

RAPORT ȘTIINȚIFIC ȘI TEHNIC – ETAPA I, PROIECT Nr. 269/2014 – BIOCON

Rezumat

Etapa 1 a proiectului Nr. 269/2014 – BIOCON (Modelarea matematică a proceselor de digestive anaerobă și de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor. Stabilirea modelului matematic al procesului global) a constat în realizarea a trei activități, după cum urmează: **Activitatea A1.1**–*Modelarea matematică a procesului de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor și analiza acestuia prin simulare numerică*, **Activitatea A1.2** – *Stabilirea modelului matematic al digesterului anaerob și analiza acestuia prin simulare numerică*, **Activitatea A1.3** – *Cuplarea celor două modele pentru realizarea modelului matematic global al instalației de tip biorafinărie*. Cele trei activități **au fost realizate integral** și au rolul de a analiza modele matematice pentru fiecare proces în parte și pentru instalația de tip biorafinărie, modele care să exprime cât mai fidel dinamica proceselor și care, ulterior, să fie utilizate în dezvoltarea algoritmilor de control.

În cadrul **activității A1.1** a fost tratat procesul de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor. Au fost investigate două modele matematice, după cum urmează: 1. Modelul matematic al procesului de creștere fotosintetică a microalgelor cu limitare de lumină, cu cele trei componente ale sale (modelul de transfer radiativ, modelul biologic și cel termodinamic) și 2. Modelul Droop, în care componenta nutrițională este limitată. Ambele modele matematice au fost analizate prin simulare numerică, astfel: s-au determinat caracteristicile statice ale procesului și au fost stabilite unele regimuri de funcționare posibile; fiecare model matematic a fost liniarizat în punctele de funcționare alese și s-a analizat posibilitatea reducerii ordinului modelului matematic prin analiza valorilor singulare Hankel, pe toate canalele de interacțiune; au fost apoi stabilite proprietățile modelului matematic liniarizat. În cazul primului model matematic al procesului de creștere fotosintetică a microalgelor cu limitare de lumină analiza Hankel a arătat că modelul procesului poate fi redus de la ordinul 16 la ordinul 3, prin utilizarea doar a componentelor de medie și joasă frecvență a caracteristicii Bode. Aceiași analiză a fost realizată și pentru modelul Droop pentru care s-a considerat canalul de interacțiune „intensitatea luminii incidente → substrat intracelular”, rezultând prin analiza Hankel ordinul sistemului egal cu 2.

În cadrul **activității A1.2** a fost tratat procesul de digestie anaerobă. Au fost investigate două modele matematice, folosind aceeași procedură, indicată mai sus: 1. ADM1 (Anaerobic Digestion Model No. 1) și un model simplificat. Modelul ADM1 este un model foarte complex care conține un număr de 35 de ecuații de stare și care descriu atât procesele biochimice, cât și pe cele fizico-chimice. De asemenea, în cadrul modelului sunt utilizate parametrizări neliniare și termeni inhibitori pentru descrierea reacțiilor care au loc în digester. Dinamica sistemului neliniar de ordinul 35 a fost analizată pe canalul debit de influent → concentrația de metan în stare gazoasă, multiplicată cu 10, în diverse regimuri de operare, definite prin valoarea medie a debitului de influent: 30; 70; 170 și 250 mc/zi. S-a constatat prezența unor neliniarități care afectează atât amplificarea statică, cât și proprietățile regimului dinamic (la valori mari ale debitului mediu de influent, durata regimului tranzitoriu crește). Și în acest caz, analiza valorilor singulare Hankel sugerează posibilitatea utilizării unui sistem de ordin mult mai mic decât 35. S-au testat succesiv modele de ordinul 12 și 4 și s-a justificat faptul că poate fi utilizat în condiții satisfăcătoare un model de ordinul 4, care aproximează bine modelul de bază în zonele de medie și joasă frecvență ale caracteristicii Bode.

În cadrul **activității A1.3** a fost investigată posibilitatea realizării unui cuplaj între un digester anaerob și un fotobioreactor rezultând astfel o instalație complexă de tip biorafinărie. Au fost analizate, din punct de vedere funcțional, trei scheme de cuplare. Dintre cele trei scheme de cuplare a fost aleasă prima care prezintă certe avantaje și care ajută la studiul proceselor de obținere a mai multor compuși cu valoare adăugată. Schema de cuplaj constă în: influentul digesterului anaerob are o compoziție cunoscută (biomasă, substrat, azot, fosfor etc.), putând proveni dintr-o rețea municipală de canalizare sau de la un operator industrial. Efluentul digesterului anaerob cu proprietăți cunoscute poate fi deversat către o rețea de canalizare, dacă respectă normele de calitate impuse de lege sau către o altă treaptă de epurare specifică proceselor de tratare a apelor uzate. În urma procesului de digestie anaerobă a deșeurilor organice rezultă debite consistente de biogaz care pot fi arse în stații de co-generare de unde se obține energie electrică, căldură dar și cantități mari de CO₂. Pentru reducerea emisiilor de gaze cu efect seră în atmosferă, CO₂ produs în urma arderii se poate folosi ca sursă de carbon (substrat) în procesele de creștere fotosintetică a microalgelor. Biomasă microalgală este procesată pentru extragerea compușilor cu valoare adăugată, iar resturile acestora reprezintă un adaos de substrat pentru digesterul anaerob în vederea producerii de biogaz. A fost studiată prin simulare numerică dinamica sistemului neliniar, după care s-a efectuat analiza modelului global după procedurile menționate în cazul celor două activități anterioare. Sistemul dinamic neliniar cuplat, de ordinul 51, a fost liniarizat și apoi prelucrat prin analiza Hankel, în vederea reducerii ordinului.

1. Introducere

Etapa 1 a proiectului Nr. 269/2014 – BIOCON (*Modelarea matematică a proceselor de digestive anaerobă și de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor. Stabilirea modelului matematic al procesului global*) a constat în realizarea a trei activități, după cum urmează: **Activitatea A1.1** – *Modelarea matematică a procesului de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor și analiza acestuia prin simulare numerică*, **Activitatea A1.2** – *Stabilirea modelului matematic al digesterului anaerob și analiza acestuia prin simulare numerică*, **Activitatea A1.3** – *Cuplarea celor două modele pentru realizarea modelului matematic global al instalației de tip biorafinărie*. Cele trei activități **au fost realizate integral** și au rolul de a stabili modelele matematice pentru fiecare proces în parte și pentru instalația de tip biorafinărie, modele care să exprime cât mai fidel dinamicile proceselor și care, ulterior, să fie utilizate în dezvoltarea algoritmilor de control.

2. **Activitatea A1.1: Modelarea matematică a procesului de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor și analiza acestuia prin simulare numerică**

2.1 **Descrierea procesului de creștere a microalgelor în fotobioreactor**

Microalgele au captat atenția cercetătorilor și a mediului industrial datorită cerințelor de creștere relativ simple, care le fac foarte atractive într-un număr mare de aplicații. Microalgele pot fi asemuite, din punct de vedere metabolic, unor fabrici celulare, care își găsesc aplicații în producția, pe cale biotehnologică, a unor metaboliți de uz industrial sau terapeutic, cum sunt: acizi grași polinesaturați cu catenă lungă, pigmenți, policarbohidrați, vitamine sau alte componente biologice active. Dintre numeroasele aplicații în care sunt utilizate microalgele menționăm câteva de importanță majoră: obținerea de biocombustibili, bio-mitigația CO₂, tratarea apelor reziduale etc. Microalgele se cultivă în fotobioreactoare, pentru creșterea lor fiind necesară o sursă de carbon, macronutrimente (azot, fosfor etc.), precum și o sursă de lumină. În funcție de sursa de lumină, fotobioreactoarele se pot clasifica în fotobioreactoare iluminate artificial (acest tip fiind abordat în proiectul de față) și fotobioreactoare solare (cu lumină naturală). Lumina este, de asemenea, considerată substrat pentru microalge. Un microorganism fotoautotrof este capabil să asimileze forme anorganice de carbon (i.e. CO₂, HCO₃⁻) și să le transforme în substanțe necesare pentru funcțiile celulare proprii, producând în același timp O₂ prin reacția de oxidare a apei indusă de lumină. În plus față de rolul său de substrat, CO₂ este utilizat pentru scăderea pH-ului culturii de microalge deoarece este un acid slab. La dizolvarea CO₂ în apă se formează o serie de specii chimice în mediul lichid (i.e. CO_{2,aq}, HCO₃⁻, CO₃²⁻) printr-o serie de reacții precum hidratarea, deshidratarea și protonarea. Ionii de HCO₃⁻ interferează cu cei de NH₃ (sursa de azot) ducând la formarea unui sistem multi-solut NH₃ – CO₂ – H₂O care constă în 9 specii chimice: NH₃, NH₄⁺, NH₂COO⁻, CO₂, HCO₃⁻, CO₃²⁻, H₂O, OH⁻ și H⁺. Sursele anorganice de carbon și azot sunt consumate în procesul de creștere cu viteze de reacție guvernate de disponibilitatea luminii în interiorul fotobioreactorului. Mecanisme de reacții chimice și biochimice prezentat a stat la baza determinării modelelor matematice considerate în raport.

2.2 **Analiza modelului procesului de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor cu limitare de lumină**

Modelul matematic care descrie procesul de creștere fotosintetică a microalgelor constă în trei sub-modele: modelul de transfer radiativ, modelul biologic și modelul termodinamic. Modelul de transfer radiativ exprimă atenuarea luminii în interiorul culturii de microalge care, fiind eterogenă din punct de vedere al disponibilității luminii, este tratată ca un sistem cu parametri uniform distribuiți de-a lungul adâncimii z . Modelul de transfer radiativ, cuplat cu o lege cinetică de creștere a biomasei, furnizează răspunsurile fotosintetice locale $\mu_G(G(z))$. Cultura de microalge este considerată totuși omogenă din punct de vedere al componentilor din faza lichidă și, de aceea, răspunsurile fotosintetice sunt integrate pentru a obține un răspuns fotosintetic mediu. Modelul biologic descrie variația celor mai importante variabile de stare ale sistemului biologic și anume: concentrația de biomasă (X), concentrația de azot anorganic total (c_{TIN}), concentrația de carbon anorganic total (c_{TIC}), concentrația de oxigen dizolvat (c_{O_2}) și fracțiile molare ale CO₂ și O₂ în gazul la ieșire ($y_{\text{out}}^{\text{CO}_2}$ și, respectiv $y_{\text{out}}^{\text{O}_2}$); primele patru stări sunt caracteristice fazei lichide, pe când ultimele două sunt specifice fazei gazoase. Modelul termodinamic este un grup de ecuații algebrice care permite descrierea cantitativă a speciilor chimice prezente în sistemul multi-solut NH₃ – CO₂ – H₂O și care generează valori numerice pentru coeficienții de activitate. Pe baza concentrațiilor speciilor chimice prezente în sistem se poate determina în final valoarea exactă a pH-ului din mediul de cultură.

- **Modelul de transfer radiativ**

În scopul determinării atenuării luminii în interiorul unei culturi de microalge se va adopta un model radiativ dedicat reactoarelor rectangulare iluminate pe o singură parte.

$$G(z) = 2q_0 \frac{(1+\alpha)e^{\delta(L-z)} - (1-\alpha)e^{-\delta(L-z)}}{(1+\alpha)^2 e^{\delta L} - (1-\alpha)^2 e^{-\delta L}} \quad (1)$$

unde $\delta = X\sqrt{E_a(E_a + 2bE_s)}$ este coeficientul de extincție bi-flux, iar $\alpha = \sqrt{E_a}/\sqrt{E_a + 2bE_s}$ este coeficientul de dispersie liniară a luminii. E_a și E_s sunt coeficienții de absorbție masică și de dispersie masică a luminii, iar b este fracția de dispersie a luminii prin reflexie (adimensional). q_0 reprezintă fluxul incident de lumină, X este concentrația de biomasă iar L este adâncimea fotobioreactorului. Parametrii optici se determină în mod uzual prin metode spectrofotometrice pentru orice microorganism fotosintetic.

- **Modelul biologic**

Cinetica de creștere microbiană. Rata volumetrică de creștere a microalgelor rezultă din diferența între rata de creștere a biomasei prin fotosinteză (r_{x_p}) și rata de degradare a acesteia prin procese de respirație (r_{x_s}):

$$r_x = r_{x_p} - r_{x_s} = (\mu_G - \mu_s)X \quad (2)$$

Viteza specifică de creștere asociată fotosintezei (μ_G) este o funcție a luminii disponibile în interiorul culturii de microalge și, prin urmare, o funcție a iradianței locale, $G(z)$. Pentru a exprima dependența vitezei specifice de creștere de lumină, s-a ales un model de tip Monod:

$$\mu_G = \mu_{max} \frac{G}{K_I + G} \quad (3)$$

unde: K_I – constanta de semi-saturație, μ_{max} – viteza specifică maximă de creștere, μ_s – parametru cinetic asociat cu procesul de respirație (considerat de cele mai multe ori constant). Răspunsul fotosintetic mediu, $\langle \mu_G \rangle$, calculat pentru întreg volumul fotobioreactorului se obține prin integrarea răspunsurilor fotosintetice medii de-a lungul adâncimii culturii, z :

$$\langle \mu_G \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \mu_G(G(z)) dz \quad (4)$$

Microalgele au a viteză specifică de creștere optimă atunci când pH-ul este menținut în domeniul optim în funcție de specie. În cazul proceselor fotoautotrofe pH-ul este reglat prin adiția de CO_2 în reactor, ceea ce înseamnă că viteza specifică de creștere a microalgelor este o funcție de carbonul anorganic total (TIC) prezent în mediul de cultură. Pentru descrierea matematică a acestei dependențe s-a preferat utilizarea unui termen de tip Monod, de forma $c_{TIC}/(K_{TIC} + c_{TIC})$, care să multiplice relația (4). Astfel, atunci când c_{TIC} va avea valori foarte mici, pH-ul va crește, limitând viteza de creștere a microalgelor.

