

مدلسازی دینامیک تاثیر اختلاط غیر ایده آل بر روی عملکرد راکتورهای ناپیوسته دوره ای

علیرضا کشتکار

دانشجوی دکتری گروه مهندسی شیمی- دانشکده فنی - دانشگاه تهران
بهروز میثمی

استادیار گروه مهندسی شیمی- دانشکده فنی - دانشگاه تهران
گیتی ابوالحمد

دانشیار گروه مهندسی شیمی- دانشکده فنی - دانشگاه تهران
حسین غفوریان

سازمان انرژی اتمی ایران - مرکز توسعه انرژیهای نو
مرتضی خلجی اسدی

سازمان انرژی اتمی ایران - مرکز توسعه انرژیهای نو
(تاریخ دریافت ۷۹/۹/۱۹ ، تاریخ تصویب ۸۰/۱۱/۱۳)

چکیده

فضولات دامی از جمله مستعدترین مواد زائد آلتی هستند که میتوانند توسط تخمیر بیهوازی به بیوگاز و کود تبدیل شوند. راکتورهای ناپیوسته دوره ای نیز از جمله متداولترین راکتورها برای تخمیر بیهوازی فضولات دامی هستند. با توجه به اینکه اختلاط موثر مواد از جمله عواملی است که بر روی میزان تولید متان تاثیر میگذارد لذا پیشگویی عملکرد راکتورهای واقعی مستلزم مدلسازی میزان اختلاط در راکتورهای است. در این مقاله از یک مدل اختلاط ساده دو پارامتری که به مدل اختلاط دو ناحیه ای معروف است برای شبیه سازی دینامیک فرایند تخمیر بیهوازی فضولات گاوی در راکتورهای ناپیوسته دوره ای استفاده شده است. در این مدل راکتور به دو ناحیه یکی ناحیه جریان دار که تحت تاثیر ورود و خروج مواد قرار دارد و دیگری ناحیه ساکن که فقط در حال تبادل جرم با ناحیه جریان دار است تقسیم میگردد. میزان انحراف از شرایط اختلاط ایده آل توسط پارامترهای اختلاط که عبارتند از حجم نسبی ناحیه جریان دار (a) و سرعت تبادل جرم بین دو ناحیه مذکور (b) مدلسازی میشود. مدل سینتیک در نظر گرفته شده برای تخمیر فضولات گاوی شامل یک مرحله هیدرولیز و چهار مرحله میکروبی است. این چهار مرحله عبارتند از تولید اسیدهای چرب فرار توسط باکتریهای اسیدوژن، تولید استات توسط باکتریهای استوژن پروپیونات خوار و بوتیرات خوار و بالاخره تولید متان توسط باکتریهای متانوژن. در سینتیک تخمیر اثرات بازدارندگی pH، اسیدهای چرب فرار، استات و آمونیاک نیز بر روی باکتریها لحاظ گردیده شده است. در مدل برای رشد باکتریها از سینتیک مونود و برای مرگ و میر باکتریها و همچنین مرحله هیدرولیز از واکنشهای درجه اول استفاده شده است. شبیه سازی فرایند توزع زبان برنامه نویسی فرتون و با استفاده از روش اولر برای حل ۲۵ معادله دیفرانسیل مرتبه اول غیرخطی انجام گرفته است. همچنین pH فرایند توسط موازنۀ بار اجزاء یونی موجود در سیستم و با استفاده از یک روش حدس و خطأ محاسبه شده است. نتایج شبیه سازی کامپیوتري نشان میدهدند که میزان تولید متان بستگی زیادی به توزیع زمان اقامت اجزاء و الگوی تغییرات غلظت و توزیع مواد در دو فاز جریان دار و ساکن دارد. همچنین نشان داده شد که این توزیع خود تابع پیچیده ای از پارامترهای اختلاط a و b است. علاوه بر پارامترهای اختلاط، پریود خوارک دهی راکتور نیز بر روی توزیع غلظت اجزاء موثر بود بطوریکه عملکرد راکتور در شرایط خوارک دهی پیوسته بهبود می یافتد. نتایج حاصله اهمیت در نظر گرفتن اختلاط و همچنین توانایی بالقوه مدل اختلاط دو ناحیه ای برای شبیه سازی عملکرد راکتورهای بیهوازی را نشان میدهد.

واژه های کلیدی: تخمیر بیهوازی، راکتور ناپیوسته دوره ای، مدلسازی، فضولات دامی، بیوگاز

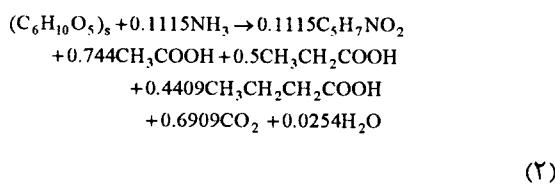
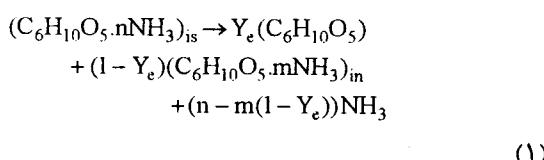
مقدمه

سبوسترا و حرارت و همچنین سایر عوامل محیطی بطور یکنواخت در راکتور توزیع گردند. در مقابل در صورتیکه اختلاط کامل در راکتور صورت نپذیرد راندمان فرایند حذف مواد آلی و تولید انرژی کاهش می یابد و در نتیجه بر روی میزان پایداری و تنبیت لجن خروجی از راکتور نیز اثرات منفی بجا می گذارد [۵].

تبديل فضولات دامی به کودی غنی از مواد مغذی و تولید انرژی بوسیله روش تخمیر بیهوازی سالهاست که در کشورهای مختلف جهان انجام میگیرد. عنوان مثال فقط تا سال ۱۹۸۱ در کشورهای جامعه مشترک اروپا ۴۲۲ واحد صنعتی تولید بیوگاز از فضولات دامی در حال کار بوده است [۶]. از آنجائیکه مدلسازی ریاضی فرایند تخمیر بیهوازی در شرایط اختلاط غیرکامل این پتانسیل را دارد که ارتباط بین پارامترهای اختلاط و سینتیک تخمیر را تشریح نماید و همچنین بعلت اینکه کار کمی در این خصوص انجام گرفته است [۷] لذا در این مقاله بمنظور داشتن درک بهتری از رابطه بین اختلاط و عملکرد راکتور، مدلسازی ریاضی فرایند تخمیر این نوع خوارک انجام گرفته است. همچنین بعلت اینکه در نقاط مختلف دنیا عمدتاً از راکتورهای ناپیوسته دوره ای برای تخمیر بیهوازی فضولات دامی استفاده میگردد لذا مدلسازی این نوع راکتور انتخاب شده است.

