

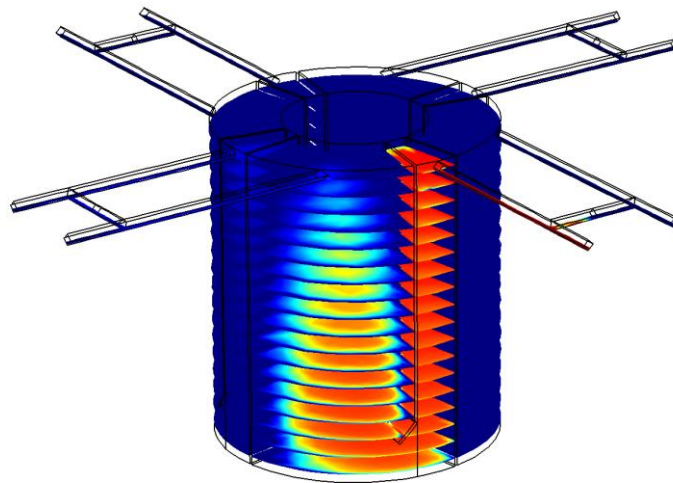


**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

**ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΤΟΜΕΑΣ IV: ΣΥΝΘΕΣΗΣ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΩΝ**

**Υπολογιστική Μελέτη Υδραυλικής Συμπεριφοράς Περιοδικού  
Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες**



**Θεόφιλος Καμπερίδης**

**Επιβλέπων:** Λυμπεράτος Γεράσιμος

**Τριμελής Επιτροπή:**

Λυμπεράτος Γεράσιμος, Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Παπαθανασίου Αθανάσιος, Επίκουρος Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Μαρούλης Ζαχαρίας, Καθηγητής Ε.Μ.Π.

## Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική εργασία πραγματοποιήθηκε στο εργαστήριο Οργανικής Χημικής Τεχνολογίας του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου.

Καθ' όλη τη διάρκεια της εκπόνησης της διπλωματικής μου εργασίας υπήρξαν πολλοί άνθρωποι που με τη βοήθεια και τις συμβουλές τους, με οδήγησαν στην επιτυχή ολοκλήρωσή της και θα ήθελα να τους αναφέρω ξεχωριστά, εκφράζοντας την αμέριστη ευγνωμοσύνη μου.

Πρωτίστως, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της διπλωματικής μου εργασίας Γεράσιμο Λυμπεράτο, Καθηγητή Ε.Μ.Π., τόσο για την ανάθεση ενός ιδιαίτερα ενδιαφέροντος θέματος όσο και για τις ανεκτίμητες συμβουλές του καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της διπλωματικής εργασίας.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον υποψήφιο διδάκτορα Γιάννη Μιχαλόπουλο, καθώς χωρίς την καθημερινή βοήθεια και καθοδήγησή του η πραγματοποίηση αυτής της διπλωματικής εργασίας θα ήταν αδύνατη.

Ευχαριστίες οφείλω και στο Γεώργιο Πάσχο για τις υποδείξεις και τη βοήθειά του, καθώς ήταν αναγκαία για την εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

Ευχαριστώ τον Γεώργιο Σεϊντή για την εισαγωγή και την καθοδήγηση που μου προσέφερε στο κομμάτι της προσομοίωσης του αντιδραστήρα και για τις γνώσεις που μοιράστηκε από τη δικιά του διπλωματική εργασία, συνέχεια της οποίας αποτελεί το παρόν κείμενο.

Ευχαριστώ και τον Ηλία Πρεμέτη με τον οποίο συνεργαστήκαμε άψογα αυτό το διάστημα αλληλοβοηθώντας ο ένας τον άλλον με τις διπλωματικές μας εργασίες.

Ευχαριστίες οφείλω συνολικά στους συναδέλφους από το Εργαστήριο Οργανικής Χημικής Τεχνολογίας για την υποστήριξή τους στο χρονικό διάστημα εκπόνησης της διπλωματικής εργασίας.

Ακόμη, ευχαριστώ θερμά τα μέλη της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής, τον κύριο Αθανάσιο Παπαθανασίου, Επίκουρο καθηγητή Ε.Μ.Π. και τον κύριο Ζαχαρία Μαρούλη, καθηγητή Ε.Μ.Π. για την τιμή που μου έκαναν να συμμετάσχουν στην αξιολόγηση της προσπάθειάς μου καθώς και για το χρόνο που διέθεσαν στην ανάγνωση της διπλωματικής μου εργασίας.

Τέλος, θα ήθελα να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στην οικογένεια και στους φίλους μου για τη διαρκή τους στήριξη κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της διπλωματικής εργασίας αλλά και καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου.

## Περιεχόμενα

Περιεχόμενα .....	3
Περιεχόμενα Σχημάτων .....	5
Περιεχόμενα Διαγραμμάτων .....	7
Περιεχόμενα Εξισώσεων .....	9
Περιεχόμενα Πινάκων .....	10
Περίληψη .....	11
Abstract .....	12
Θεωρητικό Μέρος.....	13
Εισαγωγή .....	13
Σχεδιασμός χημικών αντιδραστηρών .....	14
Ρευστομηχανική μελέτη .....	15
Έρπουσα ροή .....	15
Συναγωγή και Διάχυση .....	16
Περιοδικός Αναερόβιος Αντιδραστήρας με Ανακλαστήρες .....	17
Βιβλιογραφική Ανασκόπηση πειραμάτων κατανομής χρόνου παραμονής και υπολογιστικής προσομοίωσης.....	20
Υδραυλικός χαρακτηρισμός συστημάτων.....	23
Κατανομή Χρόνου Παραμονής.....	24
Το μοντέλο των δοχείων στη σειρά .....	26
Υδραυλικός Νεκρός Όγκος .....	28
Πρόγραμμα προσομοίωσης Comsol Multiphysics® Version 5.2.....	29
Υπολογιστικό Μέρος.....	31
Κατασκευή της γεωμετρίας.....	32
Ορισμός των υλικών .....	40
Διαμόρφωση των μοντέλων για τη μελέτη της ροής.....	41
Δημιουργία πλέγματος.....	45
Διαμόρφωση της μελέτης .....	46
Μόνιμες συνθήκες.....	46
Μεταβατικές συνθήκες .....	47
Αποτελέσματα – Συζήτηση .....	51
Εξαγωγή δεδομένων .....	51
Προσομοίωση κατανομής χρόνου παραμονής.....	52
Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής 4 ημέρες .....	53

Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής 6 ημέρες .....	68
Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής 10.65 ημέρες .....	85
Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής 20 ημέρες .....	92
Συμπεράσματα – Προτάσεις για Μελλοντική Εργασία .....	107
Προτάσεις για Μελλοντική Εργασία .....	108
Βιβλιογραφία .....	109
Ελληνική Βιβλιογραφία .....	109
Ξενόγλωσση Βιβλιογραφία .....	109
Ιστοσελίδες .....	110

## Περιεχόμενα Σχημάτων

ΣΧΗΜΑ 1: ΔΟΜΗ Ρ.Α.Β.Ρ., ΠΡΟΣΟΨΗ ΚΑΙ ΚΑΤΟΨΗ .....	17
ΣΧΗΜΑ 2: ΔΙΑΤΑΞΗ ΤΟΥ ΠΙΛΟΤΙΚΟΥ Ρ.Α.Β.Ρ. ....	18
ΣΧΗΜΑ 3: ΚΑΤΟΨΗ Ρ.Α.Β.Ρ. ΚΑΙ ΦΟΡΑ ΕΝΑΛΛΑΓΗΣ ΔΙΑΜΕΡΙΣΜΑΤΩΝ. ....	20
ΣΧΗΜΑ 4: ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ ΚΥΛΙΝΔΡΙΚΟΥ ΑΝΑΕΡΟΒΙΟΥ ΧΩΝΕΥΤΗΡΑ ΚΑΙ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΠΟΥ ΑΝΑΠΤΥΧΘΗΚΕ ΣΤΟ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ. ....	21
ΣΧΗΜΑ 5: ΜΟΝΑΔΑ ΑΝΑΕΡΟΒΙΑΣ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑΣ.....	22
ΣΧΗΜΑ 6: ΕΙΔΗ ΡΟΗΣ ΚΑΙ Η ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΗ ΑΠΟΚΡΙΣΗ ΣΕ ΒΗΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΟΛΗ. ....	25
ΣΧΗΜΑ 7: ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ "F - Θ <sub>1</sub> " ΣΕ ΒΗΜΑΤΙΚΕΣ ΕΠΙΒΟΛΕΣ ΑΝΑΛΟΓΑ ΜΕ ΤΟΝ ΑΡΙΘΜΟ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ ΠΛΗΡΟΥΣ ΑΝΑΜΕΙΞΗΣ ΣΤΗ ΣΕΙΡΑ. ....	27
ΣΧΗΜΑ 8: ΜΕΡΟΣ ΤΗΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ ΤΗΣ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ Γ.ΣΕΪΝΤΗ, 2015 ΣΤΗΝ ΟΠΟΙΑ ΕΓΙΝΑΝ ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΣΕΙΣ.....	32
ΣΧΗΜΑ 9: ΤΟΠΟΘΕΤΗΣΗ ΣΩΛΗΝΩΣΕΩΝ ΕΙΣΟΔΟΥ - ΕΞΟΔΟΥ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ.....	33
ΣΧΗΜΑ 10: ΕΙΣΑΓΩΓΗ "WORK PLANE", ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΝΤΑΣ ΤΗ ΧΡΩΜΑΤΙΣΜΕΝΗ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑ. ....	33
ΣΧΗΜΑ 11: ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΗΜΕΙΟΥ ΣΥΖΕΥΞΗΣ ΣΤΟ "WORK PLANE", ΣΩΛΗΝΩΣΕΩΝ ΕΙΣΟΔΟΥ - ΕΞΟΔΟΥ. ....	34
ΣΧΗΜΑ 12: ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΕΥΘΥΓΡΑΜΜΟΥ ΤΜΗΜΑΤΟΣ, ΠΑΝΩ ΣΤΟ ΟΠΟΙΟ ΘΑ ΔΗΜΙΟΥΡΓΗΘΕΙ Ο ΣΩΛΗΝΑΣ ΣΥΖΕΥΞΗΣ ΕΙΣΟΔΟΥ - ΕΞΟΔΟΥ. ....	35
ΣΧΗΜΑ 13: ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ ΤΟΥ ΕΥΘΥΓΡΑΜΜΟΥ ΤΜΗΜΑΤΟΣ, ΠΑΝΩ ΣΤΟ ΟΠΟΙΟ ΘΑ ΔΗΜΙΟΥΡΓΗΘΕΙ Ο ΣΩΛΗΝΑΣ ΣΥΖΕΥΞΗΣ ΕΙΣΟΔΟΥ - ΕΞΟΔΟΥ.....	35
ΣΧΗΜΑ 14: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΣΩΛΗΝΩΣΗΣ ΣΥΖΕΥΞΗΣ.....	36
ΣΧΗΜΑ 15: ΈΝΩΣΗ ΣΩΛΗΝΩΣΕΩΝ ΕΙΣΟΔΟΥ - ΕΞΟΔΟΥ - ΣΥΖΕΥΞΗΣ. ....	37
ΣΧΗΜΑ 16: ΤΟΠΟΘΕΤΗΣΗ ΤΟΥ ΣΩΛΗΝΑ ΣΥΖΕΥΞΗΣ ΣΕ ΚΑΘΕ ΔΙΑΜΕΡΙΣΜΑ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ. ....	37
ΣΧΗΜΑ 17: ΌΓΚΟΣ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΠΟΥ ΕΞΑΙΡΕΘΗΚΕ ΑΠΟ ΤΟΥ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥΣ. ....	38
ΣΧΗΜΑ 18: ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ ΠΟΥ ΕΞΑΙΡΕΘΗΚΑΝ ΑΠΟ ΤΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ, ΣΤΗΝ ΈΝΩΣΗ ΣΩΛΗΝΩΣΕΩΝ - ΔΟΧΕΙΟΥ. ....	39
ΣΧΗΜΑ 19: ΤΕΛΙΚΗ ΕΙΚΟΝΑ ΤΗΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ.....	40
ΣΧΗΜΑ 20: ΕΠΙΛΟΓΗ ΌΓΚΟΥ ΕΛΕΓΧΟΥ ΓΙΑ ΤΟΝ ΟΡΙΣΜΟ ΤΗΣ ΡΟΗΣ ΤΟΥ ΝΕΡΟΥ.....	41
ΣΧΗΜΑ 21: ΕΠΙΦΑΝΕΙΑ ΕΙΣΟΔΟΥ, ΕΙΣΡΟΗΣ ΤΟΥ ΥΔΑΤΙΚΟΥ ΔΙΑΛΥΜΑΤΟΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ.....	42
ΣΧΗΜΑ 22: ΕΠΙΦΑΝΕΙΑ ΕΞΟΔΟΥ, ΕΚΡΟΗΣ ΤΟΥ ΥΔΑΤΙΚΟΥ ΔΙΑΛΥΜΑΤΟΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ. ....	42
ΣΧΗΜΑ 23: ΕΠΙΛΟΓΗ ΕΝΔΙΑΜΕΣΗΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ ΓΙΑ ΤΗ ΦΡΑΓΗ ΤΗΣ ΡΟΗΣ.....	43
ΣΧΗΜΑ 24: ΜΗ ΔΙΑΠΕΡΑΤΕΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ ΑΠΟ ΤΟΝ ΙΧΝΗΘΕΤΗ. ....	44
ΣΧΗΜΑ 25: ΠΛΕΓΜΑ ΠΟΥ ΚΑΤΑΣΚΕΥΑΣΤΗΚΕ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ.....	45
ΣΧΗΜΑ 26: ΠΛΕΓΜΑ ΠΟΥ ΚΑΤΑΣΚΕΥΑΣΤΗΚΕ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ, ΜΕ ΠΡΟΒΟΛΗ ΤΟΥ ΕΣΩΤΕΡΙΚΟΥ ΜΕΡΟΥΣ ΤΟΥ ΔΙΑΜΕΡΙΣΜΑΤΟΣ.....	45
ΣΧΗΜΑ 27: ΕΝΑΛΛΑΓΗ ΤΩΝ ΕΙΣΟΔΩΝ - ΕΞΟΔΩΝ - ΕΝΔΙΑΜΕΣΩΝ ΤΟΙΧΩΜΑΤΩΝ. ....	46
ΣΧΗΜΑ 28: ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΥ ΓΙΑ ΤΗΝ ΔΙΕΥΚΟΛΥΝΣΗ ΤΗΣ ΜΕΤΑΒΟΛΗΣ ΤΗΣ ΠΕΡΙΟΔΟΥ ΕΝΑΛΛΑΓΗΣ... ..	47
ΣΧΗΜΑ 29: ΟΡΙΣΜΟΣ ΧΡΟΝΙΚΩΝ ΟΡΙΩΝ, ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΝΤΑΣ ΤΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟ ΤΗΣ ΠΕΡΙΟΔΟΥ ΕΝΑΛΛΑΓΗΣ. .	48
ΣΧΗΜΑ 30: ΟΡΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΜΕΝΩΝ ΜΕΤΑΒΛΗΤΩΝ. ....	49
ΣΧΗΜΑ 31: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΓΙΑ HRT=4D, T=2D ΚΑΙ T=108H.....	52
ΣΧΗΜΑ 32: ΤΡΟΦΟΔΟΣΙΑ ΠΡΩΤΟΥ ΔΙΑΜΕΡΙΣΜΑΤΟΣ ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=2D, ΤΙΣ ΧΡΟΝΙΚΕΣ ΣΤΙΓΜΕΣ T=0H, T=6H ΚΑΙ T=12H ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ. ....	53
ΣΧΗΜΑ 33: ΤΕΛΙΚΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ ΤΡΟΦΟΔΟΣΙΑΣ ΔΕΥΤΕΡΟΥ ΔΙΑΜΕΡΙΣΜΑΤΟΣ. ....	54
ΣΧΗΜΑ 34: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=2D.....	55
ΣΧΗΜΑ 35: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=24H, ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=4D. ....	59
ΣΧΗΜΑ 36: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=4D.....	60
ΣΧΗΜΑ 37: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΙΧΝΗΘΕΤΗ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=48H, ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=8D. ....	63
ΣΧΗΜΑ 38: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=8D.....	64

ΣΧΗΜΑ 39: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΕΞΙ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=8D. ....	66
ΣΧΗΜΑ 40: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=12H, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=2D. ....	68
ΣΧΗΜΑ 41: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=2D. ....	69
ΣΧΗΜΑ 42: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=24H, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=4D. ....	72
ΣΧΗΜΑ 43: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=4D. ....	73
ΣΧΗΜΑ 44: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=180H, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=30D. ....	75
ΣΧΗΜΑ 45: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΧΡΟΝΟΥ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=30D. ....	76
ΣΧΗΜΑ 46: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=360H, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=60D. ....	79
ΣΧΗΜΑ 47: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΧΡΟΝΟΥ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=60D. ....	80
ΣΧΗΜΑ 48: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=432H, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=72D. ....	82
ΣΧΗΜΑ 49: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΧΡΟΝΟΥ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=72D. ....	83
ΣΧΗΜΑ 50: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=12H, ΓΙΑ HRT=10.65D ΚΑΙ T=2D. ....	85
ΣΧΗΜΑ 51: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=10.65D ΚΑΙ T=2D. ....	86
ΣΧΗΜΑ 52: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=24H, ΓΙΑ HRT=10.65D ΚΑΙ T=4D. ....	89
ΣΧΗΜΑ 53: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=10.65D ΚΑΙ T=4D. ....	90
ΣΧΗΜΑ 54: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=12H, ΓΙΑ HRT=20D ΚΑΙ T=2D. ....	92
ΣΧΗΜΑ 55: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=20D ΚΑΙ T=2D. ....	93
ΣΧΗΜΑ 56: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=24H, ΓΙΑ HRT=20D ΚΑΙ T=4D. ....	96
ΣΧΗΜΑ 57: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=20D ΚΑΙ T=4D. ....	97
ΣΧΗΜΑ 58: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΤΗ ΧΡΟΝΙΚΗ ΣΤΙΓΜΗ T=240H, ΓΙΑ HRT=20D ΚΑΙ T=40D. ....	100
ΣΧΗΜΑ 59: ΤΕΛΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΟΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΜΕ ΤΟ ΠΕΡΑΣ ΤΡΙΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ HRT=20D ΚΑΙ T=40D. ....	101

