

Modelarea matematică și simularea proceselor care au loc într-un digester

Petrică D. Toma

S.C. Apa Nova București S.A. Autor corespondent: P. D. Toma,
danielpetre2006@yahoo.com

Abstract. Mathematical modelling and simulation of processes taking place in a digester. In this paper is presented the mathematical model and simulation of the processes taking place in a digester effluent for urban type based on kinetic equations describing these processes and developed using Scilab-Xcos program. So you can see how it evolves over time the concentration of organic substrate (S_1), the total concentration of AGV (volatile fatty acids) (S_2), acidogenic bacteria concentration (X_1), methanogenic bacteria concentration (X_2), the total concentration of inorganic carbon (C), total alkalinity (Z), gas flow (q_M), CO_2 flow (q_C) and the pH of the solution in a digester.

Key Words: digester acidogenic bacteria, methanogenic bacteria, mathematical modeling, simulation, Xcos.

Introducere. Epurarea biologică este realizată cu ajutorul microorganismelor, care îndepărtează substanțele organice din apă utilizându-le ca hrană, respectiv drept sursă de carbon. O parte din materiile organice folosite de microorganisme servesc la producerea energiei necesare mișcării și desfășurării altor reacții consumatoare de energie, legate de sinteza materiei vii, adică de reproducerea microorganismelor (Cuculeanu & Mărculescu 2004).

Microorganismele (bacterii și enzime) sunt forme de viață unicelulare care posedă trei caracteristici fundamentale: 1. capacitatea de a digera substanțe organice folosindu-le ca hrană; 2. capacitatea de a produce enzime; 3. capacitatea de a se reproduce.

Bacteriile sunt organisme microscopice unicelulare de natură vegetală, iar enzimele sunt compuși organici de natură proteică prezente în celulele vii, care dirijează procesele de sinteză și de degradare din materiile organice. În momentul în care acestea vin în contact cu substanțele nutritive, bacteriile încep să se hrănească și, grație capacității lor de a emite enzime, le transformă în apă și anhidridă carbonică (Badiu 2012).

Procesele biologice, indiferent că sunt aerobe sau anaerobe, sunt, probabil, cele mai complexe din știința modernă. Aceasta deoarece apar parametri de natură diferită: chimică, fizică, biologică. Pentru modelare se fac considerații fizice, chimice și biologice care apar în ecuațiile care descriu procesul. Studiile efectuate nu au reușit să privească problema reactoarelor biologice în toată complexitatea ei. Astfel, toate reacțiile cinetice de prelucrare a materiilor organice analizează procesul numai pe culturi biologice pure, fără a putea privi totalitatea microorganismelor ce apar și realizează degradarea biologică (Robescu et al 2004).

Procesele de degradare anaerobă a apelor reziduale sunt utilizate pentru tratarea influențelor care conțin cantități importante de substanțe organice insolubile, cum sunt nămolurile reziduale de la stațiile de epurare biologică, reziduurile industriale concentrate, reziduurile zootehnice bogate în dejecții animaliere etc.

Tehnologia de tratare anaerobă implică participarea unor comunități complexe de microorganisme, care determină degradarea și fermentarea materialelor organice, care, în final, sunt convertite în metan și dioxid de carbon (Petre 2011).

Procesele anaerobe depind foarte mult de temperatură. Eficiența maximă se realizează la temperaturi de 35-45°C (condiții mezofile). Deși sunt mai sensibile la schimbările de temperatură față de procesele aerobe, acestea funcționează la temperaturi de 10-45°C fără schimbări majore în ecosistemul de microorganisme.

Un alt parametru care influențează procesele anaerobe îl reprezintă pH-ul. Valoarea optimă pentru bacteriile producătoare de acid (acidogene) este 5,5-6,5 iar pentru bacteriile producătoare de metan (metanogene) este 7,8-8,2. În situația în care coexistă ambele culturi, pH-ul optim este 6,8-7,4. Deoarece metanogeneza este considerată etapa determinantă de viteză, este necesar să se mențină digesterul la pH aproape de neutru (Costache 2011).

Procesul de tratare anaerobă a apelor reziduale se realizează în sistem semi-continuu, în tancuri mari, închise etanș, prevăzute cu dispozitive de colectare a metanului sau în bazine anaerobe deschise, în care datorită adâncimii mari, concentrației ridicate în substanțe organice a mediilor reziduale, precum și datorită barbotării continue determinate de metanul care se degajă, se realizează o epuizare a oxigenului.

În cursul anaerobiozei, creșterea lentă a microorganismelor asigură conversia celei mai mari părți din substanțele organice în CO_2 și CH_4 , cu producerea unei mici cantități de biomasă microbiană.

Metanul format este colectat și folosit ca sursă de energie, asigurând fie autonomia energetică a stației de epurare, fie utilizarea sa pentru încălzire sau producere de electricitate (Petre 2011).

În Figura 1 este prezentată schema unui digester anaerobic, iar în Figura 2 este prezentat procesul simplificat de digestie anaerobă.