مدل سینتیک میکروبی

مدل سینتیک استفاده شده در این مقاله بر اساس مدل پیشنهادی آنجلی داکی و همکاران [۸] که برای تخمیر بیهوازی فضولات گاوی ارائه شده است میباشد. در این مدل تخمیر فضولات گاو و تولید بیوگاز توسط پنج واکنش زیر انجام میگیرد:



تخمیر بیهوازی فرایند چند مرحله ای پیچیده ای است که در نتیجه آن ترکیبات آلی توسط فعالیت گروههای مختلفی از باکتریهای بیهوازی نهایتاً به مtan و دی اکسید کربن تجزیه میگردد. اگرچه تاکنون مطالعات زیادی بمنظور درک هرچه بهتر مکانیسم فرایند تخمیر بیهوازی بعمل آمده است اما هنوز قواعد سینتیکی فرایند و اثرات باکتریهای مختلف روی عملکرد فرایند تخمیر بیهوازی بخوبی شناخته شده نیست [۱,۲]. این در حالی است که کاربرد عملی و بهینه فرایند بخصوص بمنظور تولید انرژی و حذف آلاینده ها مستلزم درک کاملتر این قواعد و اثرات است. بنابراین مدلسازی ریاضی فرایند حائز اهمیت است. یکی از فرضیاتی که در مدلسازی فرایند تخمیر زیاد مورد استفاده قرار میگیرد فرض یکنواختی محیط واکنش و داشتن شرایط اختلاط کامل در درون راکتور است. اگرچه این فرض در بعضی از موقعیت مثلاً ماقعیکه با راکتورهای کوچک آزمایشگاهی سروکار داریم یا ماقعیکه ثابتها مشخصه زمانی سینتیک فرایند خیلی بزرگتر از ثابتها مشخصه زمانی اختلاط و انتقال جرم فرایند باشند معین است [۲] اما در حالت کلی و بخصوص در ماقعیکه طراحی راکتورهای بزرگ مدنظر میباشد و عملاً رسیدن به اختلاط کامل در راکتور غیر ممکن یا پر هزینه میباشد اعمال چنین فرضی در مدلسازی ریاضی فرایند تخمیر بیهوازی منجر به محدودیت در کاربرد عملی اینگونه مدلها میگردد. بررسی نمودارهای توزیع زمان افامت در راکتورهای بزرگ نشان میدهد که اختلاط در راکتورهای حجمی بخوبی راکتورهای کوچک نمی تواند انجام گیرد بطوریکه نسبت حجم کاملاً اختلاط یافته به کل حجم در راکتورهای بزرگ تا مقادیر کوچکی در حدود ۲۳ درصد نیز گزارش شده اند [۳]. از طرف دیگر مطالعات انجام گرفته توسط نیلسن و ویلادسن [۴] نشان میدهد که غیر همگن بودن محیط واکنش تاثیرات زیادی بخصوص بر روی میزان تولید باکتریها و در نتیجه عملکرد کلی فرایند دارد. بنابراین میتوان نتیجه گرفت که برای داشتن عملکرد بهینه در راکتورهای بیهوازی اختلاط یکی از عوامل مهم و موثر است. اختلاط موثر باعث میگردد تا

جريان خوراک میباشد. با توجه به تعريف a و b ، در شرایط حدی وقتیکه پارامتر a به سمت یک میل کند و همچنین برای هر مقدار a وقتیکه پارامتر b به سمت بینهایت میل کند نتایج جاصل از مدل دینامیک به آنچه که از یک راکتور اختلاط کامل انتظار می رود میل خواهد نمود. بر عکس برای هر مقدار از a وقتیکه b به سمت صفر میل نماید سیستم شامل یک ناحیه کاملاً مرده با حجم غیر فعال V₁ (1-a) خواهد بود.

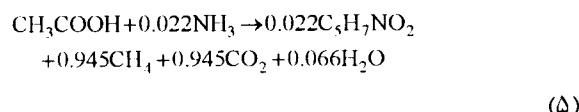
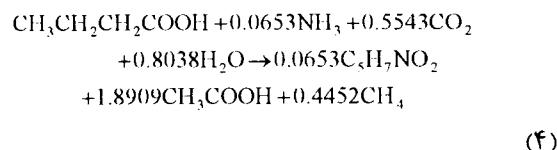
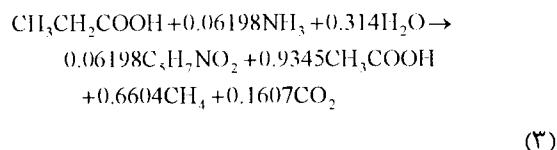
مدلسازی ریاضی فرایند

طبق تعريف در یک راکتور ناپیوسته دوره ای خوراک دهی و تخلیه راکتور در پریودهای زمانی معینی انجام میگیرد. عبارت دیگر در هر پریود زمانی حجم معینی از خوراک بسرعت وارد راکتور شده و با محتویات درون راکتور که از پریود قبل بجا مانده است مخلوط شده و واکنشهای تخمیر در طول این پریود زمانی در حالت ناپیوسته انجام میگیرد. سپس در انتهای هر پریود حجمی معادل با حجم خوراک ورودی از راکتور خارج میگردد و دوباره محتویات درون راکتور با حجم جدیدی از خوراک مخلوط شده و در مدت زمان مشابه با پریودهای قبل واکنشهای تخمیر ادامه می یابند. معمولاً پس از گذشت چندین پریود زمانی غلظت محصولات خروجی از راکتور ثابت میگردد و یک شرایط شبیه پایا در راکتور ایجاد میشود. پارامترهای مشخصه راکتورهای ناپیوسته دوره ای که عبارتند از پریود زمانی خوراک دهی t_r و نسبت حجم باقیمانده درون راکتور به حجم تخلیه شده از راکتور R بصورت زیر بیان میگردد:

$$t_r = \frac{V_r}{Q_f} \quad (6)$$

$$R = \frac{a V_1 - V_r}{V_r} \quad (7)$$

با توجه به تعريف فوق، شرایط اولیه راکتور در ناحیه جریان دار در شروع هر پریود زمانی جدید بصورت زیر محاسبه میگردد:



در این مدل سرعت مرحله هیدرولیز و سرعت مرگ و میر باکتریها بوسیله واکنشهای درجه اول و سرعت سایر مراحل بوسیله سینتیک رشد مونود بیان میگردد. همچنین اثرات بازدارندگی pH روی باکتریهای استوژن و متانوژن، بازدارندگی اسیدهای چرب فرار روی باکتریهای اسیدوژن، بازدارندگی استرات بوسیله اسیدهای استوژن و بازدارندگی آمونیاک روی باکتریهای متانوژن بصورت توابعی غیرقابلی در معادلات سرعت رشد مونود در نظر گرفته شده است.

