X}_3 + \alpha)Y_P \\ \dot{\bar{S}}_3 &= F(-\bar{S}_3 + \varphi_1) - \mu(\bar{X}_3 + \alpha)Y_S. \\ \bar{\mu} &= \frac{\mu_{max}(\bar{S} - \varphi_1)}{k_s + \bar{S} - \varphi_1} \end{aligned} \quad (27)$$

Seja $\theta_3 = \bar{\mu}(\bar{E}_3)$ e $\theta_4 = \partial \bar{\mu}$ a matriz Jacobiana associada à linearização do Modelo (10) sobre o ponto E_3 é

$$J(\bar{E}_3) = \begin{bmatrix} \theta_3 - F & 0 & \alpha \theta_4 \\ \theta_3 Y_P & -F & \alpha \theta_4 Y_P \\ -\theta_3 Y_S & 0 & -F - \alpha \theta_4 Y_P \end{bmatrix}, \quad (28)$$

que corresponde ao polinômio característico em λ :

$$Z_3(\lambda) = (F + \lambda) [(\theta_3 - F - \lambda)(-F - \pi_2 - \lambda) + (\theta_3 \pi_2)], \quad (29)$$

no qual $\pi_2 = \alpha \theta_4 Y_P$

■

2.3. Lema

Considerando E_1, E_2 e E_3 sejam estados estacionários do Modelo (10) e todos os parâmetros sejam positivos. Então, as seguintes afirmações são verdadeiras:

- (i) O ponto de equilíbrio E_1 é localmente assintoticamente estável;
- (ii) Se o ponto de equilíbrio E_2 existe e $\rho_1 < 1$, então E_2 será localmente assintoticamente estável, em que $\rho_1 = \frac{\mu_{max}\alpha Y_S(\alpha Y_S - 2k_S)}{\alpha F(k_S - \alpha Y_S)^2}$, $0 < \alpha \leq \frac{S_0}{Y_S}$ e $k_S \neq \alpha Y_S$;
- (iii) Se o ponto de equilíbrio E_3 existe e $\rho_2 < 1$, então E_3 será localmente assintoticamente estável, com $\rho_2 = \frac{F k_S(F - \mu_{max} + 1) - F + \mu_{max}}{\alpha Y_S(\mu_{max} - F)^2}$ e $\mu_{max} > F$.

Prova.

Sejam os seguintes polinômios as equações características das matrizes jacobianas do modelo linearizado (10) referentes os pontos de equilíbrio E_1, E_2 e E_3 , respectivamente:

$$Z_1(\lambda) = (-F - \lambda)^3, \quad (30)$$

$$Z_2(\lambda) = (F + \lambda) [(\theta_1 - F - \lambda)(-F - \pi_1 - \lambda) + \theta_1 \pi_1], \quad (31)$$

$$Z_3(\lambda) = (F + \lambda) [(\theta_3 - F - \lambda)(-F - \pi_2 - \lambda) + \theta_3 \pi_2]. \quad (32)$$

- (i) O polinômio $Z_1(\lambda)$ de Equação (30) tem solução $\lambda = -F$, com multiplicidade três. Portanto, o ponto de equilíbrio E_1 , ao qual corresponde o polinômio $Z_1(\lambda)$, é localmente assintoticamente estável no sentido de Lyapunov.
- (ii) Em relação ao ponto de equilíbrio E_2 , resolvendo a Equação (31), $Z_2(\lambda) = 0$, as soluções são:

$$\lambda = -F, \quad (33)$$

com multiplicidade dois ou:

$$\lambda = \theta_1 - F - \pi_1. \quad (34)$$

Da equação (34), uma vez que $\theta_1 = \bar{\mu}(\bar{E}_2)$, $\pi_1 = \alpha Y_S \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial S}(\bar{E}_2)$, o único caminho para $\lambda < 0$ é:

$$\theta_1 < F + \pi_1, \quad (35)$$

ou seja:

$$-\frac{\mu_{max}\alpha Y_S}{k_S - \alpha Y_S} < F < \frac{\alpha Y_S \mu_{max} k_S}{(k_S - \alpha Y_S)^2}. \quad (36)$$

Ao subtrair π_1 em ambos os lados da desigualdade anterior e através alguma manipulação algébrica, o seguinte resultado é dado:

$$\frac{\mu_{max}\alpha Y_S(\alpha Y_S - 2k_S)}{F(k_S - \alpha Y_S)^2} < 1, \quad (37)$$

para cada Y_S, μ_{max}, k_S e α positivo e $0 < \alpha \leq \frac{S_0}{Y_S}$. O valor de $\rho_1 = \frac{\mu_{max}\alpha Y_S(\alpha Y_S - 2k_S)}{F(k_S - \alpha Y_S)^2}$ é um parâmetro de bifurcação em relação ao ponto de equilíbrio E_2 e a seguinte afirmação é verdadeira:

$$\begin{cases} \lambda < 0, & \text{se } \rho_1 < 1, \\ \lambda \geq 0, & \text{se } \rho_1 \geq 1. \end{cases} \quad (38)$$

Nesse sentido, se o parâmetro de bifurcação $\rho_1 < 1$, o ponto de equilíbrio E_2 será localmente assintoticamente estável no sentido de Lyapunov.

- (iii) Em relação à análise qualitativa do ponto de equilíbrio E_3 , a Equação (32), $Z_3(\lambda) = 0$, é resolvido, dados os seguintes resultados:

$$\lambda = -F, \quad (39)$$

com multiplicidade dois ou

$$\lambda = \theta_3 - F - \pi_2. \quad (40)$$

Desde que $\theta_3 = \bar{\mu}(\bar{E}_3)$ e $\pi_2 = \alpha Y_S \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial S}(\bar{E}_3)$, o único caminho para $\lambda < 0$ é:

$$\theta_3 < F + \pi_2 \quad (41)$$

ou seja:

$$\frac{\mu_{\max}\varphi_1}{k_S+\varphi_1} < F < \frac{\alpha Y_S \mu_{\max} k_S}{(k_S+\varphi_1)^2}. \quad (42)$$

Multiplicando a Desigualdade (42) pela constante positiva $(k_S + \varphi_1)^2$, em que $\varphi_1 = \frac{F k_S}{\mu_{\max} - F}$ e por manipulação algébrica, o seguinte resultado é dado:

$$\frac{F k_S (F - \mu_{\max} + 1) - F + \mu_{\max}}{\alpha Y_S (\mu_{\max} - F)^2} < 1, \quad (43)$$

para cada parâmetro positivo $Y_S, \alpha, \mu_{\max}, k_S, F$ e $\mu_{\max} > F$. A quantidade $\rho_2 = \frac{F k_S (F - \mu_{\max} + 1) - F + \mu_{\max}}{\alpha Y_S (\mu_{\max} - F)^2}$ é um parâmetro de bifurcação relacionado ao ponto de equilíbrio E_3 . Em outras palavras, a estabilidade desse ponto muda de acordo com o sinal de λ na Equação (40), como segue:

$$\begin{cases} \lambda < 0, & \text{se } \rho_2 < 1, \\ \lambda \geq 0, & \text{se } \rho_2 \geq 1. \end{cases} \quad (44)$$

Portanto, o ponto de equilíbrio E_3 será localmente assintoticamente estável no sentido de Lyapunov quando $\rho_2 < 1$.

■

Este capítulo realizou uma análise qualitativa do modelo apresentado no Capítulo 1, com base na teoria de sistemas dinâmicos não lineares e na teoria de Lyapunov. O foco da análise foi investigar a estabilidade assintótica dos pontos de equilíbrio e a não negatividade nas soluções de equilíbrio. O uso das ferramentas teóricas apropriadas permitiu uma melhor compreensão do comportamento dinâmico do sistema, elucidando as condições necessárias para a estabilidade e a manutenção da não negatividade ao longo do tempo. Essa abordagem validou a eficácia do modelo, contribuindo para o avanço do conhecimento na área e sua aplicação em contextos práticos correlatos. Os resultados dos Lemas 2.1, 2.2 e 2.3 foram explorados e verificados por meio de simulações computacionais do Modelo (10), conforme apresentado no Capítulo 3.

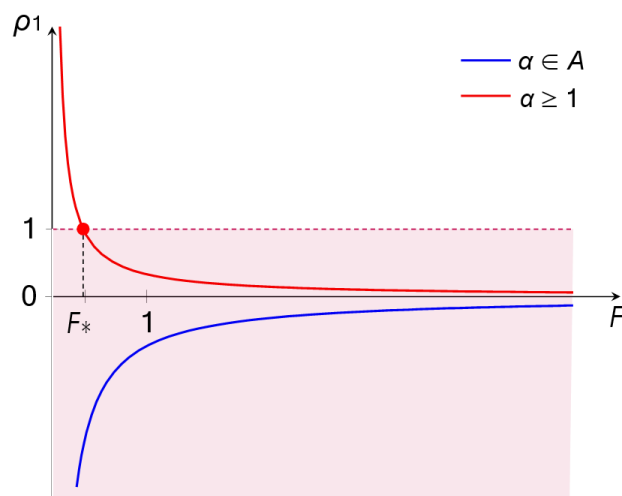
Capítulo 3 - Simulações computacionais

Os parâmetros de bifurcação desempenham um papel importante no planejamento e controle de como o bioprocessamento é realizado. O Modelo (10) admite três casos de soluções de equilíbrio, para as quais a estabilidade de dois casos entre eles depende dos valores dos parâmetros ρ_1 e ρ_2 do Lema (2.3), os quais são parâmetros de bifurcação para este sistema e, de acordo com esse lema, eles podem ser calculados como uma combinação da velocidade de crescimento específica máxima do consórcio, constante de saturação, rendimentos, taxa de fluxo de massa e uma concentração de consórcio α .

Dentre os parâmetros cinéticos do bioprocessamento, o único que não diz respeito aos consórcios microbianos é a taxa de massa de fluxo de entrada/saída F . Em outras palavras, em relação ao sistema operacional, é possível controlar a estabilidade do regime permanente analisando a relação entre o parâmetro de bifurcação ρ_1 e a vazão mássica de entrada/saída, conforme mostrado nas Figuras 4 e 5.

Para calcular o diagrama de bifurcação de ρ_1 em relação à taxa de fluxo de massa F (Figura 4), considera-se que $\mu_{max} = 0.3283 \text{ dia}^{-1}$, $Y_s = 2.1885$ e $k_s = 0.5470 \text{ gL}^{-1}$ com dois diferentes cenários para concentração de bactérias $\alpha \text{ (gL}^{-1}\text{)}$, tal que $\alpha \in A$, $A = \left\{ \alpha \in \mathbb{R}_+ \mid 0 < \alpha < \frac{k_s}{Y_s}, 0 < \alpha \leq \frac{S_0}{Y_s}, \frac{k_s}{Y_s} < \alpha < 1 \right\}$ e $\alpha \geq 1$, gerado aleatoriamente com distribuição normal (0,10)

Figura 4- Diagrama de bifurcação do parâmetro ρ_1 em relação à vazão mássica F .



Fonte – Autor (2022).