Cinetica de consum a carbonului anorganic total. Rata de consum a carbonului anorganic total, $\langle r_{TIC} \rangle$, este proporțională cu rata volumetrică de creștere, $\langle r_x \rangle$:

$$\langle r_{TIC} \rangle = \frac{1}{M_x} \langle r_x \rangle = \frac{\langle \mu_G \rangle X - \mu_s X}{M_x} \quad (5)$$

Microalgele sunt sintetizate doar din carbon organic, astfel 1 mol CO_2 fixat duce la formarea unui C-mol de biomasă (M_x – masa C-molară).

Stoichiometria procesului de creștere fotosintetică. Atunci când anumiți componenți precum azotul, fosforul, sulful sau oxigenul dizolvat au concentrații astfel încât nu limitează și nici nu inhibă creșterea microalgelor, expresiile matematice pentru ratele lor de producere sau consum pot fi reduse prin utilizarea unei singure ecuații stoichiometrice asociată cu o lege care să descrie doar influența luminii asupra creșterii. Al doilea substrat după carbon, susceptibil să limiteze creșterea microalgelor, este azotul anorganic total, rata de consum a acestuia $\langle r_{TIN} \rangle$ fiind exprimată cu ajutorul unei ecuații stoichiometrice:

$$\langle r_{\text{TIN}} \rangle = \frac{Y_{N/X}}{M_x} \langle r_x \rangle \quad (6)$$

unde $Y_{N/X}$ reprezintă rata de asimilare a TIN pe unitate de biomasă produsă. Oxigenul este produs în urma fotolizei apei și este parțial consumat prin respirație, rata sa de consum fiind astfel proporțională cu rata de creștere, după cum urmează:

$$\langle r_{\text{O}_2} \rangle = \frac{Q_P}{M_x} \langle r_x \rangle \quad (7)$$

Q_P este cota fotosintetică care reprezintă numărul de moli de O_2 produși raportați numărul de moli de CO_2 asimilați.

Transferul de masă gaz-lichid este modelat folosind teoria celor două filme și făcând presupunerea că faza gazoasă are un comportament de tip piston, iar faza lichidă este complet amestecată. Rata de transfer masic a oxigenului, N_{O_2} , poate fi exprimată astfel:

$$N_{\text{O}_2} = (K_L a)_{\text{O}_2} (c_{\text{O}_2}^* - c_{\text{O}_2}) = (K_L a)_{\text{O}_2} \left(\frac{y_{\text{O}_2}^{\text{lm}} P}{H_{\text{O}_2}} - c_{\text{O}_2} \right) \quad (8)$$

$c_{\text{O}_2}^*$ și c_{O_2} reprezintă concentrația de oxigen dizolvat la saturație și concentrația sa actuală. $(K_L a)_{\text{O}_2}$ este coeficientul global de transfer de masă pentru oxigen, $y_{\text{O}_2}^{\text{lm}}$ este media logaritmică între fracțiile molare ale oxigenului la intrare și respectiv la ieșire, P este presiunea totală, iar H_{O_2} este constanta lui Henry. În aceeași manieră, rata de transfer masic a dioxidului de carbon, N_{CO_2} , este dată de:

$$N_{\text{CO}_2} = (K_L a)_{\text{CO}_2} \left(\frac{y_{\text{CO}_2}^{\text{lm}} P}{\gamma_{\text{CO}_2} H_{\text{CO}_2}} - c_{\text{CO}_2} \right) \quad (9)$$

doar că valoarea coeficientului global de transfer de masă pentru dioxidul de carbon va fi obținută pe baza difuzivităților moleculare ale dioxidului de carbon și oxigenului – $(K_L a)_{\text{CO}_2} = (K_L a)_{\text{O}_2} \cdot D_{\text{CO}_2}/D_{\text{O}_2}$.

- Modelul termodinamic

Sistemul multi-solut $\text{NH}_3 - \text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ este compus din nouă specii chimice distincte: NH_3 (moleculară), NH_4^+ , NH_2COO^- , CO_2 (moleculară), HCO_3^- , CO_3^{2-} , H_2O (moleculară), OH^- și H^+ care rezultă în 17 necunoscute (c_i și γ_i pentru toate speciile chimice cu excepția apei care este exprimată ca activitate, a_w). Pentru a rezolva aceste necunoscute sunt necesare 17 ecuații, după cum urmează:

1. cinci echilibrice chimice

$$K_1 = \frac{a_{\text{H}^+} a_{\text{HCO}_3^-}}{a_{\text{CO}_2} a_w}, \quad K_2 = \frac{a_{\text{H}^+} a_{\text{CO}_3^{2-}}}{a_{\text{HCO}_3^-}}, \quad K_3 = \frac{a_{\text{NH}_4^+} a_{\text{OH}^-}}{a_{\text{NH}_3} a_w}, \quad K_4 = \frac{a_{\text{NH}_3} a_{\text{HCO}_3^-}}{a_{\text{NH}_2\text{COO}^-} a_w}, \quad K_w = \frac{a_{\text{H}^+} a_{\text{OH}^-}}{a_w} \quad (10)$$

unde $a_i = \gamma_i c_i$ reprezintă activitatea componentului i , γ_i este coeficientul de activitate al componentului i , iar c_i este concentrația componentului i . Constantele de activitate K_1 , K_2 , K_3 , K_4 și K_w pot fi găsite în Edwards et al. (1978) pentru diferite temperaturi.

2. două ecuații de bilanț

$$c_{\text{TIC}} = c_{\text{CO}_2} + c_{\text{HCO}_3^-} + c_{\text{CO}_3^{2-}} + c_{\text{NH}_2\text{COO}^-} \quad (11)$$

$$c_{\text{TIN}} = c_{\text{NH}_3} + c_{\text{NH}_4^+} + c_{\text{NH}_2\text{COO}^-} \quad (12)$$

3. o ecuație de electroneutralitate scrisă pentru principalele specii chimice din mediul de cultură

$$c_{\text{NH}_4^+} + c_{\text{H}^+} + c_{\text{Na}^+} = c_{\text{HCO}_3^-} + 2c_{\text{CO}_3^{2-}} + c_{\text{NH}_2\text{COO}^-} + c_{\text{OH}^-} + c_{\text{Cl}^-} \quad (13)$$

4. opt ecuații pentru calcularea coeficienților de activitate (una pentru fiecare specie cu excepția apei). Expresia pentru calculul coeficienților de activitate este dată în Edwards et al. (1978), unii parametri ai acestora fiind redați în Zemaitis et al. (1986):

$$\ln \gamma_i = -A_\phi z_i^2 \left[\frac{\sqrt{I}}{1+1.2\sqrt{I}} + \frac{2}{1.2} \ln(1 + 1.2\sqrt{I}) \right] + 2 \sum_{j \neq w} m_j \left\{ \beta_{ij}^0 + \frac{\beta_{ij}^1}{2I} [1 - (1 + 2\sqrt{I}) \exp(-2\sqrt{I})] \right\} - \frac{z_i^2}{4I^2} \sum_{j \neq w} \sum_{k \neq w} m_j m_k \beta_{jk}^1 \quad (14)$$

unde $I = \frac{1}{2} \sum_j z_j^2 m_j$ reprezintă tăria ionică a soluției. Parametrii β_{ij}^0 și β_{ij}^1 sunt parametrii pentru interacțiunile între speciile moleculare și cele ionice. A_ϕ poate fi exprimat prin următoarea relație pentru temperaturi cuprinse între 0 și 100 °C.

$$A_\phi = -61.44534 \exp\left(\frac{T-273.15}{273.15}\right) + 2.8644468 \left[\exp\left(\frac{T-273.15}{273.15}\right) \right]^2 + 183.5379 \ln\left(\frac{T}{273.15}\right) - 0.6820223(T - 273.15) + 0.0007875695(T^2 - (273.15)^2) + 58.95788 \left(\frac{273.15}{T}\right) \quad (15)$$

Activitatea apei a fost calculată cu o ecuație de tip Gibbs-Duhem.

$$\ln a_w = M_w \left\{ \frac{2A_\phi I^{\frac{3}{2}}}{1+1.2\sqrt{I}} - \sum_{i \neq w} \sum_{j \neq w} m_i m_j [\beta_{ij}^0 + \beta_{ij}^1 \exp(-2\sqrt{I})] \right\} - M_w \sum_{i \neq w} m_i \quad (16)$$

Calculul precis al concentrațiilor speciilor chimice din sistem permite în cele din urmă determinarea pH-ului:

$$\text{pH} = -\log(a_{H^+}) \quad (17)$$

- Modelul structural-funcțional de bilanț de masă

Modelul de bilanț de masă include termeni cinetici care descriu ratele de producere sau de consum ale diferiților componenți și termeni de transport care descriu fluxuri convective și difuzive care depășesc limitele volumelor de control. Termenii asociați fluxurilor de transport convectiv de intrare sunt mai mari decât zero doar dacă reactorul este operat în regim semi-continuu sau continuu, pe când cei de ieșire sunt pozitivi doar la operarea în regim continuu.

Stările caracteristice fazei lichide care descriu procesul de creștere fotosintetică a microalgelor sunt concentrația de biomasă (X), concentrația de azot anorganic total (TIN), concentrația de carbon anorganic (TIC) și concentrația de oxigen dizolvat (c_{O_2}):

$$\frac{dX}{dt} = \langle r_x \rangle(t) - D(t)X(t) \quad (18)$$

$$\frac{dc_{TIN}}{dt} = -\langle r_{TIN} \rangle(t) + D(t) \left(c_{TIN,i} - c_{TIN}(t) \right) \quad (19)$$

$$\frac{dc_{TIC}}{dt} = -\langle r_{TIC} \rangle(t) + N_{CO_2}(t) + D(t) \left(c_{TIC,i} - c_{TIC}(t) \right) \quad (20)$$

$$\frac{dc_{O_2}}{dt} = \langle r_{O_2} \rangle(t) + N_{O_2}(t) - D(t)c_{O_2}(t) \quad (21)$$

D este diluția, iar $c_{TIN,i}$ și $c_{TIC,i}$ sunt concentrațiile de TIN și TIC în fluxul de alimentare.

Stările caracteristice fazei gazoase sunt fracțiile molare ale CO_2 și O_2 în gazul la ieșire, $y_{out}^{CO_2}$ și respectiv $y_{out}^{O_2}$. Ecuațiile dinamice de bilanț pentru fracțiile molare ale componenților gazului la ieșire se determină pornind de la legea gazului ideal și de la fracțiile molare cunoscute ale gazului la intrare. Astfel, variația în timp a $y_{out}^{CO_2}$ și $y_{out}^{O_2}$ este dată de:

$$\frac{dy_{out}^{CO_2}}{dt} = \frac{RT}{PV_g} \left(y_{in}^{CO_2}(t)G_{in}(t) - y_{out}^{CO_2}(t)G_{out}(t) - V_l N_{CO_2}(t) \right) \quad (22)$$

$$\frac{dy_{out}^{O_2}}{dt} = \frac{RT}{PV_g} \left(y_{in}^{O_2}(t)G_{in}(t) - y_{out}^{O_2}(t)G_{out}(t) - V_l N_{O_2}(t) \right) \quad (23)$$

unde R este constanta universală a gazelor, T este temperatura, iar V_g și V_l sunt volumele de gaz și de lichid. G_{in} și G_{out} sunt debitele totale de gaz la intrare și respectiv la ieșire. N_2 este un gaz cu solubilitate mai mică decât CO_2 și O_2 în apă, iar pentru că nu ia parte la nici un proces de producție sau consum, concentrația sa se consideră că rămâne constantă. Frația molară a N_2 în gazul la ieșire, $y_{out}^{N_2}$, se determină pe baza fracțiilor molare determinate anterior:

$$y_{out}^{N_2} = 1 - y_{out}^{CO_2} - y_{out}^{O_2} \quad (24)$$

Toate fracțiile molare ale componentelor gazului la intrare sunt cunoscute și egale cu: $y_{in}^{CO_2} = G_{in}^{CO_2}/G_{in}$; $y_{in}^{O_2} = G_{in}^{O_2}/G_{in}$; $y_{in}^{N_2} = G_{in}^{N_2}/G_{in}$, unde $G_{in}^{CO_2}$, $G_{in}^{O_2}$ și $G_{in}^{N_2}$ sunt debitele de alimentare cu CO_2 , O_2 și N_2 . G_{in} este debitul total de gaz la intrare și, deci, suma tuturor gazelor la intrare. Aceleași relații se pot scrie și pentru gazele de la ieșire, iar G_{out} poate fi calculat pe baza fracțiilor molare ale N_2 în gazul la intrare și respectiv la ieșire:

$$G_{out} = \frac{y_{in}^{N_2}}{y_{out}^{N_2}} G_{in} \quad (25)$$

În Fig.1 a și b sunt ilustrate două rezultate privind regimul dinamic al fotobioreactorului, obținute prin simulare numerică. S-a considerat cazul când mărimile de intrare ale subsistemului au următoarele variații în treaptă: la $t=50$ [h], intrarea $G_{in}^{CO_2}$ are o variație de 0.0005 [$mol \cdot h^{-1}$], la $t=100$ [h] intensitatea luminii incidente crește cu 50%, iar la $t=250$ [h], rata de diluție D se reduce cu 0.025 [h^{-1}]. În aceste condiții, evoluțiile obținute pentru mărimile de ieșire TIC și pH sunt cele prezentate în Fig.1a, respectiv Fig.1b.