## Περιεχόμενα Διαγραμμάτων

ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 1: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=2D.	56
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 2: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΜΕΣΩΝ ΤΙΜΩΝ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=2D.	57
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 3: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΚΑΙ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=2D.	58
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 4:ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=4D.	61
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 5: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=4D.	62
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 6: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=8, T=12 D	65
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 7: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=4D ΚΑΙ T=8D, T=24D	66
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 8:ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=8D ΚΑΙ T=8D	67
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 9: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=2D.	70
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 10: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=2D	71
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 11: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=4D.	74
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 12: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=4D	74
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 13: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=30D.	77
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 14: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=30D.	78
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 15: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=60D.	81
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 16: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=60D.	81
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 17: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=72D.	84
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 18: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=6D ΚΑΙ T=72D.	84
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 19: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=10.65D ΚΑΙ T=2D.	87
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 20: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=10.65D ΚΑΙ T=2D.	88
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 21: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=10.65D ΚΑΙ T=4D.	91
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 22: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=10.65D ΚΑΙ T=4D.	91
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 23: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=20D ΚΑΙ T=2D.	94
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 24: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ HRT=20D ΚΑΙ T=2D.	95

ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 25: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ $HRT=20D$ ΚΑΙ $T=4D$ .	98
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 26: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ $HRT=20D$ ΚΑΙ $T=4D$	99
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 27: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ $HRT=20D$ ΚΑΙ $T=40D$ .	101
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 28: ΜΕΣΕΣ ΤΙΜΕΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΑΣΤΟΤΕ ΕΞΟΔΟ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΓΙΑ $HRT=20D$ ΚΑΙ $T=40D$ .	102
ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ 29: ΜΕΣΗ ΔΙΑΦΟΡΑ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΕΩΝ ΙΧΝΗΘΕΤΗ ΣΤΑ ΔΙΑΜΕΡΙΣΜΑΤΑ ΤΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ, ΑΝΑΛΟΓΑ ΜΕ ΤΟ ΛΟΓΟ $HRT/T$ .	106



## Περιεχόμενα Εξισώσεων

ΕΞΙΣΩΣΗ 1: ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΑΡΙΘΜΟΥ REYNOLDS. ....	15
ΕΞΙΣΩΣΗ 2: ΕΞΙΣΩΣΗ NAVIER – STOKES. ....	15
ΕΞΙΣΩΣΗ 3: ΣΥΝΘΗΚΗ ΑΣΥΜΠΙΕΣΤΗΣ ΡΟΗΣ. ....	16
ΕΞΙΣΩΣΗ 4: ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΜΑΖΑΣ ΜΕ ΣΥΝΑΓΩΓΗ ΚΑΙ ΔΙΑΧΥΣΗ. ....	16
ΕΞΙΣΩΣΗ 5: ΜΕΣΟΣ ΧΡΟΝΟΣ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ. ....	23
ΕΞΙΣΩΣΗ 6: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΧΡΟΝΟΥ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ, $E(T^{-1})$ . ....	24
ΕΞΙΣΩΣΗ 7: ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΧΡΟΝΟΥ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΓΙΑ ΒΗΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΟΛΗ. ....	25
ΕΞΙΣΩΣΗ 8: ΕΞΑΡΤΗΣΗ ΜΕΤΑΞΥ ΤΩΝ ΔΥΟ ΚΑΤΑΝΟΜΩΝ. ....	25
ΕΞΙΣΩΣΗ 9: ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΤΗΣ ΚΑΤΑΝΟΜΗΣ "F". ....	26
ΕΞΙΣΩΣΗ 10: ΛΟΓΟΣ ΤΗΣ ΧΡΟΝΙΚΗΣ ΣΤΙΓΜΗΣ "I" ΜΕ ΤΟΝ ΜΕΣΟ ΧΡΟΝΟ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ. ....	26
ΕΞΙΣΩΣΗ 11: ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ "ΝΕΚΡΟΥ" ΟΓΚΟΥ. ....	28
ΕΞΙΣΩΣΗ 12: ΤΡΟΠΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΜΕΣΟΥ ΧΡΟΝΟΥ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ, ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΞΙΣΩΣΗ 11. ....	28

## Περιεχόμενα Πινάκων

ΠΙΝΑΚΑΣ 1: ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΟΙ ΣΥΝΔΥΑΣΜΟΙ ΥΔΡΑΥΛΙΚΩΝ ΧΡΟΝΩΝ ΠΑΡΑΜΟΝΗΣ ΚΑΙ ΠΕΡΙΟΔΟΥ ΕΝΑΛΛΑΓΗΣ, ΓΙΑ ΤΟΥΣ ΟΠΟΙΟΥΣ ΕΓΙΝΑΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ. ....	31
ΠΙΝΑΚΑΣ 2: ΔΙΑΣΤΑΣΕΩΝ ΠΙΛΟΤΙΚΟΥ P.A.B.R., ΒΑΣΗ ΤΩΝ ΟΠΟΙΩΝ ΔΗΜΙΟΥΡΓΗΘΗΚΕ ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ. ....	32
ΠΙΝΑΚΑΣ 3: ΖΕΥΓΗ HRT - T ΚΑΙ ΤΑ ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ "TIME DEPENDENT STEPS" ΠΟΥ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΗΘΗΚΑΝ ΣΕ ΚΑΘΕ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ. ....	50
ΠΙΝΑΚΑΣ 4: ΣΥΝΟΨΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΚΑΙ ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗ ΤΟΥΣ ΜΕ ΑΥΞΩΝ ΛΟΓΟ HRT/T. ....	103

## Περίληψη

Ο σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας ήταν η μελέτη της ρεολογικής συμπεριφοράς ενός πιλοτικής κλίμακας Περιοδικού Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες (Periodic Anaerobic Baffled Reactor, P.A.B.R.), που χρησιμοποιείται για παραγωγή βιοαερίου μέσω αναερόβιας χώνευσης. Πραγματοποιήθηκε με τη χρήση του υπολογιστικού εργαλείου Comsol Multyphysics® Version 5.2, προσομοιώνοντας πειράματα Κατανομής Χρόνου Παραμονής, με βηματική επιβολή στην τροφοδοσία, υδατικού διαλύματος και ιχνηθέτη γνωστής συγκέντρωσης.

Το μοντέλο αναπτύχθηκε για αντιδραστήρα P.A.B.R. ενεργού όγκου 80 λίτρων και τεσσάρων διαμερισμάτων, με περιοδική εναλλαγή του διαμερίσματος εισόδου της τροφοδοσίας. Πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις εναλλάσσοντας τον υδραυλικό χρόνο παραμονής (Hydraulic Retention Time, HRT) και την περίοδο εναλλαγής (T) των διαμερισμάτων, παρατηρώντας τη συγκέντρωση του ιχνηθέτη στις εκροές. Για την προσομοίωση της μεταφοράς του ιχνηθέτη εντός του αντιδραστήρα μελετήθηκε η ταχύτητα του ρευστού σε σταθερές συνθήκες (steady state) και η κατανομή της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη σε εξάρτηση με το χρόνο (transient state). Η μεταφορά της μάζας του ιχνηθέτη επιτεύχθηκε με δύο τρόπους, με συναγωγή καθώς πραγματοποιείται στον κύριο όγκο του ρευστού και με διάχυση, επειδή μετατοπίζεται από περιοχές με υψηλή συγκέντρωση σε περιοχές με χαμηλή.

Από τα αποτελέσματα που προέκυψαν δημιουργήθηκαν διαγράμματα συγκέντρωσης – χρόνου, υπολογίστηκε ο ισοδύναμος αριθμός αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης στη σειρά, το ποσοστό του «νεκρού» όγκου σε κάθε ζεύγος HRT – T και η διακύμανση που παρουσιάζουν οι τιμές των συγκεντρώσεων στην παρατηρούμενη έξοδο. Για διευκόλυνση στην επεξεργασία αποτελεσμάτων και στην εξαγωγή συμπερασμάτων αξιοποιήθηκε ο λόγος HRT/T.

Παρατηρήθηκε ότι για μεγάλες τιμές του λόγου HRT/T η ροή εντός του αντιδραστήρα προσομοίαζε ροή πλήρους ανάμειξης ενώ για μειωμένες τιμές του λόγου HRT/T η ροή έτεινε στην εμβολική. Αυτό επιβεβαιώθηκε και από τον αντίστοιχο ισοδύναμο αριθμό αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης στη σειρά που υπολογίστηκε για κάθε περίπτωση. Τα αποτελέσματα επίσης προσέγγιζαν ικανοποιητικά την κατανομή πειραματικών δεδομένων που προέκυψαν για ίδιες συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα. Το ποσοστό του «νεκρού» όγκου, σε κάθε υπολογιστικό πείραμα, κυμάνθηκε εντός του εύρους 39 έως 47%, χωρίς να προκύπτει κάποια άμεση εξάρτηση από τον αντίστοιχο λόγο HRT/T. Τέλος προτάθηκαν τρόποι βελτιστοποίησης του μοντέλου, όπως η χρήση μεγαλύτερης υπολογιστικής ισχύος, η πλήρης προσομοίωση της διεργασίας της αναερόβιας χώνευσης και η κλιμάκωση του μεγέθους του, με απώτερο σκοπό τη βιομηχανική χρήση του P.A.B.R.

## Abstract

The purpose of this diplomatic thesis is the rheological study of a pilot scale Periodic Anaerobic Baffled Reactor used for the production of biogas by anaerobic digestion. The study was conducted using the computational software Comsol Multiphysics® Version 5.2, simulating Residence Time Distribution experiments, with a step enforcement to the reactors' feed, of aqueous solution containing tracer at a set concentration.

The model was developed for a P.A.B.R., with an effective volume of 80 liters and four compartments, with periodic rotation of the infeed compartment. The simulations were carried out by varying the Hydraulic Retention Time (HRT) and the rotation period (T) of the compartments, observing the concentration of the tracer on the outflow. For the simulation of the tracer's movement inside the reactor, its speed was studied on steady state conditions, while the distribution of the concentration on transient state. The transfer of the tracer's mass was achieved in two ways, by convection as it is performed in the bulk of the fluid and by diffusion, because it was displaced from areas with high concentration to areas with low concentration.

The results of the simulations were presented in diagrams showing the distribution of the tracer in relation to time, the equivalent number of continuous stirred tank reactors in series was calculated, as the percent of the "dead" space for every HRT – T pair and the variance of the concentrations on the observed outflow. To facilitate the processing of the results and the extraction of conclusions, the fraction  $HRT/T$  was exploited.

It was observed for greater values of the fraction  $HRT/T$ , that the reactor's performance was similar to that of a continuous stirred tank and for lesser values it tended to the behaviour of a plug flow reactor. This was confirmed by the equivalent number of continuous stirred tank reactors in series, calculated for each case. The percent of "dead" space fluctuated in the range 39 to 47%, without showing any significant dependence to the corresponding ratio  $HRT/T$ . Finally, ways were proposed to optimize the model, such as using greater computing power, the complete simulation of the process of anaerobic digestion and the study of the scaling up of the reactor looking forward to industrial use of the P.A.B.R.

## Θεωρητικό Μέρος

### Εισαγωγή

Ο Περιοδικός Αναερόβιος Χωνευτήρας με Ανακλαστήρες είναι ένας καινοτόμος βιοαντιδραστήρας σχεδιασμένος από τους Γεράσιμο Λυμπεράτο και Ιωάννη Σκιαδά στο Εργαστήριο Βιοχημικής Μηχανικής και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος (Παν/μιο Πατρών, Τμ. Χημικών Μηχανικών) που εγείρει ιδιαίτερο ενδιαφέρον καθώς παρουσιάζει μεγάλη ευελιξία στον τρόπο λειτουργίας του. Έχει τη δυνατότητα, δηλαδή, να συμπεριφέρεται μεταξύ των δύο ιδανικών τύπων ροής (εμβολική ροή και ροή πλήρους ανάμιξης) με κατάλληλη μεταβολή των λειτουργικών του παραμέτρων. Για την καλύτερη κατανόηση της ρεολογικής συμπεριφοράς του συγκεκριμένου αντιδραστήρα έχουν πραγματοποιηθεί πειράματα κατανομής χρόνου παραμονής, με τη πλήρωση του αντιδραστήρα με νερό και τη τροφοδοσία υδατικού διαλύματος παρουσία ιχνηθέτη. Επειδή τα πειράματα στον αντιδραστήρα απαιτούν συνεχή ανθρώπινη επίβλεψη για την εξασφάλιση της σωστής λειτουργίας του, παράλληλα με τακτική δειγματοληψία και εργαστηριακές αναλύσεις, χρησιμοποιούνται υπολογιστικά προγράμματα προσομοίωσης, τα αποτελέσματα των οποίων μπορούν να αξιοποιηθούν για την εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων σχετικά με την πορεία των πειραμάτων.

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής είναι η διεξαγωγή προσομοιώσεων της λειτουργίας του Περιοδικού Αναερόβιου Χωνευτήρα με Ανακλαστήρες, προκειμένου να διερευνηθεί η επίδραση της μεταβολής διαφόρων παραμέτρων λειτουργίας όπως ο υδραυλικός χρόνος παραμονής και η συχνότητα εναλλαγής του διαμερίσματος εισόδου της τροφοδοσίας στη ρεολογική συμπεριφορά του αντιδραστήρα. Οι προσομοιώσεις σχεδιάστηκαν ώστε να προσομοιάζουν τις συνθήκες των εργαστηριακών πειραμάτων που πραγματοποιήθηκαν στα πλαίσια προγενέστερης διπλωματικής εργασίας (Γ.Σεϊντής, 2015). Από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, εξήχθησαν συμπεράσματα όσον αφορά τη ρεολογική συμπεριφορά του PABR σε σχέση με την μεταβολή παραμέτρων λειτουργίας, τους «νεκρούς» χώρους στο εσωτερικό του και τις διακυμάνσεις κατά τη λειτουργία του. Το υπολογιστικό εργαλείο που χρησιμοποιήθηκε ήταν το Comsol Multyphysics® Version 5.2. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων θα συνεισφέρουν στην κατανόηση της υδραυλικής συμπεριφοράς του PABR, με απώτερο σκοπό την κλιμάκωση μεγέθους.

## Σχεδιασμός χημικών αντιδραστήρων

Χημικός αντιδραστήρας καλείται ένα δοχείο ειδικά σχεδιασμένο ώστε να φιλοξενήσει μια χημική αντίδραση. Εντός αυτού τα αντιδρώντα θα μετατραπούν σε προϊόντα με την αντίστοιχη έκλυση ή απορρόφηση θερμότητας.

Ανάλογα με τον τρόπο λειτουργίας που επιθυμείται οι αντιδραστήρες κατατάσσονται σε μια από τις τρεις ακόλουθες κατηγορίες: αντιδραστήρες συνεχούς έργου, όπου υπάρχει συνεχόμενη τροφοδότηση και απομάκρυνση υλικών, αντιδραστήρες διαλείποντος έργου, δηλαδή με ασυνεχή λειτουργία και αντιδραστήρες ημιδιαλείποντος έργου, που λειτουργούν μεταξύ των δύο προηγούμενων τύπων και για κάποια υλικά του αντιδραστήρα η λειτουργία είναι συνεχής και για άλλα ασυνεχής. (Μ.Χ.Δ. 1 Σημειώσεις Παραδόσεων, 2013)

Η ταξινόμηση των αντιδραστήρων μπορεί επίσης να γίνει ανάλογα με τον αριθμό των φάσεων που υπάρχουν στο εσωτερικό τους, δηλαδή σε μονοφασικούς και πολυφασικούς. Επιπλέον, κατανέμονται ανάλογα με την ύπαρξη καταλύτη ή όχι.

Τέλος δύναται να διαχωριστούν με βάση το σχήμα τους, σε δοχεία πλήρους ανάμειξης, αυλωτούς αντιδραστήρες όπου θεωρείται ότι αναπτύσσεται εμβολική ροή, κλιβάνους και πύργους με πληρωτικά υλικά. (Μ.Χ.Δ. 1 Σημειώσεις Παραδόσεων, 2013)

Προκειμένου να επιλεγεί ένα από τα είδη αντιδραστήρα που προαναφέρθηκαν για να κατασκευαστεί για μια διεργασία, είναι απαραίτητο να είναι γνωστές οι πληροφορίες για τη χημική αντίδραση που θα συμβαίνει εντός του συστήματος, δηλαδή η κινητική της αντίδρασης, η παραγωγή ή απαίτησή της σε ενέργεια, η επίτευξη ή όχι ισορροπίας, η ανάγκη για μηχανική ανάδευση και γενικότερα ο τρόπος με τον οποίο θα έρθουν σε επαφή τα αντιδρώντα μεταξύ τους ή με τον καταλύτη. Επίσης, πρέπει να είναι γνωστό αν θα είναι στην ίδια φάση τα αντιδρώντα και αν θα προκύπτουν νέες φάσεις κατά την αντίδραση καθώς και πώς θα αλληλεπιδρούν μεταξύ τους.