A área preenchida sob a linha $\rho_1 = 1$ representa a variedade em que cada solução de equilíbrio do Modelo (10) é localmente estável. Dois cenários diferentes são considerados,

- para a condição $\alpha \in A$:

$$A = \left\{ \alpha \in \mathbb{R}_+ \mid 0 < \alpha < \frac{k_s}{Y_s}, 0 < \alpha \leq \frac{S_0}{Y_s}, \frac{k_s}{Y_s} < \alpha < 1 \right\};$$

utilizou-se $\alpha = 0.1109908 \text{ gL}^{-1}$, representado na curva em azul;

- para a condição $\alpha \geq 1$ utilizou-se $\alpha = 7.828458 \text{ gL}^{-1}$, representada pela curva em vermelho.

O valor crítico $F^* = 0.3279429 \text{ dia}^{-1}$ foi calculado considerando $\alpha = 0.1109908 \text{ gL}^{-1}$, $\mu_{max} = 0.3283 \text{ dia}^{-1}$, $Y_s = 2.1885$ e $k_s = 0.5470 \text{ gL}^{-1}$.

Na Figura 4, a área preenchida sob a linha $\rho_1 = 1$ representa a variedade estável, onde as soluções para o modelo estudado são localmente assintoticamente estáveis. Quando $\alpha \geq 1$, ρ_1 diminui enquanto F aumenta. Além disso, quando $F > F^*$, a solução de equilíbrio E_2 é localmente assintoticamente estável para $\alpha \geq 1$. Por outro lado, a solução de equilíbrio E_2 sempre permanece localmente assintoticamente estável para cada valor de $F > 0$ quando a concentração do consórcio $X(t) = \alpha$, tal que $\alpha \in A$. Além disso, como $\alpha \rightarrow k_s$, $\rho_1 \rightarrow -\infty$. No entanto, o ponto de equilíbrio E_2 só existe quando as condições no conjunto A são satisfeitas para α .

Ao analisar o parâmetro de bifurcação ρ_2 , podemos notar que existem duas regiões estáveis possíveis para o ponto de equilíbrio E_3 : $0 \leq F < F_1^*$ e $F_2^* < F$, para uma vazão de massa finita F . Por outro lado, de acordo com o Lema (2.2), E_3 existe apenas se $\mu_{max} > F$, portanto, E_3 é localmente assintoticamente estável se $0 \leq F < F_1^*$. Além disso, à medida que F se aproxima da assíntota μ_{max} , ρ_2 tende ao infinito, o que significa, na prática, que a reação não é mais realizada em fluxo laminar, ou há desequilíbrios na rotação do sistema, ou até mesmo na lavagem fora do reator.

O diagrama de bifurcação para ρ_2 em relação a F (Figura 5) foi calculado assumindo os mesmos valores dos parâmetros cinéticos da Figura 4. Soluções numéricas para o Modelo (10) foram simuladas em um computador com processador *Intel Core i7* e 8GB de RAM através do pacote *deSolve* do *software*

livre R 3.0.1, que resolve o sistema não linear com o método *Runge-Kutta-Fehlberg* de 4ª ordem, com passo $h = 0.01$ e tempo de fermentação $t_f = 200$ dias. Quatro cenários diferentes foram testados, conforme descrito na Tabela 1:

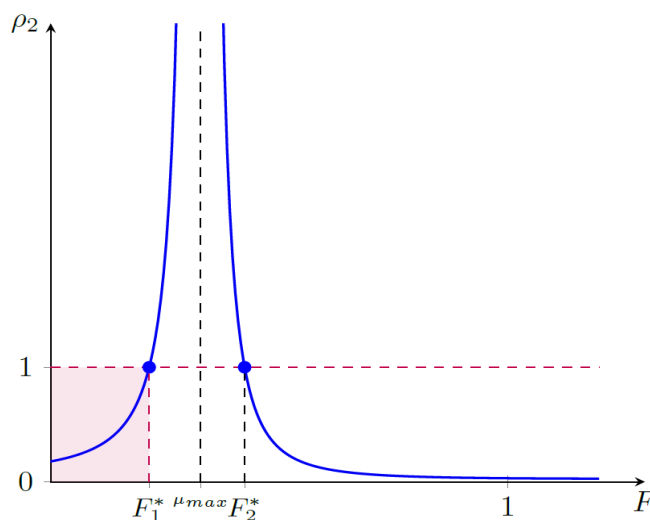
Tabela 1 - Condições iniciais e valores dos parâmetros para o 4º método de Runge-Kutta-Fehlberg

Cenários	I	II	III	IV
$S(0)$	5.6324	8.53565	1.152023	4.667149
$P(0)$	0	0	0	0
$X(0)$	0	4.5413886	0.1623299	4.6012838
<i>Parâmetros</i>				
μ_{max}	0.3283	0.3283	0.3283	0.1
Y_S	2.1885	2.1885	2.1885	2.1885
Y_P	0.4226	0.4226	0.4226	0.4226
k_S	0.5470	0.5470	0.5470	0.5470
F	0.25	0.25	0.25	0.25

Fonte – Autor (2022).

Considerando condições iniciais geradas aleatoriamente com distribuição Uniforme (0,10) e o conjunto de parâmetros de Balmant (2009) e Chen et al (2008).

Figura 5- Diagrama de bifurcação do parâmetro ρ_2 em relação à vazão mássica F

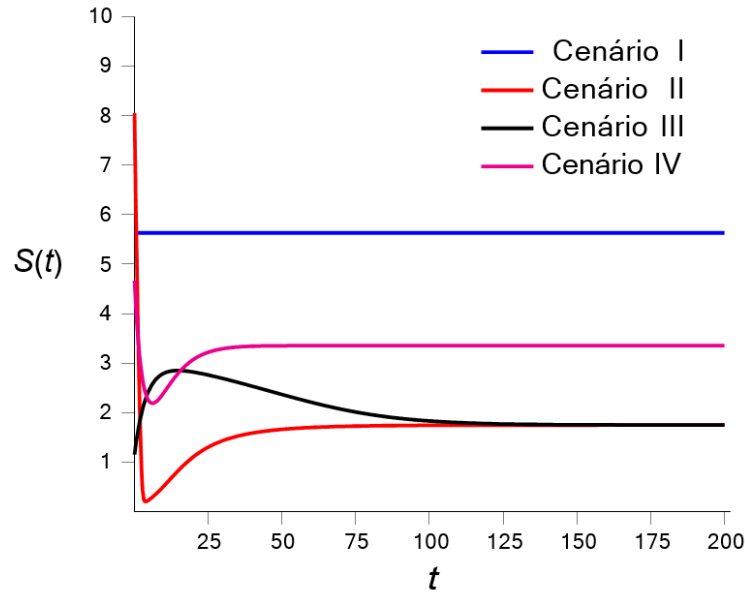


Fonte – Autor (2022).

Na Figura 5, a área preenchida sob a linha $\rho_2 = 1$ representa a variedade em que cada solução de equilíbrio para o Modelo (10) é localmente assintoticamente

estável quando $0 < F < F_1^*$. Com $F_1^* = 0.2156761 \text{ dia}^{-1}$ e $F_2^* = 0.4244385 \text{ dia}^{-1}$. Para computar esses resultados, considera-se que $\alpha = 7.828458 \text{ gL}^{-1}$, gerado aleatoriamente com distribuição uniforme (0,10), $\mu_{max} = 0.3283 \text{ dia}^{-1}$, $Y_S = 2.1885$ e $k_S = 0.5470 \text{ gL}^{-1}$.

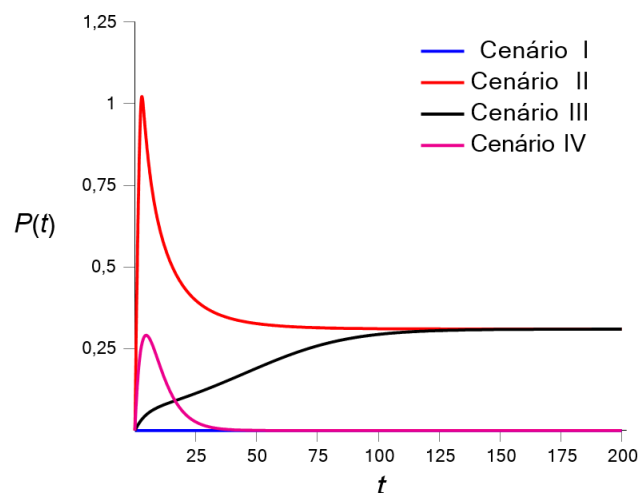
Figura 6 - Dinâmica de concentração do substrato durante a biodigestão em diferentes cenários.



Fonte – Autor (2022).

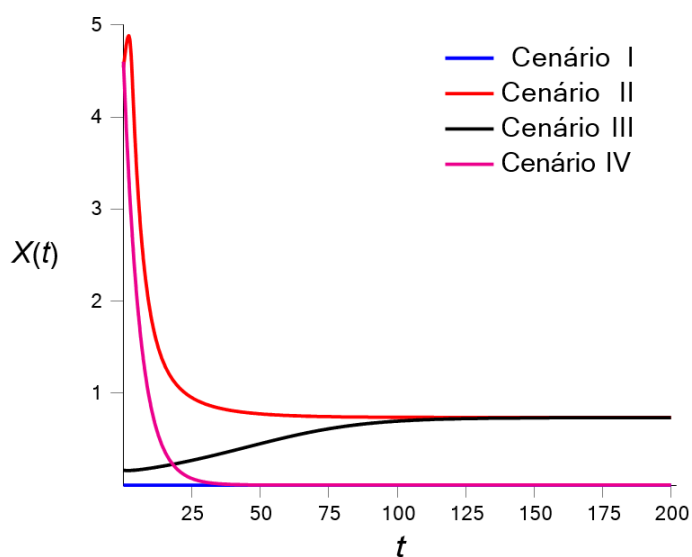
Na Figura 6, o cenário I representa o ponto de equilíbrio E_1 , no qual não há concentração de bactérias para consumir o substrato para produzir biogás. Nesse sentido, a concentração de substrato permanece constante e igual à sua condição inicial para cada tempo de fermentação neste cenário. As concentrações de substrato nos Cenários II e III convergem para a concentração de substrato no valor de equilíbrio $E_3, \frac{Fk_S}{\mu_{max}-F}$, desde que $\mu_{max} > F$. Além disso, aproximadamente, antes de 30 dias pode-se observar que os comportamentos de $S(t)$ para os Cenários II, III e IV são distintos, principalmente pela razão $\frac{S(0)}{X(0)}$, que é maior no Cenário III.

Figura 7 - Dinâmica de concentração do biogás durante a biodigestão em diferentes cenários.



Fonte – Autor (2022).

Figura 8 - Dinâmica de concentração do consórcio anaeróbico durante a biodigestão em diferentes cenários



Fonte – Autor (2022).

Resultados numéricos apresentados nas Figuras 7 e 8 mostram que a produção de biogás e o crescimento bacteriano estão associados, uma vez que $P(t)$ e $X(t)$ apresentam comportamento semelhante para cada cenário. Esses resultados fornecem subsídios para auxiliar no planejamento desse bioprocessos, uma vez que a concentração inicial do consórcio e a razão $\frac{S(0)}{X(0)}$ afetam diretamente o comportamento da produção de biogás.