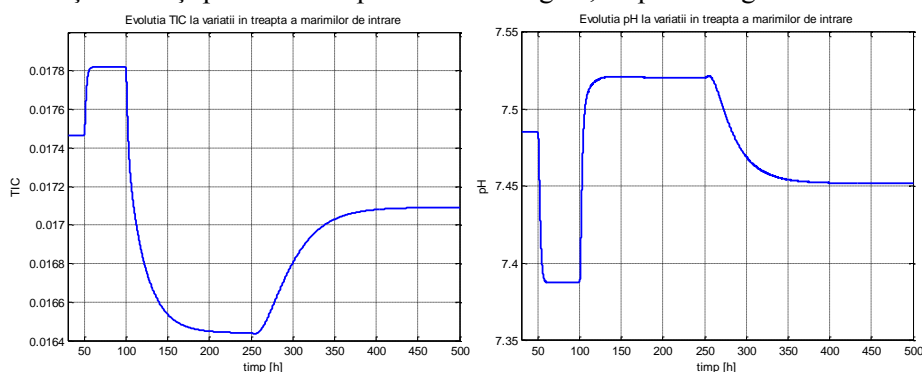


Fig.1. Evoluțiile mărimilor TIC (a) și pH (b) când mărimile de intrare $G_{in}^{CO_2}$, q_0 și D au variații în treaptă la $t=50$, respectiv 100 și 250 [h^{-1}]

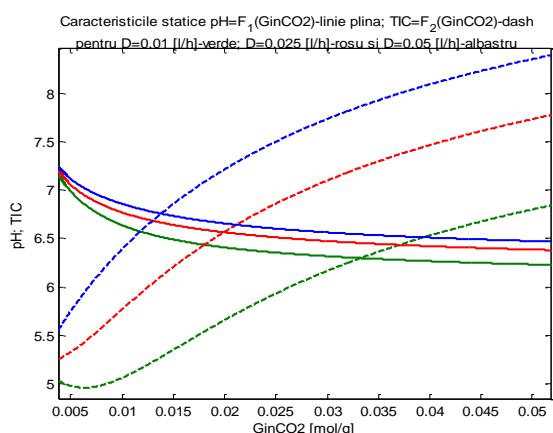


Fig.2. Caracteristicile statice $pH = F_1(G_{in}^{CO_2})$ – linie plină; $TIC = F_2(G_{in}^{CO_2})$ – dash, pentru $D = 0.01$ [$L \cdot h^{-1}$] – verde; $D = 0.025$ [$L \cdot h^{-1}$] – roșu și $D = 0.05$ [$L \cdot h^{-1}$] – albastru

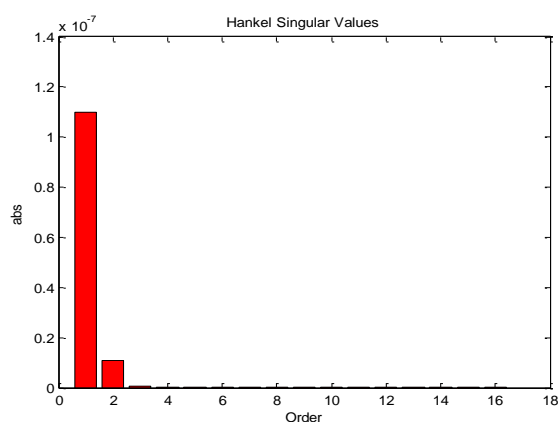


Fig.3. Ilustrarea valorilor singulare Hankel la subsistemul fotobioreactorului

Caracteristicile statice $pH = F_1(G_{in}^{CO_2})$ (cu linie plină) și $TIC = F_2(G_{in}^{CO_2})$ (dash), pentru $D = 0.01, 0.025$ și $0.05 [L \cdot h^{-1}]$, sunt date în Fig.2. Ele ilustrează prezența unor neliniarități semnificative ale sistemului. Analiza proprietăților dinamice s-a făcut după liniarizarea sistemului, utilizând funcția Matlab `linmod`, urmată de reducerea modelului prin analiza Hankel, utilizând funcția Matlab `hankelmr`. În Fig.3 sunt prezentate valorile singulare Hankel ale subsistemului fotobioreactor, care sugerează posibilitatea reducerii semnificative a ordinului sistemului inițial liniarizat (de ordinul 16). În Fig.4a sunt date caracteristicile Bode ale canalului $D \rightarrow c_{H^+}$ pentru ordinele 16, 8 și 3 ale sistemului. La frecvențe înalte sunt incluse dinamicile parazite induse de ecuațiile diferențiale utilizate pentru rezolvarea sistemului de ecuații algebrice. Acestea sunt întrutotul neglijabile și se poate utiliza doar componenta de medie și joasă frecvență a caracteristicii Bode, reprezentată în Fig.4b. Dacă se reprezintă grafic răspunsurile la semnal treaptă ale sistemului liniarizat inițial și sistemelor reduse de ordin 8 și 3, se constată că aceste răspunsuri practic coincid (Fig.4c).

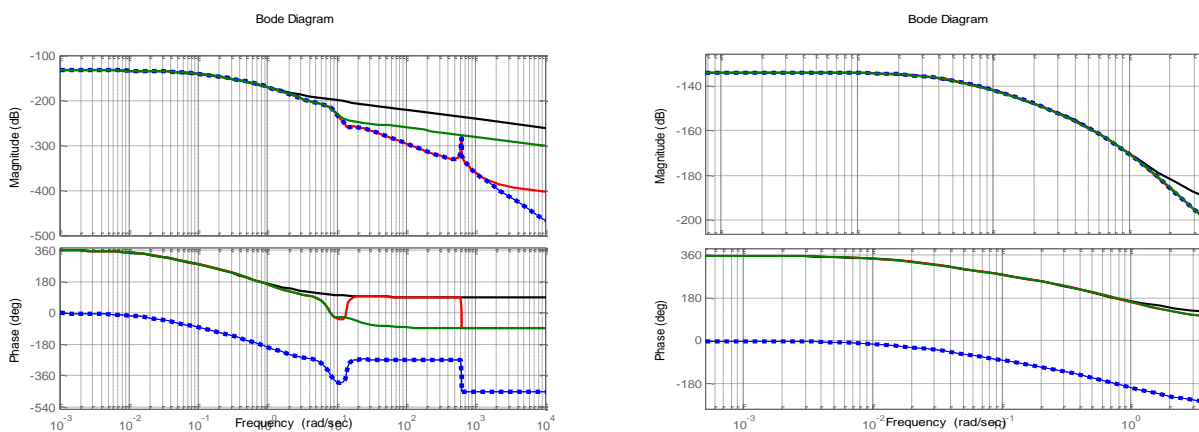


Fig.4. Caracteristicile Bode pe canalul (a) sistemul liniar obținut prin liniarizare (punctat), de ordinul 16 (roșu), de ordinul 8 (verde) și de ordinul 3 (negru), (b) - zoom la medie și joasă frecvență

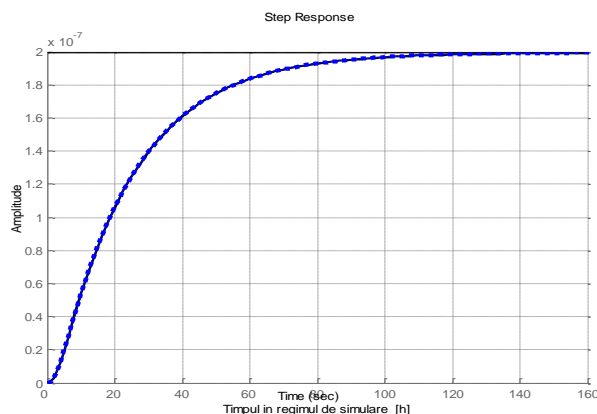


Fig.4c. Răspunsurile la semnal treaptă ale sistemelor liniarizate de ordinul 16 (punctat), 8 și 3.

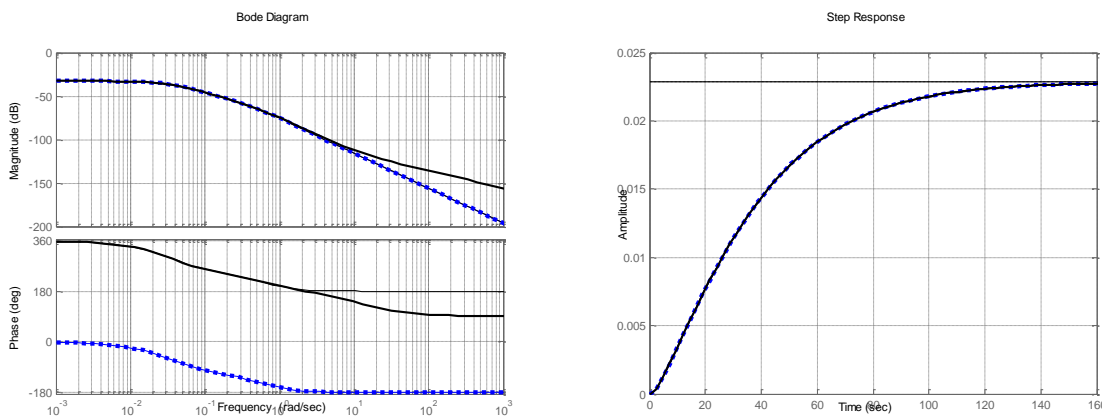


Fig.5. Caracteristicile Bode pe canalul $D \rightarrow TIC$ (a) pentru sistemul de ordinul 16 (punctat) și de ordinul 3 (negru); (b) răspunsurile la semnal treaptă ale celor două sisteme liniarizate

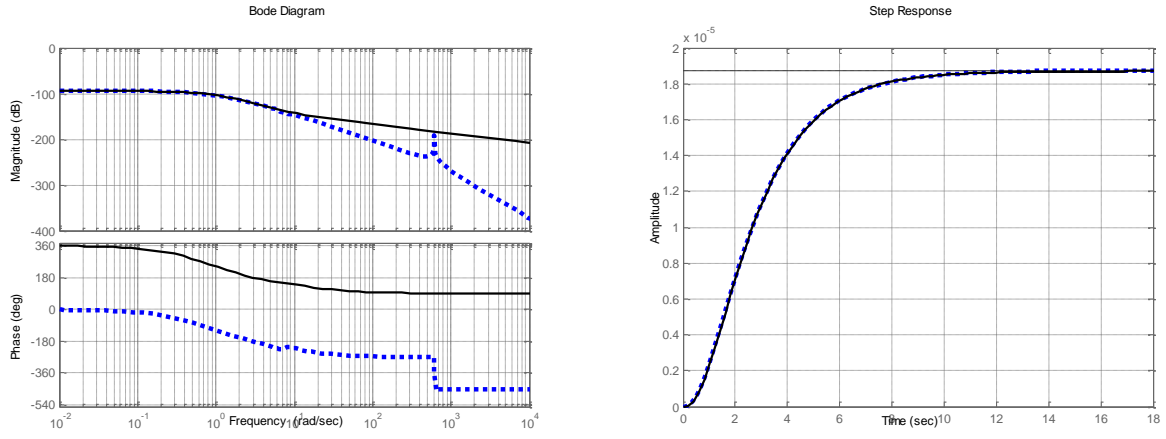


Fig.6. Caracteristicile Bode pe canalul $G_{in}^{CO_2} \rightarrow c_{H^+}$ (a) pentru sistemul de ordinul 16 (punctat) și de ordinul 3 (negru); (b) răspunsurile la semnal treaptă ale celor două sisteme liniarizate (punctat și negru)

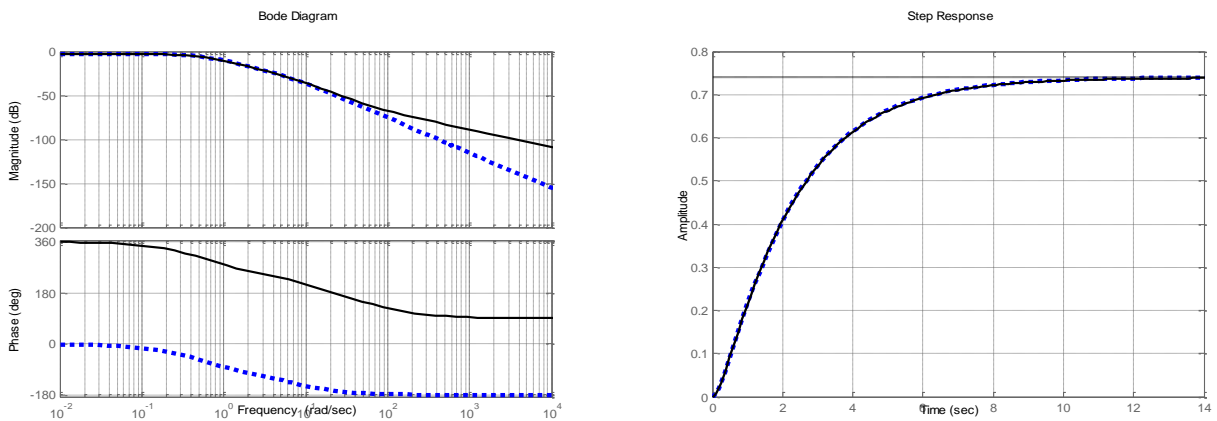


Fig.7. Caracteristicile Bode pe canalul $G_{in}^{CO_2} \rightarrow TIC$ (a) pentru: sistemul de ordinul 16 (punctat) și de ordinul 3 (negru); (b) răspunsurile la semnal treaptă ale celor două sisteme liniarizate (punctat și negru)

Deci considerarea ordinului egal cu 3, care este conformă și cu valorile singulare Hankel din Fig. 3, este validată prin comportarea temporală a sistemului. Analiza canalelor de interacțiune $D \rightarrow TIC$, $G_{in}^{CO_2} \rightarrow c_{H^+}$, $G_{in}^{CO_2} \rightarrow TIC$ s-a realizat în mod similar, fiind ilustrată prin Fig.5, respectiv Fig.6 și Fig.7. În toate cazurile analizate, răspunsul la semnal treaptă a confirmat că se poate utiliza un model redus de ordinul 3. Analiza prezentată s-a realizat în punctul static de funcționare definit prin intrările $D = 0.05 [L \cdot h^{-1}]$ și $G_{in}^{CO_2} = 0.002 [mol \cdot h^{-1}]$.