مدل اختلاط فاز مایع

از میان مدل‌های اختلاط کلاسیک، مدل اختلاط دو ناحیه ای علیرغم سادگی آن برای تشریح توزیع زمان اقامت مواد در راکتورهای واقعی در فرایندهای شیمیایی و بیولوژیکی استفاده میشود [۹]. در این مدل فرض میگردد که فاز مایع به دو ناحیه جریان دار (α) و ساکن (β) تقسیم شده و این دو ناحیه در حال تبادل جرم با یکدیگر باشند. همچنین فرض می گردد که شرایط اختلاط کامل در هر دو ناحیه وجود دارد. علاوه بر این در این مدل فرض می گردد که ورود مواد به راکتور و همچنین خروج مواد از راکتور فقط در ناحیه جریان دار صورت می پذیرد. مدل دارای دو پارامتر اختلاط a و b است که با کمک آنها درجات مختلفی از اختلاط در راکتور قابل شبیه سازی است. پارامتر اختلاط a معرف نسبت حجم ناحیه جریان دار به حجم کل راکتور است و پارامتر اختلاط b معرف نسبت شدت جریان تبادلی بین دو فاز α و β به شدت

فرض میگردد ۶- انتقال جرم به فاز گاز فقط از طریق فاز مایع α انجام میگیرد ۷- جریانهای ورودی و خروجی در راکتور تنها برروی فاز مایع α اعمال میگردد ۸- فاز مایع β فقط در حال تبادل جرم با فاز مایع α می باشد ۹- فشار و حجم سیستم ثابت است ۱۰- دمای سیستم ثابت فرض می شود ۱۱- در دمای و فشار عملیاتی، بیوگاز بصورت یک گاز ایده آل در نظر گرفته می شود ۱۲- فرض میگردد که بیوگاز فقط شامل متان، دی اکسید کربن و آب باشد ۱۳- فشار جزیی آب برابر فشار بخار اشباع در نظر گرفته می شود ۱۴- فرض میگردد که دی اکسید کربن در فاز مایع α طبق قانون هنری، در حال تعادل ترمودینامیکی با دی اکسید کربن در فاز گاز باشد ۱۵- غلظت متان در فاز مایع α ناجیز فرض میگردد بعارت دیگر بعلت حلالیت پایین فرض میگردد که متان بلافضله وارد فاز گاز گردد ۱۶- در موازنۀ بار مجموع ترکیبات یونی غیر از اجزاء یونی اصلی در طول فرایند تخمیر ثابت در نظر گرفته می شود و از طریق pH اولیه سیستم برای هر یک از دو فاز مایع α و β بطور جداگانه محاسبه میگردد ۱۷- زمانهای تخلیه، تغذیه و اختلاط در مقایسه با زمان واکنش t ناجیز فرض میگردد.

شبیه سازی کامپیوتری فرایند

بمنظور بررسی تاثیر شرایط عملیاتی مختلف و همچنین ارزیابی تاثیر پارامترهای اختلاط برروی عملکرد راکتورهای دوره ای، شبیه سازی کامپیوتری مدل با کمک زبان برنامه نویسی فرتون انجام گرفت. در این شبیه سازی برای حل همزمان معادلات دیفرانسیل از روش اولر استفاده گردید. اطلاعات مورد نیاز برنامه نظری غلظت اجزا: موجود در خوراک، غلظت اجزاء و pH در شرایط اولیه راکتور، پریود خوراک دهی، مقادیر پارامترهای اختلاط، حجم فازهای مایع و گاز در راکتور، دما و فشار عملیاتی، زمان اقامت هیدرولیک یا دی خوراک توسط کاربر به برنامه داده می شوند. اطلاعات خروجی برنامه شامل غلظت اجزاء و pH در فاز مایع α یا همان جریان خروجی از راکتور، فاز مایع β و همچنین اطلاعاتی در خصوص گاز تولیدی است.

$$C_i = \frac{C_f + R C_r}{R + 1} \quad (8)$$

با توجه به اینکه مقدار t علاوه بر صفر تا زمان اقامت هیدرولیک (HRT) و متناظراً مقدار R بین بینهایت تا صفر می تواند تغییر کند لذا با انتخاب t یا R در این دو محدوده بترتیب عملکرد راکتورهای جریان مداوم و ناپیوسته نیز قابل پیشگویی است.

اعمال موازنۀ های جرم روی فازهای α و β همچنین فاز گاز در یک راکتور ناپیوسته دوره ای در شرایط گذرا برای اجزاء مختلف موجود در سیستم منجر به مجموعه ای از معادلات دیفرانسیل مرتبه اول غیر خطی می گردد که می بایستی با کمک شرایط اولیه معلوم بطور همزمان حل گردد. اجزاء موجود در سیستم شامل سوبسترای نامحلول، سوبسترای محلول، استات، پروپیونات، بوتیرات، آمونیاک، دی اکسید کربن، متان، باکتریهای اسیدوژن، باکتریهای استوژن پروپیونات خوار، باکتریهای استوژن بوتیرات خوار و باکتریهای متانوژن میگردد. علاوه بر این بمنظور اعمال اثرات بازدارندگی pH برروی غلظت آمونیاک و دی اکسید کربن آزاد در فاز محاسبه غلظت آمونیاک و دی اکسید کربن و همچنین این منظور معادله موازنۀ بار اجزاء یونی موجود در سیستم و همچنین واکنشهای تفکیک یونی و معادلات مربوط به تعیین غلظت هر یک از اجزاء یونیزه موجود در فاز مایع برحسب تابعی از pH و غلظت کل آن جزو می بایستی بطور همزمان حل گردد. بطور کلی فرضیات زیر برای مدلسازی فرایند تخمیر بعمل آمده است:

- ۱- فاز گاز و فازهای مایع α و β همگن و یکنواخت میباشند ۲- فرض میگردد که سرعت واکنشهای مراحل میکروبی از سینتیک رشد مونود تبعیت نمایند ۳- اثرات بازدارندگی برروی سینتیک واکنشهای میکروبی توسط معادلات غیر روابطی بیان میگردد ۴- سرعت مراحل هیدرولیز و سرعت مرگ و میر باکتریها توسط واکنشهای درجه اول بیان می گردد ۵- ثابت سرعت مرگ و میر باکتری برابر ۵ درصد ثابت ماگزینم سرعت رشد باکتری

جدول ۱ : ثابت‌های سینتیکی استفاده شده در مدل [۸] .

مقدار	واحد	ثابت
.۵	(g/l)	K_{ss}
.۲۵۹	(g/l)	K_{spr}
.۱۷۶	(g/l)	K_{shut}
.۱۲	(g/l)	K_{sac}
.۲۳	(g/l)	K_{iVFA}
.۹۶	(g/l)	K_{ipr}
.۷۲	(g/l)	K_{ibut}
.۲۶	(g/l)	K_{iam}
.۰	(d ⁻¹)	K_o
.۰	(d ⁻¹)	μ_{maxA}
.۵۴	(d ⁻¹)	μ_{maxAP}
.۶۸	(d ⁻¹)	μ_{maxAB}
.۶	(d ⁻¹)	μ_{maxM}
.۵۵	---	Y_e
.۴۵۴	---	n
.۳۴	---	m
.۵	---	pK_h
.۰	---	pK_l

جدول ۲ : ثابت‌های ترمودینامیکی در C ° ۳۵ .