Em relação ao Cenário I, como as condições iniciais $X(0) = P(0) = 0$, então $X(t)$ e $P(t)$ permanecem nulos para todo tempo de fermentação, o que corrobora com a realidade biológica do fenômeno. Os valores iniciais no Cenário III proporcionaram boas condições para o crescimento do consórcio anaeróbio, que aumenta de 0.1623 gL^{-1} para 0.7339 gL^{-1} , em vez dos Cenários II e IV, em que há um aumento repentino de $X(t)$ próximo aos primeiros 10 dias seguido de diminuição da concentração do consórcio, devido à falta de substratos a serem consumidos e fornecer energia.

De acordo com o Lema 2.1, qualquer solução $X(t)$, $P(t)$ e $S(t)$ do Modelo (10) permanecem não negativas para cada tempo t , de tal modo que $0 \leq t < \infty$, desde que as condições iniciais se verificam, ou seja, $X(0) \geq 0$, $P(0) \geq 0$ e $S(0) \geq 0$.

O modelo (10), composto por um conjunto de equações diferenciais não lineares, oferece uma representação da dinâmica biológica envolvida na biodigestão anaeróbica. A complexidade dessa representação é crucial, uma vez que permite capturar a variedade de interações que ocorrem entre os diferentes microorganismos que compõem o consórcio anaeróbio. A biodiversidade, que é uma característica intrínseca desse consórcio, desempenha um papel fundamental na eficiência do processo, afetando a produção de biogás e a degradação dos resíduos orgânicos.

Através da análise das propriedades de equilíbrio do modelo, é possível obter insights valiosos acerca dos estados estacionários do sistema. Compreender quais condições levam ao estabelecimento desses estados e em quais momentos eles ocorrem é essencial para a otimização do processo de digestão. Isso se traduz em um controle mais eficaz das variáveis operacionais, como temperatura, pH e tempo de retenção hidráulica, criando um ambiente favorável à atividade dos microrganismos envolvidos.

A proporção entre o substrato inicial e as concentrações iniciais do consórcio é um fator determinante na maximização da produção de biogás. O modelo sugere que uma relação elevada entre o substrato e as concentrações iniciais do consórcio deve ser mantida para que ocorra um aumento significativo na produção de biogás ao longo do processo. Essa relação não apenas propicia um

ambiente propício para a multiplicação dos microrganismos, mas também garante que a biodegradação dos resíduos orgânicos ocorra de forma mais eficiente.

O tratamento biológico de resíduos orgânicos por meio da biodigestão não é apenas um avanço técnico, mas também uma resposta necessária aos desafios ambientais que enfrentamos atualmente. Os produtos gerados por esse processo, em especial o biogás e o biofertilizante, têm significativas implicações tanto no contexto ambiental quanto econômico. O biogás, por exemplo, apresenta-se como uma fonte de energia limpa que pode ser utilizada para substituir combustíveis fósseis, auxiliando na diminuição da emissão de gases de efeito estufa.

Além disso, o biofertilizante resultante da digestão anaeróbica oferece uma alternativa ao uso de fertilizantes químicos nas práticas agrícolas. Com menor toxicidade e livre de patógenos, esse biofertilizante contribui para a saúde do solo e para a produção de alimentos de forma sustentável. A implementação do modelo (10) pode, portanto, facilitar a adoção dessas práticas sustentáveis, promovendo uma maior eficiência na conversão de resíduos em recursos valiosos.

O novo modelo matemático proposto se destaca não apenas pela sua capacidade analítica, mas também por suas simulações que se alinham com a realidade observada nos bioprocessos de biodigestão. Essa congruência entre a teoria e a prática é vital para a aceitação do modelo por parte dos profissionais da área, pois assegura que as previsões e recomendações oriundas do modelo são aplicáveis em contextos reais.

A aplicação deste modelo em biodigestores indianos, que frequentemente enfrentam desafios específicos relacionados à diversidade de resíduos orgânicos e à variabilidade nas condições operacionais, pode levar a melhorias significativas na eficiência do processo de digestão anaeróbica. A personalização dos parâmetros do modelo para refletir as particularidades dos resíduos e das condições locais pode demandar um esforço inicial, mas os benefícios a longo prazo para o tratamento de resíduos e a geração de energia são inestimáveis.

Neste capítulo, foram apresentadas simulações computacionais do modelo proposto no Capítulo 1. As simulações foram realizadas em diversos cenários,

permitindo observar a dinâmica da concentração de substrato, biogás e bactérias ao longo do tempo. Os resultados obtidos indicaram que a produção de biogás e o crescimento bacteriano estavam inter-relacionados, evidenciando a importância da concentração inicial do consórcio, bem como da razão entre o substrato inicial e as concentrações iniciais do consórcio, para a maximização da produtividade de biogás. As análises realizadas demonstraram que variações nesses parâmetros impactaram significativamente os níveis de biogás gerados, o que sugeriu que uma abordagem cuidadosa na definição dessas condições iniciais poderia otimizar o processo de fermentação e melhorar a eficiência da produção de biogás. Assim, o estudo não apenas contribuiu para uma melhor compreensão das interações biotecnológicas envolvidas, mas também forneceu diretrizes valiosas para futuras investigações e aplicações práticas na produção de biogás a partir de substratos orgânicos.

No próximo capítulo, será apresentado o modelo de otimização de variáveis de controle proposto com base na análise dos pontos críticos e análise de bifurcação feitas até aqui, cuja investigação de soluções desse caracterizará a proposta da conclusão da tese.

Capítulo 4 - Modelo de Otimização

Nesta seção é apresentada uma proposta de modelo de otimização da produção de biogás em um biodigestor indiano de modo contínuo desenvolvida em co-autoria em Teles & Tanaka et al (2019). Considere um biodigestor de volume constante V e vazão mássica Q constante nas suas fronteiras, no qual ocorre a transformação de um substrato orgânico de concentração $S(t)$ em biogás, com concentração $P(t)$, pela ação de um consócio microbiano de concentração $X(t)$. Uma vez que a concentração total de biogás no reator em um tempo de fermentação t_f depende basicamente das concentrações iniciais de substrato e bactérias, propõe-se o Modelo (45)-(51) para determinar as condições iniciais $S(0)$ e $X(0)$ que maximizem o rendimento γ da produção de biogás para um biodigestor em modo contínuo de condução. Respeitando as condições do sistema não linear de equações do Modelo (10), tem-se o seguinte modelo de otimização:

$$\text{Maximizar: } \gamma = \frac{1}{S(0)+X(0)} \int_0^{t_f} P(t) dt \quad (45)$$

s.a.

$$\dot{X} = (\mu - F)X \quad (46)$$

$$\dot{P} = -FP + \mu XY_P \quad (47)$$

$$\dot{S} = F(S_0 - S) - \mu XY_S \quad (48)$$

$$\mu = \frac{\mu_{max} S}{k_S + S} \quad (49)$$

$$F = \frac{Q}{V} \in \mathbb{R}_+^* \quad (50)$$

$$t_f \in [0, t]. \quad (51)$$

Como provado no Capítulo 2, $S(t) \geq 0, P(t) \geq 0, X(t) \geq 0$, pode-se dizer que todas as variáveis de estado são não negativas e suas dimensões são em $g L^{-1}$, para qualquer tempo t do período de fermentação, e os parâmetros são constantes reais positivas, definidas na Tabela 2:

Tabela 2 - Definição dos parâmetros do Modelo (45) - (51)

Parâmetro	Dimensão	Descrição
t_f	dia	Tempo de fermentação
S_0	$g L^{-1}$	Concentração inicial de substrato
X_0	$g L^{-1}$	Concentração inicial de bactérias do consórcio
μ_{max}	dia^{-1}	Velocidade específica máxima de crescimento das bactérias
Y_p	-	Coeficiente de rendimento de produção
Y_s	-	Coeficiente de rendimento de consumo
k_s	$g L^{-1}$	Constante de saturação de Monod
V	L	Volume do reator
Q	$L dia^{-1}$	Vazão nas fronteiras do reator

Fonte: Teles & Tanaka et al (2019).

4.1. Algoritmo VNS e Resultados Preliminares de Otimização

Para resolver o Modelo (45) - (51) propõe-se um algoritmo de Busca em Vizinhança Variável (VNS), visto no Apêndice B, no qual, a partir de uma solução inicial factível $\nu = (S(0), P(0), X(0)) = (S_0, 0, X_0)$, tal que $0 \leq S_0 \leq 40$ e $0 \leq X_0 \leq 10$, tomados aleatoriamente, quatro estruturas ($k_{max} = 4$) de vizinhança são exploradas com $l_{max} = 20$ e $l_{max} = 100$, realizando buscas locais com a finalidade de melhorar o valor da função objetivo γ . As k_{max} estruturas de vizinhança são:

$$\aleph_1(\nu) = \{\nu = (S_0, 0, X_0) | S_0 = S_0(1 + \epsilon_1), \epsilon_1 \sim U(0, 1)\}, \quad (52)$$

$$\aleph_2(\nu) = \{\nu = (S_0, 0, X_0) | S_0 = S_0(1 - \epsilon_2), \epsilon_2 \sim U(0, 1)\}, \quad (53)$$

$$\aleph_3(\nu) = \{\nu = (S_0, 0, X_0) | X_0 = X_0(1 + \epsilon_3), \epsilon_3 \sim U(0, 1)\}, \quad (54)$$

$$\aleph_4(\nu) = \{\nu = (S_0, 0, X_0) | X_0 = X_0(1 - \epsilon_4), \epsilon_4 \sim U(0, 1)\}. \quad (55)$$

O Modelo de otimização (45) - (51) foi solucionado considerando-se as estruturas de vizinhança $\aleph_k$, com valores distintos de busca locais, $l_{max} = 20$ e $l_{max} = 100$, e os seguintes valores de parâmetros para a resolução do modelo proposto em Teles & Tanaka et al (2019), de acordo com a Tabela 3:

Tabela 3 - Valores dos parâmetros do Modelo (45) - (51)

Parâmetro	t_f	μ_{max}	Y_p	Y_s	k_s	V	Q
Valor	500	0.3283	0.4226	2.1885	0.5470	2000	500

Fonte: Teles & Tanaka et al (2019).

Para cada busca local foram rodadas 10 repetições do VNS e os resultados encontram-se na Tabela 4. Nesta Tabela, os valores entre parênteses são os intervalos de 95% de confiança para a média das soluções geradas para o substrato, o consócio de bactérias e a concentração de biogás ao final da fermentação.

Tabela 4 - Sumário dos resultados obtidos através do VNS para o Modelo (45) - (51)

l_{max}	$S(0)$	$X(0)$	$P(t_f)$	γ	Tempo (s)
20	20.94 (12.87; 29.01)	1.59 (0.91; 2.26)	108.45 (66.67; 150.22)	1032.74	136.50
100	21.86 (12.74; 30.97)	1.54 (0.55; 2.53)	113.18 (65.97; 160.39)	1038.49	418.37

Fonte: Teles & Tanaka et al (2019).

Os intervalos de confiança apresentados possuem grande amplitude, devido ao processo heurístico e também as características do problema. Ao comparar as soluções encontradas com 20 e 100 buscas locais, observou-se que as soluções de $S(0)$ e $X(0)$ estão muito próximas, tanto em suas médias, quanto em seus intervalos de confiança.