2.3 Analiza modelului procesului de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor. Modelul Droop

Este cunoscut faptul că anumiți metaboliți secundari precum (e.g. lipide, amidon, hidrogen etc.) sunt biosintetizați în condiții de stres, unul dintre mecanismele de producere fiind limitarea/privarea unui nutrient principal precum azotul, fosforul sau sulful. Aceste nutrienți nu sunt utilizați direct de către microalge, ci sunt absorbiți și stocați intracelular. Astfel, chiar și după epuizarea nutrientului din mediul de cultură, activitatea fotosintetică a microalgelor va continua câteva zile pe baza rezervelor intracelulare. Pentru a descrie dinamica unui astfel de proces Droop (1968) a fundamentat un nou concept numit cota intracelulară pe baza faptului că viteza de creștere a biomasei nu este direct legată de viteza de consum a nutrientului din mediul de cultură. Modelul prezentat în continuare este adaptat pentru privarea de sulf a microalgelor în scopul producerii de hidrogen, dar poate fi scris, fără a-și modifica structura, și pentru limitarea altor nutrienți precum azotul în scopul producerii de lipide. Modelul constă în trei variabile de stare, concentrația de biomasă – X , concentrația de sulf extracelular – S și cota intracelulară de sulf – Q :

$$\frac{dX}{dt} = \langle r_x \rangle - DX \quad (26)$$

$$\frac{dS}{dt} = -\langle r_s \rangle + D(S_i - S) \quad (27)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{\langle r_s \rangle - \langle r_{x_p} \rangle Q}{X} \quad (28)$$

Rata volumetrică de creștere a microalgelor este similară cu cea prezentată anterior (2), dar se impune adăugarea unei funcții care să descrie interacțiunea cotei intracelulare de sulf în activitatea fotosintetică:

$$r_{x_p} = \langle \mu_G \rangle X f(Q) \quad (29)$$

Rata volumetrică de consum a sulfului, r_s , este și ea influențată de cota intracelulară:

$$r_s = Y_{S/X} r_{x_p} \frac{S}{K_S + S} \quad (30)$$

Funcția $f(Q)$ va fi determinată prin următoarea relație:

$$\frac{f(Q) - f_{min}}{1 - f_{min}} = \frac{\exp\left[k \frac{Q}{Q_m}\right] - 1}{\exp(k) - 1} \quad (31)$$

unde f_{min} este valoarea minimă a funcției, Q_m este cota intracelulară maximă peste care activitatea fotosintetică nu este afectată, $Y_{S/X}$ este randamentul de conversie a substratului și k este o constantă.

În Fig.8 sunt prezentate rezultatele obținute prin simulare numerică, utilizând acest model. S-a considerat că cele două mărimi de intrare, intensitatea luminii incidente – q_0 și rata de diluție – D , au variații în treaptă, corespunzătoare unor creșteri cu 50% față de valorile anterioare. Variația intrării q_0 s-a aplicat la $t = 400$ [h], iar variația diluției s-a aplicat la $t = 700$ [h]. Evoluțiile obținute pentru mărimile de ieșire – biomasa (multiplicată cu 5), substratul extracelular (multiplicat cu 2) și substratul intracelular – sunt prezentate în Fig.8.

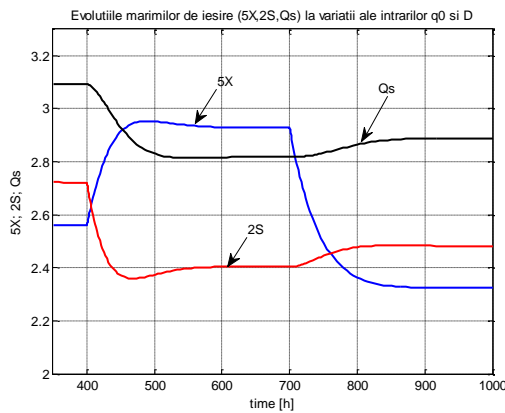


Fig.8. Răspunsuri la semnale în treaptă ale modelului Droop

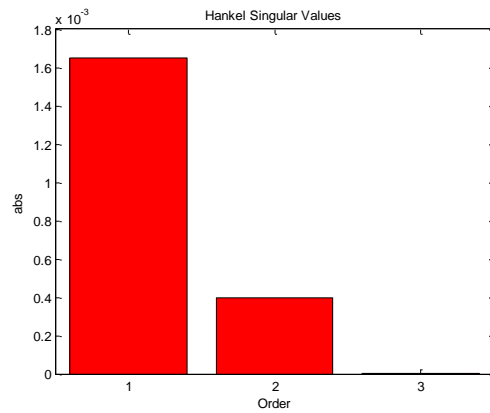


Fig.9. Valorile singulare Hankel la modelul Droop

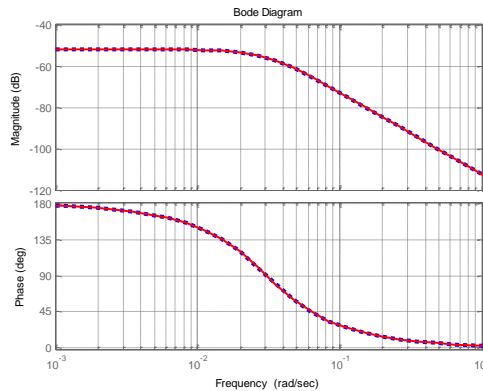


Fig.10. Caracteristicile Bode ale modelului nesimplificat (punctat) și simplificat (roșu)

Analiza sistemului a avut ca obiectiv liniarizarea modelului matematic prin funcția Matlab `linmod` și reducerea ordinului sistemului, fără a se afecta proprietățile dinamice ale acestuia. Pentru ilustrarea analizei, efectuată cu funcția Matlab `hankelmr`, s-a considerat canalul de interacțiune „intensitatea luminii incidente → substrat intracelular”, pentru care graficul valorilor singulare Hankel este dat în Fig.9. Adoptând ordinul sistemului egal cu 2, în Fig.10 sunt date caracteristicile Bode ale sistemului nesimplificat (punctat) și sistemului de ordin redus (roșu).

3. Activitatea A1.2: Modelarea matematică a procesului de digestie anaerobă

3.1 Descrierea procesului de digestie anaerobă

Digestia anaerobă este procesul de fermentație în care materia organică este degradată și este produs biogazul, proces care se desfășoară în condițiile absenței oxigenului din mediul respectiv. În mod uzual, instalațiile de tratare urbane sau industriale utilizează tehnologii aerobe, mari consumatoare de energie. O soluție pentru micșorarea costului tratării apei este de a dota instalațiile de tratare cu digesteoare anaerobe în care se introduc nămolul rezultat din partea aerobă a instalației și apa uzată cu încărcare foarte mare, apă uzată transportată cu vidanșele din locații izolate, neconectate la rețeaua de canalizare urbană. Rezultatul obținut este biogazul, format în principal din metan și dioxid de carbon, care este la rândul lui ars pentru a produce energie termică sau/și electrică. În acest mod, se încearcă obținerea unui efluent cât mai curat și, în același timp, obținerea unui beneficiu economic, efectul negativ fiind cel al producerii unei cantități importante de dioxid de carbon.

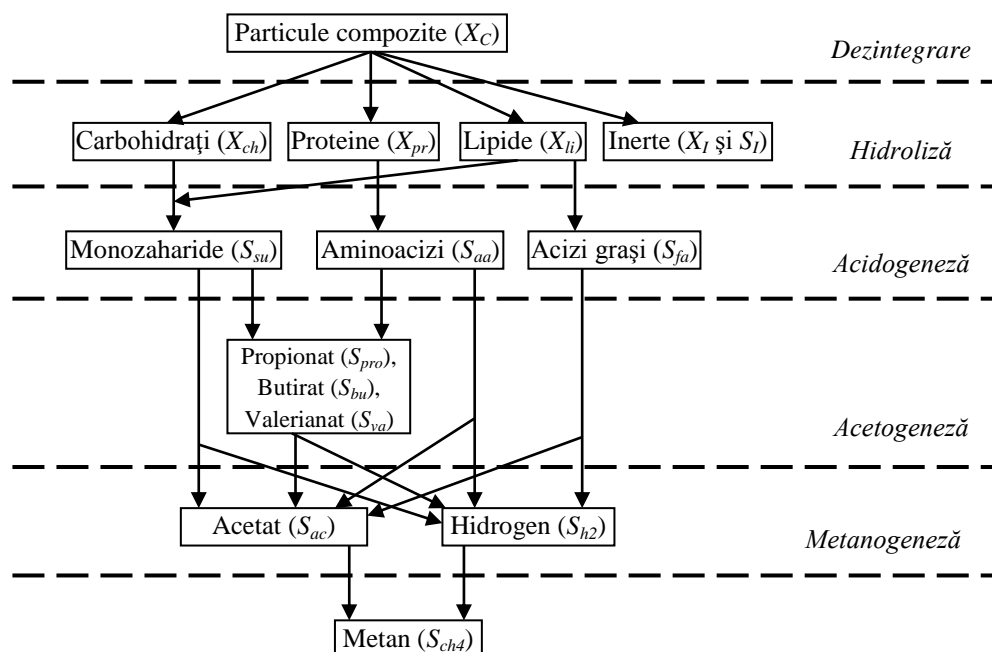


Fig.11. Reacțiile biochimice care au loc în digestia anaerobă (Batstone et al., 2002)

Întreaga fenomenologie ce are loc în cadrul unui digester anaerob presupune considerarea a două tipuri de procese:

- *procese biochimice:* aceste procese sunt catalizate de enzime intra și extracelulare și acționează asupra materiei organice existente determinând procesul propriu-zis de fermentație anaerobă. Reacțiile care au loc în cazul proceselor biochimice sunt împărțite în patru categorii (hidroliză, acidogeneză, acetogeneză și metanogeneză), fiecare dintre ele presupunând acțiunea unui grup specific de microorganisme. În Figura xx se prezintă schematic reacțiile biochimice care au loc în digestia anaerobă.
- *procese fizico-chimice:* aceste procese se referă la asocierea/disocierea ionilor (care determină pH-ul în amestecul lichid) și la transferul lichid-gaz (care determină debitele de CH_4 și CO_2 rezultate din digester).

3.2 Modelul ADM1 al procesului de digestie anaerobă

Dintre modelele existente în literatura de specialitate, două sunt considerate ca oferind o reprezentare satisfăcătoare a procesului studiat: modelul ADM1 și modelul Siegrist. Modelul ADM1 este un model care realizează o reprezentare completă a fenomenelor ce au loc într-un digester anaerob, în timp ce modelul Siegrist este un model ușor simplificat orientat în special către tratamentul nămolului mixt. Cele două modele au la bază

abordări diferite: în cazul modelului ADM1 parametrii acestuia sunt stabiliți pe baza valorilor acceptate în literatura de specialitate, în timp ce în cazul modelului Siegrist sunt determinați prin experimente de laborator și validați pe stații de tratare orășenești. Ținând cont de procesul abordat, în care influența digesterului aerob este dat de ieșirea fotobioreactorului și, eventual, de apă uzată provenită din consumul uman, în continuare pentru descrierea proceselor din cadrul digesterului anaerob s-a utilizat modelul ADM1, cu parametrii corespunzători. Totuși, ținând cont de o serie de corecții care au fost aduse modelului ADM1, în contextul utilizării acestuia în cadrul platformei software Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2) (Rosern și Jeppsson, 2006), acestea vor fi adoptate și în cadrul modelului implementat în cadrul acestei activități.

Modelul ADM1 conține un număr de 35 de ecuații de stare care descriu atât procesele biochimice, cât și pe cele fizico-chimice. De asemenea, în cadrul modelului sunt utilizate parametrizări neliniare și termeni inhibitori pentru descrierea reacțiilor care au loc în digester. În continuare, din motive de spațiu, se prezintă doar principalele elemente care compun modelul ADM1, fiind prezentate și modificările adoptate în construirea modelului.

Mărimile de stare ale modelului ADM1 sunt:

S_{su} - monozaharide [kgCOD/m³]; S_{aa} - aminoacizi [kgCOD/m³]; S_{fa} - acizi grași cu catenă lungă [kgCOD/m³]; S_{va} - valerianat [kgCOD/m³]; S_{bu} - butirat [kgCOD/m³]; S_{pro} - propionat [kgCOD/m³]; S_{ac} - acetat [kgCOD/m³]; S_{h2} - hidrogen [kgCOD/m³]; S_{ch4} - metan [kgCOD/m³]; S_{IC} - carbon anorganic [kmolC/m³]; S_{IN} - azot anorganic [kmolN/m³]; S_I - solubile inerte [kgCOD/m³]; X_C - particule compozite [kgCOD/m³]; X_{ch} - carbohidrați [kgCOD/m³]; X_{pr} - proteine [kgCOD/m³]; X_{li} - lipide [kgCOD/m³]; X_{su} - degradator de monozaharide [kgCOD/m³]; X_{aa} - degradator de aminoacizi [kgCOD/m³]; X_{fa} - degradator de acizi grași cu catenă lungă [kgCOD/m³]; X_{c4} - degradator de valerianat și butirat [kgCOD/m³]; X_{pro} - degradator de propionat [kgCOD/m³]; X_{ac} - degradator de acetat [kgCOD/m³]; X_{h2} - degradator de hidrogen [kgCOD/m³]; X_I - particule inerte [kgCOD/m³]; S_{cat} - cationi [kmol/m³]; S_{an} - anioni [kmol/m³]; S_{va-} - ioni de valerianat [kgCOD/m³]; S_{bu-} - ioni de butirat [kgCOD/m³]; S_{pro-} - ioni de propionat [kgCOD/m³]; S_{ac-} - ioni de acetat [kgCOD/m³]; S_{hco3-} - ioni de hidrogen carbonat [kmolC/m³]; S_{nh3} - amoniac [kmolN/m³]; $S_{gas,h2}$ - hidrogen stare gazoasă [kgCOD/m³]; $S_{gas,ch4}$ - metan stare gazoasă [kgCOD/m³]; $S_{gas,co2}$ - dioxid de carbon stare gazoasă [kmol/m³].

Procesele biochimice au loc în mediu lichid și sunt date prin intermediul a 19 reacții. Acestea sunt: dezintegrare; hidroliza carbohidraților; hidroliza proteinelor; hidroliza lipidelor; absorbția de monozaharide; absorbția de aminoacizi; absorbția de acizi grași cu catenă lungă; absorbția de valerianat; absorbția de butirat; absorbția de propionat; absorbția de acetat; absorbția de hidrogen; descompunerea de X_{su} ; descompunerea de X_{aa} ; descompunerea de X_{fa} ; descompunerea de X_{c4} ; descompunerea de X_{pro} ; descompunerea de X_{ac} ; descompunerea de X_{h2} .

Vitezele de desfășurare a reacțiilor considerate în cadrul modelului ADM1 sunt de tip:

- proporțional, cum ar fi în cazul hidrolizei proteinelor ($\rho_3 = k_{hyd,pr} \cdot X_{pr}$) sau lipidelor - $\rho_4 = k_{hyd,li} \cdot X_{li}$;
- parametrizări de tip Monod, cum ar fi în cazul $\rho_5 = k_{m,su} \cdot \frac{S_{su}}{K_{S,su} + S_{su}} \cdot X_{su} \cdot I_5$;
- parametrizări de tip dublu Monod, cum ar fi în cazul $\rho_9 = k_{m,c4} \cdot \frac{S_{bu}}{K_{S,c4} + S_{bu}} \cdot X_{c4} \cdot \frac{S_{bu}}{S_{va} + S_{bu}} \cdot I_9$

În cadrul parametrizărilor de tip Monod se observă prezența termenilor de tip inhibitor. Aceștia au rolul de a limita desfășurarea reacției în cazul lipsei unui compus (cum ar fi S_{IN}), al prezenței unui produs (cum ar fi S_{h2}) sau în cazul în care pH-ul mediului este sub o anumită valoare.