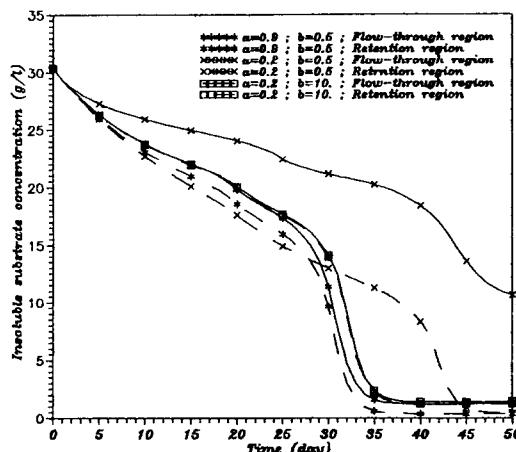
مرجع	مقدار	واحد	ثابت
۱۲	$2/068 \times 10^{-14}$	مولار	K_w
۱۲	$0/909 \times 10^{-7}$	مولار	K_{a1}
۱۲	$5/6223 \times 10^{-11}$	مولار	K_{a2}
۱۲	$1/773 \times 10^{-5}$	مولار	K_{a3}
۱۲	$1/445 \times 10^{-5}$	مولار	K_{a4}
۱۲	$1/445 \times 10^{-5}$	مولار	K_{a5}
۱۲	$1/567 \times 10^{-9}$	مولار	K_{a6}
۱۳	۳۷/۶۷	اتمسفر.لیتر.رمول	H_c

پارامترهای اختلاط بکاربرده شده در این مقاله با توجه به اطلاعات موجود در مایع علمی انتخاب شده اند. در مطالعات ردبایی که توسط محققین برروی راکتورهای بیهوده‌ی صنعتی انجام گرفته است حجم ناحیه جریان دار بین ۲۳ تا ۸۸ درصد گزارش شده است [۱۰]. عنوان مثال مطالعات ردبای انجام شده توسط اسمیت و همکاران [۱۱] برروی یک راکتور بیهوده‌ی پایلوت، حجم ناحیه جریان دار را ۴۹ درصد و نسبت شدت جریان تبادلی بین دو فاز مایع α و β به شدت جریان خوراک را ۰/۳۳ گزارش نموده اند. پارامترهای مدل که شامل پارامترهای سینتیکی و پارامترهای فیزیکی-شیمیایی میگردند در جداول (۱) و (۲) آرائه شده اند. علاوه بر این در جدول ۳ نیز مشخصات فضولات گاو و شرایط عملیاتی بکاربرده شده در شبیه سازیهای کامپیوتری داده شده است. مشخصات فضولات گاو بر اساس اطلاعات ارائه شده در مرجع [۸] انتخاب گردیده اند. همچنین شرایط اولیه فاز مایع α و β شیوه مشخصات خوراک انتخاب شده اند.

با توجه به اینکه اجزاء یونی موجود در سیستم تابعی از pH می‌باشند بنابراین حل معادله موازنی بار مستلزم استفاده از روش‌های حدس و خطأ است. علاوه بر این محاسبه pH فاز مایع α نیز به یک روش حدس و خطأ احتیاج دارد زیرا غلظت CO_2 کل در فاز مایع α تابعی از pH و فشار جزئی CO_2 می‌باشد. بنابراین برای محاسبه pH فاز مایع α مراحل زیر می‌باشند طی گردند:

- برای هر مرحله زمانی t یک pH حدس بزنید(pH مرحله زمانی قبل حدس اولیه خوبی برای این مرحله میتواند باشد) -۲- معادلات دیفرانسیل مربوط به غلظت اجزاء در فاز مایع α را حل کنید -۳- معادله موازنی بار را با استفاده از غلظتها محاسبه شده اجزاء در مرحله ۲ و از طریق یک روش حدس و خطأ بمنظور محاسبه pH حل نمائید -۴- pH محاسباتی در مرحله ۳ را با pH حدسی در مرحله ۱ مقایسه نمائید -۵- چنانچه اختلاف این دو کمتر از 10^{-3} بود مقادیر محاسباتی را عنوان مقادیر نهایی مرحله زمانی t در نظر بگیرید. در غیر این صورت pH محاسباتی را عنوان حدس اولیه انتخاب نموده، به مرحله ۲ رفته و محاسبات را تکرار نمائید.

نتایج حاصل از شبیه سازی کامپیوتری برای سه گروه مختلف پارامترهای اختلاط a و b با هم مقایسه شده اند. پارامترهای اختلاط (a,b) برای این سه گروه بترتیب برابر ($0.09/5$ ، $0.02/5$ و $0.002/0$) انتخاب شده اند. همانطور که در شکل (۱) مشاهده میشود به ازای مقادیر a بزرگ، غلظت سوبستراتی نامحلول در هر دو فاز جریان دار و ساکن تقریباً با یکدیگر برابر بوده و همچنین الگوی تغییرات غلظت در هر دو فاز یکسان است. در مقابل با کاهش پارامتر اختلاط a از 0.09 به 0.02 و ثابت نگهداشتن پارامتر اختلاط b مشاهده میشود که غلظت سوبستراتی نامحلول در دو فاز کاملاً با یکدیگر فرق می کنند اگرچه الگوی تغییرات غلظت در هر دو فاز همچنان مشابه یکدیگر می باشند. در حالت سوم با ثابت نگهداشتن پارامتر a برابر 0.02 و افزایش پارامتر b از 0.05 به 0.10 مشاهده میگردد که الگوی تغییرات غلظت سوبستراتی نامحلول در هر دو فاز کاملاً بر روی یکدیگر منطبق شده اند و در نتیجه غلظت سوبستراتی نامحلول در تمام زمانها در دو فاز با یکدیگر برابر شده اند.



شکل ۱: تغییرات غلظت سوبستراتی نامحلول بر حسب تابعی از زمان به ازای اقامت هیدرولیک ۲۰ روز و خوراک دهی یک روز.

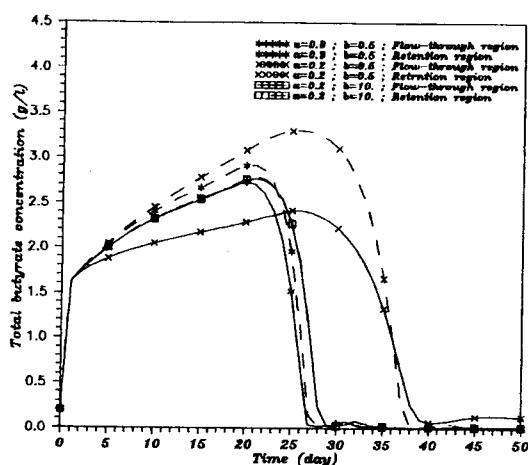
در اشکال (۲) تا (۴) همین تغییرات را برای اجزاء دیگر موجود در راکتور نیز میتوان مشاهده نمود. همانطور که در این اشکال مشاهده میشود پارامتر اختلاط b بر روی توزیع یکسان غلظت اجزاء موجود در راکتور تاثیر به سزاوی دارد بطوریکه با افزایش پارامتر b غلظت اجزاء مختلف در فازهای α و β کاملاً شبیه یکدیگر میگردند

جدول ۳: مشخصات فضولات گاو و شرایط عملیاتی استفاده شده در شبیه سازیهای کامپیوتری.