Εφόσον συγκεντρωθούν οι απαραίτητες πληροφορίες επιλέγεται ο κατάλληλος τύπος αντιδραστήρα με βάση και τις υπάρχουσες γνώσεις για τη συγκεκριμένη διεργασία, στη συνέχεια επιλέγονται οι συνθήκες που πραγματοποιείται βέλτιστα η αντίδραση και υπολογίζεται η επιθυμητή απόδοση. Γίνεται διαστασιολόγηση του αντιδραστήρα και υπολογίζεται η απόδοσή του, παράλληλα λαμβάνονται υπόψιν παράγοντες ασφαλείας όπως η απομόνωση επικίνδυνων αντιδραστηρίων ή προϊόντων. Δημιουργείται ένα μηχανικό σχέδιο του αντιδραστήρα και επιλέγονται τα υλικά για την κατασκευή του, κατόπιν βελτιστοποιούνται τα σχέδια λαμβάνοντας υπόψιν και οικονομικούς παράγοντες, όπως ελαχιστοποίηση πάγιου και λειτουργικού κόστους της διεργασίας. Τελευταίο βήμα είναι η εκτίμηση του κόστους του αντιδραστήρα που σχεδιάστηκε. (Nanda S., 2008)

## Ρευστομηχανική μελέτη

### Έρπουσα ροή

Η ροή εντός του αντιδραστήρα χαρακτηρίστηκε ως έρπουσα επειδή ο αριθμός Reynolds που υπολογίστηκε ήταν πολύ μικρότερος της μονάδας. Ο αριθμός Reynolds είναι ο λόγος των δυνάμεων αδράνειας προς τις ιξώδεις δυνάμεις που δρουν πάνω στο ρευστό και υπολογίζεται από τη σχέση .

$$R_e = \frac{\rho u D_H}{\mu}$$

*Εξίσωση 1: Υπολογισμός Αριθμού Reynolds.*

όπου, «ρ» είναι η πυκνότητα του ρευστού, «u» η μέση ταχύτητα του ρευστού, «D<sub>H</sub>» η υδραυλική διάμετρος του αγωγού (παραδείγματος χάριν, η εσωτερική διάμετρος σε περίπτωση που είναι κυκλικός) και «μ» είναι το δυναμικό ιξώδες του ρευστού. Στην έρπουσα ροή υπερισχύουν οι ιξώδεις δυνάμεις σε ολόκληρο το πεδίο της ροής. (Παπαϊωάννου Τόμος II, 2002)

Χαρακτηριστικά παραδείγματα στα οποία παρουσιάζεται έρπουσα ροή ή ροή Stokes είναι η ροή βαρέων κλασμάτων πετρελαίου, ροή μελιού και οι κινήσεις μικροοργανισμών και βακτηρίων στο νερό και στον αέρα που ανήκουν επίσης σε αυτή την κατηγορία.

Οι εξισώσεις που χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση του μοντέλου της ταχύτητας του ρευστού εντός του αντιδραστήρα είναι οι παρακάτω:

$$\rho \frac{D\underline{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \underline{u} + \rho \underline{g}$$

*Εξίσωση 2: Εξίσωση Navier – Stokes.*

Η πρώτη είναι η εξίσωση Navier – Stokes, μπορεί να εφαρμοστεί σε περιπτώσεις νευτωνικού ρευστού, ασυμπίεστης ροής και σταθερού ιξώδους. Το αριστερό σκέλος αποτελεί την υλική παράγωγο της ταχύτητας, δηλαδή τον ολικό ρυθμό μεταβολής της ταχύτητας ως προς έναν παρατηρητή ο οποίος ακολουθεί το κινούμενο ρευστό. Στη παρούσα διπλωματική εργασία η ταχύτητα θεωρείται οιονεί στατικό μέγεθος σε σύγκριση με τη συγκέντρωση του ιχνηθέτη, καθώς η ταχύτητα του νερού επιτυγχάνει μόνιμες συνθήκες ροής πολύ πιο γρήγορα από την πλήρη κατανομή της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη σε όλο τον όγκο του αντιδραστήρα. Αυτός είναι ο λόγος που μηδενίζεται. (Παπαϊωάννου Τόμος I, 2002) Στο δεξί σκέλος, ο ένας όρος αναφέρεται στη πίεση, ο δεύτερος στο ιξώδες και ο τελευταίος όρος του δεύτερου σκέλους αναφέρεται στη βαρυτική δύναμη που ασκείται στο ρευστό.

Η δεύτερη εξίσωση που χρησιμοποιείται είναι η συνθήκη ασυμπίεστης ροής, δηλαδή οι μεταβολές της πυκνότητας σε όλο το πεδίο ροής είναι αμελητέες (Α.Θ.Παπαϊωάννου Τόμος Ι, 2002):

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0$$

*Εξίσωση 3: Συνθήκη Ασυμπίεστης Ροής.*

### *Συναγωγή και Διάχυση*

Στο σύστημα που υπάρχει μια διαλυμένη ουσία μέσα σε ένα ρευστό προκαλείται διάχυση της ουσίας από βαθμίδες υψηλότερης συγκέντρωσης σε γειτονικές βαθμίδες με χαμηλότερη συγκέντρωση. Εάν παράλληλα υπάρχει κίνηση στον κύριο όγκο του ρευστού, τότε και η συναγωγή θα συνεισφέρει στην ροή των χημικών ουσιών. Για την μοντελοποίηση της μεταφοράς του ιχνηθέτη εντός του αντιδραστήρα που είναι πληρωμένος με νερό παρατηρούνται και τα δύο φαινόμενα οπότε χρησιμοποιείται ο συνδυασμός των εξισώσεων Διάχυσης και Συναγωγής. (Δ.Κ.Ασημακόπουλος, 2012)

Η εξίσωση που χρησιμοποιήθηκε παρουσιάζεται παρακάτω:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla c = D \nabla^2 c$$

*Εξίσωση 4: Μεταφοράς Μάζας με Συναγωγή και Διάχυση.*

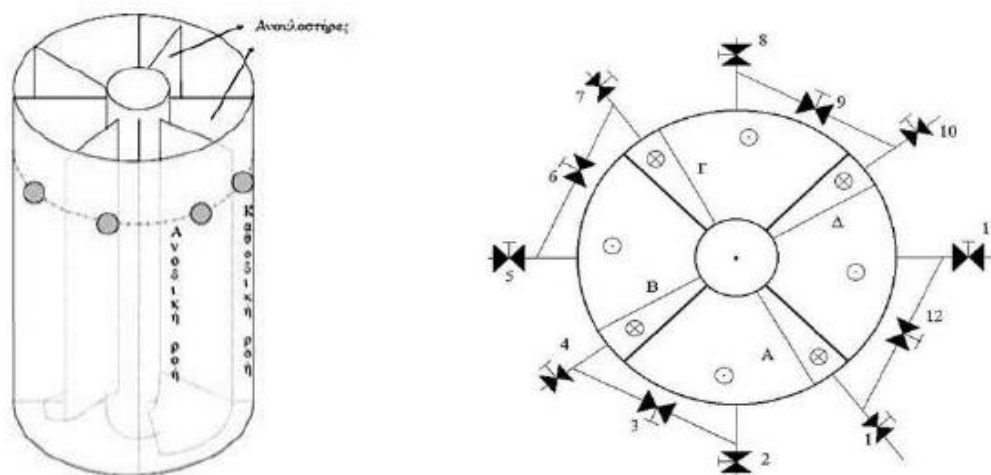
- Με «c» συμβολίζεται η συγκέντρωση του ιχνηθέτη
- Ως «D» συμβολίζεται ο συντελεστής διάχυσης της ουσίας που χρησιμοποιείται. Συνήθως περιγράφει ζεύγη ουσιών, δηλαδή όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της μιας ουσίας σε σχέση με την άλλη τόσο γρήγορα διαχέεται η μια στην άλλη
- Με «u» συμβολίζεται η μέση ταχύτητα της μεταβλητής που μελετάται, καθώς κινείται στον κύριο όγκο του ρευστού Στην προκειμένη περίπτωση είναι αυτή του νερού που κινείται από διαμέρισμα σε διαμέρισμα του αντιδραστήρα

Από τους όρους της εξίσωσης (3) ο πρώτος όρος του αριστερού σκέλους περιγράφει τη μεταβολή της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη με το πέρασ του χρόνου, ο δεύτερος όρος του αριστερού σκέλους περιγράφει την κίνηση λόγω της συναγωγής, ενώ ο τελευταίος όρος την κίνηση λόγω διάχυσης.



## Περιοδικός Αναερόβιος Αντιδραστήρας με Ανακλαστήρες

Ο Περιοδικός Αναερόβιος Αντιδραστήρας με Ανακλαστήρες (Periodic Anaerobic Baffled Reactor, P.A.B.R.) αναπτύχθηκε από τον Γεράσιμο Λυμπεράτο και Ιωάννη Σκιαδά στο Εργαστήριο Βιοχημικής Μηχανικής και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος (Παν/μιο Πατρών, Τμ. Χημικών Μηχανικών). Είναι ένας ταχύρυθμος, ευέλικτος αντιδραστήρας που μπορεί να επεξεργάζεται υψηλά οργανικά φορτία με μικρούς χρόνους παραμονής. Αποτελείται από δύο ομόκεντρα κυλινδρικά κομμάτια, ο χώρος μεταξύ τους χωρίζεται σε τέσσερα διαμερίσματα έτσι ώστε η διάταξη να μοιάζει με αυτή του A.B.R., με διαφορά ότι τα διαμερίσματα βρίσκονται σε κυκλική διάταξη. Κάθε διαμέρισμα αποτελείται από το τμήμα ανοδικής ροής και το τμήμα καθοδικής, η τροφοδοσία εισέρχεται στο ανώτερο μέρος του τμήματος καθοδικής ροής, διέρχεται μέσα από το στρώμα της βιομάζας που υπάρχει στο πυθμένα κάθε διαμερίσματος και ανέρχεται στο ανοδικό τμήμα προκειμένου μέσω εξωτερικών σωληνώσεων να περάσει στο τμήμα καθοδικής ροής του επόμενου διαμερίσματος. Η ροή μεταξύ των διαμερισμάτων πραγματοποιείται με τη φορά των δεικτών του ρολογιού ενώ η εναλλαγή μεταξύ των διαμερισμάτων γίνεται είτε αντίθετα με τη φορά της ροής, είτε σύμφωνα με αυτή ή σταυρωτά. Η εναλλαγή μεταξύ των διαμερισμάτων επιτυγχάνεται με βάνες που είναι τοποθετημένες στις εξωτερικές σωληνώσεις και καθορίζουν αν το διαμέρισμα θα τροφοδοτείται και συλλέγεται εκκροή από αυτό ή θα είναι συνδεδεμένο με το επόμενο. (Γ.Σειντής, 2015)



Σχήμα 1: Δομή P.A.B.R., Πρόσοψη και Κάτοψη.

Η συχνότητα εναλλαγής διαμερίσματος τροφοδοσίας του αντιδραστήρα αποτελεί μια από τις κύριες παραμέτρους λειτουργίας του αντιδραστήρα και του προσδίδει το πλεονέκτημα ότι μπορεί να συμπεριφέρεται σαν A.B.R. όταν η συχνότητα εναλλαγής είναι μηδέν, ενώ όταν η συχνότητα εναλλαγής είναι πολύ μεγάλη, τείνει στο άπειρο συμπεριφέρεται σαν U.A.S.B. Ο αντιδραστήρας λειτουργεί σε μια ενδιάμεση κατάσταση μεταξύ των δύο άκρων έχοντας έτσι μεγάλη ευελιξία.(Γ.Σεϊντής, 2015)

Ο αναερόβιος χωνευτήρας που μελετάται στην παρούσα διπλωματική είναι πιλοτικής κλίμακας ωφέλιμου όγκου 80 λίτρων. Το δοχείο είναι κατασκευασμένο από ανοξείδωτο χάλυβα και οι εξωτερικές σωληνώσεις από τμήματα σκληρού PVC (3/4"), συνδεδεμένες με αυτόματες ηλεκτροβάνες. Η συχνότητα εναλλαγής του διαμερίσματος τροφοδοσίας καθορίζεται από ηλεκτρονικό πίνακα ελέγχου PLC και ο υδραυλικός χρόνος παραμονής από περισταλτική αντλία, κατάλληλα βαθμονομημένη. Στον εσωτερικό κύλινδρο βρίσκεται λουτρό για να διατηρείται σταθερή η θερμοκρασία στους 35°C για τη διευκόλυνση της αναερόβιας χώνευσης. Η δειγματοληψίες των πειραμάτων κατανομής χρόνου παραμονής έγιναν από χειροκίνητες βάνες τοποθετημένες στο μέσο του ύψους των διαμερισμάτων. (Μαθιουδάκης, 2016)

Στην εικόνα που ακολουθεί φαίνεται η διάταξη του περιοδικού αναερόβιου αντιδραστήρα με ανακλαστήρες, που βρίσκεται στο ημιβιομηχανικό εργαστήριο της σχολής Χημικών Μηχανικών του Ε.Μ.Π.



Σχήμα 2: Διάταξη του πιλοτικού P.A.B.R.

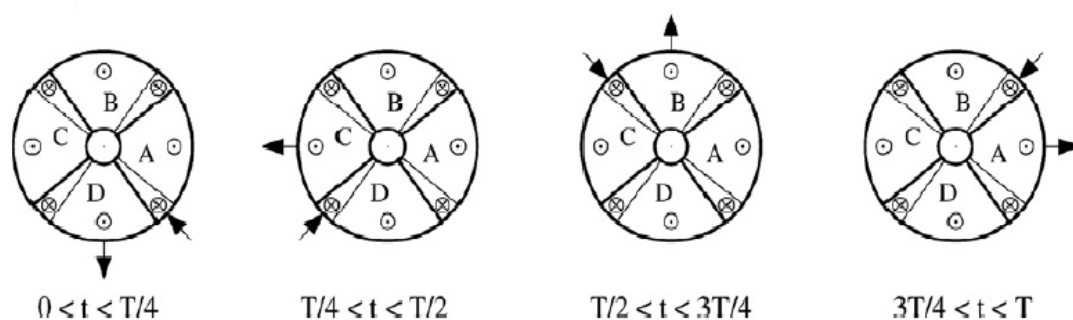
Τα πλεονεκτήματα του P.A.B.R. συνοψίζονται παρακάτω όπως τα αναφέρει ο (Ι.Σκιαδάς, 1998):

- Το κυριότερο πλεονέκτημα αποτελεί η ευελιξία του P.A.B.R. να συμπεριφέρεται μεταξύ της εμβολικής και της πλήρους αναμίξιμης ροής, αντίστοιχα μεταξύ του A.B.R. και του U.A.S.B. αντίστοιχα,
- Ελαχιστοποίηση των θερμικών απωλειών,
- Εξαιτίας της σταθερής περιοδικής κατάστασης που επικρατεί, ο αντιδραστήρας δε διαταράσσεται από αιφνίδιες μεταβολές του ρυθμού οργανικής φόρτισης.

## Βιβλιογραφική Ανασκόπηση πειραμάτων κατανομής χρόνου παραμονής και υπολογιστικής προσομοίωσης

Στα πλαίσια της διπλωματικής εργασίας έγινε βιβλιογραφική ανασκόπηση για την εύρεση πειραμάτων σε περιοδικό αναερόβιο αντιδραστήρα με ανακλαστήρες και για την εύρεση υπολογιστικών πειραμάτων σε αναερόβιους αντιδραστήρες. Επιλέχθηκαν τα παρακάτω, γιατί συνοψίζουν την αποδοτικότητα του P.A.B.R., παρουσιάζουν λειτουργίες αντιδραστήρων με ποικίλους υδραυλικούς χρόνους παραμονής και προσφέρεται τρόπος ταυτόχρονης εκτέλεσης πειράματος κατανομής χρόνου παραμονής με λειτουργία αναερόβιου αντιδραστήρα.