În cazul reacțiilor care au loc în mediul lichid din digesterul anaerob, se scriu 24 de ecuații de stare, câte 12 ecuații pentru componentele de substrat și pentru componentele de biomasă:

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{Q_{ad}}{V_{ad,liq}} (S_{i,in} - S_i) + \sum_{j=1}^{19} v_{i,j} \rho_j; i = \overline{1,12}; \quad \frac{dX_i}{dt} = \frac{Q_{ad}}{V_{ad,liq}} (X_{i,in} - X_i) + \sum_{j=1}^{19} v_{i,j} \rho_j; i = \overline{13,24} \quad (32)$$

unde $i=1...12$ este indexul pentru componentele de substrat, $i=13...24$ este indexul pentru componentele de biomasă $j=1...19$ sunt cele 19 reacții biochimice considerate, v sunt coeficienții de stoichiometrie considerați, ei dând ponderea cu care o reacție apare în cazul unui termen, Q_{ad} este debitul de influent în digester, $V_{ad,liq}$ este volumul de lichid din digester, $S_{i,in}$ este concentrația componentei S_i în influent.

În cadrul mediului lichid se consideră și procesul fizico-chimic de asociere/disociere a ionilor, rezultând două ecuații diferențiale:

$$\frac{dS_{cat^+}}{dt} = \frac{Q_{ad}}{V_{ad,liq}} (S_{cat^+,i} - S_{cat^+}); \frac{dS_{an^-}}{dt} = \frac{Q_{ad}}{V_{ad,liq}} (S_{an^-,i} - S_{an^-}) \quad (33)$$

Pentru determinarea pH-ului mediului lichid este necesară determinarea mărimilor de stare corespunzătoare ionilor S_{va^-} , S_{bu^-} , S_{pro^-} , S_{ac^-} , S_{hco3^-} , S_{nh3} . Pentru acești ioni se pot folosi fie ecuații algebrice, fie diferențiale. În cazul aplicației noastre, pentru a permite utilizarea instrumentelor informatice de liniarizare oferite de Matlab, s-a preferat utilizarea ecuațiilor diferențiale (astfel, rezultă 6 ecuații diferențiale corespunzătoare acestor ioni). În final, se calculează pH-ul mediului utilizând relațiile:

$$pH = -\lg \left(-\frac{\Theta}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\Theta^2 + 4K_w} \right) \quad (34)$$

unde: $\Theta = S_{cat^+} + S_{IN} - S_{nh3} - S_{hco3^-} - \frac{S_{ac^-}}{64} - \frac{S_{pro^-}}{112} - \frac{S_{bu^-}}{160} - \frac{S_{va^-}}{208} - S_{an^-}$, iar K_w este constanta de ionizare a apei.

În modelarea fazei gazoase se consideră descrierea a 3 componente: hidrogenul, metanul și dioxidul de carbon:

$$\frac{dS_{gas,h2}}{dt} = -\frac{S_{gas,h2} \cdot Q_{gas}}{V_{ad,gas}} + \rho_{T,8} \cdot \frac{V_{ad,liq}}{V_{ad,gas}} \quad (35)$$

$$\frac{dS_{gas,ch4}}{dt} = -\frac{S_{gas,ch4} \cdot Q_{gas}}{V_{ad,gas}} + \rho_{T,9} \cdot \frac{V_{ad,liq}}{V_{ad,gas}} \quad (36)$$

$$\frac{dS_{gas,co2}}{dt} = -\frac{S_{gas,co2} \cdot Q_{gas}}{V_{ad,gas}} + \rho_{T,10} \cdot \frac{V_{ad,liq}}{V_{ad,gas}} \quad (37)$$

unde $\rho_{T,8}$, $\rho_{T,9}$, $\rho_{T,10}$ sunt ratele de transfer gazos pentru cele 3 componente, $V_{ad,gas}$ este volumul de gaz din digester, iar Q_{gas} este debitul de gaz rezultat, calculat cu formula:

$$Q_{gas} = k_p (P_{gas} - P_{atm})$$

cu k_p este coeficientul fluxului de ieșire, P_{atm} - presiunea atmosferică, iar P_{gas} este presiunea gazului:

$$P_{gas} = S_{gas,h2} \cdot \frac{R \cdot T_{ad}}{16} + S_{gas,ch4} \cdot \frac{R \cdot T_{ad}}{64} + S_{gas,co2} \cdot R \cdot T_{ad} + p_{gas,h2o}$$

unde R este constanta universală a gazului ideal, T_{ad} este temperatura în digesterul anaerob (considerată constantă și egală cu 35°C) și $p_{gas,h2o}$ este presiunea vaporilor de apă.

În concluzie, modelul ADM1 implementat este compus din ecuațiile diferențiale de tip (32), ecuațiile (33)-(37) și cele 6 ecuații corespunzătoare ionilor considerați. La acestea se adaugă vitezele de reacție și factorii inhibitori. Prima mărime are rol de comandă în sistemul de control, iar cea de a doua – de perturbație. Mărirea de ieșire din sistem este metanul în stare gazoasă, $S_{gas,ch4}$ - [kgCOD/m³].

Ilustrarea dinamicii sistemului nelinier de ordinul 35 este dată în Fig.12, unde s-au reprezentat variațiile debitului de influent (punctat) și variațiile concentrației de metan în stare gazoasă, multiplicată cu 10, în diverse regimuri de operare, definite prin valoarea medie a debitului de influent: 30; 70; 170 și 250 mc/zi (cu linie plină). Se constată prezența unor neliniarități care afectează atât amplificarea statică, cât și proprietățile regimului dinamic (la valori mari ale debitului mediu de influent, durata regimului tranzitoriu crește). În Fig.13 s-au reprezentat caracteristicile statice $S_{gasCH4} = F(Q_{ad})$, pentru două valori ale concentrațiilor din influx. Se constată că neliniaritățile statice nu sunt pronunțate (cu linie întreruptă s-au figurat variantele liniare), însă

nivelul neliniarității depinde de debitul mediu de influent.

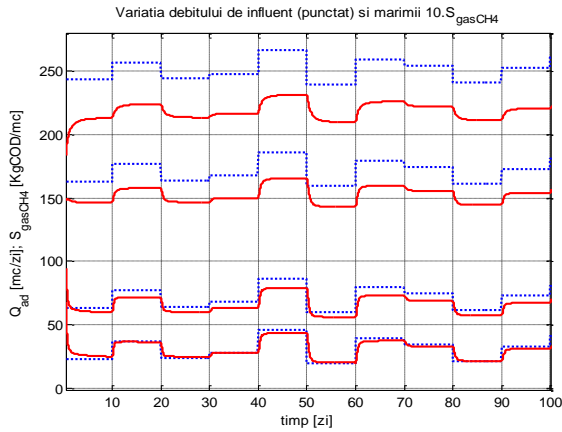


Fig.12. Ilustrarea dinamicii sistemului neliniar de ordinul 35, în diverse regimuri de operare: punctat Q_{ad} [mc/zi], cu linie plină $S_{gas.ch4}$

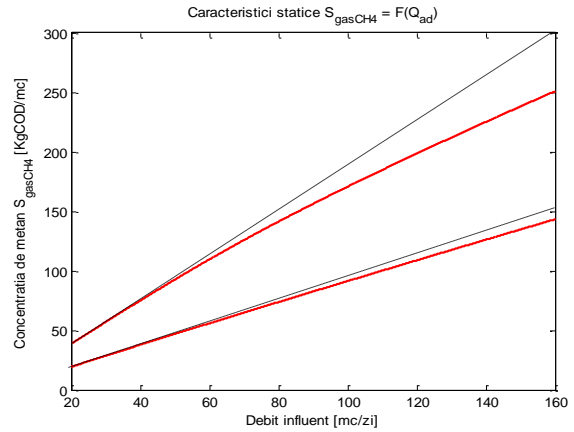


Fig.13. Caracteristici statice $S_{gasCH4} = F(Q_{ad})$, cu linie plină; cu linie întreruptă sunt variantele liniare ale acestor caracteristici

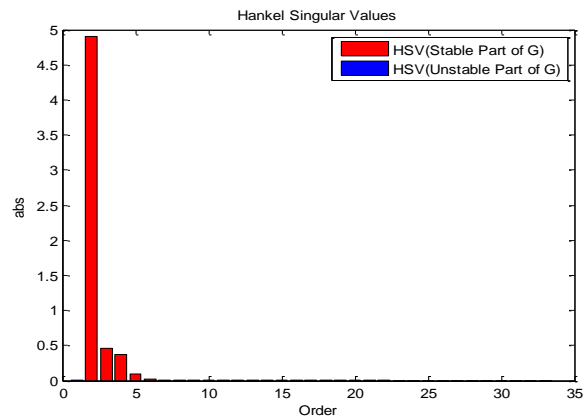
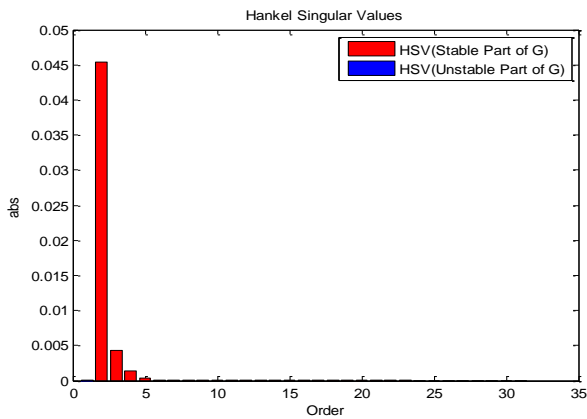


Fig.14. Valorile singulare Hankel pentru sistemul cu intrarea Q_{ad} (a) și pentru sistemul având ca intrare variația concentrațiilor din influent (b)

Obținerea modelului liniar s-a realizat cu funcția Matlab `linmod`. Evident, utilizarea modelului liniar de ordinul 35 este nerațională și practic imposibilă, astfel încât s-a procedat la reducerea ordinului modelului prin analiza valorilor singulare Hankel. În acest sens, s-a utilizat funcția Matlab `hankelmr`. Analiza a avut în vedere subsistemul cu intrarea: debitul de influent, Q_{ad} , și cu ieșirea: concentrația metanului gazos, S_{gasCH4} , acesta fiind de interes ca sistem reglat în operația de control.

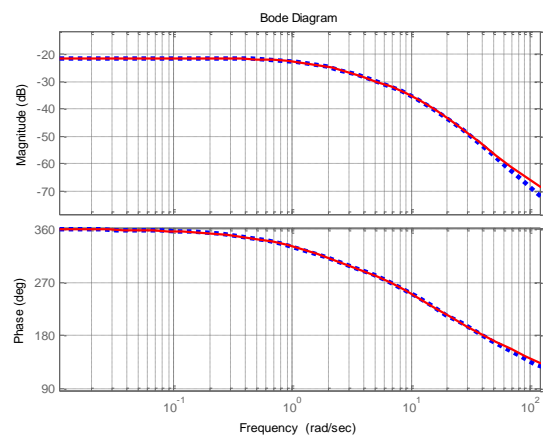
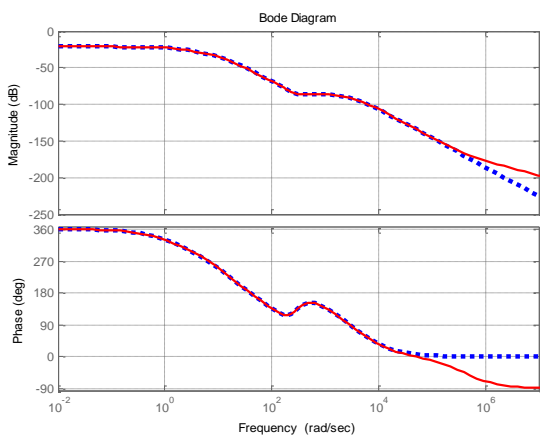


Fig.15. Caracteristicile Bode ale sistemului redus de ordinul 12 (a) și 4 (b) – cu linie întreruptă – comparativ cu caracteristica modelului liniarizat inițial – cu linie plină.

Apelarea funcției `hankelmr` a condus la valorile singulare Hankel din Fig.14a, care sugerează

posibilitatea utilizării unui sistem de ordin mult mai mic decât 35. Dacă se impune ordinul 12 pentru modelul redus, caracteristicile Bode ale sistemului inițial și sistemului redus sunt prezentate în Fig. 15. Aici se observă că diferențele dintre cele două modele apar la o frecvență unde amplificarea s-a redus de circa 10^6 - 10^7 ori, față de zona de joasă frecvență. Este evident că în practică nu este necesară o asemenea precizie și se poate utiliza informația furnizată de graficul valorilor singulare Hankel din Fig. 14a. Dacă se impune ordinul 4 al modelului redus, caracteristicile Bode ale sistemului inițial și sistemului redus sunt cele din Fig. 15b. Răspunsul la semnal treaptă al sistemului neliniar de ordinul 35, în vecinătatea unui punct static de funcționare, și răspunsul modelului liniarizat redus de ordinul 4 în același punct de funcționare sunt date în Fig. 16. În mod similar este tratat canalul perturbației din sistem. În Fig. 17 sunt ilustrate caracteristicile Nichols ale sistemului liniarizat de ordin 35 (punctat) și ale sistemelor reduse de ordin 12 (roșu) și 5 (verde).