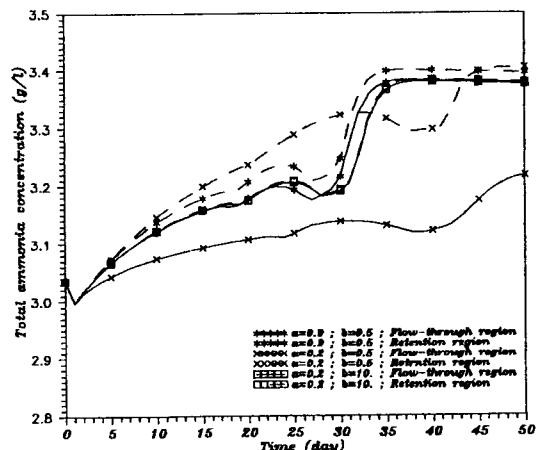
خصوصیت	مقدار	واحد
غلظت سوبستراتی نامحلول	$30/4$	گرم VS بر لیتر
غلظت سوبستراتی محلول	$5/4$	گرم VS بر لیتر
غلظت کل استات	$4/5$	گرم بر لیتر
غلظت کل پروپیونات	$2/3$	گرم بر لیتر
غلظت کل بوتیرات	$0/2$	گرم بر لیتر
غلظت کل آمونیاک	$3/0\ 357$	گرم بر لیتر
غلظت کل CO_2 در فاز مایع	$0/0$	گرم بر لیتر
غلظت کل بیوماس	$0/2$	گرم بر لیتر
کسر باکتریهای اسیدوژن	$0/65$	---
کسر باکتریهای استوژن پروپیونات خوار	$0/025$	---
کسر باکتریهای استوژن بوتیرات خوار	$0/025$	---
کسر باکتریهای متانوژن	$0/3$	---
دما	35	درجه سانتیگراد
فشار	$1/0$	اتمسفر
حجم کل فازهای مایع	$1/0$	لیتر
حجم فاز گاز	$0/1$	لیتر
زمان اقامت هیدرولیک	$20/0$	روز
pH	$8/0$	---

نتایج

تأثیر پارامترهای اختلاط a و b بر روی توزیع غلظت اجزاء در یک راکتور ناپیوسته دوره ای با پریود خوارک دهی یک روز و زمان اقامت هیدرولیک ۲۰ روز در اشکال ۱ تا ۴ بترتیب برای غلظتهای سوبستراتی نامحلول، استات، بوتیرات و آمونیاک نشان داده شده است. در این اشکال



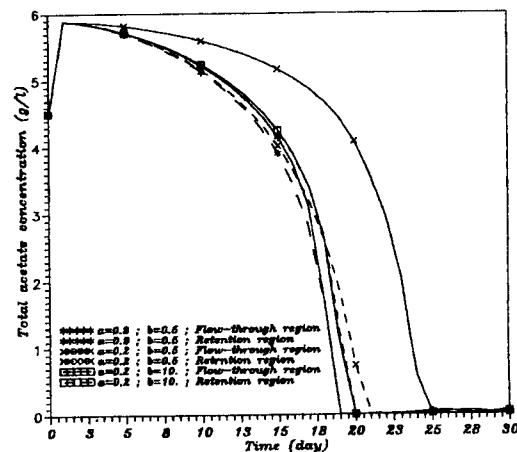
شکل ۳: تغییرات غلظت کل بوتیرات بر حسب تابعی از زمان به ازای اقامت هیدرولیک ۲۰ روز و پریود خوراک دهی یک روز.



شکل ۴: تغییرات غلظت کل آمونیاک بر حسب تابعی از زمان به ازای اقامت هیدرولیک ۲۰ روز و پریود خوراک دهی یک روز.

از آنجاییکه تولید متان از مواد زائد آلی در فرایند تخمیر بیهواری مستلزم طی مراحل میکروبی پیچیده و مختلفی است و در آن گونه های مختلفی از باکتریها با عملکردهای متفاوت نقش دارند بطوریکه محصول نهایی فرایند حاصل مجموعه ای از واکنشهای بیوشیمیابی سری و موازی است و سینتیک تخمیر نیز تحت تاثیر اثرات بازدارندگی pH و غلظت بعضی از اجزاء قرار دارد، لذا نحوه توزیع غلظت اجزاء در راکتور بروی مقدار تولید متان از مواد آلی نقش عمده ای بازی میکند از طرف دیگر با توجه به اینکه

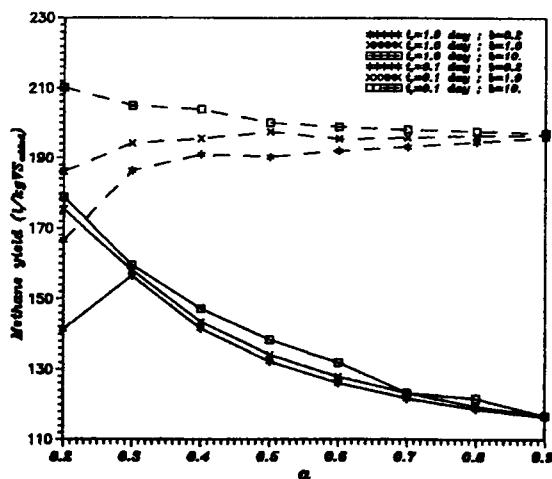
زیرا در مدل اختلاط دو ناحیه ای، پارامتر b معرف سرعت انتقال جرم میان دو ناحیه است بنابراین همانطور که از لحظه تئوری انتظار میبرود و نتایج مدل نیز آنرا نشان میدهد با افزایش پارامتر b ، سرعت انتقال جرم میان دو ناحیه جریان دار و ساکن افزایش یافته و در نتیجه غلظت مواد در هر دو فاز یکسان میگردد در نتیجه یک توزیع یکسان غلظت اجزاء در کل راکتور مشاهده میگردد. ایجاد محیطی همگن در کل حجم راکتور بعلت اعمال سرعت تبادل جرم بالا، نشان دهنده توانایی مدل اختلاط دو ناحیه ای در شبیه سازی راکتورهای تخمیر بیهواری با اختلاط کامل و غیرکامل است.



شکل ۲: تغییرات غلظت کل استات بر حسب تابعی از زمان به ازای اقامت هیدرولیک ۲۰ روز و پریود خوراک دهی یک روز.