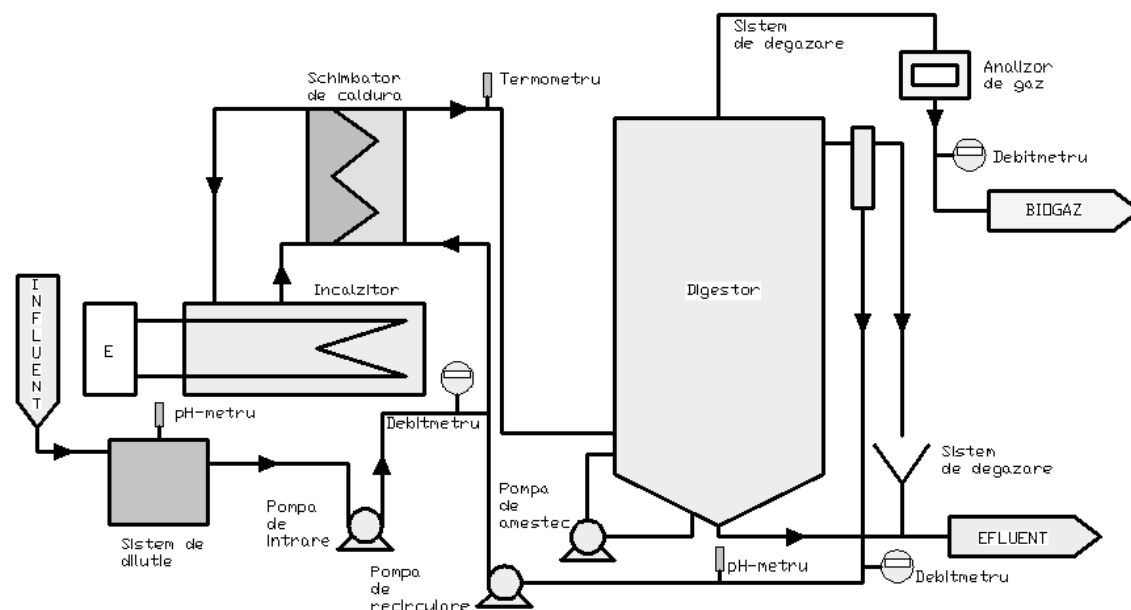


Figura 1. Schema unui digester anaerobic (Bernard et al 2001).

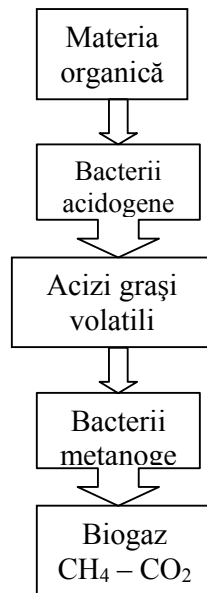


Figura 2. Procesul simplificat de digestie anaerobă (Salomon 2007).

În cadrul acestui articol se va prezenta un model matematic al proceselor de biodegradare a materiei organice care au loc într-un digester anaerobic.

Modelul matematic al proceselor de biodegradare a materiei organice într-un digester. Bacteriile acidogene și metanogene intervin în următoarele două reacții biologice (Bernard et al 2001; Bibes 2004):

- Acidogeneza (cu rata de reacție $r_1 = \mu_1 * X_1$):

$$k_1 * S_1 \xrightarrow{r_1} X_1 + k_2 * S_2 + k_4 * CO_2$$
- Metanogeneza (cu rata de reacție $r_2 = \mu_2 * X_2$):

$$k_3 * S_2 \xrightarrow{r_2} X_2 + k_5 * CO_2 + k_6 * CH_4$$

Ecuțiile matematice care descriu procesele de biodegradare a materiei organice într-un digester sunt următoarele (Bernard et al 2001; Bibes 2004):

$$\frac{dX_1}{dt} = (\mu_1 - \alpha * D) * X_1 \quad (1)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = (\mu_2 - \alpha * D) * X_2 \quad (2)$$

$$\frac{dZ}{dt} = D * (Z_{in} - Z) \quad (3)$$

$$\frac{dS_1}{dt} = D * (S_{1in} - S_1) - k_1 * \mu_1 * X_1 \quad (4)$$

$$\frac{dS_2}{dt} = D * (S_{2in} - S_2) + k_2 * \mu_1 * X_1 - k_3 * \mu_2 * X_2 \quad (5)$$

$$\frac{dC}{dt} = D * (C_{in} - C) - q_C + k_4 * \mu_1 * X_1 + k_5 * \mu_2 * X_2 \quad (6)$$

$$\mu_1 = \mu_{1max} * \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} \quad (7)$$

$$\mu_2 = \mu_{2max} * \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + \frac{S_2^2}{K_{I2}}} \quad (8)$$

$$q_C = k_{La} * (C + S_2 - Z - K_H * P_C) \quad (9)$$

$$P_C = \frac{\Phi - \sqrt{\Phi^2 - 4 * K_H * P_T * (C + S_2 - Z)}}{2 * K_H} \quad (10)$$

$$\Phi = C + S_2 - Z + K_H * P_T + \frac{k_6}{k_{La}} * \mu_2 * X_2 \quad (11)$$

$$q_M = k_6 * \mu_2 * X_2 \quad (12)$$

$$pH = -\log_{10} \left(K_b * \frac{C - Z + S_2}{Z - S_2} \right) \quad (13)$$

În care:

- S_1 – concentrația de substrat organic [mg L^{-1}];
- S_2 – concentrația totală de AGV (acizi grași volatili) [mmol L^{-1}];
- X_1 – concentrația de bacterii acidogene [mg L^{-1}];
- X_2 – concentrația de bacterii metanogene [mg L^{-1}];
- C – concentrația totală de carbon anorganic [mg L^{-1}];
- Z – alcalinitatea totală [mmol L^{-1}];
- D – factor de diluție [zi^{-1}];
- q_M – debitul molar de gaz metan [$\text{mmol} * \text{L}^{-1} * \text{zi}^{-1}$];
- q_C – debitul molar de CO_2 [$\text{mmol} * \text{L}^{-1} * \text{zi}^{-1}$];
- μ_{1max} – viteza maximă de creștere a bacteriilor acidogene [zi^{-1}];
- μ_{2max} – viteza maximă de creștere a bacteriilor metanogene [zi^{-1}];
- K_{S1} – constanta de saturație asociată substratului acidogen S_1 [g L^{-1}];
- K_{S2} – constanta de saturație asociată substratului metanogen S_2 [g L^{-1}];
- K_{I2} – constanta de inhibiție asociată substratului metanogen S_2 [mmol L^{-1}];
- K_{La} – rata de transfer lichid/gaz [zi^{-1}];
- K_H – constanta Henry's [$\text{mmol} * \text{L}^{-1} * \text{atm}^{-1}$];
- k_1 – eficiența pentru degradarea de DCO [-];
- k_2 – eficiența pentru producția de AGV [mmol g^{-1}];
- k_3 – eficiența pentru consumul de AGV [mmol g^{-1}];
- k_4 – eficiența pentru producția de CO_2 în acidogeneză [mmol g^{-1}];
- k_5 – eficiența pentru producția de CO_2 în metanogeneză [mmol g^{-1}];
- k_6 – eficiența pentru producția de metan [mmol g^{-1}];
- P_T – presiunea totală [atm];
- P_C – presiunea parțială de CO_2 [atm].

Plecând de la ecuațiile de mai sus, am realizat în Scilab-Xcos schemele din Figurile 3, 4 și 5, cu ajutorul cărora se pot face simulări pentru diverse scenarii. Astfel, pentru nămolurile reziduale de la stațiile de epurare biologică se poate vedea cum evoluează în timp în soluția dintr-un digester anaerob următorii parametri:

- concentrația de substrat organic (S_1);
- concentrația totală de AGV (acizi grași volatili) (S_2);
- concentrația de bacterii acidogene (X_1);
- concentrația de bacterii metanogene (X_2);
- concentrația totală de carbon anorganic (C);
- alcalinitatea totală (Z);
- debitul de gaz metan (q_M);
- debitul de CO_2 (q_C);
- pH-ul.