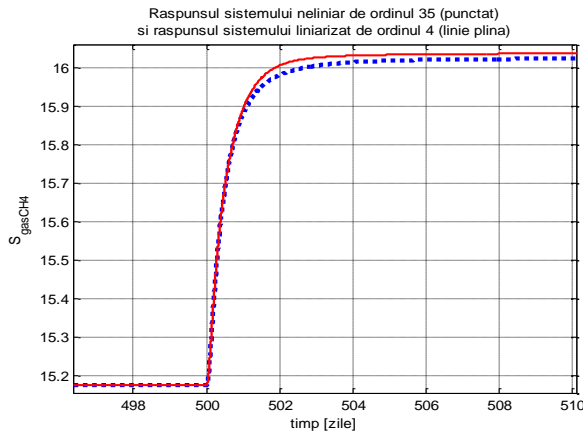


Fig. 16. Răspunsurile la semnal treaptă ale sistemului neliniar (punctat) și sistemului liniarizat și redus (linie plină)

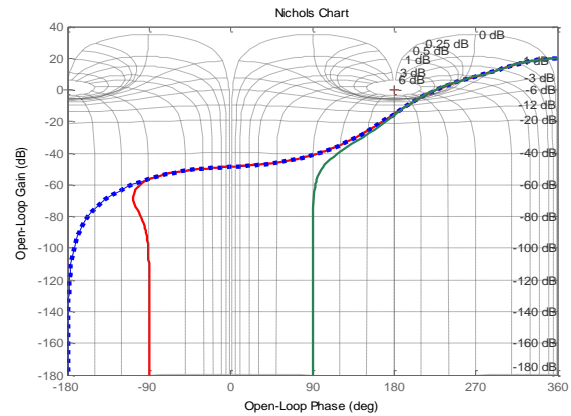
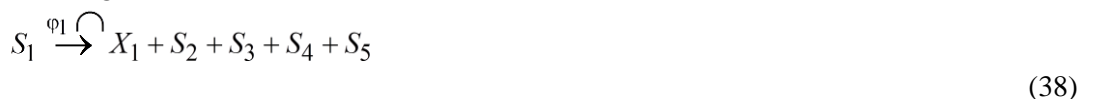


Fig. 17. Caracteristicile Nichols ale sistemului liniarizat de ordin 35 (punctat) și ale sistemelor reduse de ordin 12 (roșu) și 5 (verde)

3.3 Modelul Bastin

În modelul matematic simplificat al procesului sunt utilizate următoarele notații pentru concentrațiile mărimilor din proces: S_1 - glucoza; S_2 - acetatul; S_3 - propionil; S_4 - hidrogenul; S_5 - carbonul anorganic; X_1 - bacteriile acidogene; X_2 - bacteriile metanogene acetoclastice; X_3 - hidrogenul ionizat; X_4 - bacteriile metanogene hidrogenofile; P_1 - gazul metan, care reprezintă produsul obținut. Procesul include 4 reacții distincte, după cum urmează:

- în prima etapă, bacteriile acidogene descompun glucoza în acizi grași volatili (acetați și propionil), în hidrogen și în carbon anorganic, conform schemei de reacție:



- în a doua reacție, hidrogenul ionizat descompune acidul propionic în acetați, H_2 și dioxid de carbon:



- în următoarea fază are loc prima reacție de metanizare, în care acetatul este transformat în metan și CO_2 :



- în cea de a doua reacție de metanizare, acetatul se combină cu H_2 și cu CO_2 , rezultând metanul:



Aceste reacții introduc 10 variabile de stare, incluse în vectorul:

$$\xi = [X_1 \ S_1 \ X_2 \ S_2 \ X_3 \ S_3 \ X_4 \ S_4 \ S_5 \ P_1]^T, \quad (42)$$

precum și vectorul vitezelor de reacție:

$$\varphi = [\varphi_1 \ \varphi_2 \ \varphi_3 \ \varphi_4]^T \quad (43)$$

în care $\varphi_i, i = \overline{1,4}$ sunt vitezele reacțiilor (34)-(37).

Modelul de stare care descrie dinamica procesului se pune sub forma uzuală

$$\frac{d\xi}{dt} = K \cdot \varphi(\xi) - D \cdot \xi + F - Q \quad (44)$$

Conform datelor din literatură (Bastain și Dochain, 1990; Dochain și Vanrolleghem, 2001), acest model se poate simplifica succesiv, pe baza unor proprietăți care se prezintă în cele ce urmează.

1. Se are în vedere faptul că reacțiile de descompunere a propionilului de către hidrogenul ionizat, precum și cea de combinare a H₂ cu carbonul organic, pentru obținerea metanului, sunt foarte rapide, astfel încât se consideră $\frac{dS_3}{dt} = 0$; $\frac{dS_4}{dt} = 0$.

2. Se ține cont că solubilitatea metanului este redusă, urmare a faptului că valoarea concentrației de saturație este foarte mică. În acest caz se poate considera $\frac{dP_1}{dt} = 0$

3. Varianta simplificată uzuală a procesului este aceea în care carbonul anorganic, care nu este de interes ca produs final, este eludat. Schema de reacție a procesului de fermentație anaerobă devine



Modelul de stare corespunzător acestei scheme de reacție este

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} X_1 \\ S_1 \\ X_2 \\ S_2 \\ P_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -\kappa_1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \kappa_2 & -\kappa_3 \\ 0 & \kappa_7 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} - D \cdot \begin{bmatrix} X_1 \\ S_1 \\ X_2 \\ S_2 \\ P_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ D \cdot S_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Q_1 \end{bmatrix} \quad (46)$$

Vitezele de reacție φ_1 și φ_2 sunt de forma $\varphi_1(\xi) = \mu_1(S_1) \cdot X_1$; $\varphi_2(\xi) = \mu_2(S_2) \cdot X_2$, în care:

$$\mu_1(S_1) = \mu_1^* \frac{S_1}{K_{M_1} + S_1} \quad \mu_2(S_2) = \mu_2^* \frac{S_2}{K_{M_2} + S_2 + S_2^2 / K_{i2}} \quad (47)$$

Parametrii utilizați au fost: $\mu_1^* = 0.2 \text{ h}^{-1}$; $\mu_2^* = 0.6 \text{ h}^{-1}$; $S_{in} = 30 \text{ g/l}$; $\kappa_1 = 5.4$; $\kappa_2 = 1$; $\kappa_3 = 14.7$; $\kappa_7 = 10$; $K_{M_1} = 0.75 \text{ g/l}$; $K_{M_2} = 1 \text{ g/l}$; $K_{i2} = 21 \text{ g/l}$. Variabilele exogene sunt: $D = 0.1 [1/\text{h}]$; $S_{in} = 30 [\text{g/L}]$.

Analiza numerică a proprietăților sistemului a avut în vedere 4 aspecte, după cum urmează.

1. Evidențierea calitativă și cantitativă a proprietăților sistemului într-un punct de funcționare din zona mediană a regimurilor uzuale de funcționare: $x_0 = [5.4165 \ 0.75 \ 0.3546 \ 0.2044 \ 3.546]^T$. În Fig.18 este dată evoluția stărilor X_1, S_1, X_2, S_2, P_1 , pentru intrările $D = 0.1 [1/\text{h}]$; $S_{in} = 30 [\text{g/L}]$;

2. Determinarea caracteristicilor statice ale procesului în raport cu cele două mărimi exogene. Dintre cele 10 familii de caracteristici determinate, în Fig.19 este ilustrată familia de caracteristici $P_1(D)|_{S_{in}}$.

3. Liniarizarea modelului matematic și reducerea ordinului acestuia. Liniarizarea pe toate cele 10 canale din sistem s-a realizat cu funcția Matlab `linmod`, iar reducerea ordinului s-a făcut pe baza valorilor singulare Hankel. Pentru canalul: comandă \rightarrow mărime de ieșire ($D \rightarrow P_1$), funcția de transfer a sistemului redus (simplificat) în regimul staționar definit prin starea x_0 (menționată anterior) este

$$H_{51}(s) = \frac{-3.4993 (s+4.3)}{(s+2.218) (s+1.878)} \quad (48)$$

iar caracteristicile Bode pentru modelul $H_{51}(s)$ nesimplificat și simplificat sunt date în Fig.20.

4. Stabilirea modificărilor proprietăților dinamice ale modelului la schimbarea punctului static de funcționare al procesului. S-au selectat 5 puncte statice de funcționare în domeniul admisibil de funcționare al procesului și s-au dedus modelele matematice liniarizate în aceste puncte de funcționare. În Fig. 4 sunt ilustrate caracteristicile Bode ale sistemului liniarizat aferent canalului comandă \rightarrow mărime de ieșire ($D \rightarrow P_1$), în 5 regimuri funcționare definite prin mărimile de intrare indicate pe grafic.

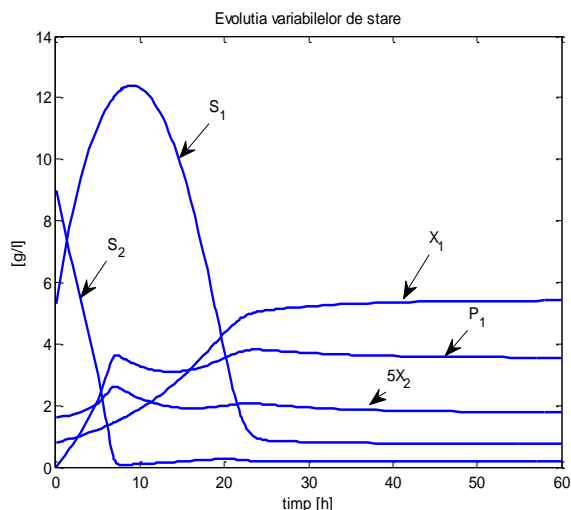


Fig.18. Evoluțiile stărilor pentru $D = 0.1 [1/h]; S_{in} = 30 [g/L]$

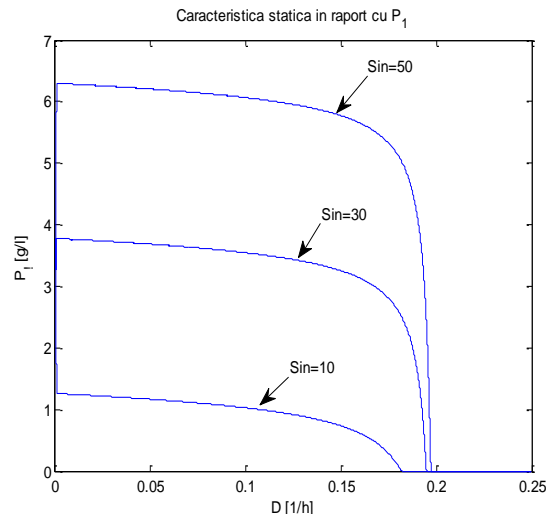


Fig.19. Caracteristica statică $P_1(D)|_{S_{in}}$

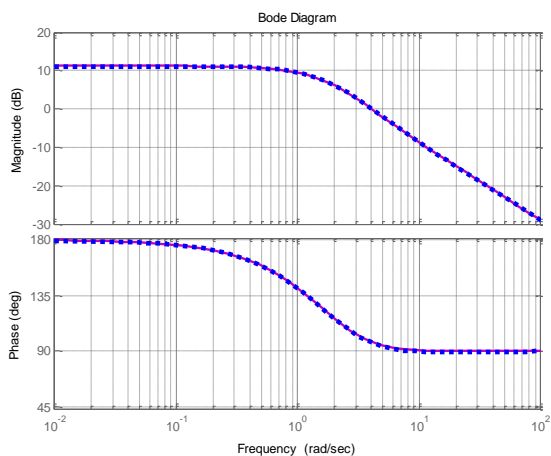


Fig.20. Caracteristicile Bode pentru modelul $H_{51}(s)$ nesimplificat și simplificat (punctată)

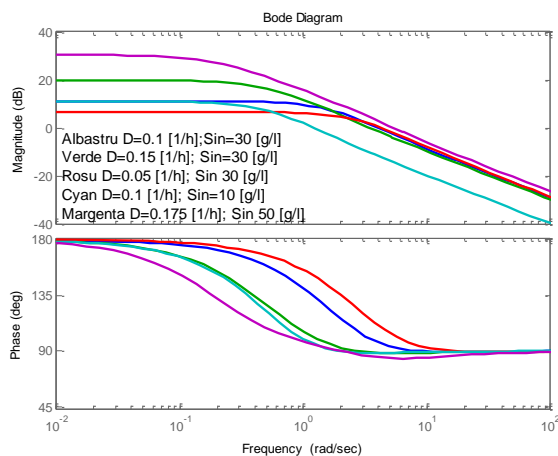


Fig.21. Caracteristicile Bode ale sistemului liniarizat în cele 5 regimuri de funcționare indicate pe grafic

Concluzii. În cel mai simplu model neliniar al procesului de producere a metanului prin digestie anaerobă, analiza detaliată a proprietăților calitative și cantitative relevă următoarele constatări importante:

- sistemul liniarizat de ordinul 5 este necontrolabil și neobservabil;
- ordinul redus al sistemului liniarizat depinde de punctul curent de operare. În cea mai mare parte a acestui domeniu admisibil, ordinul sistemului se poate considera egal cu 2;
- proprietățile sistemului dinamic liniarizat depind foarte mult de poziția punctului curent de operare în domeniul admisibil de funcționare al procesului.

4. Activitatea A1.3: Cuplarea celor două modele pentru realizarea modelului matematic global al instalației de tip biorafinărie

4.1 Scheme conceptuale de cuplare. Interfațarea modelelor

Cuplajul între un digester anaerob și un fotobioreactor rezultă într-o instalație complexă de tip biorafinărie care poate fi utilizată pentru obținerea de biomasă din microalge în vederea producerii de compuși cu valoare adăugată, bio-mitigația CO₂ rezultat la arderea biogazului și utilizarea sa ca substrat pentru procesul de creștere fotosintetică a microalgelor, studiul utilizării resturilor de biomasă provenite din extracția compușilor cu valoare adăugată din microalge ca substrat pentru producerea de biogaz în treapta anaerobă, analiza procesului de obținere de biogaz prin tratarea anaerobă a apelor reziduale și eliminarea nutrienților majore din apele uzate. Cuplajul între cele două bioprocese poate fi realizat atât prin fluxuri convective cât și prin fluxuri difuzive, identificându-se următoarele diagrame flux:

Schema de cuplaj 1. Influentul digesterului anaerob (F_{in-da}) are o compoziție cunoscută (biomasă, substrat, azot, fosfor etc.), putând proveni dintr-o rețea municipală de canalizare sau de la un operator industrial. Efluentul digesterului anaerob (F_{out-da}) cu proprietăți cunoscute poate fi deversat către o rețea de canalizare, dacă respectă normele de calitate impuse de lege, sau către o altă treaptă de epurare specifică proceselor de tratare a apelor uzate. În urma procesului de digestie anaerobă a deșeurilor organice rezultă debite consistente de biogaz ($G_{CH_4+CO_2}$) care pot fi arse în stații de co-generare de unde se obține energie electrică, căldură dar și cantități mari de CO₂. Pentru reducerea emisiilor de gaze cu efect seră în atmosferă, CO₂ produs în urma arderii se poate folosi ca sursă de carbon (substrat) în procesele de creștere fotosintetică a microalgelor (G_{CO_2}).