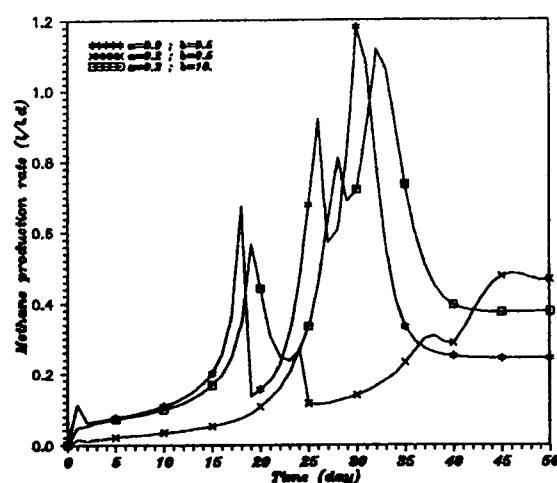
در مدل اختلاط دو ناحیه ای پارامتر a معرف حجمی از راکتور است که تحت تاثیر ورود خوراک قرار میگیرد. در شرایط حدی وقتیکه a به سمت یک میل میکند عملکرد راکتور شبیه عملکرد یک راکتور اختلاط یافته ایده آل میشود. در مقابل زمانیکه a به سمت صفر میل نماید و پارامتر اختلاط b نیز کوچک باشد عملکرد راکتور شبیه راکتوری با حجم مرده $V_1(1-a)$ شده و در این شرایط بخش قابل ملاحظه ای از خوراک ورودی به راکتور دست نخورده از راکتور خارج میگردد. به ازای مقادیر a بین این دو ناحیه حدی، تغییرات a می تواند منجر به تغییرات شدیدی در الگوی توزیع غلظت اجزاء شده بطوریکه غلظتهای یکسان یا کاملاً متفاوت در دو فاز جریان دار و ساکن مشاهده گردد.

بنابراین در حالت کلی با توجه به سینتیک تخمیر در نظر گرفته شده در این مدل میتوان نتیجه گرفت که تاثیر پارامترهای اختلاط a و b بر روی عملکرد راکتور از نظر میزان تولید متان از فضولات گاوی عمدهاً بصورت غیرمستقیم و از طریق تاثیری که این پارامترها بر روی الگوی تغییرات غلظت اجزاء در دو فاز جریان دار و ساکن a بجا می‌گذارند اعمال میگردد. تاثیر پارامترهای اختلاط a و b بر روی بازده متان در شرایط پایا به ازای زمان اقامت هیدرولیک ۲۰ روز بترتیب در اشکال (۶) و (۷) نشان داده شده است. در این اشکال نتایج شبیه سازی کامپیوتری برای دو پریود خوراک دهی مختلف (یک روز و یکدهم روز) رسم گردیده اند. عبارت دیگر در این اشکال عملکرد یک راکتور ناپیوسته دوره ای با پریود خوراک دهی یک روز و یک راکتور تقریباً پیوسته شبیه سازی شده است. همانطور که از این شکلها مشاهده میشود تحت شرایط عملیاتی در نظر گرفته شده بازده متان تقریباً در تمام مقادیر a و b در یک راکتور پیوسته بزرگتر از یک راکتور ناپیوسته دوره ای میباشد. بنابراین در یک راکتور با اختلاط محدود میتوان انتظار داشت که از تخمیر فضولات گاو در صورت استفاده از خوراک دهی پیوسته بجای استفاده از خوراک دهی ناپیوسته متان بیشتری استحصال نمود.



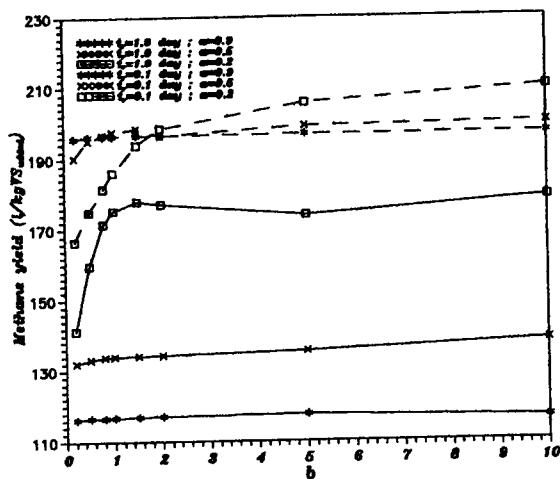
شکل ۶: تاثیر پارامتر اختلاط a بر روی بازده تولید متان در شرایط پایا به ازای زمان اقامت هیدرولیک ۲۰ روز.

پارامترهای a و b مدل اختلاط دو ناحیه ای بر روی الگوی تغییرات غلظت اجزاء و همچنین یکسان یا عدم یکسان بودن غلظتها در دو ناحیه جریان دار و ساکن تاثیر زیادی دارند بنابراین میتوان نتیجه گرفت که عملکرد راکتور از نظر تولید متان تابع پیچیده ای از پارامترهای a و b باشد. تاثیر پارامترهای a و b (سه گروه فوق الذکر) بر روی سرعت تولید متan در شکل (۵) نشان داده شده است. همانطور که مشاهده میشود در حالتیکه پارامتر a یا پارامتر b بزرگ باشند (حالات اول و سوم) سرعت تولید متان بر حسب تابعی از زمان دارای تغییرات نوسانی a بزرگی است. این در حالی است که در حالت دوم (a برابر ۰/۲ و b برابر ۰/۵) که پارامترهای اختلاط انتخاب شده یک راکتور با اختلاط محدود را شبیه سازی می کنند این تغییرات زمانی یکنواختر و کوچکتر می باشند. بنابراین در حالت اول و سوم که پارامتر اختلاط a یا b بزرگ می باشند بعلت اینکه سطح زیر نمودار سرعت تولید متان بزرگتر از حالت دوم می باشد متان بیشتری استحصال شده است. این موضوع از نتایج ارائه شده در شکل (۱) نیز قابل پیش بینی بود زیرا همانطور که از این شکل مشاهده میشود در حالت دوم بخش قابل ملاحظه ای از خوراک دست نخورده از راکتور خارج میشود.

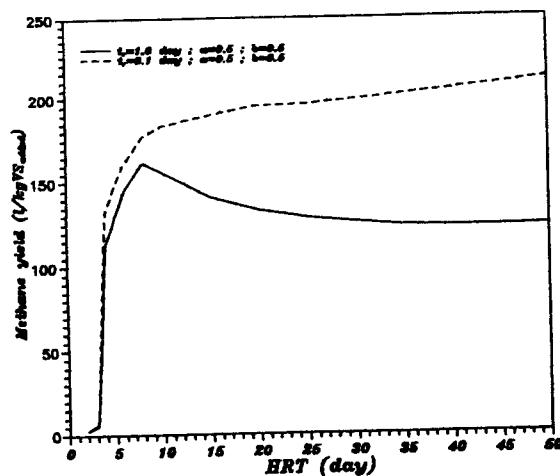


شکل ۵: تغییرات سرعت تولید متان بر حسب تابعی از زمان به ازای زمان اقامت هیدرولیک ۲۰ روز و پریود خوراک دهی یک روز.