Apesar das pequenas variações provocadas por um número maior de buscas locais, o valor da função objetivo obtido pela solução relacionada à média de 20 buscas locais é apenas 0,55% inferior a encontrada com 100 buscas locais. Portanto, o esforço computacional para buscas acima de 20 iterações é em vão, pois não proporciona ganho significativo na função objetivo do modelo proposto em (TELES & TANAKA et al, 2019).

Este capítulo apresentou um modelo de otimização da produtividade de biogás em um biodigestor indiano de maneira contínua. O modelo fundamentou-se na abordagem proposta no Capítulo 1 e visou a maximização do rendimento da produção de biogás (produtividade do biogás), levando em consideração diversas variáveis e condições específicas do ambiente em questão. Para a resolução do modelo, foi empregada a heurística VNS (Variable Neighborhood Search), vista no Apêndice B, a qual proporcionou um processo iterativo eficiente, permitindo a exploração de diferentes vizinhanças dentro do espaço de soluções. A análise dos resultados demonstrou que o modelo não apenas melhorou a eficiência da produção de biogás, mas também ofereceu um referencial importante para futuras investigações sobre a otimização de processos em biodigestores, consolidando assim a relevância da pesquisa na busca por fontes de energia renováveis e sustentáveis.

Como proposta de trabalhos futuros pretende-se aproximar numericamente a função objetivo γ por uma regra melhor de integração numérica, a regra 1/3 de Simpson, sobre n pontos igualmente espaçados, com $n_{min} = 6$ e, com essa aproximação, rodar o algoritmo de otimização da heurística VNS para obter melhores soluções aproximadas ao modelo proposto e à sua função objetivo.

Conclusão

A crescente busca de fontes de energia limpa e renovável, em um contexto marcado por preocupações ambientais e compromisso com a sustentabilidade, tem sido um catalisador importante para o avanço de tecnologias que aliam o potencial das ferramentas matemáticas à produção de biocombustíveis e à otimização de processos biológicos. Neste trabalho, o objetivo foi aprofundar a compreensão do processo de biodigestão anaeróbica, através do desenvolvimento de um modelo matemático não linear que representou com precisão a dinâmica envolvida nesse fenômeno. O biodigestor indiano considerado no modelo proposto apresentou-se como uma solução de interesse para a conversão de resíduos orgânicos em biogás e biofertilizantes, contribuindo não apenas para a gestão eficiente de resíduos, mas também para a geração de energia sustentável.

A análise minuciosa e abrangente, tanto qualitativa quanto quantitativa, do modelo proposto para a biodigestão anaeróbica revela a importância da interação eficaz entre diversos microrganismos e substratos orgânicos, que operam sob condições anóxicas. O resultado desse intrincado processo é a produção de biogás, uma fonte energética renovável, e de biofertilizantes, que é essencial para a agricultura sustentável. A proposta de um modelo de otimização das variáveis de controle, visando maximizar a produtividade de biogás, representa uma contribuição significativa para a eficiência do processo de biodigestão. Esse aspecto é crucial em um contexto em que, a busca por alternativas sustentáveis à produção de energia e ao manejo de resíduos orgânicos, se tornam cada vez mais relevantes. Quando operados de forma eficiente, os biodigestores exercem um papel importante na diminuição das emissões de poluentes. A otimização do processo de biodigestão resulta em uma produção reduzida dos gases de efeito estufa, como o metano e o dióxido de carbono, frequentemente emitidos no processo de decomposição de resíduos orgânicos. Além disso, a pesquisa voltada para a biodigestão propicia a utilização eficaz de resíduos agrícolas, alimentares e de diversas outras origens, transformando essas matérias-primas em biogás e, conseqüentemente, em energia renovável. Tal conversão previne o descarte inadequado de resíduos, diminuindo a poluição do solo e da água. Outro aspecto fundamental a ser destacado é que, ao reduzir a quantidade de resíduos sólidos e líquidos que normalmente seriam

descartados em aterros sanitários ou filetes d'água, a eficiência dos biodigestores promove a conservação de ecossistemas locais e possibilita a autoprodução de energia em instâncias que realizam a biodigestão de resíduos sólidos, diminuindo a degradação ambiental.

A fase de análise qualitativa do modelo desenvolvido através da teoria de Lyapunov, foi fundamental, pois possibilitou a identificação de um terceiro ponto crítico, até então negligenciado, além da definição de condições específicas que garantem a estabilidade do sistema de biodigestores. A estabilidade do sistema é um pré-requisito essencial para a eficiência do processo de biodigestão, pois sistemas instáveis podem levar a falhas operacionais e à diminuição da produtividade. A demonstração da não negatividade das soluções do modelo propõe uma contribuição adicional, assegurando que todas as soluções obtidas são não apenas viáveis, mas também fisicamente plausíveis. Essa credibilidade é relevante, uma vez que soluções fisicamente impossíveis não teriam aplicabilidade prática no campo, comprometendo a confiança nas tecnologias desenvolvidas.

A otimização da produtividade do biogás, realizada por meio da heurística do Variable Neighborhood Search (VNS), revelou resultados de interesse. A análise mostrou uma redução de 0,55% na função objetivo em relação à solução previamente obtida a partir de 100 buscas locais, indicando que a heurística VNS pode se revelar uma ferramenta eficaz na busca pela otimização dos processos de biodigestão. Embora essa melhoria percentual possa parecer modesta, ela representa ganhos significativos em um contexto prático, não apenas ampliando o rendimento da produção de biogás, mas também contribuindo para a viabilidade econômica dos sistemas de biodigestão.

A implementação de técnicas matemáticas e computacionais para a determinação e análise de pontos críticos do modelo proposto, bem como para a otimização dos processos de biodigestão, possui impactos significativos em diversas esferas: econômica, ambiental e social. Em termos econômicos, a otimização pode contribuir para a redução dos custos de produção de energia. Através da utilização de modelos matemáticos otimistas, é possível simular diferentes cenários operacionais, permitindo identificar configurações que maximizam a eficiência da geração e produtividade de biogás. Essa melhoria nos

processos de biodigestão gera benefícios importantes. A eficiência na produção de biogás é impulsionada pelo emprego de algoritmos de otimização, que possibilitam aos operadores a capacidade de ajustar parâmetros críticos como temperatura, tempo de retenção e a composição do substrato. Como resultado, a otimização da produtividade de biogás, adicionalmente, além do aumento no rendimento da produção de biogás, resulta em uma diminuição nos custos associados à geração de energia, tornando as operações dos biodigestores mais competitivas em comparação às fontes tradicionais, como os combustíveis fósseis. Com a redução nos custos e o incremento da eficiência, projetos de biodigestores tornam-se atrativos para investidores e empresas de produção de energia, promovendo um ciclo de crescimento econômico sustentável.

A proposta de um modelo de otimização que visa maximizar a produtividade de biogás reforça a complexidade do processo de biodigestão anaeróbica e revela oportunidades valiosas de melhorias por meio de abordagens analíticas e matemáticas. Como proposta de aprofundamento deste estudo, e considerando o modelo de otimização do capítulo 4, está previsto um refinamento na otimização das variáveis de controle utilizando a heurística VNS, conforme apresentado por Mladenovic e Hansen (1997). Essa abordagem tem como meta renovar a função objetivo γ , empregando métodos de integração numérica, especificamente o método 1/3 de Simpson, para o seu tratamento. A expectativa é que novos resultados surjam, potencializando ainda mais a eficiência do processo de biodigestão anaeróbica e reforçando sua relevância como uma solução sustentável frente aos desafios energéticos e ambientais da contemporaneidade.

Portanto, ao final deste trabalho de pesquisa conclui-se que, a proposição e aplicação de modelos matemáticos baseados em sistemas dinâmicos não lineares de EDO's e a sua extensão para a otimização do processo de biodigestão, além de representar um avanço no conhecimento acadêmico, pode trazer benefícios concretos para a sociedade, a economia e o meio ambiente. Os resultados obtidos corroboram a relevância de se investir em tecnologias limpas e renováveis, que se alinham com as metas globais de sustentabilidade e preservação ambiental. Assim, a continuidade das investigações nesse campo se mostra não apenas desejável, mas essencial para o desenvolvimento de modelos e determinação de soluções estáveis,

que atendam às demandas contemporâneas de energia de forma sustentável e equilibrada. Neste sentido, a intersecção entre modelagem matemática, análise de estabilidade e técnicas de otimização enriquecem tanto a compreensão teórica quanto a aplicação prática deste conhecimento em cenários reais, proporcionando alternativas que podem contribuir ao panorama energético contemporâneo. Além disso, ao investigar as variáveis de controle da biodigestão, a pesquisa incentiva empresas e indústrias a adotarem práticas que priorizam a eficiência e geram menos poluentes, destacando o biogás como uma fonte relevante de energia renovável. Em suma, a continuidade nas investigações nessa área é essencial para enfrentar os desafios globais atuais e garantir que a continuidade em pesquisa sobre biotecnologia e produção de energia renovável sejam consideradas na busca por um desenvolvimento sustentável.

Trabalhos publicados

TANAKA, G. C.; BARBOSA, F. T.; BALBO, A. R.; REIS, C. A.; FLORENTINO, H. O.; *Mathematical modelling of biodigestion in an Indian biodigester and its stability analysis via Lyapunov technique*. Renewable Energy, 2024, V. 226, P. 1 – 8.

TANAKA, G. C.; BARBOSA, F. T.; BALBO, A. R.; REIS, C. A.; FLORENTINO, H. O.; *Análise de estabilidade assintótica das soluções de equilíbrio do modelo matemático da biodigestão anaeróbica em um biodigestor indiano*. In: Anais do XXIX SIMPEP, Bauru-SP, 2022, p. 1-13.

TANAKA, G. C.; BALBO, A. R.; REIS, C. A.; FLORENTINO, H. O.; CHERRI, A. C. *Simulation of an optimization model of biodigesters for the sustainable production of bioenergy*. Revista Brazilian Journal of Business. v. 2, n. 2. Curitiba-Pr, 2020, p. 1140 – 1150.

TELES, F.; TANAKA, G. C.; FLORENTINO, H.; BALBO, A. R.; REIS, C. A. *Um modelo de otimização para otimizar a eficiência em um biodigestor indiano*. In: ERMAC, Bauru-SP. 2019.

Bibliografia

ANDRADE, M. A. N.; RANZI, T. J. D.; MUNIZ, R. N.; SILVA, L. G. S.; ELIAS, M. J. *Biodigestores rurais no contexto da atual crise de energia elétrica brasileira e na perspectiva da sustentabilidade ambiental*. In: Encontro de Energia no Meio Rural, 4., 2002, Campinas. Anais do evento. Campinas: UNICAMP, 2002. 1 CD ROM.

ANGELIDAKI, I., TREU, L., TSAPEKOS, P., LOUROS, V., KANG, H., WANG, M., LUO, G., CAMPANARO, S. (2018). Biogas upgrading and utilization: Current challenges and perspectives. *Renewable Energy*, 122, 385-397.