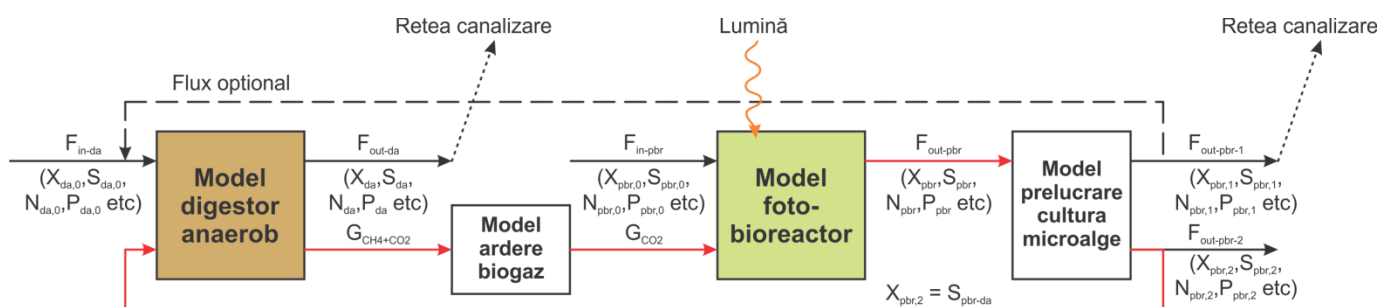


Fig.22. Cuplajul între un proces de digestie anaerobă și un proces de creștere fotosintetică a microalgelor

Un fotobioreactor operat în regim continuu va fi alimentat cu un flux convectiv (F_{in-pbr}) care să conțină celelalte nutrienți necesare creșterii (azot, fosfor etc). Prelucrarea culturii de microalge presupune separarea celulelor de mediul de cultura epuizat ($F_{out-pbr-1}$), acesta putând fi deversat către o rețea de canalizare dacă respectă normele de calitate impuse de lege sau întors în digesterul anaerob dacă se constată că prezintă o concentrație ridicată de substanțe organice. Celulele de microalge astfel separate de mediul epuizat sunt procesate pentru extragerea compușilor cu valoare adăugată, iar resturile acestora vor reprezenta un adaos de substrat pentru digesterul anaerob în vederea producerii de biogaz.

Schema de cuplaj 2. Fluxul convectiv provenit din digesterul anaerob (F_{out-da}) conține deseori cantități mari de azot și fosfor care limitează deversarea acestuia în receptoarele naturale și impun trimiterea către alte trepte de epurare. Acești efluenți pot reprezenta o sursă ieftină de nutrienți pentru procesele de creștere a microalgelor. Pentru că metabolismul autotrof (fotosintetic) al microalgelor nu poate avea loc în același timp cu cel heterotrof, aceste procese sunt mai degrabă adaptate creșterii heterotrofe a microalgelor, cu atât mai mult cu cât efluenții digesterelor anaerobe conțin chiar și după tratare cantități mari de substanțe organice. Creșterea heterotrofă a microalgelor nu se realizează în prezența luminii și este un proces asemănător cu creșterea drojdiilor. Chiar dacă viteza de creștere a microalgelor heterotrofe este mai mare decât cea a celor autotrofe, acest tip de cuplaj are dezavantajul ca efluentul digesterului anaerob, care este încă încărcat cu substanțe organice, este încărcat și cu bacterii care își vor continua creșterea în fotobioreactor, putând inhiba complet creșterea microalgelor. La fel ca și în primul caz, resturile de microalge obținute în urma prelucrării sunt adăugate în digesterul anaerob pentru obținerea de biogaz. Mediul de cultură epuizat de microalge poate fi trimis către digesterul anaerob dacă este încărcat cu substanțe organice poluante sau deversat într-o rețea de canalizare.

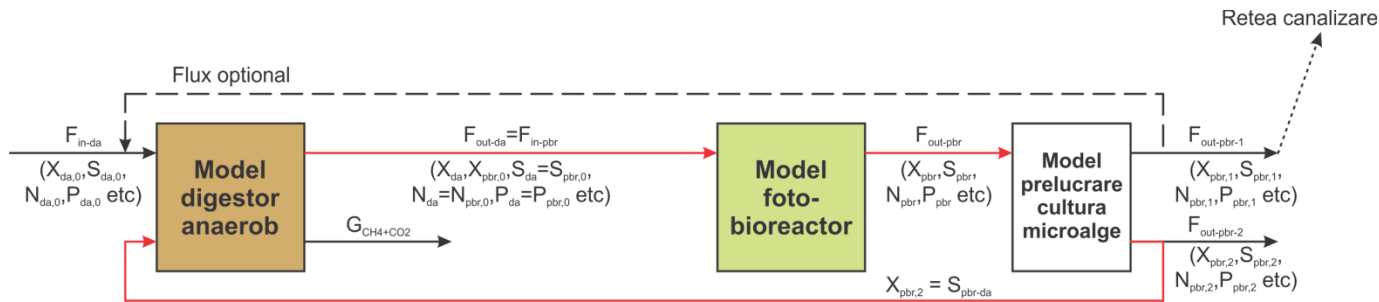


Fig.23. Cuplajul între un proces de digestie anaerobă și un proces de creștere heterotrofă a microalgelor

Schema de cuplaj 3. Această diagramă este de fapt o combinație între primele două scheme, cuplarea făcându-se atât prin intermediul fluxurilor convective ($F_{out-da} = F_{in-pbr}$) cât și prin intermediul celor difuzive (G_{CO_2}). Microalgele întrețin în acest caz un metabolism fotosintetic, având ca sursă de carbon CO_2 din arderea biogazului și macro-nutrimente (azot și fosfor) din efluentul digesterului anaerob. În acest caz trebuie selecționată o microalgă strict fototrofă, astfel încât să consume CO_2 ca unică sursă de carbon și nu substanțele organice din efluentul bazinului anaerob. Aceste substanțe organice ramase nedegradate vor rămâne netransformate dacă efluentul este sterilizat, iar mediul de cultură din fotobioreactor păstrat steril. Pentru un astfel de proces ar deveni costisitor, efluentul digesterului anaerob poate fi lăsat nesteril, urmând să se formeze consorții de bacterii și microalge care vor degrada împreună efluentul digesterului anaerob. Există riscuri mari în ceea ce privește stabilitatea consorțiului deoarece unele specii de microalge pot forma antibiotice, iar unele specii de bacterii pot secreta algicide, astfel, chiar dacă nu apare competiție pentru sursa de carbon, una dintre specii poate domina. La fel ca și în cazurile anterioare, resturile de microalge obținute în urma prelucrării acestora sunt adăugate în digesterul anaerob pentru obținerea de biogaz. Mediul de cultură epuizat de microalge poate fi trimis către digesterul anaerob dacă este încărcat cu substanțe organice poluante sau poate fi deversat într-o rețea de canalizare.

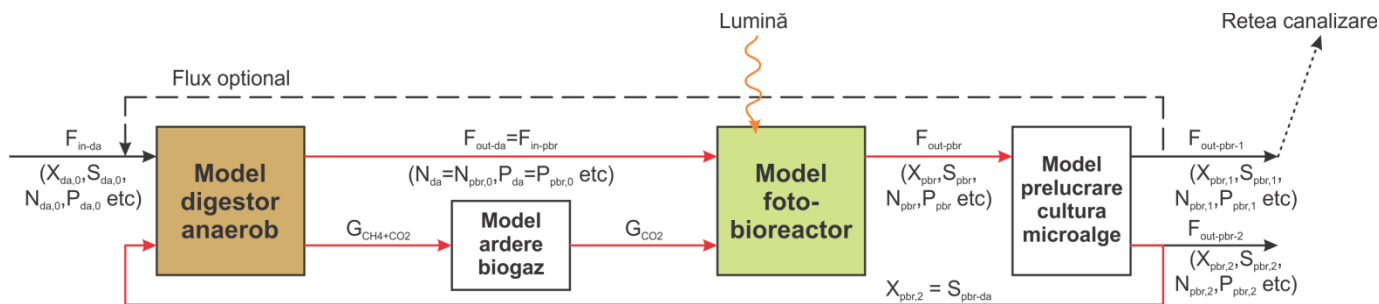


Fig.24. Cuplajul între un proces de digestie anaerobă și un proces de creștere fotosintetică a microalgelor cu nutrimente din efluentul digesterului anaerob

Există cu siguranță avantaje la fiecare schemă de cuplaj dar cea care este atractivă din multe puncte de vedere este prima, deoarece cuplajul între digesterul anaerob și fotobioreactor se realizează doar printr-un flux difuziv. Astfel, CO_2 rezultat în urma arderii reprezintă hrană pentru microalgele din fotobioreactor, un flux care nu este contaminat cu microorganisme deoarece rezultă în urma arderii, iar adăugarea sa în reactor nu participă la contaminarea mediului de cultură. Dacă riscul de contaminare este redus substanțial se pot dezvolta culturi axenice în scopul producerii de compuși cu valoare adăugată, nu doar pentru segmentul industrial (e.g. biodiesel) ci și pentru uzul uman (e.g. pigmenți, acizi grași polinesaturați cu catenă lungă precum omega-3 și omega-6 etc.). Celelalte două diagrame prezintă avantajul de a reprezenta o treaptă de tratare a apei uzate care succede treapta anaerobă, dar nu duc decât la acumularea unei biomase din microalge care poate fi folosită în cel mai bun caz pentru extragerea compușilor de uz industrial sau la o biomasă fără valoare adăugată. Pentru etapele următoare s-a ales studiul primului caz de cuplaj care prezintă certe avantaje și care ajută la studiul proceselor de obținere a mai multor compuși cu valoare adăugată.

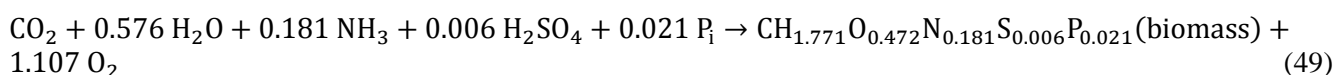
4.2 Simularea numerică a modelului instalației de tip biorafinărie

Cuplarea celor două sisteme, fotobioreactor și digester anaerob, implică o operație de conversie a mărimilor care asigură interconectarea sistemelor, astfel încât aceste mărimi să fie exprimate în aceleași unități de măsură. În același timp, pornind de la dimensiunea fotobioreactorului ce urmează a fi construit în etapa următoare și ținând cont de faptul că această activitate de modelare urmărește studiul compatibilității celor două sisteme, s-a realizat și o dimensionare corespunzătoare a digesterului anaerob.

Mărimile care asigură interconectarea sistemelor sunt:

- debitul și concentrația fluxului de ieșire de biomasă din fotobioreactor, care constituie intrare în digesterul anaerob;
- debitul de ieșire al dioxidului de carbon din digesterul anaerob care, în totalitate sau parțial, constituie intrare în fotobioreactor.

Pentru determinarea debitului și concentrației fluxului de ieșire de biomasă din fotobioreactor, se pornește de la rata de diluție și volumul fotobioreactorului și se determină debitul de intrare: $F_{in} = D \cdot V$ [m^3/h]. Debitul de ieșire $F_{out} = F_{in}$ deoarece sistemul funcționează în regim continuu. Astfel, productivitatea în biomasă din microalge se calculează cu relația: $D \cdot V \cdot X$ [Kg/h]. Această cantitate de biomasă constă în ~30% compuși cu valoare adăugată și ~70% resturi de biomasă. Astfel, concentrația de biomasă care va fi trimisă către digesterul anaerob este: $0.7 \cdot D \cdot V \cdot X$ [Kg/h]. Pentru a exprima biomasa în unități COD compatibile cu modelul pentru digesterul anaerob s-a luat ca exemplu ecuația stoichiometrică pentru creșterea fotosintetică a unei tulpini model de *Chlamydomonas reinhardtii* (Roels, 1983) conform căreia 1 g biomasă = 1.434 g COD:



Intrarea în digesterul anaerob va fi calculată astfel: $0.7 \cdot D \cdot V \cdot X \cdot 1.434$ [$Kg \text{ COD}/h$]. Aceste resturi de biomasă rezultă din procesarea mediului din fotobioreactor (e.g. centrifugare, filtrare etc.) și se prezintă sub forma unei paste cu o concentrație de substanță uscată de ~20%. Rezultă că debitul de resturi de biomasă se poate determina prin următoarea relație: $(0.7 \cdot D \cdot V \cdot X) / 20$ [m^3/h]. În lipsa datelor din literatura de specialitate privind compoziția biomasei rezultată din bioreactor în raport cu componentele existente în modelul ADM1, în cadrul acestei activități s-a considerat că această biomasă este constituită din particule compozite X_C , care prin procesul de dezintegrare se transformă în carbohidrați, proteine, lipide și inerte. Urmează ca la momentul realizării experimentelor propriu-zise această ipoteză să fie corectată în raport cu rezultatele analizelor ce vor fi realizate.

În cazul debitului de ieșire de dioxid de carbon din digesterul anaerob, acesta provine din arderea amestecului gazos de la ieșirea digesterului, amestec format din CH_4 , CO_2 și H_2 . Cum prin arderea un mol de metan conduce la producerea unui mol de C , rezultă că este necesară transformarea concentrației de CH_4 de la ieșirea digesterului conform formulei: 1 Kg COD = 1/64 kmol C.

Pentru dimensionarea digesterului anaerob, s-a considerat că fotobioreactorul ce urmează a fi realizat în etapa următoare are un volum previzionat de 5L. În aceste condiții, digesterul anaerob se consideră a avea la rândului lui un volum de 5 L, ceea ce asigură un debit de CO_2 la ieșirea lui suficient pentru alimentarea fotobioreactorului.