$t_r = 0$ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود در هر دو مورد یک ناحیه بحرانی HRT وجود دارد که به ازای مقادیر HRT کمتر از این محدوده بعلت وقوع پدیده فرار لجن و تجمع اسیدهای چرب فرار و افت شدید pH، فرایند ناپایدار گشته و اصطلاحاً راکتور ترش می‌گردد و در نتیجه تولید متان به شدت کاهش می‌یابد. در مقابل به ازای HRT بزرگتر از این ناحیه بحرانی، با توجه به نوع خوراک دهی راکتور با افزایش HRT بازده متان با شبکه کمی افزایش یا کاهش می‌یابد. در این شکل باز مشاهده می‌گردد که عملکرد راکتورهای ناپیوسته برای تولید متان بهتر از راکتورهای ناپیوسته دوره ای است.



شکل ۷: تاثیر پارامتر اختلاط a بر روی بازده تولید متان در شرایط پایا به ازای زمان اقامت هیدرولیک ۲۰ روز.



شکل ۸: تاثیر زمان اقامت هیدرولیک بر روی بازده تولید متان در شرایط پایا.

همانطور که از شکل (۶) مشاهده می‌شود در يك راکتور ناپيوسته دوره اي صرفنظر از مقدار پارامتر b ، تاثير پارامتر a برروي الگوي تعديلات غلظت اجزاء بگونه ايست که در اكتر محدوده در نظر گرفته شده برای اين پارامتر، افزایش a منجر به کاهش بازده متان گشته است. در مقابل وقتیکه عملکرد راکتور به سمت يك راکتور پيوسته ميل می نماید تاثير پارامتر a بستگی به پارامتر b داشته و غالباً با افزایش پارامتر a بازده متان نيز افزایش یافته است. يك دیگر از نکات قابل توجه در اين شکل اين است که با افزایش a نمودارهای تولید متان به يكديگر نزدیک شده اند بطوریکه بازده متان در راکتور ناپيوسته دوره اي ($t_r = 0$ برابر ۱ روز) تقریباً برابر نصف راکتور پيوسته (۰.۱۵ برابر ۰.۱ روز) شده است. بزرگتر بودن بازده متان در راکتورهای پيوسته نسبت به راکتورهای ناپيوسته دوره اي از لحاظ تئوري نيز قابل پيش بینی است زیرا در راکتورهای ناپيوسته دوره اي تمام خوراک روزانه در يك لحظه زمانی محدود وارد راکتور می‌گردد. اين امر باعث می‌شود تا غلظت سوبسترا در راکتور ناگهان افزایش یابد و بصورت يك شوك آني بر روی عملکرد باكتريها تاثير منفي بگذارد. از طرف ديگر از آنجايike پارامتر اختلاط a معرف حجمی از راکتور است که تحت تاثير ورود خوراک قرار دارد بنابراین هرچه پارامتر a بزرگتر باشد تاثير اين شوك آني در حجم بيشتری از راکتور اعمال خواهد شد و در نتیجه بازده متان بيشتر کاهش می‌یابد. همچنان از شکل (۷) میتوان مشاهده نمود که تقریباً در تمام موارد، با افزایش پارامتر b بازده متان نيز افزایش یافته است. از مقایسه دو شکل (۶) و (۷) میتوان نتیجه گرفت که تاثير پارامتر a برروي میزان تعديلات بازده متان نسبت به پارامتر b بيشتر است. البته در حالت كلی بازده متان تابع پیچیده ای از پارامترهای a و b است و به شرایط عملیاتی بستگی دارد.

در شکل (۸) تاثير زمان اقامت هیدرولیک برروي بازده متان در شرایط پایا برای دو راکتور مختلف شامل يك راکتور ناپيوسته دوره اي با اختلاط محدود($a=0/b=0.5$) و يکروز($t_r=0$) و يك راکتور با خوراک دهی نسبتاً پيوسته با اختلاط محدود($a=0/b=0.5$) و يكدهم روز

در این مقاله که ارتباط بین مدل سینتیک و مدل اختلاط فرایند تخمیر بیهوازی را نشان می‌دهد بطور تجربی مورد بررسی قرار نگرفته است اما اعتبار مدل سینتیک فرایند در مرجع [۱۴] مورد بررسی و تأثید واقع شده است. از طرف دیگر اخیراً نشان داده شده است که مدل‌های اختلاط ساده دارای دقت کافی برای شبیه سازی الگوی اختلاط مایع در راکتورهای تخمیر بیهوازی می‌باشد [۱۵].

فهرست علائم

a	: پارامتر اختلاط
b	: پارامتر اختلاط
C_i	: غلظت کل جزء i در فاز مایع (g/l)
H_c	: ثابت هنری دی اکسید کربن (atm.l/mol)
HRT	: زمان اقامت هیدرولیک (رور)
K_0	: ثابت سرعت هیدرولیز (day ⁻¹)
K_{a1}	: ثابت تفکیک اول کربنیک اسید
K_{a2}	: ثابت تفکیک دوم کربنیک اسید
K_{a3}	: ثابت تفکیک استیک اسید
K_{a4}	: ثابت تفکیک پروپیونیک اسید
K_{a5}	: ثابت تفکیک بوتیریک اسید
K_{a6}	: ثابت تفکیک آمونیاک
K_w	: ثابت تفکیک آب
K_{iam}	: ثابت بازدارندگی آمونیاک برروی باکتریهای متابوژن (g/l)
K_{ibut}	: ثابت بازدارندگی بوتیرات برروی باکتریهای استوژن بوتیرات خوار (g/l)
K_{ipr}	: ثابت بازدارندگی پروپیونات برروی باکتریهای استوژن پروپیونات خوار (g/l)
K_{iVFA}	: ثابت بازدارندگی اسیدهای چرب فرار برروی سرعت مرحله هیدرولیز (g/l)
K_{ss}	: ثابت اشباع مونود باکتریهای اسیدوژن (g/l)
K_{sac}	: ثابت اشباع مونود باکتریهای متابوژن (g/l)
K_{shut}	: ثابت اشباع مونود باکتریهای استوژن بوتیرات خوار (g/l)
K_{spr}	: ثابت اشباع مونود باکتریهای استوژن پروپیونات خوار (g/l)
m	: ثابت خوارک استفاده شده در معادله ۱