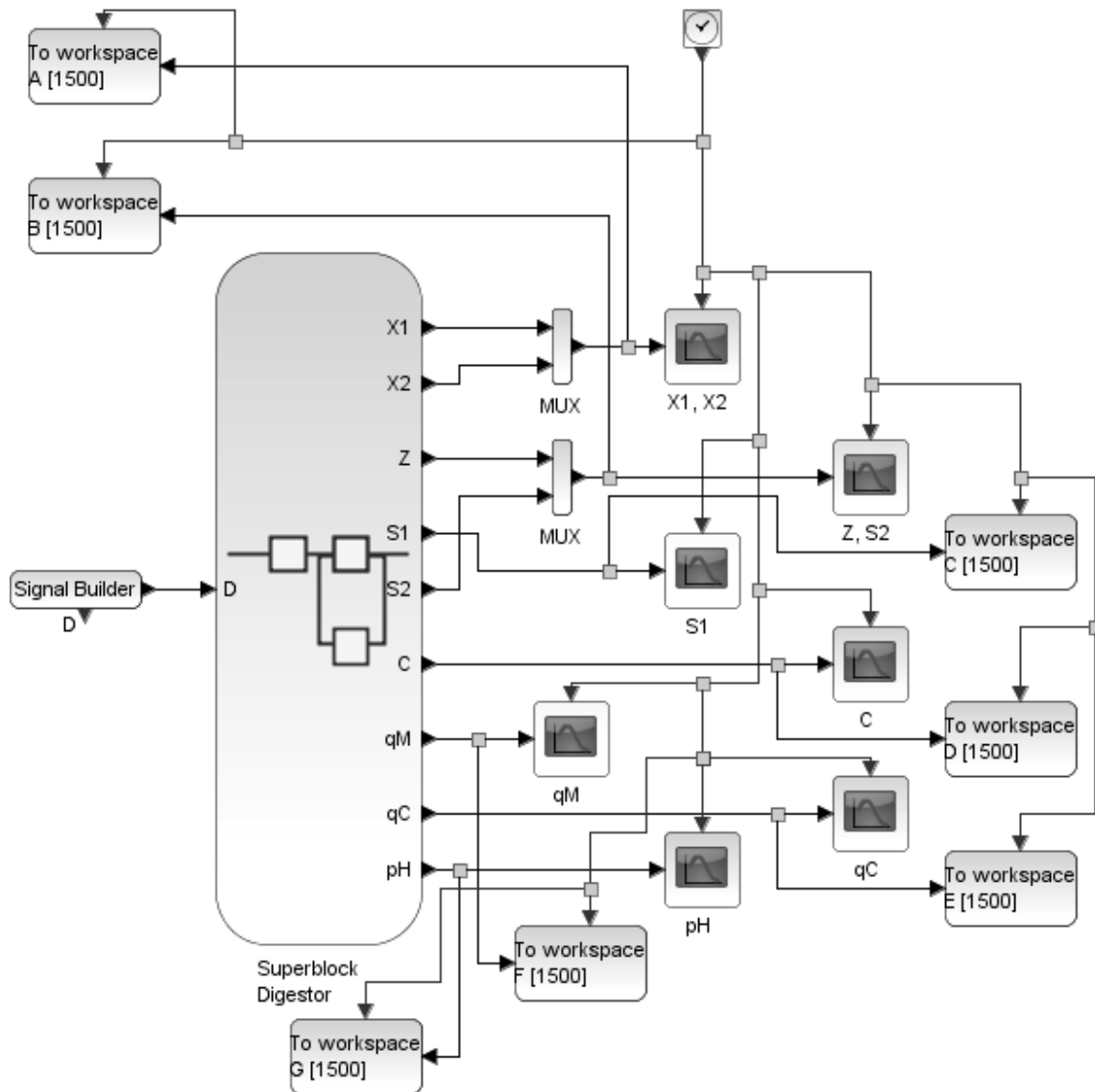


Figura 3. Schema Xcos de simulare a proceselor dintr-un digestor anaerob.

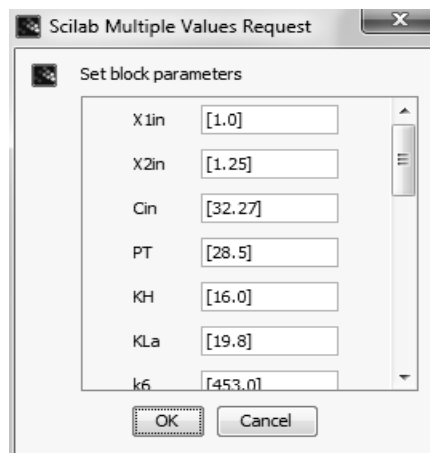


Figura 4. Caseta cu parametrii Superblock Digestor din Figura 2.