BALMANT, W., *Concepção, construção e operação de um biodigestor e modelagem matemática da biodigestão anaeróbica*. 2009. 59 f. Dissertação (mestrado em processos térmicos e químicos) - Pós-graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais - PIPE. Setor de tecnologia. Universidade Federal do Paraná. Curitiba, 2009.

BASSANEZI, R. C. e FERREIRA JUNIOR, W. C. *Equações diferenciais com Aplicações*. São Paulo: Harbra Ed., 1988. 572 p.

BATSTONE, D. J.; VIRDIS, B. The role of anaerobic digestion in the emerging energy economy, *Current opinion in biotechnology* 27. 2014. 142 - 149.

BISCARO, F. V. e SILVA, H. O. F., *Modelagem matemática para determinação da eficiência da redução de ST e SV na biodigestão anaeróbia*. revista energia na agricultura, Botucatu, v. 23, n.3, p.1-15, 2008.

CARIOCA, J. O. B. e ARORA, H. L. *Biomassa: fundamentos e aplicações tecnológicas*. Fortaleza: Universidade Federal do Ceará, 1984. 644 p.

CHAUDHARI, P. K., PRAJAPATI, A. K., MAZUMDAR, B., CHOUDHARY, R. *Treatment of rice grain based biodigester distillery effluent (BDE) using inorganic coagulants*, *Indian Journal of Chemical Technology*. v. 23, 2016, pp. 491-496.

CHAUDHARI, P. K., MISHRA, I. M., CHAND S., *Decolorization and removal of chemical oxygen demand (COD) with energy recovery: Treatment of biodigester effluent of a molasses- based alcohol distillery using inorganic coagulants*. Colloids Surf A Physicochem. Eng Asp, 2007, pp. 238–247.

FAGBOHUNGBE, M. O.; HERBERT, B. M.; HURST, L.; IBETO, C. N.; LI, H.; USMANI, S. Q. Semple, The challenges of anaerobic digestion and the role of biochar in optimizing anaerobic digestion, Waste Management 61. 2017. 236 - 249.

FONTANA, A.; CAMPANARO, S.; TREU, L.; KOUGIAS, P. G.; CAPPA, F.; MORELLI, L.; ANGELIDAKI, I. Performance and genome-centric metagenomics of thermophilic single and two-stage anaerobic digesters treating cheese wastes, Water research 134. 2018. 181 - 191.

HO, S.H.; NAGARAJAN, D.; REN, N.Q.; CHANG, J.S. Waste bioreneries integrating anaerobic digestion and microalgae cultivation for bioenergy production, Current opinion in biotechnology 50. 2018. 101 - 110.

KHAN, A. A., STACEY, A. J., SHEPHERD, J. J. *Optimization of Methane Output for an Anaerobic Waste Digester*. ANZIAM J, 54:C523–C539. 2013.

LIU, Y., ZHANG, Y., SHEN, Z., CHEN, Y., DAI, X., YUAN, Z. (2020). Anaerobic digestion of organic waste: A review of the current status, challenges and future perspectives. Journal of Environmental Sciences, 89, 126-137.

MEIER, T. R. W.; CREMONEZ, P. A.; MANIGLIA, T. C.; SAMPAIO, S. C.; TELEKEN, J. G.; SILVA, E. A. Production of biohydrogen by an anaerobic digestion process using the residual glycerol from biodiesel production as additive to cassava wastewater, Journal of Cleaner Production (2020) 120833.

MONTEIRO, L. H. A., *Sistemas dinâmicos*. 2. Ed. São Paulo: Livraria da Física, 2006. 625 p.

MOURA, A. B.; SILVA, C. D.; SANTOS, E. F. Desenvolvimento de um Sensor por Software para Avaliação de Biomassa em Reatores Anaeróbios. *Revista de Engenharia Ambiental*, v. 10, n. 2, p. 45-58, 2017.

MLANDENOVIC, N.; HANSEN, P. Variable Neighborhood Search. *Computers & Operations Research*, 11, v. 24, 1997, p. 1097-1100.

HANSEN, P.; MLADENOVIC, N. Variable Neighborhood Search Methods. *Les Cahiers du GERAD*, G-2007-52, 2007.

PRESTON, T. R., BOTERO, R. B. *Biodigestor de bajo costo para la producción de combustible y fertilizante a partir de excretas: Manual para su instalación, operación y utilización*. CIPAV - Centro para la Investigación en Sistemas Sostenibles de Producción Agropecuaria, Cali, Colombia, 2011, 20 p.

PORTES, Z. A. *Aplicativo computacional para projetos de biodigestores rurais*. 2005. 83 f. Dissertação (Mestrado em Agronomia), Faculdade de Ciências Agrônomas, Universidade Estadual Paulista, Botucatu. 2005.

REIS, C. A.; FLORENTINO, H. O.; COLÓN. D.; ROCHA, A. *Análise de um modelo populacional do mosquito transmissor da dengue via linearização exata*. In: SAUSEN, A.; SAUSEN, P.; SAWICKI, S. (Org.) *Pesquisas aplicadas em modelagem matemática*. Ijuí: Ed, UNIJUÍ, 2015, v. 4. 2015. 304 p. ISBN 9788541901840.

ROMERO-GÜIZA, M.; VILA, J.; MATA-ALVAREZ, J.; CHIMENOS, J.; ASTALS, S. The role of additives on anaerobic digestion: A review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 58 (2016) 1486 - 1499.

SANTOS, R. M., SIQUEIRA, R. C., MOURA, R. J., PELLEGRINI, C. B., SILVA, A. J., (2020). Biodigestão anaeróbica de resíduos orgânicos: uma revisão crítica dos fatores que afetam o processo. *Engenharia Sanitária e Ambiental*, 25(1), 1-13.

SCHMIDELL, W.; LIMA, U. A.; AQUARONE, E.; BORZANI, W. *Biotechnologia Industrial*. Edgard Blücher LTDA.: 2 ed. 2001.

SHEN, L.; ZHAO, Q.; WU, X.; LI, X.; LI, Q.; WANG, Y. Interspecies electron transfer in syntrophic methanogenic consortia: from cultures to bioreactors, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 54 (2016) 1358 - 1367.

SILVA, G. V. M.: Controlo não Linear, Escola Superior de Tecnologia Setúbal, Setúbal, Portugal, 2003, livro "on line". p. 1-215.

SINGH, R., KUMAR, P., KUMAR, S., KUMAR, N. (2020). Anaerobic digestion of organic waste: A review of the current status and future prospects in Indian context. *Journal of Environmental Science and Health, Part B*, 55, 1-13.

SLOTINE, J. J. E. e LI, W. *Applied nonlinear control*. New Jersey: Prentice Hall, 1991. 459 p.

TANAKA, G. C. ***Análise da dinâmica não linear do processo de biodigestão em um biodigestor indiano no espaço de estados via técnica de Lyapunov***. 2018. 64 f. Dissertação (mestrado acadêmico em engenharia elétrica) – Universidade Estadual Paulista. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Faculdade de Engenharia de Bauru, UNESP, Bauru. 2018.

TANAKA, G. C.; BALBO, A. R.; REIS, C. A.; FLORENTINO, H. *Um modelo matemático de biodigestores, análise de pontos críticos e estabilidade assintótica*. *Análise dos pontos críticos de um modelo não linear de um biodigestor indiano*. In: DINCON: Conferência brasileira de dinâmica, controle e aplicações. IBILCE. Rio Preto. Caderno se resumos. 2017. p. 1-7.

TANAKA, G. C.; BALBO, A. R.; REIS, C. A.; FLORENTINO, H. *O uso conjunto de técnicas de análise e controle por linearização exata e de métodos predictor-corretor primal-dual de pontos interiores/exteriores de um modelo não linear de biodigestor*. In: ERMAC, Bauru. Caderno de resumos. 2016. p. 160-164.

TELES, F.; TANAKA, G. C.; FLORENTINO, H.; BALBO, A. R.; REIS, C. A. *Um modelo de otimização para otimizar a eficiência em um biodigestor indiano*. In: ERMAC, Bauru. Caderno de resumos. 2019. p. 516 - 517.

THY, S., BORIN, K., VANVUTH, T., BUNTHA, P., PRESTON, T.R. *Effect of water spinach and duckweed on fish growth performance in poly-culture ponds*, Livestock Research for Rural Development, 2008.

YEN, S., PRESTON, T. R., THUY, N. T. *Biogas production from water spinach combined with manure from buffaloes in an in vitro biodigester system*. Livestock Research for Rural Development, v. 29, 2017.

ZHANG, Z.; O'HARA, I. M.; MUNDREE, S.; GAO, B.; BALL, A. S.; ZHU, N., BAI, Z.; JIN, B. Biofuels from food processing wastes, Current opinion in biotechnology 38 (2016) 97 - 105.

Apêndice A - Sistemas autônomos

Este Capítulo apresenta uma revisão matemática de sistemas autônomos não lineares de acordo com a literatura, os quais foram utilizados como base para o desenvolvimento desse trabalho. O estudo de EDO's, bem como suas aplicações, proporciona uma grande vantagem em aspectos de desenvolvimento tecnológico e científico. Considerando que, em condições ideais, pode-se modelar qualquer evento, natural ou não, e estudar tal assunto (BASSANEZI, 1988). A maioria dos eventos são de natureza não linear e encontrar uma solução analítica para o seu modelo pode ser uma tarefa complexa e, por vezes, impossível de ser realizada através de um método exato. Em sistemas regidos por um sistema de equações diferenciais não lineares, dependendo das condições, podemos utilizar o método de Lyapunov para obter as soluções analíticas desses modelos (SILVA, 2003; MONTEIRO, 2006; BESSA, 2011). Para esse objetivo são revistos os tópicos matemáticos postos a seguir.

A.1.1 Conceitos básicos: plano de fase, caminhos e pontos críticos.

Esta seção trata a teoria de sistemas autônomos para dinâmicas bidimensionais e n-dimensional. Com base em Bassanezi (1988), Slotine (1991), Silva (2003); Monteiro (2006) e Bessa (2011),

Definição A1.1.1: Considera-se o seguinte sistema:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = P(x, y) \\ \frac{dy}{dt} = Q(x, y) \end{cases}, \quad (A1.1)$$

um sistema de equações diferenciais no qual a variável independente t não aparece explicitamente nas funções P e Q é denominado **sistema autônomo**.

Observação: Pode-se provar que dado o problema de valor inicial:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = P(x, y) \\ \frac{dy}{dt} = Q(x, y) \end{cases} \quad \text{no qual } x(t_0) = x_0 \text{ e } y(t_0) = y_0 \quad (A1.2)$$

Sendo t_0 , dado, (x_0, y_0) pertencente a um retângulo no plano x e $P(x, y), Q(x, y) \in C^1$, então o sistema (A1.2) tem uma única solução:

$$x = f(t), y = g(t), \quad (\text{A1.3})$$

Definição A1.1.2: Se $x = f(t), y = g(t)$ em (1.3) são constantes, isto é, $x = f(t) = x_0, y = g(t) = y_0$, então as curvas (A1.3) são denominadas um **caminho**, ou **órbita** ou **trajetória** do sistema (A1.1).