Στο Τεχνολογικό Ινστιτούτο του «Harbin» έγιναν από τους Xiaolei Liu, Nanqi Ren και Yixing Yuan πειράματα για τη μελέτη των επιδόσεων ενός περιδικού αναερόβιου αντιδραστήρα με ανακλαστήρες, μικρότερου από αυτού που μελετήθηκε στη παρούσα διπλωματική εργασία. Ο αντιδραστήρας είχε συνολικό ωφέλιμο όγκο 18 L. Οι διαστάσεις ήταν 500 mm σε ύψος και οι ακτίνες/διάμετροι των ομόκεντρων κυλίνδρων ήταν 50 mm ο εσωτερικός και 250 mm ο εξωτερικός. Η αναλογία όγκων στο κάθε διαμέρισμα του αντιδραστήρα μεταξύ του τμήματος καθόδου και ανόδου ήταν 1 προς 5 και η θερμοκρασία εντός του αντιδραστήρα διατηρήθηκε στους 35 °C χρησιμοποιώντας σερπαντίνα θερμικής εναλλαγής τυλιγμένη γύρω από τον εξωτερικό κύλινδρο του αντιδραστήρα («heater strip twining»). Ο υδραυλικός χρόνος παραμονής ήταν 2 d ενώ η περίοδος εναλλαγής ήταν 4 d. Ο αντιδραστήρας τροφοδοτήθηκε με λύματα κινεζικής φαρμακοβιομηχανίας, πλούσια σε μακρομόρια που δεν αντιμετωπίζονται εύκολα από την αερόβια βιοαποικοδόμηση. Στο μίγμα τροφοδοσίας προστέθηκε νερό βρύσης και διττανθρακικό νάτριο ( $\text{NaHCO}_3$ ) (1.5 g /L) προκειμένου να διατηρηθεί σταθερό το pH και η αλκαλικότητα. Ο αντιδραστήρας λειτούργησε συνεχόμενα με μέσο ρυθμό φόρτισης οργανικού φορτίου 1, 2, 4, 6 kg COD /  $\text{m}^3 \cdot \text{d}$  για 12, 24, 24 και 6 d αντίστοιχα. Επίσης, η εναλλαγή μεταξύ των διαμερισμάτων του αντιδραστήρα έγινε δεξιόστροφα όπως φαίνεται και στην παρακάτω εικόνα (Liu X. Et al., 2009):

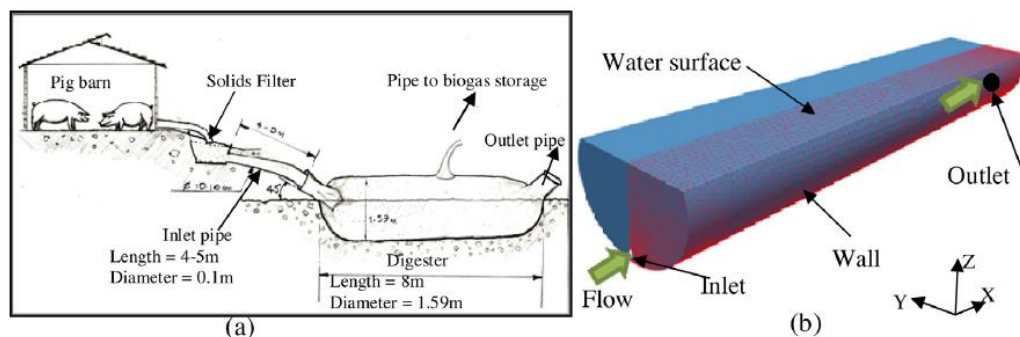


Σχήμα 3: Κάτοψη P.A.B.R. και φορά εναλλαγής διαμερισμάτων.

Από τα πειράματα που διεξήχθησαν προέκυψε ότι κατά τις πρώτες 12 ημέρες ο ρυθμός απομάκρυνσης του οργανικού φορτίου ήταν 34.08% ενώ μετά την πρώτη αύξηση του COD αυξήθηκε στο 82.47%. Στη συνέχεια, κατά τη δεύτερη αύξηση του οργανικού φορτίου από 2

σε 4 kg COD/ m<sup>3</sup> d παρατηρήθηκε μέση τιμή απομάκρυνσής του 76.73%. Με την τελική αύξηση του φορτίου σε 6 kg COD/ m<sup>3</sup> d προέκυψε αύξηση του οργανικού φορτίου σε όλα τα διαμερίσματα και η απόδοση του αντιδραστήρα μειώθηκε στο 35.12%. Η τελευταία αύξηση του οργανικού φορτίου από 4 σε 6 kg COD/ m<sup>3</sup> d είχε ως αποτέλεσμα τη διαταραχή και την καταστροφή των αναερόβιων οργανισμών, κυρίως εξαιτίας της οξύτητας και της σύστασης των αποβλήτων. Η συγκεκριμένη μελέτη καταλήγει ότι το οργανικό φορτίο θα μπορούσε να αυξηθεί και άλλο εφόσον ο αντιδραστήρας διατηρούσε σταθερές συνθήκες λειτουργίας, με σωστή ρύθμιση του pH της τροφοδοσίας και μεγαλύτερη αναλογία υδραυλικού χρόνου παραμονής προς περίοδο εναλλαγής (HRT / T). (Liu X. Et al., 2009)

Διεξήχθη προσομοίωση σε κυλινδρικό αναερόβιο αντιδραστήρα από τους Maureen N. Kinyua, Jie Zhang, Fabricio Camacho-Cespedes, Andres Tejada-Martinez, Sarina J. Ergas του Πανεπιστημίου της Νότιας Φλόριντα και της Georgia Costa Rica με σκοπό την κατανόηση των μηχανισμών μεταφοράς και μετατροπής της οργανικής ύλης σε σωληνοειδείς αναερόβιους χωνευτήρες για παραγωγή βιοαερίου από κτηνοτροφικά απόβλητα. Πριν την προσομοίωση έγινε και πείραμα με τροφοδότηση ιχνηθέτη στον αντιδραστήρα για την καλύτερη κατανόηση των φαινομένων ανάμειξης και μεταφοράς. Οι διαστάσεις του αντιδραστήρα ήταν 8 m σε μήκος και 1.59 m η εσωτερική διάμετρος ενώ τα απόβλητα συλλέχθηκαν από το χοιροστάσιο, διήθησαν και τροφοδοτήθηκαν στον αντιδραστήρα μέσω ενός σωλήνα 4-5 m και διαμέτρου 0.1 m, όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα (Maureen N. Kinyua et al., 2016):

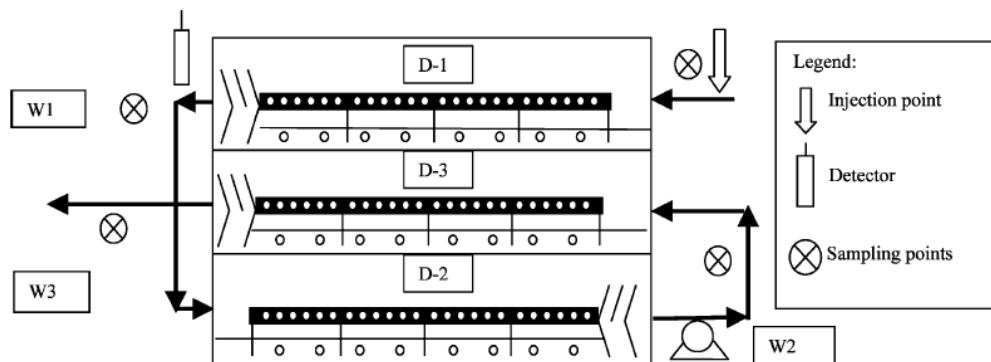


Σχήμα 4: Απεικόνιση Κυλινδρικού Αναερόβιου Χωνευτήρα και του μοντέλου που αναπτύχθηκε στο υπολογιστικό λογισμικό.

Για την προσομοίωση χρησιμοποιήθηκε το Fluent & Gambit για τη δημιουργία πλέγματος και το λογισμικό OpenFOAM® (OpenCFD Ltd. 2012) για την διεξαγωγή της προσομοίωσης. Από αυτήν προέκυψε ότι ο κύριος μηχανισμός μεταφοράς είναι η τυρβώδης διάχυση και με μέσο Υδραυλικό Χρόνο Παραμονής του υγρού τις 22.9 d. Επίσης, προβλέπει μέσο χρόνο συγκράτησης κυττάρων τις 115 d. Παρατηρήθηκε ότι ο χωνευτήρας είχε υψηλή αποδοτικότητα απομάκρυνσης πτητικών στερεών και BOD<sub>5</sub>, μεγαλύτερη του 75% καθώς και υψηλά ποσοστά απομάκρυνσης ολικού αζώτου και φωσφόρου 83.6% και 91.6% αντίστοιχα. Η παραγωγή του βιοαερίου ήταν ικανοποιητική για τις απαιτήσεις ενός σπιτιού σε ενέργεια αλλά η έρευνα κατέληξε ότι το μοντέλο χρειάζεται περαιτέρω ανάπτυξη για την αξιοποίησή

του στον σχεδιασμό ενός σωληνωειδούς αναερόβιου χωνευτήρα. (Maureen N.Kinyua et al., 2016)

Τέλος, η διεξαγωγή πειραμάτων κατανομής χρόνου παραμονής χρησιμοποιώντας νερό και ιχνηθέτη στον αντιδραστήρα δεν επιτρέπει τη λειτουργία του, καθώς είναι γεμισμένος με νερό. Για την εύρεση τρόπου ταυτόχρονης λειτουργίας και διεξαγωγής πειράματος κατανομής χρόνου παραμονής διεκπεραιώθηκε έρευνα από τους J.I. Borroto, J. Domínguez, J. Griffith, M. Fick και J.P. Leclerc από το Ανώτερο Ινστιτούτο Πυρηνικής Επιστήμης και Τεχνολογίας στη Κούβα, από το Ινστιτούτο Έρευνας για τη Ζάχαρη, της Κούβας και από το Εργαστήριο Χημικών Μηχανικών Επιστημών της Nancy στη Γαλλία με σκοπό την μελέτη της δυνατότητας χρήσης του Τεχνητίου-99m ως ιχνηθέτη για τη μέτρηση της κατανομής του χρόνου παραμονής της υγρής φάσης σε αναερόβιους χωνευτήρες που δεν είναι δυνατή η οπτική επαφή με το εσωτερικό τους. Για τα πειράματα ελήφθησαν δείγματα από τρία διαφορετικά σημεία στη μονάδα αναερόβιας επεξεργασίας του εργοστασίου ζάχαρης «Pablo Noriega», που αποτελείται από τρεις αντιδραστήρες και μειώνει έως και 90% το φορτίο ρύπανσης των λυμάτων, παρέχει ικανοποιητική ποσότητα βιοαερίου για κάθε κιλό βιοδιασπώμενου χημικά απαιτούμενου οξυγόνου (COD) και συνεισφέρει στην δημιουργία υλός κατάλληλης για λίπασμα. Στην εικόνα που ακολουθεί παρουσιάζεται η βιομηχανική μονάδα στην οποία έγινε το πείραμα καθώς και τα σημεία από τα οποία έγιναν οι λήψεις των δειγμάτων (W1, W2, W3)(J.I. Borroto et al., 2003) :



Σχήμα 5: Μονάδα Αναερόβιας Επεξεργασίας.

Ο σκοπός της λήψης δειγμάτων ήταν η μελέτη της χημικής σταθερότητας του τεχνητίου-99m ώστε να αποφευχθεί η αναγωγή του σε  $TcO(OH)_2$ , το οποίο δημιουργεί κολλοειδή, τα οποία με τη σειρά τους απορροφώνται έντονα από τη βιομάζα. Η μελέτη καταλήγει στα συμπεράσματα ότι το υπερτεχνητικό ιόν συμμείχτε σε οξειδοαναγωγικές αντιδράσεις που οδήγησαν στην σταδιακή μείωσή του, κατί που δεν καθυστέρησε την πορεία του στο σύστημα και το μοντέλο που δημιουργήθηκε για τον ιχνηθέτη με σκοπό την κατανόηση της συμπεριφοράς της ροής σε ένα βιομηχανικό χωνευτήρα ήταν συνεπές με τις φυσικές και γεωμετρικές πληροφορίες που ήταν διαθέσιμες. (J.I. Borroto et al., 2003)

## Υδραυλικός χαρακτηρισμός συστημάτων

Οι δύο ακραίοι τύποι ιδανικής ροής είναι η εμβολική και η ροή πλήρους ανάμιξης. Συχνά οι διεργασίες σχεδιάζονται ώστε να προσεγγίζουν είτε τον ένα ή τον άλλο τρόπο λειτουργίας, γιατί είναι απλοί στο χειρισμό.

Από τους τύπους ιδανικής ροής προκύπτει ότι είτε τα σωματίδια που εισέρχονται την ίδια χρονική στιγμή θα παραμένουν στον αντιδραστήρα το ίδιο χρονικό διάστημα (plug flow), είτε θα αναμειγνύονται εντελώς με την εισαγωγή τους και θα εξέρχονται από αυτόν έχοντας διανύσει διαφορετικά χρονικά διαστήματα εντός του αντιδραστήρα. Σε κάθε μια από τις παραπάνω περιπτώσεις ο μέσος χρόνος παραμονής (χώρος-χρόνος αντιδραστήρα) υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$\bar{t} = \frac{V}{Q}$$

*Εξίσωση 5: Μέσος Χρόνος Παραμονής.*

Εξαρτάται όπως φαίνεται από τον όγκο του αντιδραστήρα  $V$  ( $m^3$ ) και την παροχή του ρευστού  $Q$  ( $mol/m^3$ ). Καλείται και Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής (Hydraulic Retention Time) και είναι ο χρόνος που θα χρειαστεί για να διέλθει μέσα από τον αντιδραστήρα ποσότητα ρευστού ίση με τον όγκο του.

Μαζί με τον HRT ως παράμετρο λειτουργίας του συστήματος χρησιμοποιείται η περίοδος εναλλαγής των διαμερισμάτων (T).

Στην πραγματικότητα υπάρχουν διαφορές από τους ιδανικούς τύπους ροής. Ο τύπος της ροής καθορίζεται κυρίως από τρεις παράγοντες:

- Η κατανομή χρόνων παραμονής του υλικού που ρέει μέσα από τη συσκευή,
- Η τάση του ρευστού να σχηματίζει συσσωματώματα καθώς και η τάση ομάδων μορίων να κινούνται μαζί,
- Η πρωιμότητα και η υστέρηση της ανάμιξης του υλικού μέσα στο δοχείο. (Octave Levenspiel, 2011)

Η απόκλιση από την ιδανική ροή μπορεί να οφείλεται είτε στη ροή του ρευστού μέσα από διαύλους (bypass), από την ανακύκλωση ή τον σχηματισμό στάσιμων («νεκρών») περιοχών εντός του δοχείου, κάτι το οποίο πρέπει να αποφεύγεται για όλα τα είδη χημικού εξοπλισμού.

### Κατανομή Χρόνου Παραμονής

Όπως προαναφέρθηκε στην περίπτωση της πραγματικής ροής τα σωματίδια του ρευστού ακολουθούν διαφορετικές πορείες εντός του αντιδραστήρα, οπότε και θα εξέρχονται σε διαφορετικές χρονικές στιγμές παρά την ταυτόχρονη είσοδό τους. Η κατανομή των χρόνων αυτών ονομάζεται κατανομή χρόνου εξόδου «E» ή κατανομή χρόνου παραμονής του ρευστού και έχει μονάδες χρόνου<sup>-1</sup> (t<sup>-1</sup>). (Octave Levenspiel, 2011):

$$\int_0^{\infty} E dt = 1$$

Εξίσωση 6: Κατανομή Χρόνου  
Παραμονής, E(t<sup>-1</sup>)

Πειραματικά η κατανομή χρόνου παραμονής (Residence Time Distribution, RTD) προσδιορίζεται με εισαγωγή στον αντιδραστήρα αδρανούς χημικής ουσίας μορίου ή ατόμου που αποκαλείται ιχνηθέτης και στη συνέχεια μέτρηση της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη στο ρεύμα εξόδου του αντιδραστήρα συναρτήσει του χρόνου. Ο ιχνηθέτης, εκτός του ότι πρέπει να είναι εύκολα ανιχνεύσιμο, μη ενεργό χημικό είδος, θα πρέπει να έχει φυσικές ιδιότητες παρόμοιες με αυτές του ρευστού που πληροί τον αντιδραστήρα και να είναι πλήρως διαλυτό σε αυτό. Επιπλέον, πρέπει να μην προσροφάται στις επιφάνειες του αντιδραστήρα ώστε η συμπεριφορά του ιχνηθέτη να προσομοιάζει όσο το δυνατό βέλτιστα τη συμπεριφορά του ρευστού εντός του αντιδραστήρα. Τα συνηθέστερα είδη ιχνηθετών αποτελούν έγχρωμα και ραδιενεργά υλικά όπως και αδρανή αέρια. Οι δύο περισσότερο χρησιμοποιούμενες μέθοδοι εισαγωγής του ιχνηθέτη στον αντιδραστήρα είναι η παλμική επιβολή και η βηματική επιβολή. (Fogler, 2009)

Για την περίπτωση της παλμικής επιβολής προσδιορίζεται η κατανομή «E» μεταβάλλοντας μια παράμετρο στιγμιαία και μελετάται ο χρόνος και ο τρόπος που θα σταθεροποιηθεί η τιμή της παραμέτρου αυτής. Για τη μελέτη της Κατανομής Χρόνου Παραμονής στον P.A.B.R. αυτό επιτυγχάνεται εισάγοντας στιγμιαία μια δόση ιχνηθέτη στο ρεύμα τροφοδοσίας και μετρώντας τη συγκέντρωσή του στο ρεύμα της εξόδου. Η βηματική επιβολή επιτυγχάνεται αλλάζοντας το ρευστό εισόδου σε ρευστό που περιέχει και ιχνηθέτη, σε μια γνωστή συγκέντρωση, και καταγράφεται η συγκέντρωση στην έξοδο του αντιδραστήρα. (Octave Levenspiel, 2011)

Η βηματική μέθοδος εφαρμόζεται ευκολότερα σε σχέση με την παλμική και δεν απαιτεί τη γνώση της αρχικής ποσότητας ιχνηθέτη στη τροφοδοσία του αντιδραστήρα. Όμως, για να επιτευχθεί η βηματική επιβολή απαιτείται μεγάλη ποσότητα ιχνηθέτη και η διατήρηση της συγκέντρωσής του στην τροφοδοσία σταθερή.



Στη παρούσα διπλωματική εργασία χρησιμοποιήθηκε η βηματική επιβολή στις προσομοιώσεις καθώς με τον ίδιο τρόπο διεξήχθησαν τα πειράματα στον P.A.B.R. και για την καλύτερη σύγκριση μεταξύ των πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων.