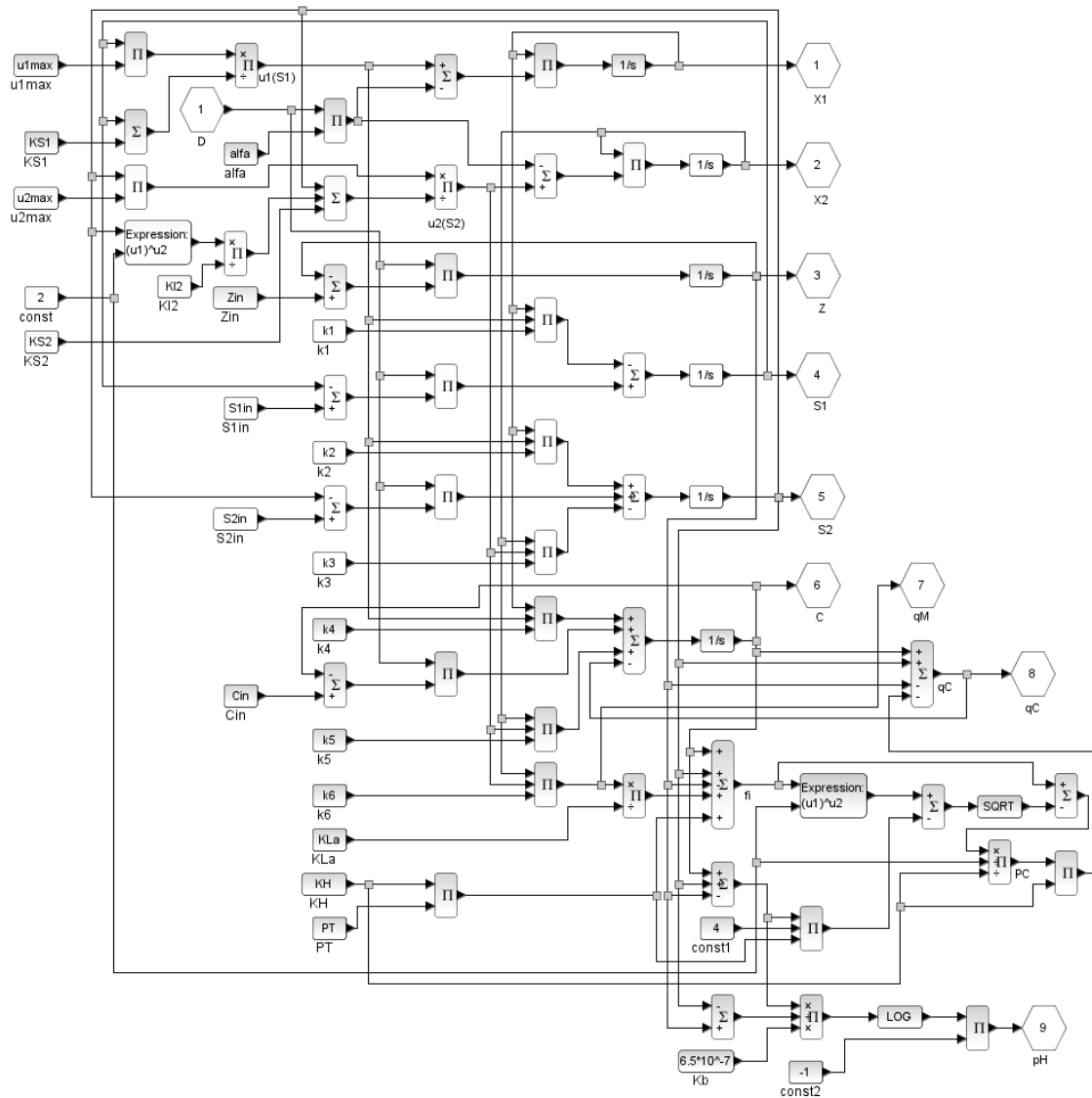


Figura 5. Schema Xcos Superblock Digester din Figura 3.

Exemplu de simulare. Date inițiale:

- factorul de diluție D [zi^{-1}] are evoluția în perioada de timp simulată conform graficului din Figura 6.
- $\mu_{1max} = 1,2 zi^{-1}$; $K_{S1} = 8,9 g L^{-1}$; $\alpha = 0,5$; $\mu_{2max} = 0,74 zi^{-1}$; $K_{I2} = 138,27 mmol L^{-1}$; $K_{S2} = 25 mmol L^{-1}$; $K_{La} = 19,8 zi^{-1}$; $K_H = 16 mmol * L^{-1} * atm^{-1}$; $P_T = 28,5 atm$; $k_1 = 42,14$; $k_2 = 116,5 mmol g^{-1}$; $k_3 = 268 mmol g^{-1}$; $k_4 = 50,6 mmol g^{-1}$; $k_5 = 343,6 mmol g^{-1}$; $k_6 = 453 mmol g^{-1}$;
- condițiile inițiale: $X_{1in} = 1 mg L^{-1}$; $X_{2in} = 1,25 mg L^{-1}$; $C_{in} = 32,27 mmol L^{-1}$; $S_{1in} = 6,86 g L^{-1}$; $S_{2in} = 110,06 mmol L^{-1}$; $Z_{in} = 138,27 mmol L^{-1}$ (Bernard et al 2001; Bibes 2004).

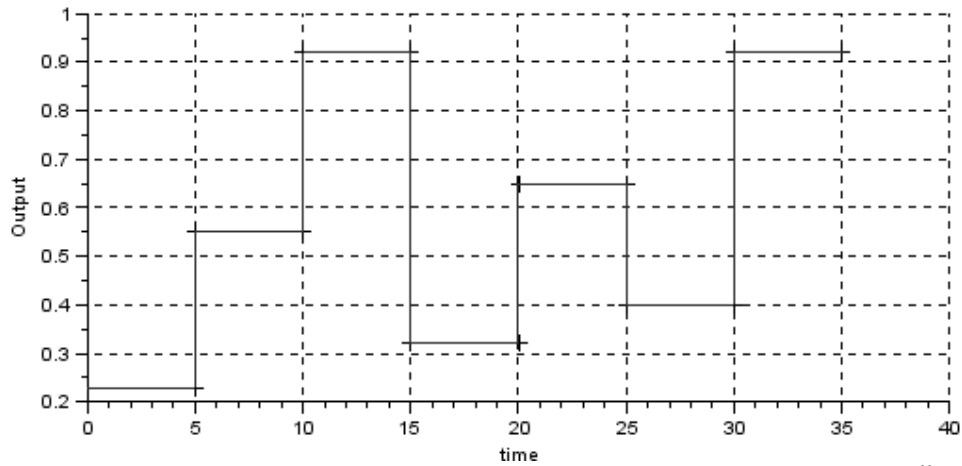


Figura 6. Evoluția factorului de diluție (D) pe perioada de timp simulată.