نتیجه گیری

عملکرد راکتورهای تخمیر بیهوازی بستگی به درجه اختلاط اعمال شده دارد. ایجاد شرایط اختلاط کامل و ایده آل در راکتورهای واقعی و صنعتی عملأً غیر ممکن و یا پر هزینه است. با مدلسازی راکتورهای بیهوازی میتوان عملکرد فرایند تخمیر بیهوازی را پیشگویی و کنترل نمود و در نتیجه از بروز هرگونه اخلال در فرایند جلوگیری و یا در هنگام بروز ناپایداری در فرایند راه حلهای مناسب ارائه نمود. متاسفانه در اکثر مدل‌های موجود فرضیات ساده کننده ای نظریه فرض اختلاط کامل در راکتور اعمال می‌شود. اعمال چنین فرضیاتی کاربرد مدل را در شرایط عملی با محدودیت مواد می‌سازد. ارزیابی اثرات پارامترهای مشخصه اختلاط a و b نشان داد که اگرچه پارامتر a نسبت به پارامتر b تاثیر بیشتری بر روی عملکرد راکتور دارد اما در حالت کلی عملکرد راکتور تابع پیچیده ای از هردوی این پارامترها است. همچنین مشاهده شد که پارامترهای اختلاط a و b تاثیر زیادی بر روی توزیع زمان اقامت اجزاء و همچنین الگوی تغییرات غلظت و توزیع اجزاء در دو فاز جریان دار و ساکن دارند. عبارت دیگر با توجه به تاثیری که این پارامترهای اختلاط بر روی نحوه توزیع غلظت اجزاء در راکتور و متعاقباً بر روی سینتیک تخمیر بحا میگذارند می‌باشد تاثیر آنها را بر روی عملکرد راکتور توجیه نمود. علاوه بر پارامترهای اختلاط مشاهده شد که پریود خوارک دهی راکتور نیز بر روی توزیع غلظت اجزاء تاثیر میگذارد. نتایج مدلسازی راکتورهای ناپیوسته دوره ای با پریود خوارک دهی یکروز و یکدهم روز نشان دادند که عملکرد راکتور زمانیکه خوارک دهی به سمت پیوسته شدن میل می‌نماید بهبود نتایج حاصله اهمیت در نظر گرفتن اختلاط هنگام شبیه سازی فرایند تخمیر بیهوازی و در نتیجه در حین طراحی راکتور را نشان میدهد. مدل اختلاط دو ناحیه ای برای شبیه سازی راکتورهای بیهوازی که الگوی اختلاط آنها شبیه این مدل اختلاط است میتواند استفاده گردد. پارامترهای اختلاط مدل با استفاده از انطباق مدل با نمودارهای تجربی حاصل از آزمایشات ردیاب قابل تعیین هستند. اگرچه انتشار مدل دینامیک استفاده شده

زیر نویس

A : باکتریهای اسیدوژن
 AB : باکتریهای استوژن بوتیرات خوار
 AP : باکتریهای استوژن پروپیونات خوار
 f : خوارک
 i : جزو
 i : شرایط اولیه راکتور
 M : باکتریهای متابولوژن
 r : جریان مایع خروجی از راکتور

تشکر و قدردانی

نویسنده‌گان این مقاله لازم می‌دانند از مرکز توسعه انرژیهای نو و همچنین جناب آقای دکتر احمدی، ریاست پیشین مرکز به دلیل امکاناتی که در اختیار این پروژه نهاده اند تشکر و قدردانی بعمل آورند.

n : ثابت خوارک استفاده شده در معادله ۱
 pK_h : ثابت تابع بازدارندگی pH
 pK_i : ثابت تابع بازدارندگی pH
 (l/d) : شدت جریان خوارک Q_f
 R : نسبت جریان برگشتی
 t : زمان (روز)
 t_r : پریود خوارک دهی (روز)
 V_1 : حجم فاز مایع در راکتور (l)
 V_r : حجم مایع خارج شده از راکتور (l)
 VFA : اسیدهای چرب فرار
 VS : مواد آلی فرار
 Y_e : ضریب بهره تعریف شده در معادله ۱
 α : ناحیه جریان دار
 β : ناحیه ساکن
 μ_{max} : ماکریتم سرعت رشد ویژه باکتری (day^{-1})

مراجع

- 1 - Kalyuzhnyi, S. V. and Davlyatshina, M. A. (1997). "Batch anaerobic digestion of glucose and its mathematical modelling. I- Kinetic investigations." *Bioresource Technology*, Vol. 59, No. 1, PP. 73-80.
- 2 - Villadsen, J. (1989). "Simulation of biochemical reactions." *Computers Chem. Engng*, Vol. 13, No. 4/5, PP. 385-395.
- 3 - Monteith, H. D. and Stephenson, J. P. (1981). "Mixing efficiencies in full-scale anaerobic digesters by trace methods." *Journal WPCF*, Vol. 53, PP. 78-84.
- 4 - Nielsen, J. and Villadsen , J. (1992). "Modelling of microbial kinetics." *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 47, PP. 4225-70.
- 5 - Lin, K. C. and Pearce, M. E. (1991). "Effects of mixing on anaerobic treatment of potato-processing wastewater." *Can. J. Civ. Eng.*, Vol. 18, PP. 504 -14.
- 6 - Constant, M., Naveau, H., Ferrero, J. L. and Nyns, E. J. (1989). *Biogas end-uses in the European Community*. Elsevier Science Publishing Company, New York.
- 7 - Mussati, M., Aguirre, P. and Scenna, N. J. (1998). "Modelling of real biological reactors for the treatment of complex substrates. Dynamic simulation." *Computers Chem. Engng*, Vol. 22, PP. S723-S726.
- 8 - Angelidaki, I., Ellegaard, L. and Ahring, B. K. (1993). "A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: Focusing on ammonia inhibition." *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 42, PP. 159-166.
- 9 - Levenspiel, O. L. (1972). *Chemical Reaction Engineering*. 2 th., Wiley & Sons, New York.
- 10 - Hertle, C. K. and Lever, M. L. (1987). "Mixing in anaerobic sludge digesters." *Water*, March, PP. 16-20.

-
- 11 - Smith, L. C., Elliot, D. J. and James, A. (1993). "Characterization of mixing patterns in an anaerobic digester by means of tracer curve analysis." *Ecol. Model.*, Vol. 69, PP. 267-85.
- 12 - Dean, J. A. (1992). *Lange's Handbook of Chemistry*. Fourteen edition, McGraw Hill Book Company, New York.
- 13 - Archer, D. B. (1983). *Enzyme Microbiology and Technology*. Vol. 5, P. 162.
- 14 - Keshtkar, A., Ghaforian, H., Abolhamd, G. and Meyssami, B. (2001). "Dynamic simulation of cyclic batch anaerobic digestion of cattle manure." *Bioresource Technology*, Vol. 80, PP. 9-17.
- 15 - Reinhold, G., Merrath, S., Lennemann, F. and Markl, H. (1996). "Modelling the hydrodynamics and the liquid-mixing behaviour of a biogas tower reactor." *Chem. Engng. Sci.*, Vol. 51, PP. 4065-4073.