Observação: Considere o sistema (A1.2) podemos dividir a primeira linha pela segunda e, eliminando t entre as duas equações deste sistema, obtêm-se:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{Q(x, y)}{P(x, y)}. \quad (\text{A1.4})$$

A equação (A1.4) fornece a **inclinação da reta tangente** ao gráfico dos caminhos do sistema (A1.1), passando através do ponto (x, y) , quando $P(x, y)$ e $Q(x, y)$ são não nulos.

A família a um parâmetro de soluções da equação diferencial (A1.4) fornece uma família a um parâmetro de caminhos de (A1.1). Em um ponto (x_0, y_0) no qual $P(x, y)$ e $Q(x, y)$ são nulos, a inclinação da reta tangente ao caminho, quando definida por (A1.4), é indeterminada. Tem-se a seguinte definição.

Definição A1.1.3: Dado o sistema autônomo $\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x, y) \\ \frac{dy}{dt} = G(x, y) \end{cases}$, um ponto (x_0, y_0) ,

nos quais ambas as funções $F(x_0, y_0) = 0$ e $G(x_0, y_0) = 0$ é denominado um **ponto crítico** ou **ponto de equilíbrio** ou **ponto singular** desse sistema.

Observação: Se (x_0, y_0) é um ponto crítico do sistema, então as funções constantes:

$$\begin{aligned} x &= f(t) = x_0 \\ y &= g(t) = y_0, \end{aligned} \quad (\text{A1.5})$$

satisfazem as equações em (A1.2). Tal solução é denominada uma **solução de equilíbrio** do sistema. Note que a trajetória de uma solução de equilíbrio consiste de um único ponto e, se o sistema for não linear, pode haver mais de um ponto de equilíbrio ou nenhum.

A.1.2 Tipos de pontos críticos.

Considera-se o sistema autônomo:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x, y) \\ \frac{dy}{dt} = G(x, y) \end{cases} \quad . \quad (\text{A1.6})$$

Para a introdução dos tipos de pontos críticos desse sistema, serão necessárias as definições a seguir.

Definição A1.2.1: Seja C um caminho do sistema (1.6) dado por $x = f(t)$ e $y = g(t)$, e $(0, 0)$ ponto crítico desse sistema. Diz-se que **C aproxima do ponto crítico $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$** se $\lim_{t \rightarrow +\infty} f(t) = 0$ e $\lim_{t \rightarrow +\infty} g(t) = 0$.

Observações:

- a) De forma análoga se define **C aproxima do ponto crítico $(0, 0)$ quando $t \rightarrow -\infty$** ;
- b) Dizer que **C aproxima do ponto crítico $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$** significa que um ponto se deslocando sobre C , no plano x, y se aproxima de $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$, independente do caminho C tomado.

Definição A1.2.2: Seja C um caminho do sistema (A1.6) dado por $x = f(t)$ e $y = g(t)$, que se aproxima do ponto crítico $(0, 0)$ ponto crítico quando $t \rightarrow +\infty$. Diz-se que **C entra no ponto crítico $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$** se $\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{g(t)}{f(t)}$ existe ou é $\pm \infty$ quando $t \rightarrow +\infty$.

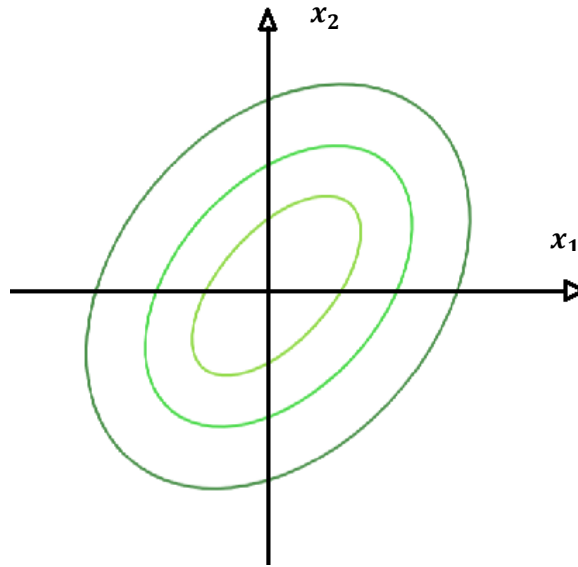
Observação: Observe que o quociente $\frac{g(t)}{f(t)}$ representa a inclinação da reta que passa pelos pontos $(0, 0)$ e $P = (x = f(t), y = g(t))$ sobre o caminho C . Então, dizer que **C entra no ponto crítico $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$** significa que a reta que une os pontos $(0, 0)$ e $P = (f(t), g(t))$ converge para uma direção limite quando $t \rightarrow +\infty$.

Definição A1.2.3: O ponto crítico isolado $(0, 0)$ de um sistema autônomo é dito **centro** se existe uma vizinhança desse ponto que contém um número infinito enumerável de caminhos fechados $C_n, n = 1, 2, 3, \dots$, cada um dos quais contendo $(0, 0)$ em seu interior, tais que seus diâmetros se aproximam de zero quando $n \rightarrow +\infty$, e $(0, 0)$ não é aproximado por qualquer um desses caminhos para $t \rightarrow \pm\infty$.

Observação: Segundo a definição de centro, $(0, 0)$ está circundado por um número infinito de caminhos, arbitrariamente próximos desse ponto, mas de tal forma que ele não é aproximado por nenhum caminho quando $t \rightarrow +\infty$ ou $t \rightarrow -\infty$, isto é, se C_n , é dado por $x_n = f_n(t)$ e $y_n = g_n(t)$, $n = 1, 2, 3, \dots$, então $\lim_{t \rightarrow +\infty} f_n(t) \neq 0$ e $\lim_{t \rightarrow +\infty} g(t) \neq 0$.

A Figura A1.1, a seguir, ilustra um centro.

Figura A1.1: Ponto de Centro



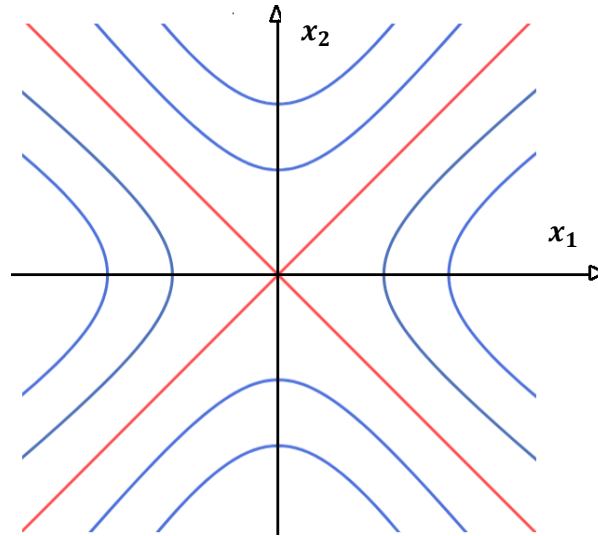
Fonte: Autor (2024).

Definição A1.2.4: O ponto crítico isolado $(0, 0)$ do sistema (A1.6) é dito um **ponto de sela** se existe uma vizinhança desse ponto na qual valem as seguintes condições:

1. Existem dois caminhos curvilíneos que se aproximam e entram tangencialmente aos autovetores no ponto $(0, 0)$ de direções opostas quando $t \rightarrow +\infty$ e existem dois caminhos retilíneos que se aproximam e entram no ponto $(0, 0)$ de direções opostas quando $t \rightarrow -\infty$;

2. Em cada um dos quatro domínios entre dois quaisquer dos quatro caminhos em (A1.1), existem infinitos outros caminhos que estão arbitrariamente próximos de $(0, 0)$, os quais não aproximam de $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$ ou $t \rightarrow -\infty$, os quais se aproximam de um ou outro dos quatro caminhos retilíneos quando $t \rightarrow +\infty$ ou $t \rightarrow -\infty$. A Figura A1.2, a seguir, ilustra um ponto de sela.

Figura A1.2: O ponto de sela (BESSA, 2011).



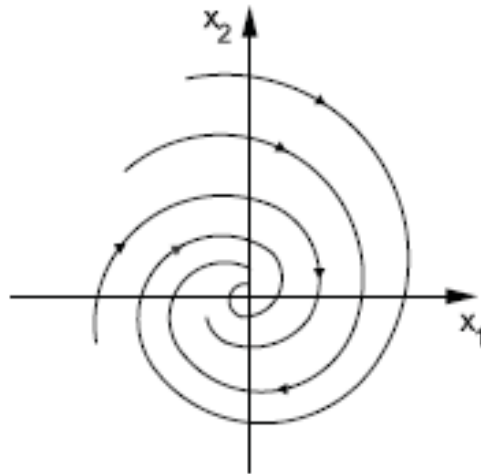
Fonte: Autor (2024).

Definição A1.2.5: O ponto crítico isolado $(0, 0)$ do sistema (A1.6) é dito um **ponto espiral** ou **ponto focal** se existe uma vizinhança desse ponto tal que todo caminho C nessa vizinhança tem as seguintes propriedades:

1. C é definido $\forall t > t_0$ (ou $\forall t < t_0$), para algum número t_0 ;
2. C aproxima de $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$ (ou quando $t \rightarrow -\infty$);
3. C aproxima de $(0, 0)$ de uma forma em espiral, enrolando em torno desse ponto um número infinito de vezes quando $t \rightarrow +\infty$ (ou quando $t \rightarrow -\infty$).

A Figura A1.3, a seguir, ilustra um ponto em espiral. Note que em um ponto em espiral, uma família infinita de caminhos se aproximam de $(0, 0)$ de maneira em espiral quando $t \rightarrow +\infty$ (ou quando $t \rightarrow -\infty$). Note que esses caminhos se aproximam, mas não entram nesse ponto já que esses caminhos não possuem uma direção limite pelo fato de se enrolarem em torno desse ponto.

Figura A1.3: Ponto de espiral.



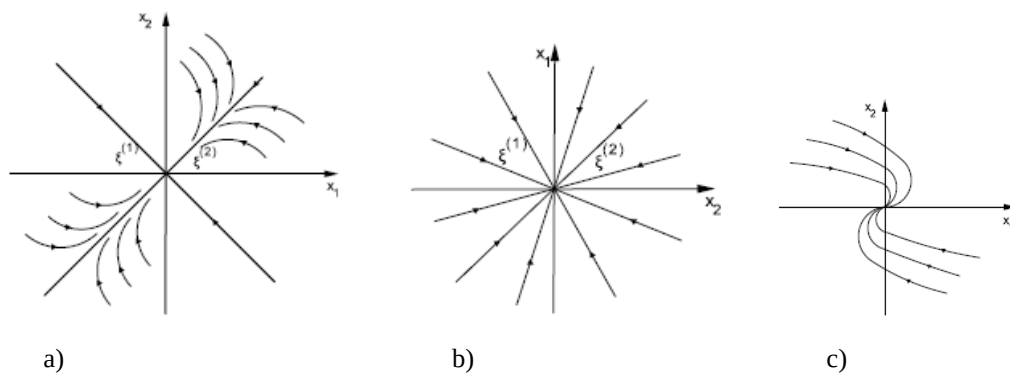
Fonte: Bessa (2011).