Η κατανομή χρόνου παραμονής για βηματική επιβολή στο σύστημα συμβολίζεται ως «F» και ισούται με:

$$F = \frac{C_i}{C_{max}}$$

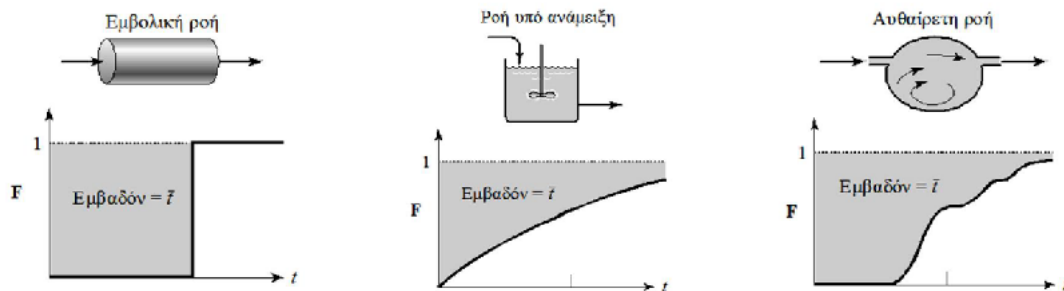
Εξίσωση 7: Κατανομή Χρόνου Παραμονής για Βηματική Επιβολή.

Επίσης, οι δύο κατανομές συνδέονται από τη ακόλουθη σχέση:

$$\frac{dF}{dt} = E$$

Εξίσωση 8: Εξάρτηση μεταξύ των δύο κατανομών.

Στην εικόνα που ακολουθεί παρουσιάζεται η απόκριση σε βηματική επιβολή σε τρεις αντιδραστήρες που αναπτύσσουν διαφορετικά είδη ροής:



Σχήμα 6: Είδη ροής και η αντίστοιχη απόκριση σε Βηματική Επιβολή.

### Το μοντέλο των δοχείων στη σειρά

Η ροή μέσα στον αντιδραστήρα μπορεί να προσομοιωθεί από κάποιο μοντέλο και στη συνέχεια να χρησιμοποιηθούν οι πληροφορίες για την κλιμάκωση του μεγέθους του αντιδραστήρα, για την ανίχνευση προβλημάτων στις ροές και για τη σύγκριση με αντίστοιχες πειραματικές προκειμένου να αναπτυχθεί καλύτερο μοντέλο για πιο ολοκληρωμένο σχεδιασμό. Δύο χαρακτηριστικά μοντέλα για μελέτη πραγματικών ροών είναι το μοντέλο διασποράς και το μοντέλο των δοχείων στη σειρά, που είναι και τα δύο εύχρηστα. (Octave Levenspiel, 2011)

Στη συγκεκριμένη διπλωματική επιλέχθηκε το μοντέλο πλήρους αναμίξιμων δοχείων στη σειρά για τη μελέτη των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από την προσομοίωση. Η κατανομή «F» για N ιδανικά αναδευόμενα δοχεία σε σειρά δίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$F = \frac{C_i}{C_{max}} = 1 - e^{-\theta_i} \cdot \left[ \sum_{j=1}^N \frac{(\theta_i)^{j-1}}{(j-1)!} \right]$$

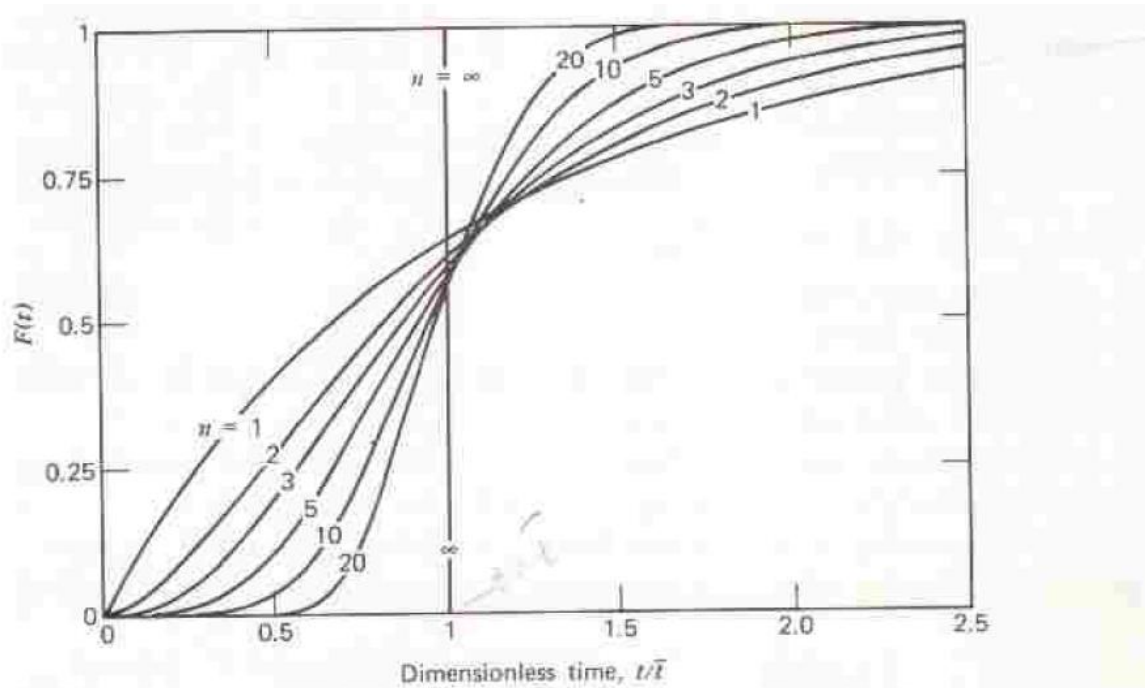
Εξίσωση 9: Υπολογισμός της κατανομής "F".

Όπου με « $\theta_i$ » συμβολίζεται ο αδιάστατος χρόνος με βάση το χώρο-χρόνο αντιδραστήρα,

$$\theta_i = \frac{t_i}{\bar{t}}$$

Εξίσωση 10: Λόγος της χρονικής στιγμής "i" με τον Μέσο Χρόνο Παραμονής.

Με « $C_i$ » συμβολίζεται η συγκέντρωση του ιχνηθέτη στην έξοδο του διαμερίσματος που χρησιμοποιείται την χρονική στιγμή « $t_i$ » και « $C_{max}$ » είναι η μέγιστη τιμή της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη που παρατηρείται κατά τη διάρκεια του πειράματος. Με «N» παρουσιάζεται ο αριθμός των αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης στη σειρά. Στο Σχήμα (7) φαίνονται οι διαφορετικές αποκρίσεις σε βηματική επιβολή ανάλογα με το αν αντιδραστήρας συμπεριφέρεται ως πλήρους ανάμειξης, εμβολικής ροής ή μεταξύ των δύο.



Σχήμα 7: Διάγραμμα "F -  $\bar{t}$ " σε Βηματικές Επιβολές ανάλογα με τον αριθμό Αντιδραστήρων Πλήρους Ανάμειξης στη σειρά.

Η τρόπος χρήσης της συγκεκριμένης μεθόδου είναι ο εξής. Υπολογίζονται για κάθε χρονική στιγμή το δεύτερο και το τρίτο σκέλος της εξίσωσης (9), χρησιμοποιώντας τιμές για το N από 1 έως 15. Στη συνέχεια, λαμβάνεται το τετράγωνο της διαφοράς κάθε χρονικής στιγμής μεταξύ των αποτελεσμάτων των δύο όρων. Τέλος, αθροίζονται οι διαφορές για κάθε τιμή του N και επιλέγεται το ελάχιστο από τα αθροίσματα, οπότε προκύπτει και ο ισοδύναμος αριθμός αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης στη σειρά που χαρακτηρίζει τη συμπεριφορά του συστήματος.

### Υδραυλικός Νεκρός Όγκος

Ο νεκρός όγκος εμφανίζεται στα σημεία που η ροή παρεμποδίζεται όπως πάνω σε ανακλαστές, σε κοιλότητες και γωνίες του δοχείου που μπορούν να σχηματιστούν και δίνες ή στα σημεία του δοχείου που βρίσκονται κοντά σε διαύλους από τους οποίους δεν ξεφεύγει εύκολα ο ιχνηθέτης, όπως και από τις δίνες, οπότε κάποιες περιοχές κατακρατούν τον ιχνηθέτη ενώ κάποια ρεύματα εντός του δοχείου δεν τον αφήνουν να απλωθεί σε ολόκληρο τον όγκο του δοχείου.

Έχει αποδειχθεί ότι ο υδραυλικός «νεκρός» όγκος αυξάνει με την αύξηση του αριθμού Reynolds (Young and Young, 1988), οπότε αναμένεται το φαινόμενο να ενταθεί σε χαμηλούς Υδραυλικούς Χρόνους Παραμονής (HRT).

Σε αυτή τη διπλωματική ο «νεκρός» όγκος του αντιδραστήρα για τους διάφορους HRT που προσομοιώθηκαν υπολογίστηκε από τον παρακάτω τύπο:

$$V_d = \left(1 - \frac{\bar{t}}{HRT}\right) \cdot 100\%$$

Εξίσωση 11: Υπολογισμού "Νεκρού" Όγκου.

Με « $\bar{t}$ » συμβολίζεται ο μέσος χρόνος παραμονής που υπολογίζεται με τη σειρά του από τον τύπο:

$$\bar{t} = \sum_{i=1}^n \frac{t_i \cdot C_i}{C_i}$$

Εξίσωση 12: Τρόπος Υπολογισμού Μέσου Χρόνου Παραμονής, για την Εξίσωση 11.

Με « $C_i$ » συμβολίζεται η συγκέντρωση τη χρονική στιγμή « $t_i$ » και « $n$ » είναι το πλήθος ζευγών συγκέντρωσης-χρονικών στιγμών που έχουν προκύψει είτε από πειραματική διαδικασία είτε από προσομοίωση.

## Πρόγραμμα προσομοίωσης Comsol Multiphysics® Version 5.2

Το Comsol Multiphysics® αποτελεί ένα διαδραστικό περιβάλλον για μοντελοποίηση και στη συνέχεια επίλυση προβλημάτων φυσικής και μηχανικής, που χρησιμοποιεί τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Method) σε συνδυασμό με περιορισμό σφάλματος, χρησιμοποιώντας αριθμητικούς επιλύτες καθώς και προσαρμοζόμενο πλέγμα. Το πλεονέκτημα του Comsol Multiphysics® είναι η δυνατότητα επέκτασης συμβατικών μοντέλων για ένα τύπο «physics» σε «multiphysics» / πολυφασικά μοντέλα που έχουν την ικανότητα να επιλύσουν συζευγμένα επιστημονικά φαινόμενα. Το πρόγραμμα προσφέρει ενσωματωμένες βιβλιοθήκες επιστημονικών δεδομένων και ιδιοτήτων υλικών, αριθμητικούς επιλύτες, εργαλεία επεξεργασίας αποτελεσμάτων όπως και τη δυνατότητα ορισμού του μοντέλου από σχετικές φυσικές ποσότητες, όπως ιδιότητες υλικών, φορτίων, περιορισμών, πηγών και ροών, αντί για τον καθορισμό των εξισώσεων που διέπουν το μοντέλο. Επίσης, δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να αντιστοιχίσει τις παραπάνω ιδιότητες σε οποιαδήποτε επιφάνεια, όγκο ελέγχου, σημείο ή και άκρο. (Comsol, 2012)

Πρόσβαση στο Comsol Multiphysics® είναι δυνατή είτε με την απόκτηση του προϊόντος και τη χρήση του μέσω της γραφικής επιφάνειας για το χρήστη είτε μέσω του προγραμματισμού ενός «script» για τη χρήση του μέσω της γλώσσας προγραμματισμού «Java» ή του «Matlab».

Η διαδικασία μοντελοποίησης στο πρόγραμμα Comsol Multiphysics® συνοψίζεται στα παρακάτω κυρίως βήματα:

- Ορισμός του φαινομένου ή και ο συνδυασμός των φαινομένων, παραδείγματος χάριν Μεταφορά Ρευστού και παράλληλα Μεταφορά Θερμότητας. Για τη συγκεκριμένη εργασία χρησιμοποιήθηκε η έκδοση 5.2 (Version 5.2). Μερικές μόνο από τις επιλογές για την επιλογή των φαινομένων παρουσιάζονται στη συνέχεια: Ακουστικά φαινόμενα, Ηλεκτρομαγνητικά Φαινόμενα, Μεταφορά Χημικών Ειδών, Ηλεκτροχημικά Φαινόμενα, Μεταφορά Ρευστών, Μεταφορά Θερμότητας, Επίλυση Διαφορικών Εξισώσεων κ.α.
- Ορισμός του είδους της μελέτης, δηλαδή αν θα εξαρτάται από το χρόνο ή θα είναι σε μόνιμες συνθήκες.
- Ορισμός της γεωμετρίας, όπου δημιουργείται η γεωμετρία του προς επίλυση προβλήματος ή εισάγεται μια έτοιμη γεωμετρία από κάποιο σχεδιαστικό πρόγραμμα όπως το Auto-CAD.
- Εισαγωγή των υλικών, από τις ενσωματωμένες βιβλιοθήκες που περιέχει το πρόγραμμα. Επιλέγονται τα υλικά και αντιστοιχίζονται στους όγκους ή στις επιφάνειες ή εισάγονται οι ιδιότητές του σε περίπτωση που το υλικό δεν περιέχεται στην έκδοση του προγράμματος.
- Ορισμός των φυσικών σχέσεων, των παραμέτρων και των τυχών περιορισμών καθώς και η επιλογή των χωρίων της γεωμετρίας που εφαρμόζονται.
- Ορισμός του πλέγματος. Επιτυγχάνεται είτε με αυτόματη δημιουργία ενός πλέγματος, όπου ο χρήστης επιλέγει μόνο το μέγεθος των στοιχείων ή με τη δημιουργία ενός πλέγματος από το χρήστη που προσαρμόζει το πλέγμα ανάλογα με την ακρίβεια των λύσεων σε συγκεκριμένα σημεία, τις επιδόσεις του υπολογιστή που χρησιμοποιεί και τη χρονική διάρκεια επίλυσης του προβλήματος που αποσκοπεί.
- Εξατομίκευση της μελέτης. Είναι το τελευταίο βήμα πριν από την επίλυση του προβλήματος. Επιλέγεται ο αριθμητικός επιλύτης (solver), καθορίζονται οι αρχικές τιμές των μεταβλητών, επιλέγεται αν κριθεί απαραίτητο ξεχωριστό πλέγμα και πιθανές επεκτάσεις της μελέτης. (Comsol, 2012)

Η επεξεργασία των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από την επίλυση του προβλήματος είναι το τελευταίο βήμα της μοντελοποίησης. Τα αποτελέσματα εξάγονται είτε σε διαγράμματα είτε σε εικόνες πάνω στη γεωμετρία είτε και με τη μορφή βίντεο με σκοπό τη περαιτέρω ανάλυσή τους.

## Υπολογιστικό Μέρος

Για τη ρεολογική μελέτη χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα Comsol Multiphysics® και συγκεκριμένα η έκδοση 5.2. Έγιναν συνολικά δεκατρία πειράματα προσομοίωσης εναλλάσσοντας το χρόνο παραμονής και τη συχνότητα εναλλαγής των διαμερισμάτων. Επιλέχθηκαν οι ακόλουθες τιμές με τις οποίες έχουν διεξαχθεί και πειράματα αναερόβιας χώνευσης στον αντιδραστήρα για τον έλεγχο της εγκυρότητας των υπολογιστικών αποτελεσμάτων και την καλύτερη ανάλυσή τους:

*Πίνακας 1: Διαφορετικοί Συνδυασμοί Υδραυλικών Χρόνων Παραμονής και Περιόδου Εναλλαγής, για τους οποίους έγιναν προσομοιώσεις.*

HRT (d)	T (d)
4	2
4	4
4	8
6	2
6	4
6	30
6	60
6	72
10.65	2
10.65	4
20	2
20	4
20	40

Για τον ορισμό της γεωμετρίας χρησιμοποιήθηκε για τον κύριο όγκο του αντιδραστήρα, εκτός των σωληνώσεων, το μοντέλο που αναπτύχθηκε από τον Γ. Σεϊντή στην διπλωματική του εργασία με θέμα «Υδραυλικά Χαρακτηριστικά και Κλιμάκωση Μεγέθους Περιοδικού Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες». Στη συνέχεια, προστέθηκαν οι σωληνώσεις ώστε να είναι εφικτή η εναλλαγή του διαμερίσματος τροφοδοσίας, μέσα από το πεδίο σχεδιασμού του Comsol Multiphysics®. Δόθηκαν ιδιότητες υλικών στη γεωμετρία και ορίστηκαν οι φυσικές σχέσεις και τα μοντέλα μελέτης της ροής. Ακολούθησε η κατασκευή πλέγματος και επιλέχθηκε το είδος της επίλυσης, με χρονική εξάρτηση ή χωρίς χρονική εξάρτηση των παραμέτρων που έχουν οριστεί.