În Fig.25-30 sunt ilustrate câteva regimuri dinamice ale sistemului cuplat, obținute prin simulare numerică. S-a considerat o succesiune de variații în treaptă aplicate mărimilor de intrare, după cum urmează: la momentul $t = 200$ [h] intrarea de apă uzată, Q_{in_Apa} , are o variație de 50% în raport cu valoarea staționară anterioară; la momentul $t = 800$ [h] s-a considerat că intensitatea luminii incidente crește cu 50%; la momentul $t = 1000$ [h] s-a considerat că rata de diluție scade cu 33% față de valoarea staționară anterioară. În aceste condiții, în Fig. 25 se prezintă evoluția concentrației carbonului anorganic total, TIC, care este afectată de toate cele 3 intrări. Efectul variației debitului de apă uzată este mult mai lent decât cel produs de celelalte două intrări. În mod firesc, intrarea Q_{in_Apa} nu influențează concentrația azotului anorganic total, TIN, așa cum se remarcă din Fig.26. Variabila $G_{in}^{CO_2}$ este afectată doar de debitul de apă uzată (Fig.27), iar biomasa este influențată de intensitatea luminii incidente și de diluție, nu însă de debitul Q_{in_Apa} (Fig.28), deoarece substratul extracelular este în exces (cel intracelular este în limitare). În Fig.29 și Fig.30 sunt prezentate evoluțiile pH-ului și concentrației c_{CO_2} , care sunt influențate de toate cele 3 mărimi de intrare.

Analiza sistemului este ilustrată prin rezultatele privitoare la canalul de interacțiune $D \rightarrow TIC$. Sistemul dinamic neliniar cuplat, de ordinul 51, a fost liniarizat prin `linmod` și apoi prelucrat prin programul `hankelmr`, în vederea reducerii ordinului. Graficul valorilor singulare Hankel este dat în Fig.31. Adoptând ordinul sistemului redus egal cu 4, rezultă – după o prelucrare suplimentară de eliminare a unei perechi pol-zero nesemnificative – un sistem de ordinul 3. În Fig.32 sunt date caracteristicile Bode ale sistemului inițial și ale celui de ordin redus.

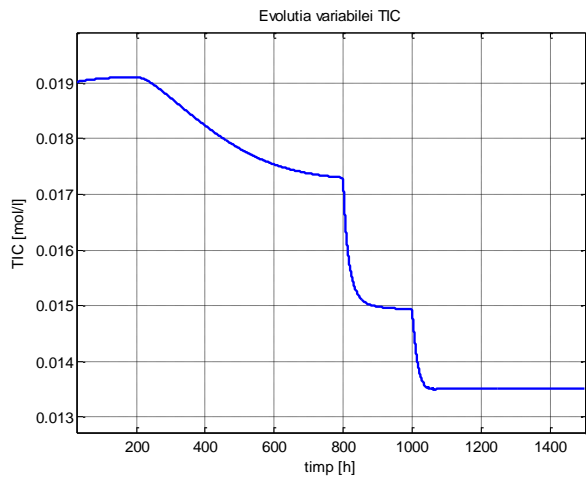


Fig.25. Evoluția variabilei TIC la aplicarea succesiunii semnalelor treaptă mărimilor de intrare

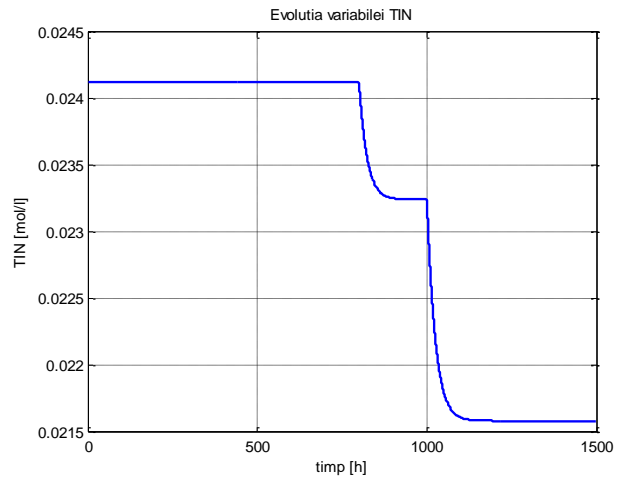


Fig.26. Evoluția variabilei TIN la aplicarea succesiunii semnalelor treaptă mărimilor de intrare

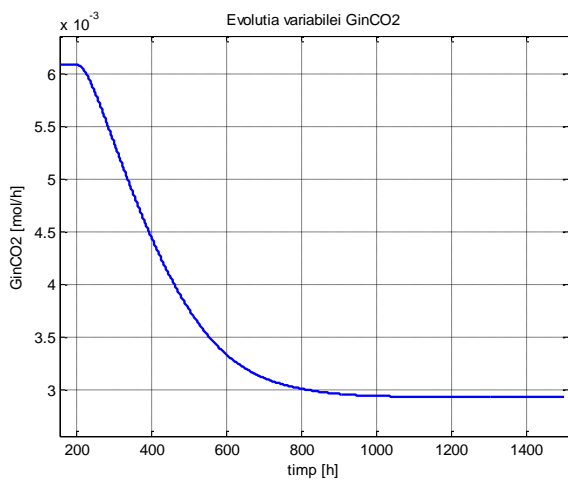


Fig.27. Evoluția variabilei $G_{in}^{CO_2}$ la aplicarea succesiunii semnalelor treaptă mărimilor de intrare

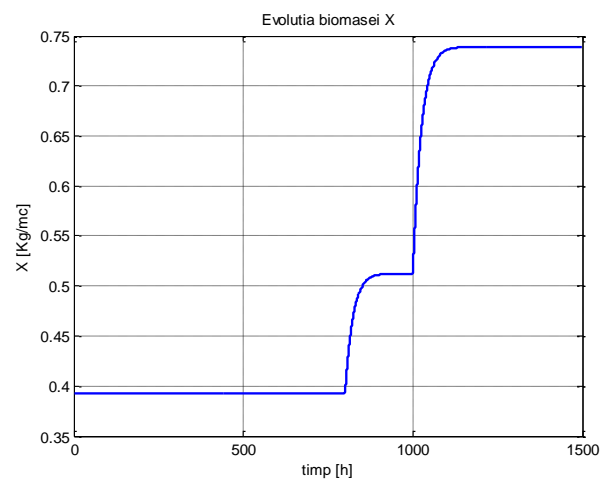


Fig.28. Evoluția biomasei X la aplicarea succesiunii semnalelor treaptă mărimilor de intrare

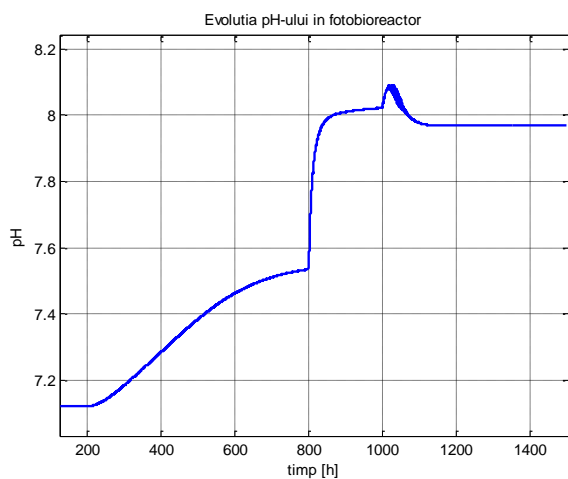


Fig.29. Evoluția pH-ului în fotobioreactor la aplicarea succesiunii semnalelor treaptă mărimilor de intrare

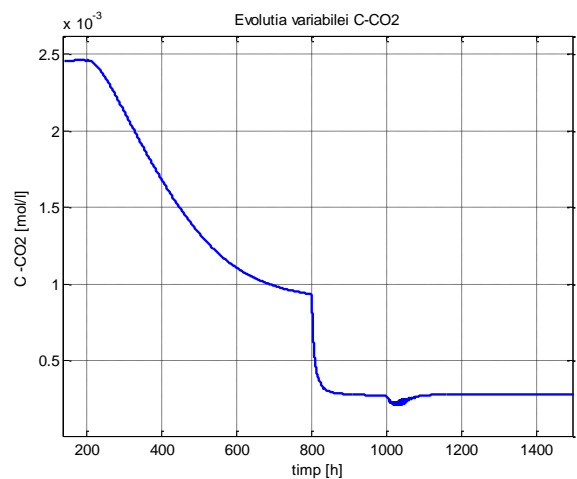


Fig.30. Evoluția variabilei c_{CO_2} la aplicarea succesiunii semnalelor treaptă mărimilor de intrare

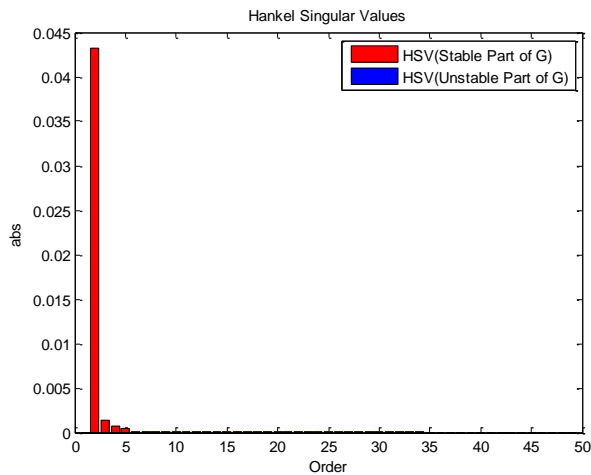


Fig.31. Graficul valorilor singulare Hankel

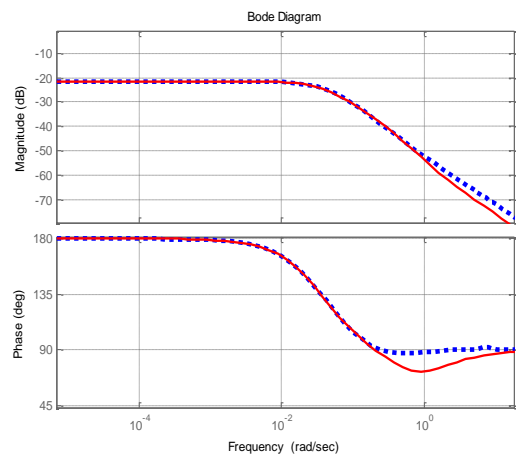


Fig.32. Caracteristicile Bode ale modelului inițial (punctat) și redus (roșu)

5. Concluzii

În cadrul etapei 1 a proiectului BIOCON au fost realizate cele trei activități prevăzute. În cele toate cele trei activități au fost analizate modele matematice pentru procesul de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor, procesul de digestie anaerobă și un model global, pentru instalația de tip biorafinărie. În esență, modelul global a fost realizat prin cuplarea a două modele matematice (cel al procesului de creștere fotosintetică a microalgelor în fotobioreactor și cel al procesului de digestie anaerobă). Pot fi trase următoarele concluzii:

1. Cele două procese menționate sunt caracterizate de modele foarte complexe (modelul fotobioreactorului este de ordinul 16 și cel de digestie anaerobă - ADM1, de ordinul 35). Modelul obținut prin cuplare ajunge la ordinul 51. Aceste modele foarte complexe sunt greu de utilizat în proiectarea legilor de reglare și, din acest motiv, au fost studiate atât modele mai simple, cât și posibilitatea de simplificarea a modelelor complexe.
2. Toate modelele matematice considerate au fost analizate prin simulare numerică, astfel: s-au determinat caracteristicile statice ale procesului și au fost stabilite unele regimuri de funcționare posibile; fiecare model matematic a fost liniarizat în punctele de funcționare alese și s-a analizat posibilitatea reducerii ordinului modelului matematic prin analiza valorilor singulare Hankel, pe toate canalele de interacțiune; au fost apoi stabilite proprietățile modelului matematic liniarizat.
3. Pot fi utilizate pentru proiectarea legilor de reglare, în etapele următoare, modele simplificate, după cum urmează: un model de ordinul 2 sau 3 pentru procesul de fotobioreactor și un model de ordinul 4 pentru digesterul anaerob.
4. Dintre cele trei scheme posibile de cuplare a fost aleasă prima, schemă analizată prin simulare numerică, menționată la punctul 2.

Rezultatele obținute arată că modelele simplificate aproximează foarte bine caracteristicile modelelor inițiale în punctele de funcționare considerate.

În concluzie, toate cele trei activități din etapa 1 a proiectului au fost îndeplinite 100%, rezultatele obținute fiind o bază solidă pentru proiectarea și realizarea fizică a structurii HILS propusă și, în același timp, oferind o serie de modele corespunzătoare pentru activitățile de proiectare a unor legi de control optimal și fuzzy, activități prevăzute în cadrul etapei 2 de derulare a proiectului.

Bibliografie

- Bastin G, Dochain D. On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors. Amsterdam: Elsevier, 1990.
- Batstone DJ, Keller J, Angelidaki I, Kalyuzhny SV, Pavlostathis SG, Rozzi A, Sanders WTM, Siegrist H., Vavilin VA., *Anaerobic digestion model No. 1 (ADM1)*, IWA Publishing, 2002.
- Dochain D, Vanrolleghem P. Dynamical Modelling and Estimation in Wastewater Treatment Processes. IWA Publ., 2001.
- Rosen C, Jeppsson U. *Aspects on ADM1 implementation within the BSM2 framework*, Department of Industrial Electrical Engineering and Automation, Lund University, Sweden, 2006.
- Droop MR. Vitamin B12 and Marine Ecology. IV. The Kinetics of Uptake, Growth and Inhibition in *Monochrysis Lutheri*. Journal of the Marine Biological Association of the United Kingdom. 1968; 48(3), 689-733.
- Edwards TJ, Maurer G, Newman J, Prausnitz JM. Vapour-liquid equilibria in multicomponent aqueous solutions of volatile weak electrolytes. AIChE Journal. 1978; 24:966-975.
- Roels JA. Energetics and kinetics in biotechnology. Amsterdam: Elsevier Biomedical Press, 1983.
- Zemaitis JF, Clark DM, Rafal M, Scrivner NC. Handbook of Aqueous Electrolyte Thermodynamics. New York: DIPPD, AIChE, 1986.