Definição A1.2.6: O ponto crítico isolado $(0, 0)$ do sistema (A1.6) é dito um **nó** se existe uma vizinhança desse ponto tal que todo caminho C nessa vizinhança tem as seguintes propriedades:

1. C é definido $\forall t > t_0$ (ou $\forall t < t_0$), para algum número t_0 ;
2. C aproxima de $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$ (ou quando $t \rightarrow -\infty$);
3. C entra em $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$ (ou quando $t \rightarrow -\infty$).

A Figura A1.4, a seguir, ilustra um ponto em nó.

Figura A1.4: Os diferentes tipos de pontos em nó: a) plano de fase autovalores negativos. b) autovalores repetidos. c) autovalor repetido com um autovetor associado



Fonte: Bessa (2011).

A1.3 A estabilidade e a estabilidade assintótica

Assumindo-se que $(0, 0)$ é ponto crítico isolado do sistema autônomo:

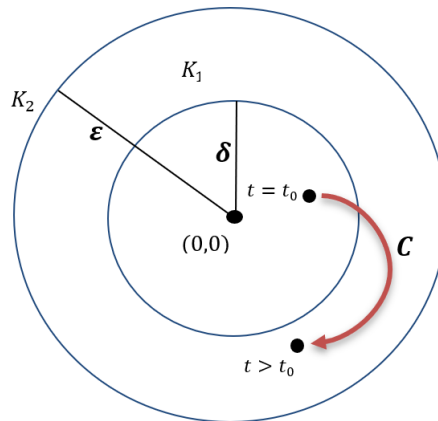
$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = P(x, y) \\ \frac{dy}{dt} = Q(x, y) \end{cases}, \quad (\text{A1.7})$$

Deseja-se introduzir o conceito de estabilidade desse ponto crítico. Para tal considere um caminho C definido por $x = f(t)$, e $y = g(t)$.

Seja $D(t) = \sqrt{(f(t))^2 + (g(t))^2}$ a distância entre os pontos $(0, 0)$ e $P = (f(t), g(t))$ sobre C .

Definição A1.3.1: O ponto crítico $(0, 0)$ é dito ser **estável** se para todo $\varepsilon > 0$, existe um $\delta > 0$ tal que todo caminho C para qual $D(t_0) < \delta$ para algum t_0 está definido para todo $t \geq t_0$ é tal que $D(t) < \varepsilon$ para todo $t_0 \leq t < +\infty$, como visto na Figura A1.5.

Figura A1.5: Conceito de estabilidade, mas não assintoticamente estável



Fonte: Tanaka (2018).

Observação: Como $D(t) = \sqrt{(f(t))^2 + (g(t))^2}$, a desigualdade $D(t_0) < \delta$ para algum valor de t_0 , significa que a distância entre $(0, 0)$ e o ponto P sobre C , é menor que δ em $t = t_0$. Isso significa que:

- (a) em $t = t_0$ P está no interior do círculo K_1 de raio δ e centrado em $(0, 0)$, como mostra a Figura A1.5.
- (b) A desigualdade $D(t_0) < \varepsilon$ para todo $t \geq t_0 < +\infty$ significa que para $t \geq t_0 < +\infty$, P está no interior do círculo K_2 de raio ε e centro $(0, 0)$;

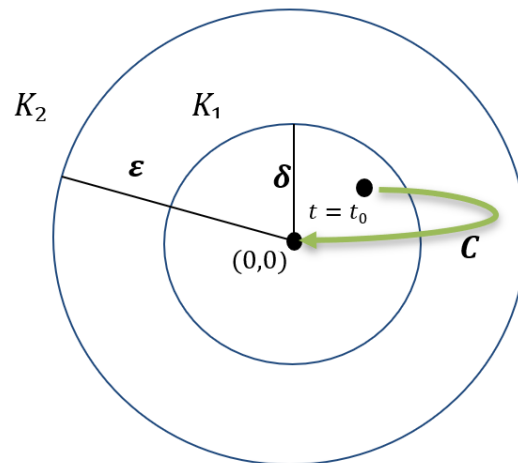
- (c) Resumindo, diz-se que $(0, 0)$ é estável se todo caminho C que está no interior do círculo K_1 de raio δ e centrado em $(0, 0)$ em $t = t_0$, permanecerá no círculo K_2 de raio ε e centro $(0, 0)$, para todo $t \geq t_0 < +\infty$.

Definição A1.3.2: O ponto crítico $(0, 0)$ é dito ser *assintoticamente estável* se:

1. Ele é estável;
2. Existe um número $\delta_0 > 0$ tal que se $D(t_0) < \delta_0$ para algum t_0 , então $\lim_{t \rightarrow +\infty} f(t) = 0$ e $\lim_{t \rightarrow +\infty} g(t) = 0$.

Portanto, dizer que $(0, 0)$ é assintoticamente estável significa que todo caminho C que está no interior do círculo K_1 de raio δ e centrado em $(0, 0)$ em $t = t_0$, permanecerá nesse círculo para todo $t_0 \leq t < +\infty$, isto é, P aproxima de $(0, 0)$ quando $t \rightarrow +\infty$. Como mostra a Figura A1.6:

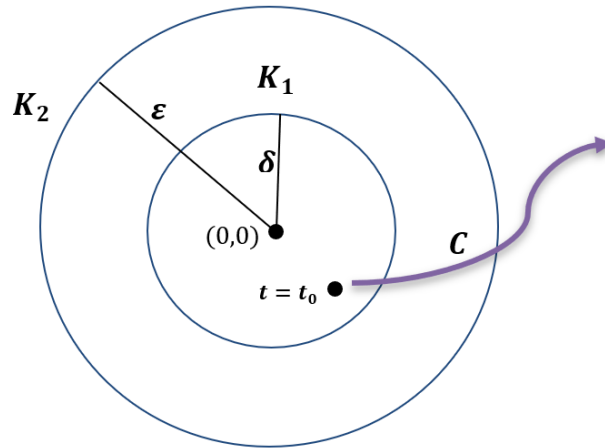
Figura A1.6: O conceito estabilidade assintótica



Fonte: Tanaka (2018).

Definição A1.3.3: O ponto crítico $(0, 0)$ é dito ser *instável* se ele não é estável. A representação é feita na Figura A1.7.

Figura A1.7: O conceito de instabilidade



Fonte: Tanaka (2018).

Para a análise da natureza do ponto crítico $(0, 0)$ e de sua estabilidade, vamos introduzir alguns resultados que facilitarão tal análise. Inicialmente considera-se um sistema linear autônomo da seguinte forma:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = ax + by \\ \frac{dy}{dt} = cx + dy \end{cases} \quad (\text{A1.8})$$

O sistema (A1.8) pode ser escrito na forma matricial, isto é:

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \text{ ou } \dot{X} = AX. \quad (\text{A1.9})$$

Note que $(0, 0)$ é um ponto crítico de (A1.9). Será assumido que a matriz A é não singular, ou seja, $\det(A) \neq 0$. Portanto $(0, 0)$ é o único ponto crítico desse sistema. Pode ser provado que as funções: $x(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t}$ e $y(t) = c_3 e^{\lambda_1 t} + c_4 e^{\lambda_2 t}$ são soluções do sistema (A1.8) e λ satisfaz a equação:

$$\lambda^2 - (a + d)\lambda + (ad - bc) = 0. \quad (\text{A1.10})$$

A equação (A1.10) é dita **equação característica** do sistema (A1.8) ou (A1.9).

A natureza do ponto crítico $(0, 0)$ pode ser determinada dependendo da natureza das raízes da equação característica (A1.10). Esses resultados serão enunciados a seguir.

Teorema A1.3.1: Natureza do ponto crítico

1. Se as raízes λ_1 e λ_2 são reais, desiguais e de mesmo sinal, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema (A1.8) é um nó;
2. Se as raízes λ_1 e λ_2 são reais, desiguais e de sinais opostos, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema (A1.8) é um ponto de sela;
3. Se as raízes λ_1 e λ_2 são reais e iguais, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema (A1.8) é um nó;
4. Se as raízes λ_1 e λ_2 formam um par complexo conjugado com parte real não nula, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema (A1.8) é um ponto de espiral;
5. Se as raízes λ_1 e λ_2 são imaginários puros, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema (A1.8) é um centro.

Teorema A1.3.2: Estabilidade assintótica

1. Se ambas as raízes λ_1 e λ_2 são reais e negativas ou complexas conjugadas com parte real negativa, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema (A1.9) é assintoticamente estável;
2. Se as raízes λ_1 e λ_2 são imaginários puros, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema (A1.9) é estável, mas não assintoticamente estável;
3. Se qualquer uma das raízes λ_1 e λ_2 são reais e positivas ou se as raízes são complexas conjugadas com parte real positiva, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema (A1.8) é instável.

A1.4 Pontos críticos e caminhos de sistemas não lineares.

Considera-se o sistema não linear autônomo da seguinte forma:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = P(x, y) \\ \frac{dy}{dt} = Q(x, y) \end{cases} \quad (\text{A1.11})$$

Com ponto crítico isolado $(0, 0)$. Assume-se que P e Q tem a forma:

$$P(x, y) = ax + by + P_1(x, y) \text{ e } Q(x, y) = cx + dy + Q_1(x, y), \quad (\text{A1.12})$$

sendo que:

1. a, b, c e d , constantes reais tais que:

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \neq 0; \quad (\text{A1.13})$$

2. $P_1(x, y)$ e $Q_1(x, y)$ tem derivadas parciais de primeira ordem contínuas para todo (x, y) e tais que:

$$\lim_{(x,y) \rightarrow (0,0)} \frac{P_1(x,y)}{\sqrt{x^2+y^2}} = \lim_{(x,y) \rightarrow (0,0)} \frac{Q_1(x,y)}{\sqrt{x^2+y^2}} = 0. \quad (\text{A1.14})$$

Então, o sistema (A1.8), sob as considerações anteriores toma a forma:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = ax + by + P_1(x, y) \\ \frac{dy}{dt} = cx + dy + Q_1(x, y) \end{cases}, \quad (\text{A1.15})$$

tais que a, b, c e d , satisfazem as condições 1 e 2 anteriores.

Observação: A condição (2) nos diz que os termos não lineares $P_1(x, y)$ e $Q_1(x, y)$ tendem a zero mais rapidamente do que os termos lineares, isto é, $ax + by$ e $cx + dy$.

Se $P(x, y)$ e $Q(x, y)$ em (A1.11) podem ser expandidos em série de potência em torno de $(0, 0)$, o sistema (A1.16) toma a forma:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{\partial P}{\partial x}(0,0)x + \frac{\partial P}{\partial y}(0,0)y + a_{12}x^2 + a_{22}xy + a_{21}y^2 + \dots \\ \frac{dy}{dt} = \frac{\partial Q}{\partial x}(0,0)x + \frac{\partial Q}{\partial y}(0,0)y + a_{12}x^2 + a_{22}xy + a_{21}y^2 + \dots \end{cases}. \quad (\text{A1.16})$$

O sistema (A1.11) é da forma dada por (A1.8) sendo $P_1(x, y)$ e $Q_1(x, y)$ os termos não lineares de altas ordem no membro direito de (A1.11). Nesse sistema, as condições (1) e (2) são satisfeitas e são tais que:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial P}{\partial x} & \frac{\partial P}{\partial y} \\ \frac{\partial Q}{\partial x} & \frac{\partial Q}{\partial y} \end{bmatrix}, \text{ é não singular.} \quad (\text{A1.17})$$

Definição A1.4.1: Dado o sistema não linear (A1.15), o **sistema linear associado** é dado por:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = ax + by \\ \frac{dy}{dt} = cx + dy \end{cases}, \quad (\text{A1.18})$$

o sistema (A1.18) é obtido do sistema não linear (A1.15), negligenciando os termos não lineares.