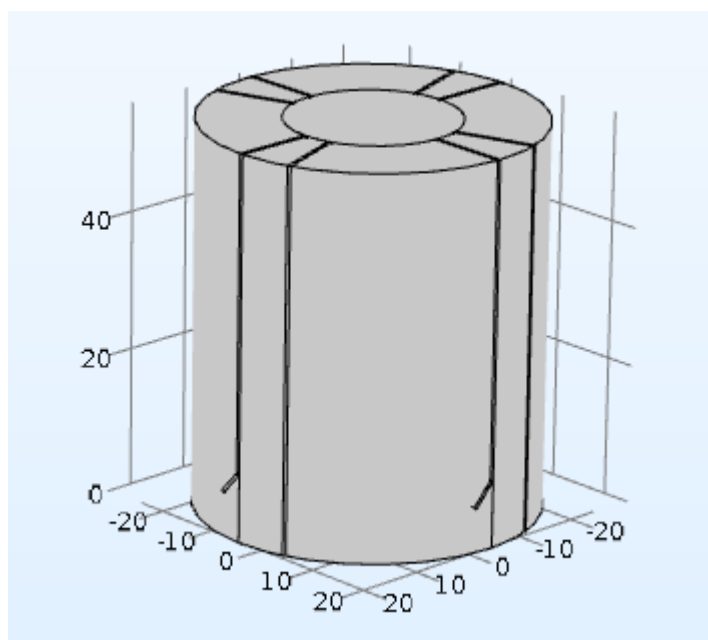
## Κατασκευή της γεωμετρίας

Η δημιουργία της γεωμετρίας αποτελεί το πρώτο βήμα της προσομοίωσης και ανάλογα με τον τρόπο κατασκευής της σε συνδυασμό με την εισαγωγή του πλέγματος μπορεί να αυξήσει ή να μειώσει του βαθμούς ελευθερίας του προβλήματος καθιστώντας τη λύση του από πολύ χρονοβόρα εως πολύ γρήγορη. Στον πίνακα που ακολουθεί παρατίθενται τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αντιδραστήρα:

Πίνακας 2: Διαστάσεων Πυλοτικού P.A.B.R., βάση των οποίων δημιουργήθηκε το μοντέλο προσομοίωσης.

Ύψος Αντιδραστήρα	55.7cm
Διάμετρος Αντιδραστήρα	24.4 cm
Μήκος Σωλήνα	42.4 cm
Διάμετρος Σωλήνα	0.96 cm

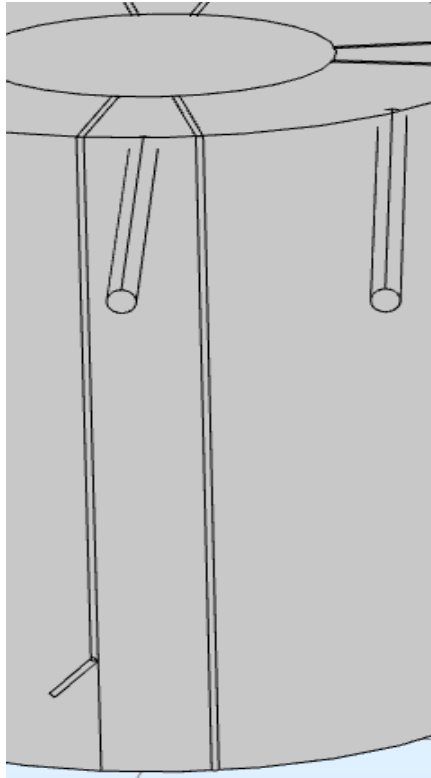
Όπως προαναφέρθηκε ένα κομμάτι της γεωμετρίας του αντιδραστήρα ελήφθη έτοιμο και πάνω σε αυτό προστέθηκαν τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά για την εκτέλεση των υπολογισμών. Παρακάτω απεικονίζεται η γεωμετρία πάνω στην οποία έγιναν οι τροποποιήσεις:



Σχήμα 8: Μέρος της Γεωμετρίας της Διπλωματικής Εργασίας Γ.Σεϊντή, 2015 στην οποία έγιναν τροποποιήσεις.

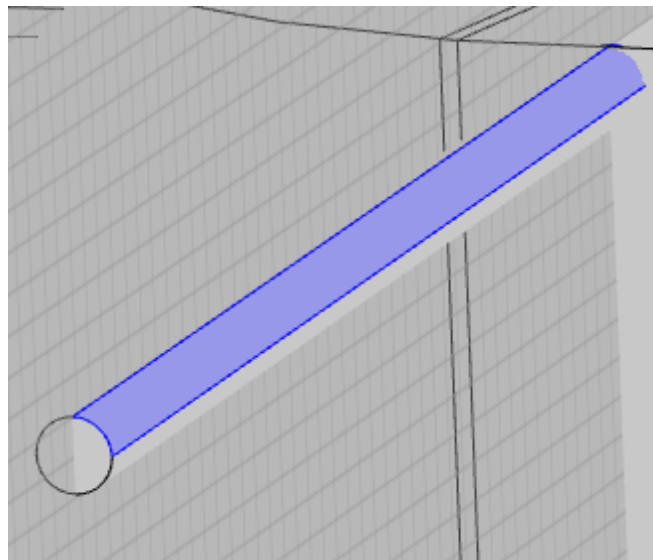
Σε αυτό το μοντέλο προστέθηκαν οι σωληνώσεις που ενώνουν τα διαμερίσματα μεταξύ τους, αλλά παράλληλα λειτουργούν και ως βάνες για την εναλλαγή του σημείου τροφοδοσίας και συνεπώς του αντίστοιχου διαμερίσματος. Πιο συγκεκριμένα, τοποθετήθηκαν δύο ευθείες παράλληλες σωληνώσεις.





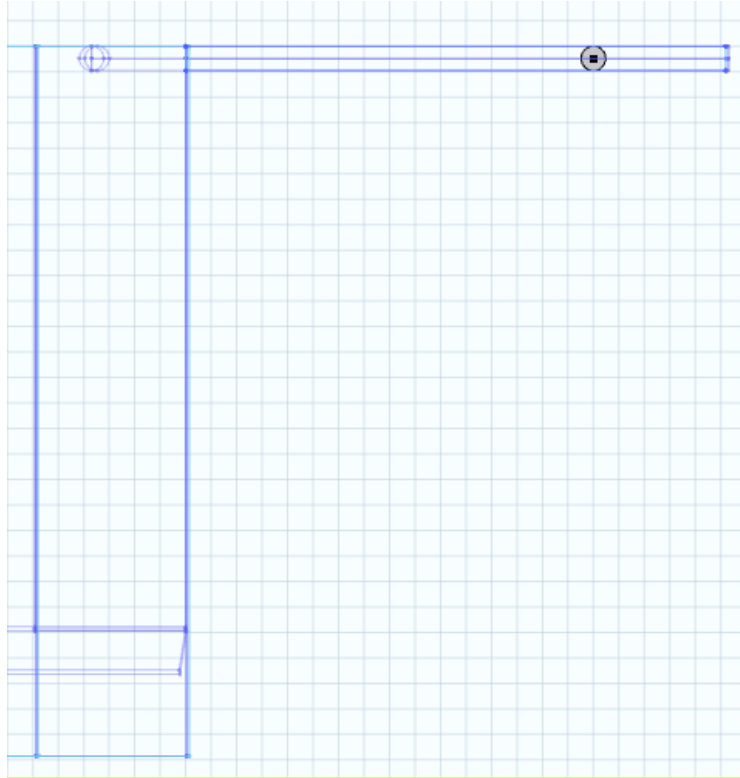
Σχήμα 9: Τοποθέτηση σωληνώσεων εισόδου - εξόδου στο μοντέλο του αντιδραστήρα.

Για την σύζευξη των δύο σωληνώσεων χρησιμοποιήθηκε η εισαγωγή ενός περιβάλλοντος εργασίας (Work Plane), πάνω στον άξονα που διέρχεται από το κέντρο του κυλίνδρου και κάθετο στη κορυφή του αντιδραστήρα. Στην εικόνα που ακολουθεί παρουσιάζεται ο τρόπος τοποθέτησης του περιβάλλοντος εργασίας χρησιμοποιώντας έναν άξονα και μια επιφάνεια για τον ακριβή ορισμό της θέσης του.



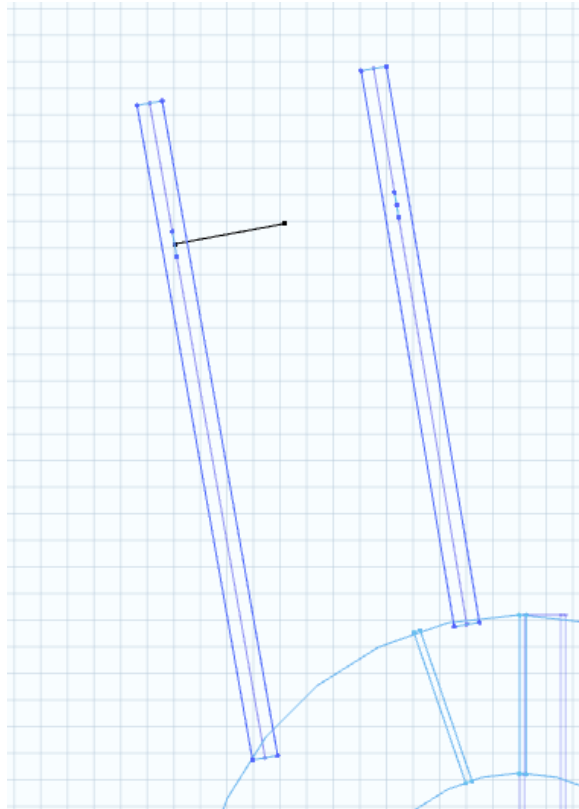
Σχήμα 10: Εισαγωγή "Work Plane", χρησιμοποιώντας τη χρωματισμένη επιφάνεια.

Αντιστοίχως, προστέθηκε ένα δεύτερο περιβάλλον εργασίας στον δεύτερο σωλήνα. Ο λόγος για τον οποίο χρησιμοποιήθηκαν τα δύο περιβάλλοντα εργασίας είναι γιατί επιτρέπουν την εισαγωγή ενός σχήματος δύο διαστάσεων επάνω στο ανεπτυγμένο σε τρεις διαστάσεις μοντέλο. Επιλέχθηκε στο Work Plane > Plane Geometry και στη συνέχεια την εισαγωγή κύκλου, όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα, δίνεται η ακτίνα του να είναι ίση με την ακτίνα της σωλήνωσης και να απέχει από τον αντιδραστήρα όσο απέχουν και οι βάνες από αυτόν.



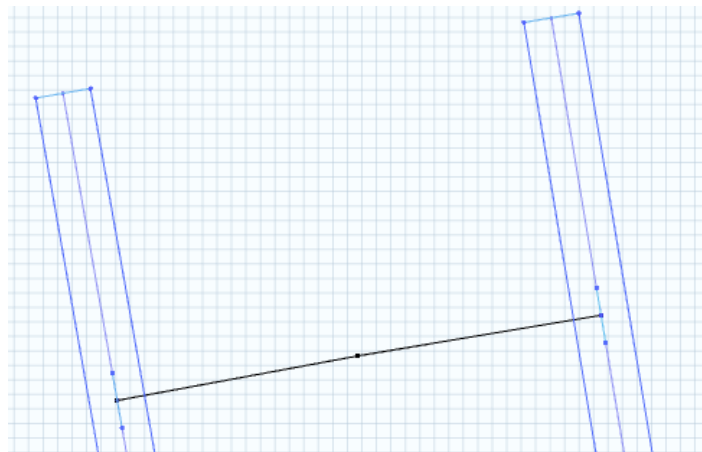
Σχήμα 11: Εισαγωγή σημείου σύζευξης στο "Work Plane", σωληνώσεων εισόδου - εξόδου.

Επίσης, εισήχθη και ένα τρίτο περιβάλλον εργασίας το οποίο όμως τοποθετήθηκε πάνω στον άξονα «xy» και σε ύψος ίσο με αυτό των σωλήνων εισόδου και εξόδου. Αυτή τη φορά στην επιλογή της γεωμετρίας Plane Geometry, επιλέχθηκε το Bezier Polygon και προστέθηκε ένα γραμμικό κομμάτι (linear segment) που έχει ως αρχή το κέντρο ενός εκ των δύο κύκλων που ορίστηκαν νωρίτερα και τέλος το μέσο της μεταξύ τους απόστασης.



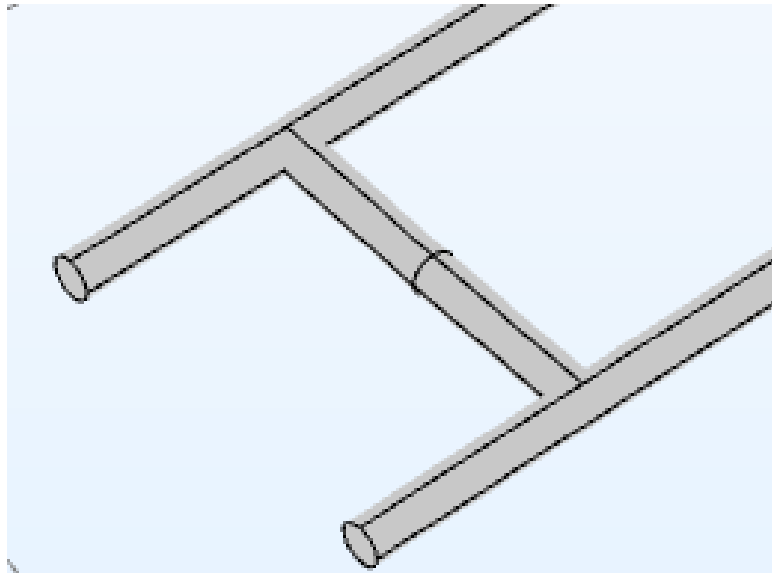
Σχήμα 12: Κατασκευή Ευθύγραμμου Τμήματος, πάνω στο οποίο θα δημιουργηθεί ο σωλήνας σύζευξης εισόδου - εξόδου.

Όμοια, εισήχθη και το δεύτερο Bezier Polygon επιλέγοντας πάλι ευθύγραμμο τμήμα μόνο που έχει ως αφετηρία το κέντρο του δεύτερου κύκλου και τέλος, πάλι, το μέσο μεταξύ των δύο κύκλων. Το αποτέλεσμα που προκύπτει παρουσιάζεται στην εικόνα που ακολουθεί:



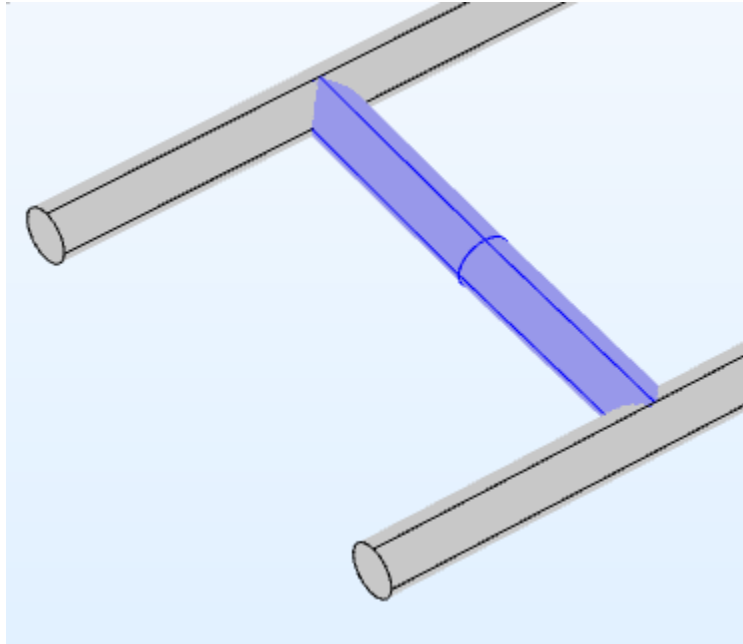
Σχήμα 13: Ολοκλήρωση του Ευθύγραμμου Τμήματος, πάνω στο οποίο θα δημιουργηθεί ο σωλήνας σύζευξης εισόδου - εξόδου.

Η σύζευξη μεταξύ των δύο σωλήνων ολοκληρώθηκε με την εντολή Sweep από τη Γεωμετρία, η οποία δέχεται μια επιφάνεια και έναν άξονα, κατά μήκος του οποίου επιμηκύνεται η επιφάνεια δημιουργώντας τρισδιάστατα σχήματα. Επιλέχθηκε η επιφάνεια καθώς και ο άξονας πάνω στον οποίο δημιουργήθηκε το πρώτο μισό του σωλήνα. Επαναλήφθηκαν τα ίδια βήματα και για το δεύτερο κύκλο με το υπόλοιπο μισό του ευθύγραμμου τμήματος που δημιουργήθηκε από τα περιβάλλοντα εργασίας. Προέκυψε το ακόλουθο αποτέλεσμα:



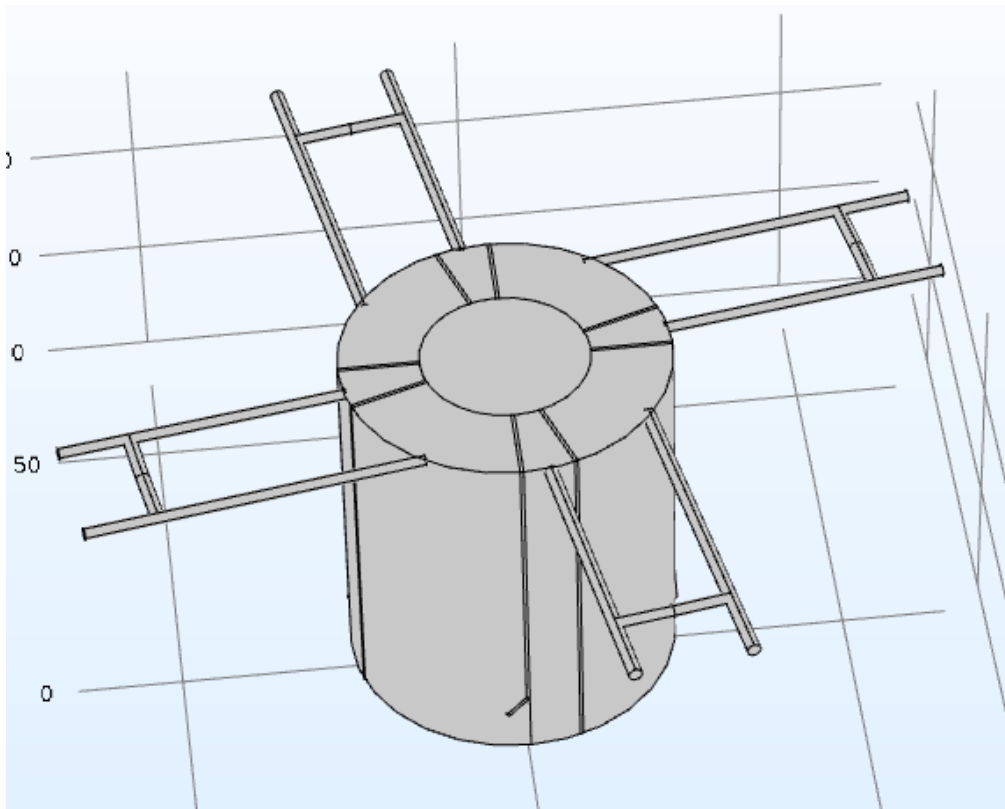
Σχήμα 14: Αποτέλεσμα Δημιουργίας Σωλήνωσης Σύζευξης..