În urma simulării se poate vedea grafic cum au evoluat în perioada de timp simulată și pentru condițiile pentru care s-a făcut simularea concentrația de substrat organic (S_1), concentrația totală de AGV (acizi grași volatili) (S_2), concentrația de bacterii acidogene (X_1), concentrația de bacterii metanogene (X_2), concentrația totală de carbon anorganic (C), alcalinitatea totală (Z), debitul de gaz metan (q_M), debitul de CO_2 (q_C) și pH-ul soluției dintr-un digester anaerob (Figurile 7-13).

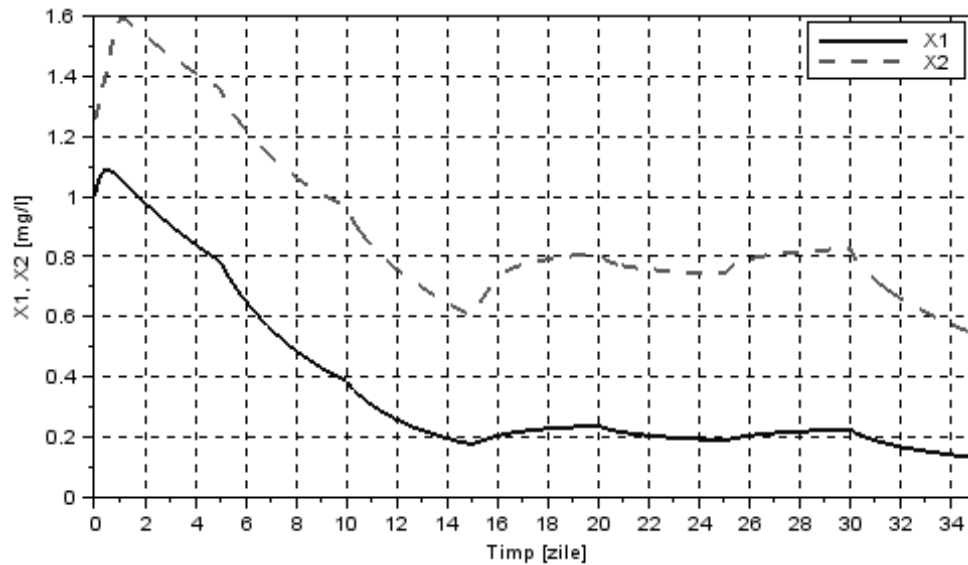


Figura 7. Evoluția în timp a concentrației de bacterii acidogene (X_1) și a concentrației de bacterii metanogene (X_2) în soluția dintr-un digester anaerob.

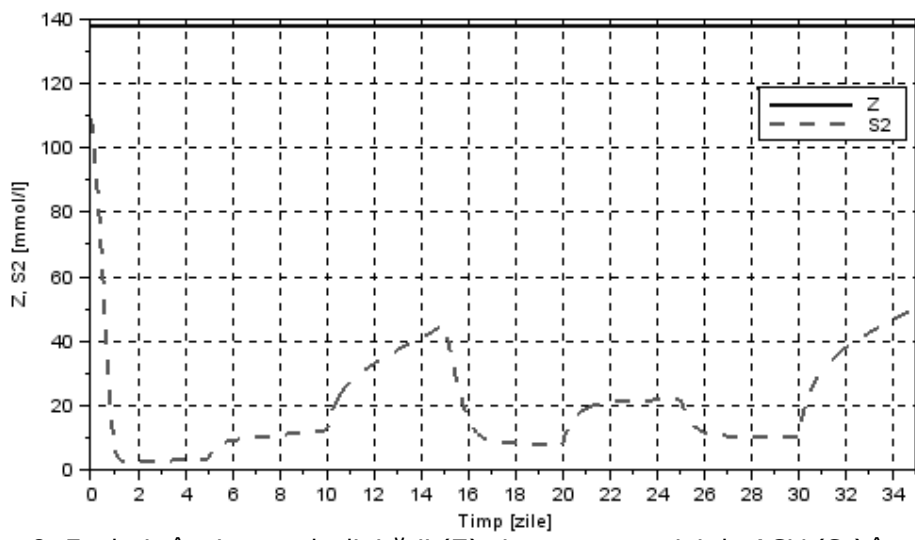


Figura 8. Evoluția în timp a alcalinității (Z) și a concentrației de AGV (S_2) în soluția dintr-un digester anaerob.