De uma forma geral, como a condição (2) diz que os termos não lineares $P_1(x, y)$ e $Q_1(x, y)$ tendem a zero mais rapidamente do que os termos lineares, isto é, $ax + by$ e $cx + dy$, é de se esperar que o comportamento dos caminhos do sistema (A1.18) próximos à origem sejam similares aos caminhos do sistema linear associado.

Em outras palavras, a natureza dos pontos críticos do sistema não linear é similar aos do sistema linear associado. Em geral isto é verdadeiro. Esse resultado será enunciado a seguir.

Considere o sistema não linear autônomo

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = ax + by + P_1(x, y) \\ \frac{dy}{dt} = cx + dy + Q_1(x, y) \end{cases}, \quad (\text{A1.19})$$

tais que a, b, c e d , satisfazem as condições 1. e 2. anteriores e o **sistema linear associado**:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = ax + by \\ \frac{dy}{dt} = cx + dy \end{cases}, \quad (\text{A1.20})$$

Suponha que ambos os sistemas tenham ponto crítico isolado em $(0, 0)$. Sejam λ_1 e λ_2 as raízes da equação característica do sistema linear associado, isto é:

$$\lambda^2 - (a + d)\lambda + (ad - bc) = 0. \quad (\text{A1.21})$$

Tem-se o seguinte resultado:

Teorema A1.4.1: Natureza do ponto crítico de sistemas não lineares

1. Se as raízes λ_1 e λ_2 são **reais, desiguais e de mesmo sinal**, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado e do sistema não linear é um **nó**;
2. Se as raízes λ_1 e λ_2 são **reais, desiguais e de sinais opostos**, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado e do sistema não linear é um **ponto de sela**;
3. Se as raízes λ_1 e λ_2 são **reais e iguais** e não é tal que $a = d \neq 0$ e $b = c = 0$, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado e do sistema não linear é um **nó**;
4. Se as raízes λ_1 e λ_2 formam **um par complexo conjugado com parte real não nula**, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado e do sistema não linear é um **ponto espiral**;
5. Se as raízes λ_1 e λ_2 são **reais e iguais** e são tais que $a = d \neq 0$ e $b = c = 0$, então embora o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado seja um **nó**, ele pode ser um **nó** ou **ponto em espiral** do sistema não linear;
6. Se as raízes λ_1 e λ_2 são **imaginários puros**, então embora o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado seja um **centro**, ele pode ser um **centro** ou **ponto em espiral** do sistema não linear.

Com relação a estabilidade dos pontos críticos do sistema não linear, tem-se o seguinte resultado:

Teorema A1.4.2: Estabilidade assintótica para pontos críticos de sistemas não lineares.

1. Se ambas as raízes λ_1 e λ_2 são **reais e negativas ou complexas conjugadas com parte real negativa**, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado e do sistema não linear é **assintoticamente estável**;

2. Se as raízes λ_1 e λ_2 são **imaginários puros**, então embora o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado seja **estável**, ele **não é necessariamente um ponto crítico estável** do sistema não linear. Ele pode ser ou **assintoticamente estável** ou **estável** mas **não assintoticamente estável ou instável**;
3. Se qualquer uma das raízes λ_1 e λ_2 são **reais e positivas** ou se as raízes são **complexas conjugadas com parte real positiva**, então o ponto crítico $(0, 0)$ do sistema linear associado e do sistema não linear é **instável**.

A1.5 Teoria de Lyapunov para sistemas não lineares

Um dos primeiros a desenvolver estudos sobre sistemas autônomos foi o matemático francês Jules Henri Poincaré (1854-1912), que é responsável pelos conceitos de retrato de fase, análise de pontos críticos e estabilidade.

O matemático e físico russo Aleksandr Mikhailovich Lyapunov (1857 – 1918) publicou seu primeiro trabalho sobre estabilidade em 1892 como tese de doutorado, intitulado “The General Problem of Motion Stability” (SILVA, 2013; MONTEIRO 2006).

Segundo Silva (2003), o método da linearização de Lyapunov, também conhecido como primeiro método de Lyapunov, é devido a Poincaré, que divulgou seu trabalho com o nome de linearização de Lyapunov. Este método possibilita investigar localmente a estabilidade assintótica de um sistema não-linear a partir da contraparte linear associada ao sistema original. Para isso basta aproximar o sistema não linear em torno de seus pontos de equilíbrio por série de Taylor, encontrando a matriz Jacobiana, e a sua estabilidade assintótica é definida através do sinal dos autovalores. Trata-se de um resultado de grande relevância prática, pois serve de base para projetos de controladores utilizando modelos linearizados em torno dos pontos de equilíbrio.

Nesta seção trataremos da teoria de Lyapunov para sistemas não lineares, a qual foi utilizada neste trabalho. De acordo Bessa (2015), Silva (2003) e Monteiro (2006). Começando pela linearização de sistemas autônomos descrita a seguir.

A1.5.1 Linearização de sistemas autônomos

Seja o sistema

$$\dot{X} = f(X), \text{ no qual } X \in \mathbb{R}^n \text{ e } f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \quad (\text{A1.22})$$

Considerando que $f(X)$ seja definida na origem e derivável uma vez, ou seja, de classe C^1 , podemos reescrever o sistema (A1.22) como:

$$\dot{X} = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{X_e} X + g(X), \quad (\text{A1.23})$$

em que $\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{X_e}$ representa o primeiro termo do desenvolvimento de $f(X)$ em série de Taylor em torno do ponto de equilíbrio $X_e = 0$ e $g(X)$ representa os termos não lineares.

Por definição, $\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)$ é a matriz Jacobiana de $f(X)$, que será chamada de A :

$$A = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right) = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right) & \dots & \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_n} \right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_1} \right) & \dots & \left(\frac{\partial f_n}{\partial x_n} \right) \end{pmatrix} \quad (\text{A1.24})$$

Reescrevendo o sistema (A1.23) temos:

$$\dot{X} = AX + g(X), \quad (\text{A1.25})$$

Para linearizar o sistema (A1.25) deve-se desprezar os termos não lineares $g(X)$, obtendo apenas:

$$\dot{X} = AX, \quad (\text{A1.26})$$

A1.5.2 Método da linearização de Lyapunov

O método da linearização de Lyapunov, ou primeiro método de Lyapunov consiste em analisar a matriz A do sistema linearizado (1.26) para concluir sobre a estabilidade do sistema não linear, e afirma que (SILVA, 2003):

Teorema A1.5.2 Primeiro método de Lyapunov

1. Se o modelo linearizado (A1.26) é assintoticamente estável, então o sistema original (A1.22) é assintoticamente estável em torno de X_e .

2. Se o modelo linearizado (A1.26) é instável, então o sistema original (A1.22) é instável em torno de X_e .

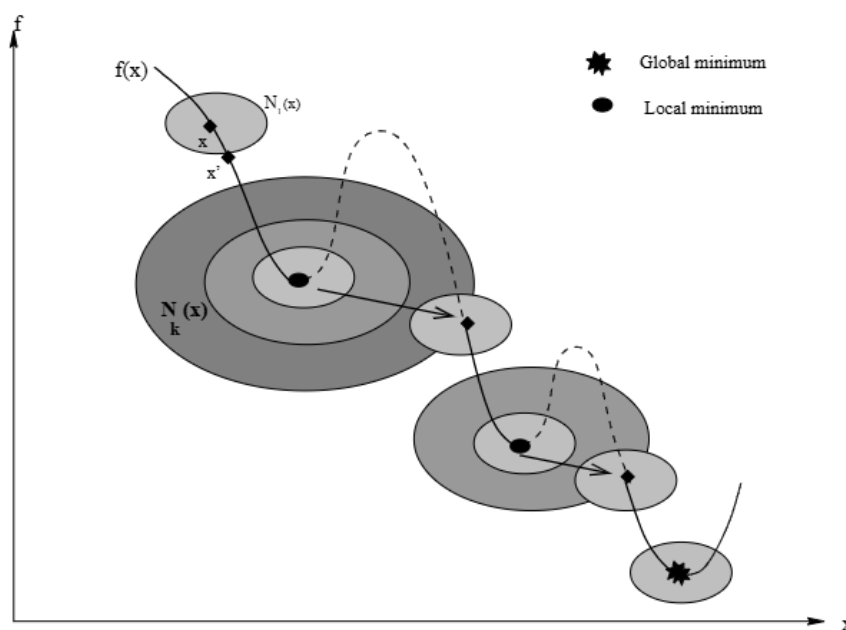
A partir do Teorema 1.5 pode-se dizer que, se o modelo linearizado (A1.26) é estável, mas não assintoticamente estável, ou seja, algum autovalor de A , em (A1.26), tem parte imaginária não nula, nada se pode afirmar sobre o sistema original (A1.26).

Todos os resultados sobre sistemas autônomos apresentados neste apêndice, serão explorados no Capítulo 2, quando apresentam-se e demonstram-se resultados sobre a análise qualitativa do modelo sobre biodigestores indianos proposto no Capítulo 1.

Apêndice B - Heurística VNS

A Figura B.1 apresenta um esquema básico da Busca de Vizinhança Variável (VNS). Neste esquema, o processo de otimização é representado de forma simplificada, destacando as etapas fundamentais da abordagem VNS.

Figura B.1 – Esquema básico do algoritmo VNS



Fonte: Hansen & Mladenović (2007).

De acordo com Hansen & Mladenović (2007), a Busca de Vizinhança Variável (VNS) é uma metaheurística eficaz para resolver uma variedade de problemas de otimização. No centro da figura, temos a representação do ponto atual da busca, denotado por " x " e seu valor de função objetivo " $f(x)$ ". Esse ponto é considerado o incumbente, ou seja, a solução atual em que a busca se encontra.

Ao redor do ponto " x ", são representadas diferentes vizinhanças, denotadas por " $N(x)$ ", que são conjuntos de soluções próximas ao ponto atual. A ideia central da VNS é explorar essas diferentes vizinhanças de forma sistemática, alterando a estrutura de vizinhança para buscar soluções melhores.

O processo de busca na VNS envolve a avaliação de soluções em cada vizinhança, buscando melhorias em relação ao incumbente atual. Caso uma solução melhor seja encontrada em uma determinada vizinhança, o ponto atual é atualizado para essa nova solução e o processo de busca continua.

Essa abordagem de busca iterativa, combinada com a exploração de diferentes estruturas de vizinhança, permite que a VNS encontre soluções de alta qualidade para problemas de otimização complexos, adaptando-se dinamicamente às características do espaço de busca e evitando ficar presa em ótimos locais.

Os resultados resumidos neste apêndice serão considerados quando da aplicação da heurística VNS utilizados para a determinação de soluções aproximadas ao modelo de otimização de produção de biogás proposto no Capítulo 4.