Στη συνέχεια, προστέθηκε από Geometry>Booleans and Partitions η επιλογή Union, που ενώνει δύο αντικείμενα, στη συγκεκριμένη περίπτωση διατηρήθηκε η εσωτερική επιφάνεια, η οποία χρειαζόταν για την εισαγωγή συνθηκών προκειμένου να προσομοιωθούν οι βάνες. Επιλέχθηκαν, όπως φαίνεται στο σχήμα (14) τα δύο Sweeps και με την ενέργεια αυτή κατέστη δυνατή η ένωσή τους.



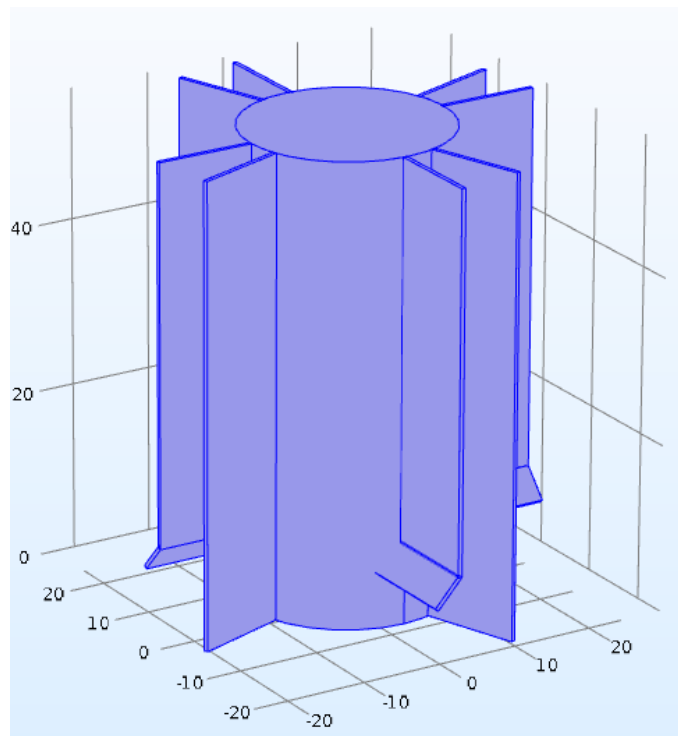
Σχήμα 15: Ένωση Σωληνώσεων Εισόδου - Εξόδου - Σύζευξης.

Αφού επιτεύχθηκε η σύζευξη δύο σωληνώσεων εκκρεμούσε η ένωση των υπόλοιπων ζευγών. Από την επιλογή Geometry > Transforms επιλέχθηκε η ενέργεια Rotate και η ένωση που δημιουργήθηκε και ορίστηκε το εύρος των μοιρών που θα γινόταν η περιστροφή. Ορίστηκε επίσης ένα βήμα για τη περιστροφή, καθορίζοντας ανά πόσες μοίρες θα τοποθετείτο το επιλεγμένο αντικείμενο. Παρατίθεται το τελικό αποτέλεσμα:



Σχήμα 16: Τοποθέτηση του Σωλήνα Σύζευξης σε κάθε διαμέρισμα του Αντιδραστήρα.

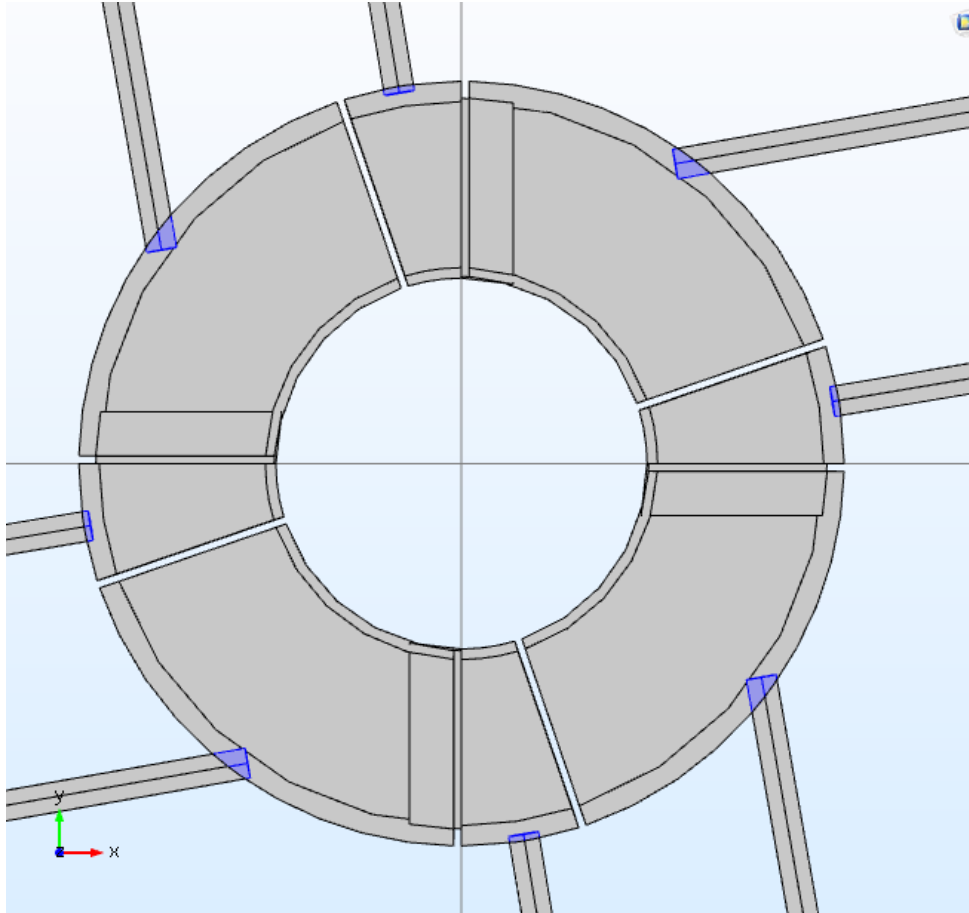
Με την γεωμετρία να έχει ολοκληρωθεί επιλέχθηκε ο όγκος στον οποίο γίνεται η ροή και επικεντρώνεται η μελέτη, εξαιρώντας έτσι τον εσωτερικό κύλινδρο και τα πτερύγια, απλοποιώντας την γεωμετρία, προκειμένου να απλοποιηθεί το πρόβλημα. Αυτό επιτεύχθηκε από το Geometry > Booleans and Partitions με την ενέργεια Difference, επιλέγοντας τους εξωτερικούς όγκους και αφαιρώντας από αυτούς τους εσωτερικούς που αναφέρθηκαν. Στη συνέχεια, απεικονίζεται ο όγκος που αφαιρέθηκε με την ενέργεια Difference:



Σχήμα 17: Όγκος του Αντιδραστήρα που Εξαιρέθηκε από του Υπολογισμούς.

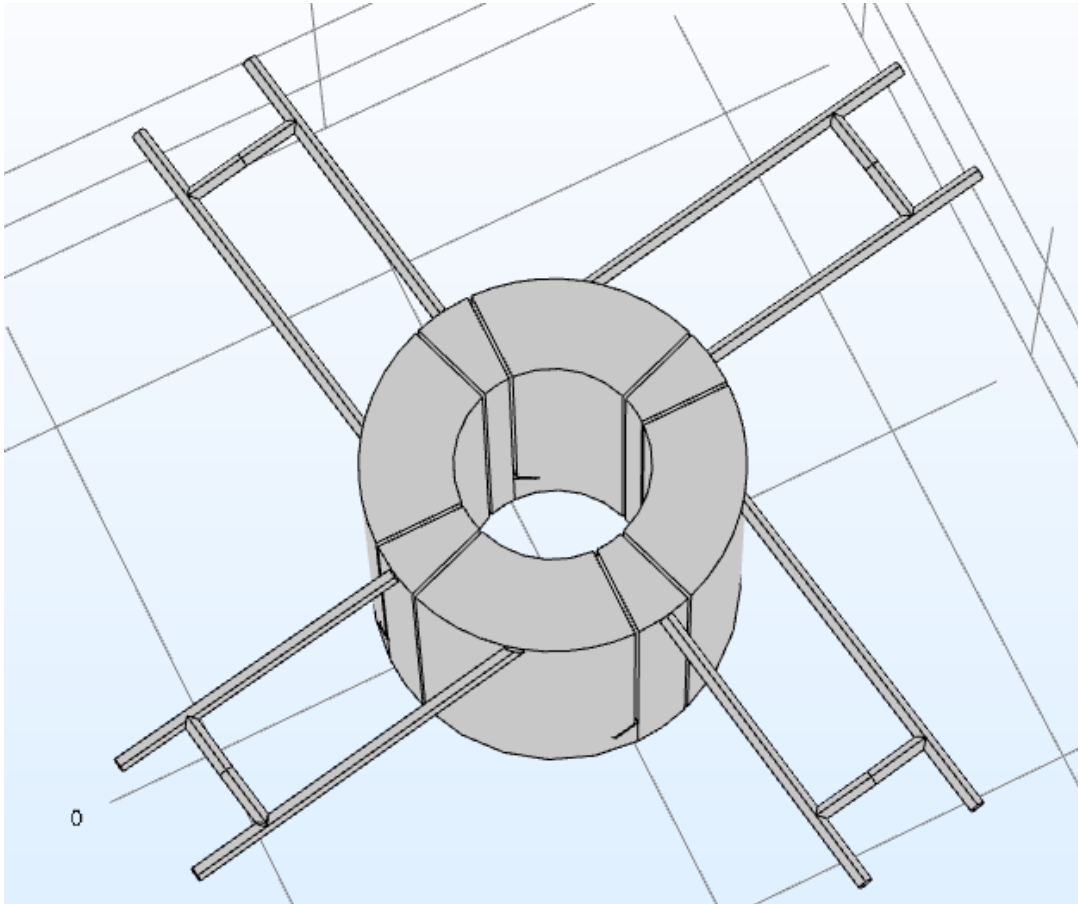
Πριν ολοκληρωθεί η δημιουργία της γεωμετρίας με την εντολή Form Union, αφαιρέθηκαν συγκεκριμένες επιφάνειες που βρίσκονταν εντός του όγκου ροής υγρού και θα επιβάρυναν το πρόβλημα. Οι συγκεκριμένες επιφάνειες βρίσκονται στα σημεία που χρησιμοποιήθηκε η εντολή Sweep καθώς και στα σημεία που ενώνονται οι σωλήνες με τον κύριο κύλινδρο του αντιδραστήρα.

Στην εικόνα που παρατίθεται γίνεται αντιληπτό ποιες είναι αυτές οι επιφάνειες. Η εντολή που χρησιμοποιήθηκε βρίσκεται στη Geometry > Virtual Operations > Ignore Faces. Μετά τη συγκεκριμένη προσθήκη επιλέγονται οι ανεπιθύμητες επιφάνειες που θα αγνοηθούν.



Σχήμα 18: Επιφάνειες που εξαιρέθηκαν από τη Γεωμετρία, στην Ένωση Σωληνώσεων - Δοχείου.

Τελικά προέκυψε η γεωμετρία που θα χρησιμοποιηθεί για τους υπολογισμούς και παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα:



Σχήμα 19: Τελική Εικόνα της Γεωμετρίας του Μοντέλου.

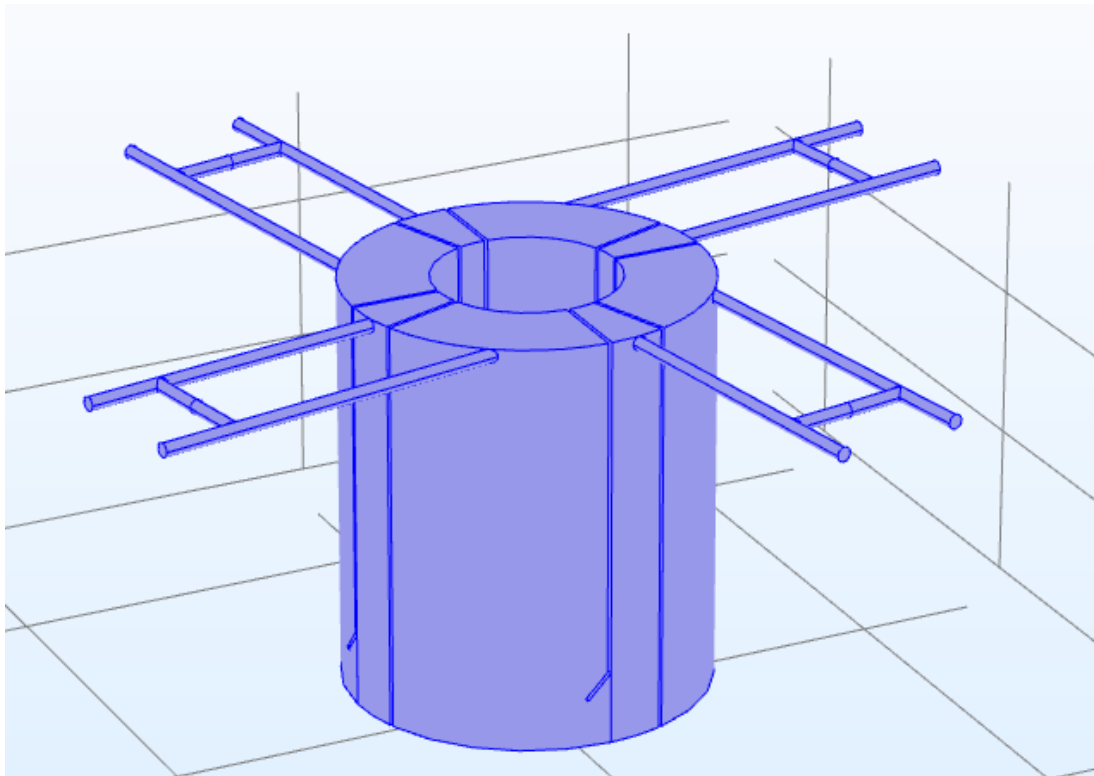
### Ορισμός των υλικών

Μετά το καθορισμό της γεωμετρίας ακολούθησε ο ορισμός των υλικών στους διάφορους όγκους (Domains) και στις επιφάνειες/όρια (Boundaries) του αντιδραστήρα. Χρησιμοποιώντας τη βιβλιοθήκη υλικών του Comsol Multiphysics®, από τα «Built-in» στοιχεία επιλέχθηκε το νερό σε υγρή μορφή (Water, liquid) και ο χάλυβας (Steel AISI 4340). Το νερό προτιμήθηκε γιατί τα πειράματα ΚΧΠ διεξήχθησαν στον αντιδραστήρα με υδατικό διάλυμα παρουσία ιχνηθέτη ενώ ο χάλυβας γιατί το κέλυφος του αντιδραστήρα αποτελείται από ανοξείδωτο ατσάλι. Μετά την επιλογή των υλικών, ακολούθησε η αντιστοίχισή τους στον εκάστοτε όγκο και επιφάνεια. Για τον χάλυβα έγινε η παραδοχή ότι και οι σωληνώσεις είναι κατασκευασμένες από αυτόν.



## Διαμόρφωση των μοντέλων για τη μελέτη της ροής

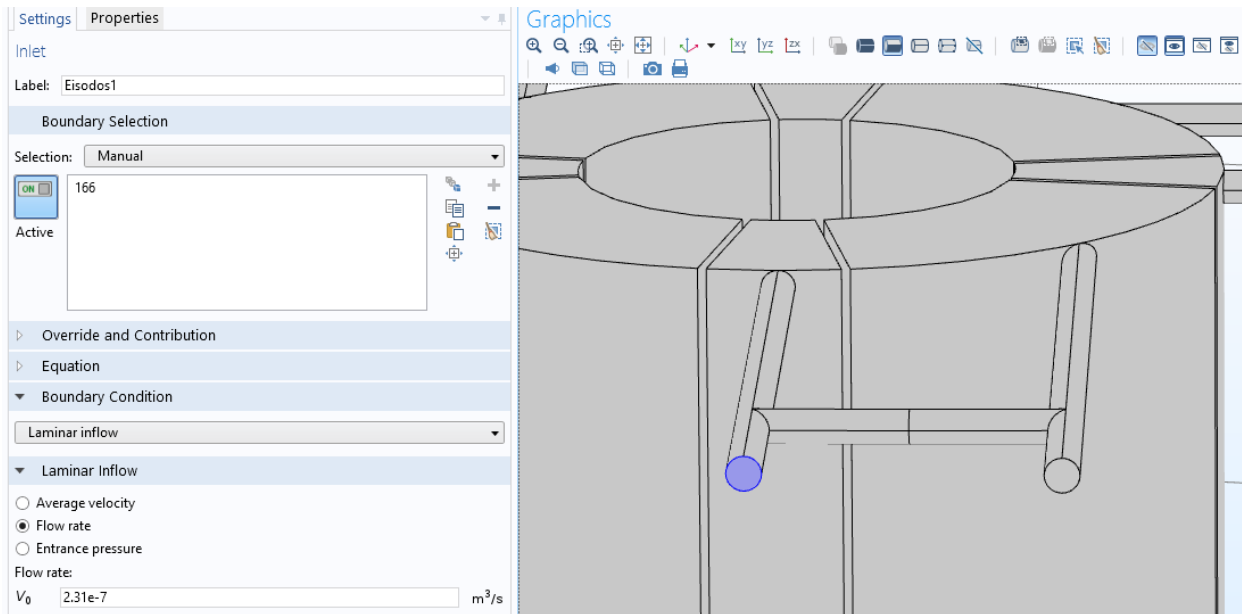
Μετά τον καθορισμό των υλικών για τους όγκους του αντιδραστήρα πρέπει να αποφασιστεί ο τύπος της ροής εντός του και ο τρόπος που γίνεται η διάχυση του ιχνηθέτη. Προκύπτει από τον αριθμό Reynolds, για τον οποίο υπολογίστηκε  $Re \ll 1$ , ότι η ροή είναι της μορφής Stokes ή Creeping flow. Επιλέγοντας το μοντέλο και την επιλογή «Add Physics» και στη συνέχεια «Fluid Flow > Single Phase Flow > Creeping Flow». Όπως φαίνεται και στην παρακάτω εικόνα, καθορίζονται τα πεδία ορισμού (Domains) για τη συγκεκριμένη ροή που είναι όλος ο όγκος του αντιδραστήρα. Η ροή θεωρείται ασυμπίεστη καθώς δεν μεταβάλλεται η πυκνότητα του νερού.