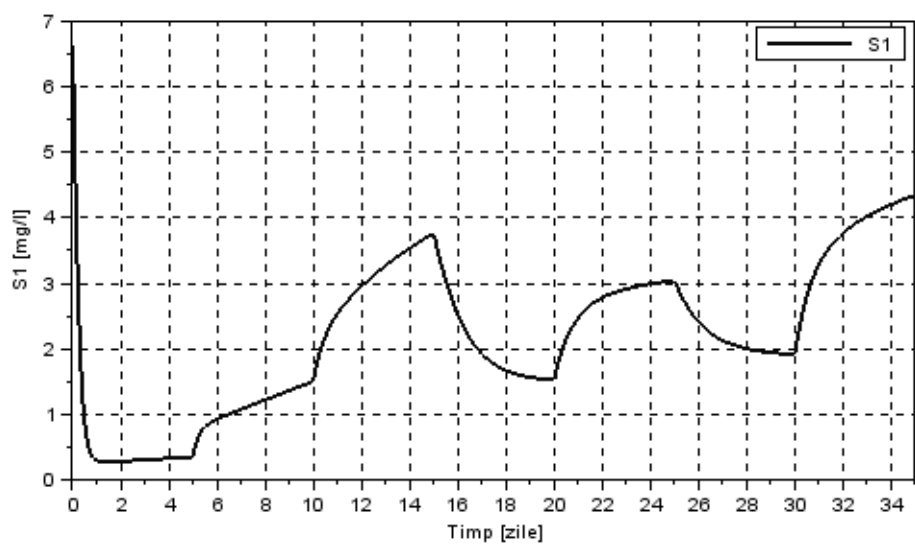


Figura 9. Evoluția în timp a concentrației de substrat organic S_1 , în soluția dintr-un digester anaerob.

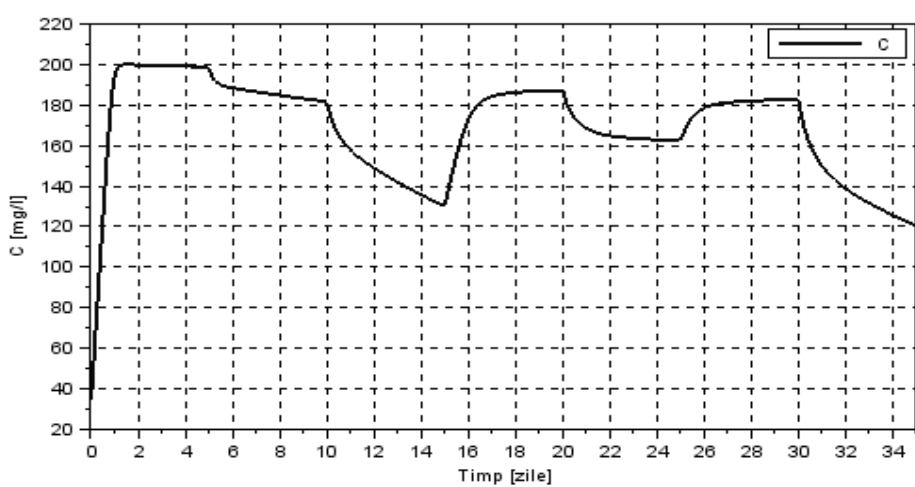


Figura 10. Evoluția în timp a concentrației de carbon inorganic C, în soluția dintr-un digester anaerob.

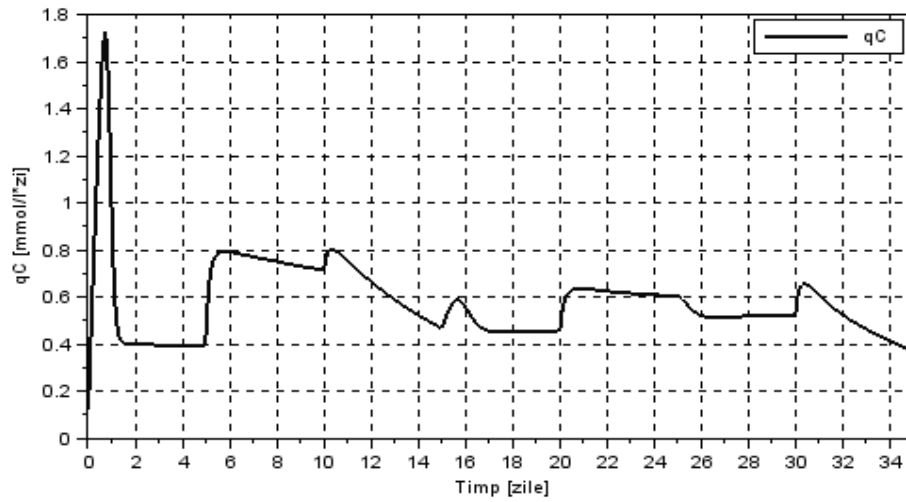


Figura 11. Evoluția în timp a debitului de CO₂, într-un digester anaerob.

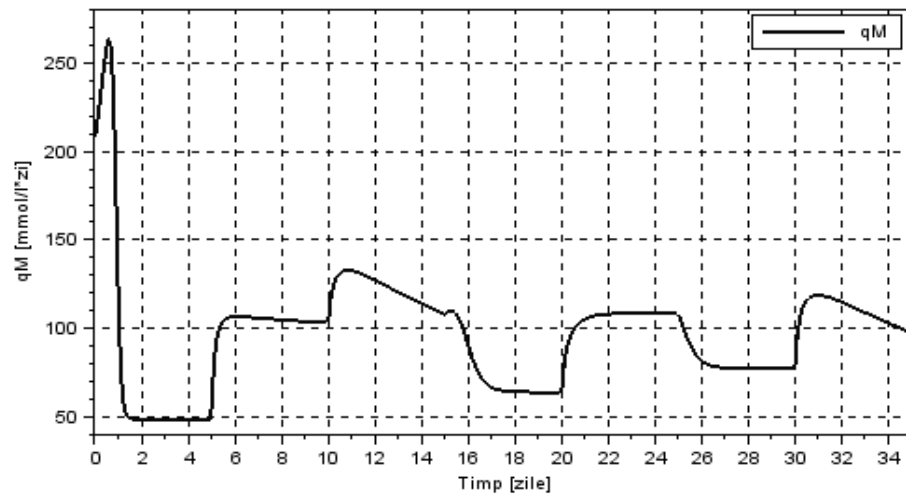


Figura 12. Evoluția în timp a debitului de gaz metan, într-un digester anaerob.

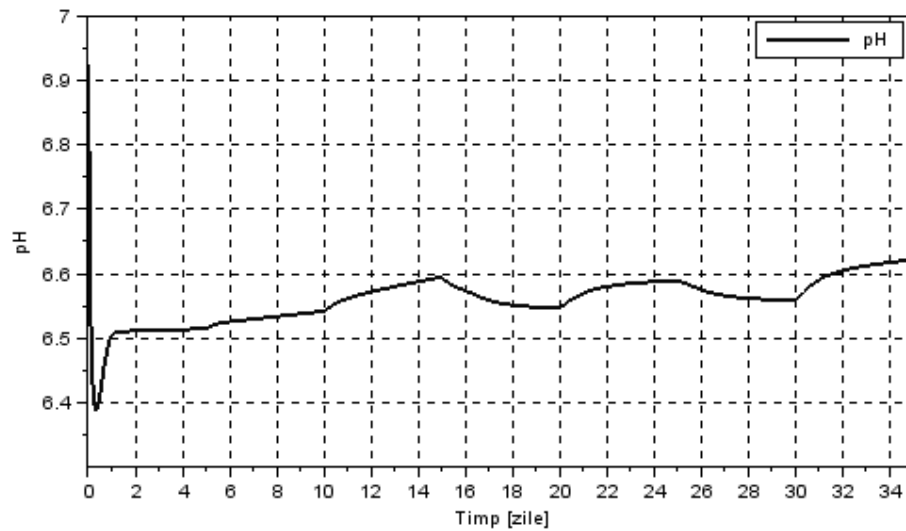


Figura 13. Evoluția în timp a pH-ului soluției dintr-un digester anaerob.

Concluzii. Programul de calcul (Figurile 3, 4 și 5) elaborat de autorul acestui articol în Scilab-Xcos, rezolvă ecuațiile matematice (1-13) care descriu evoluția în timp a: concentrației de substrat organic (S_1), concentrației totale de AGV (acizi grași volatili) (S_2), concentrației de bacterii acidogene (X_1), concentrației de bacterii metanogene (X_2), concentrației totale de carbon anorganic (C), alcalinității totale (Z), debitului molar de gaz metan (q_M), debitului molar de CO_2 (q_C) și pH-ului soluției dintr-un digester. Astfel, acest program este util la proiectarea și exploatarea digesterelor biologice, putându-se face simulări și astfel se poate vedea cum au evoluat în perioada de timp simulată și pentru condițiile specifice fiecărui caz în parte parametrii mai sus menționați.

Bibliografie

- Badiu N., 2012 Aplicații practice ale biotehnologiilor pentru epurarea apelor uzate rezultate din gospodăriile individuale ale populației, http://www.biotehнологia.ro/documente/ian2012/Biotehнологii_pentru_tratarea_apelor_uzate.pdf.
- Bernard O., Hadi-Sadok Z., Dochain D., Genovesi A., Steyer J.P., 2001 Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process. *Biotechnology and Bioengineering* 75(4):424-438.
- Bibes G., 2004 Modélisation de procédés de traitement des eaux et reconstruction de grandeurs physico-chimiques. These L'Université de Poitiers.
- Costache C., Importanța energetică a biotehnologiilor anaerobe, <http://www.biotehнологia.ro/documente/dec2011/Cristina%20Costache.pdf>.
- Cuculeanu G., Mărculescu C., 2004 Modelarea nitrificării apelor uzate. *Economia* 1.
- Petre M., 2011 Tendințe actuale și de perspectivă în domeniul biotehnologiilor de epurare a apelor reziduale, <http://www.biotehнологia.ro/documente/dec2011/Marian%20Petre.pdf>.
- Robescu D., Verestoy A., Lanyi S., Robescu D., 2004 Modelarea și simularea proceselor de epurare. Editura Tehnică, București.
- Salomon K. R., 2007 Avaliação Técnico-Econômica e Ambiental da Utilização do Biogás Proveniente da Biodigestão da Vinhaça em Tecnologias para Geração de Electricidade. Tese de doutorado, Universidade Federal de Itajuba.

Autori:

Petrică Daniel Toma, S.C. Apa Nova București S.A., București, România, e-mail: danielpetre2006@yahoo.com

Cum se citează acest articol:

Toma P. D., 2013 Modelarea matematică și simularea proceselor care au loc într-un digester. *Ecoterra* 35:15-24.