Σχήμα 20: Επιλογή Όγκου Ελέγχου για τον ορισμό της ροής του νερού.

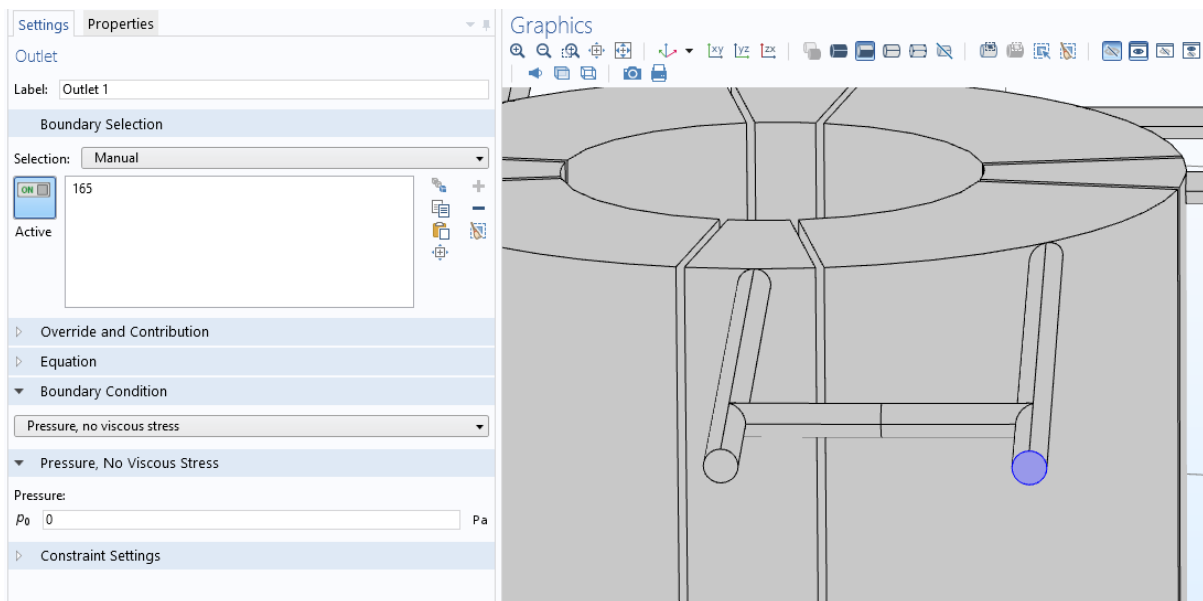
Αφού καθορίστηκαν οι ιδιότητες του ρευστού επιλέχθηκε η συνθήκη μη ολίσθησης «No Slip» για τα τοιχώματα και τους σωλήνες του μοντέλου και οι τιμές για τη πυκνότητα και το ιξώδες του νερού αυτόματα λαμβάνονται από το υλικό που ορίστηκε στον συγκεκριμένο όγκο ελέγχου.

Στη συνέχεια, επιλέγοντας το «Creeping Flow» και «Inlet» προστέθηκαν τέσσερις οριακές συνθήκες που αντιπροσωπεύουν τις τέσσερις εισόδους του αντιδραστήρα, πιο συγκεκριμένα επιλέχθηκε «Laminar Inflow», δηλαδή η στρωτή ροή χωρίς συνθήκες αντιρροής και δόθηκε ο ρυθμός της ροής υπολογισμένος για κάθε διαφορετικό χρόνο παραμονής. Αντιστοιχίστηκαν οι συνθήκες αυτές με τις επιφάνειες που υπάρχει εισροή υγρού:



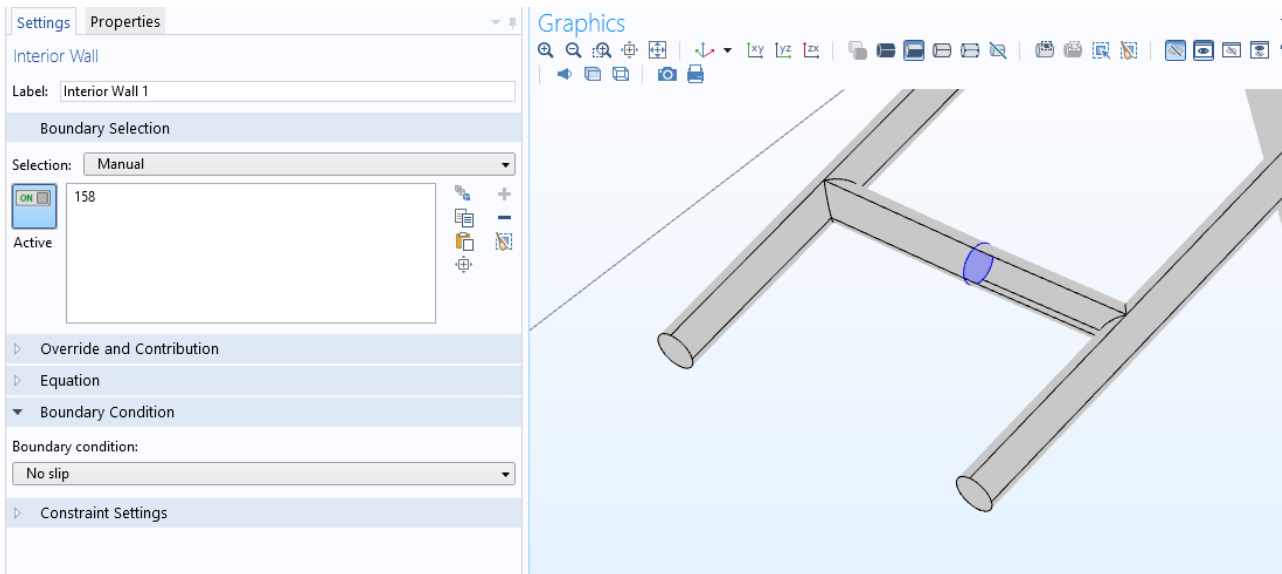
Σχήμα 21: Επιφάνεια Εισόδου, εισροής του υδατικού διαλύματος ιχνηθέτη.

Επίσης, προστέθηκαν και τέσσερις έξοδοι, «Outlet», με τον ίδιο τρόπο όπως οι Είσοδοι και δόθηκε η συνθήκη «Pressure, No Viscous Stress», γιατί η εκροή γίνεται σε ατμοσφαιρική πίεση και εξαρτάται μόνο από την ταχύτητα εισόδου. Αντιστοιχίστηκαν οι τέσσερις συνθήκες με τις επιφάνειες που γίνεται η εκροή του υγρού:



Σχήμα 22: Επιφάνεια Εξόδου, εκροής του υδατικού διαλύματος ιχνηθέτη.

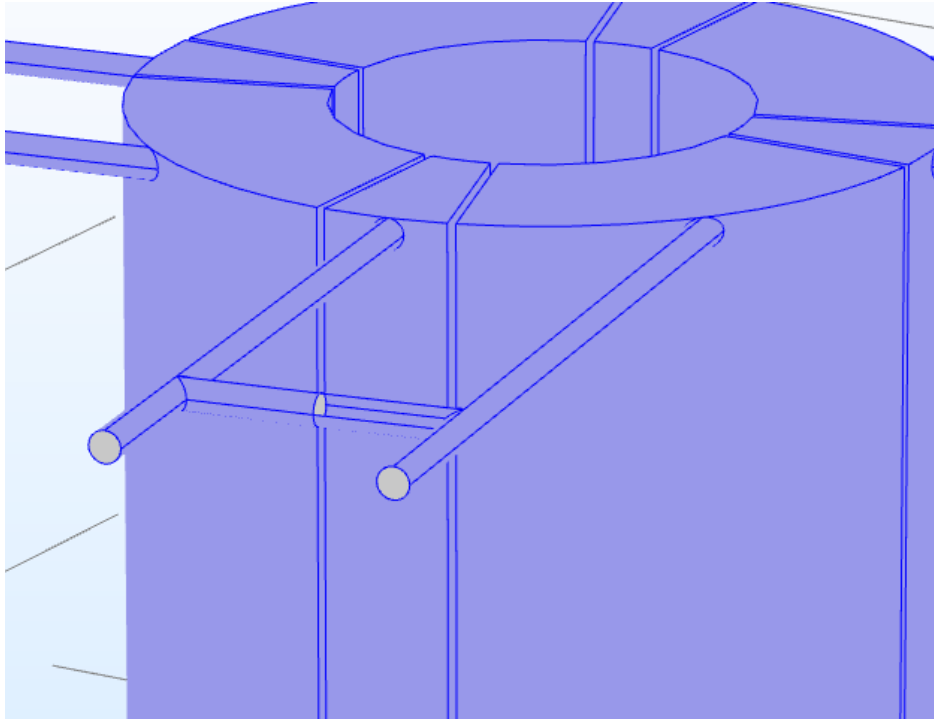
Η τελευταία συνθήκη που προστέθηκε σχετικά με τη ροή του ρευστού εντός του αντιδραστήρα είναι αυτή μέσα από την οποία προσομοιώνονται οι βάνες. Επιλέχθηκε «Creeping Flow > Interior Wall» και προστέθηκαν τέσσερα εσωτερικά τοιχώματα. Κατόπιν επιλέγονται και προσδίδεται η οριακή συνθήκη «No Slip» καθώς δεν επιθυμείται ολίσθηση στη συγκεκριμένη επιφάνεια. Για την εφαρμογή της συγκεκριμένης συνθήκης επιλέχθηκε στη γεωμετρία η επιφάνεια που διατηρήθηκε από τη σύζευξη των δύο «Sweeps», δηλαδή το μέσο του σωλήνα που ενώνει τις σωληνώσεις εισόδου και εξόδου, όπως φαίνεται παρακάτω:



Σχήμα 23: Επιλογή Ενδιάμεσης Επιφάνειας για τη φραγή της ροής.

Για την πλήρη περιγραφή του πειράματος Κατανομής Χρόνου Παραμονής είναι απαραίτητη και η προσθήκη του μοντέλου «Transport of Diluted Species». Η μάζα του ιχνηθέτη μεταφέρεται εντός του νερού με το μηχανισμό της συναγωγής, οπότε επιλέχθηκε «Convection» στους μηχανισμούς μεταφοράς και σημειώθηκαν όλοι οι όγκοι του αντιδραστήρα ως ενεργοί όγκοι όπως έγινε με το νερό. Η διάχυση θεωρείται ισοτροπική και ο συντελεστής διάχυσης ίσος με  $4e-10$  ( $m^2/s$ ).

Όπως στη ροή του νερού επιλέχθηκαν τα τοιχώματα από τα οποία δε διέρχεται το υγρό έτσι και με τη μεταφορά του ιχνηθέτη επιλέχθηκαν οι επιφάνειες που δε διαπερνώνται και η επιλογή αυτών απεικονίζεται παρακάτω. Επιλέχθηκαν όλα τα τοιχώματα του αντιδραστήρα και των σωληνώσεων εκτός από τις επιφάνειες που έχουν οριστεί ως εισοδοί, έξοδοι ή τα ενδιάμεσα τοιχώματα στις συζεύξεις:



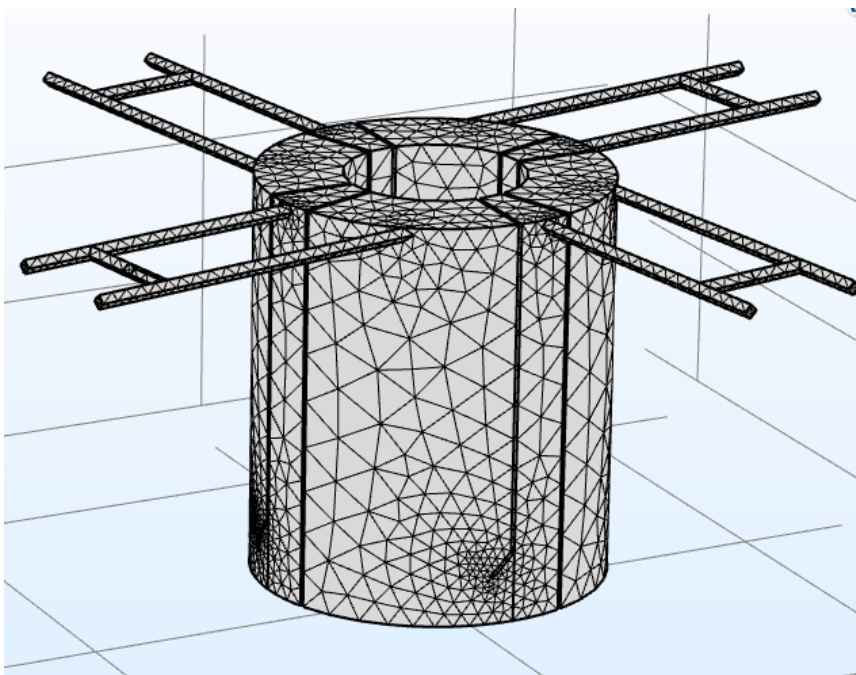
Σχήμα 24: Μη διαπερατές Επιφάνειες από τον ιχνηθέτη.

Φαίνεται η εξαίρεση των επιφανειών που διαπερνώνται από τον ιχνηθέτη, σκιαγραφημένες με γκρι χρώμα.

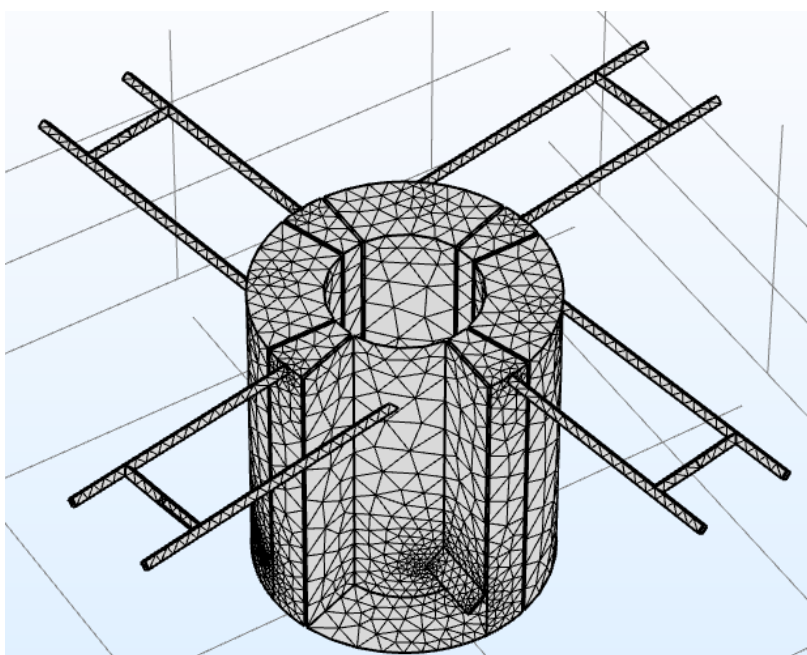
Αφού ορίστηκαν οι βασικές συνθήκες για τη μεταφορά του ιχνηθέτη πρέπει να οριστούν οι εισοδοί και οι έξοδοί του, που είναι ίδιες με τις αντίστοιχες εισόδους και εξόδους του ρευστού. Προστίθενται από επιλογή του «Transport of Diluted Species» τέσσερις «Inflows» και τέσσερις «Outflows» και αντιστοιχίζονται στις επιφάνειες των εισόδων και των εξόδων. Επιπλέον ορίστηκε η τιμή της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη ίση με  $1 \text{ mol/m}^3$ .

## Δημιουργία πλέγματος

Μετά τον πλήρη ορισμό του προβλήματος και πριν την επιλογή του τρόπου επίλυσής του διαμορφήθηκε το πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων. Έγινε επιλογή ελεγχόμενου πλέγματος από το πρόγραμμα χωρίς να παρεμβαίνει ο χρήστης στη δημιουργία του πέρα από την επιλογή μεγέθους των στοιχείων με τραχύ μέγεθος που μειώνει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων αλλά επίσης μειώνει το χρόνο που απαιτεί η επίλυση του κάθε υπολογισμού και μειώνει και την απαίτηση σε υπολογιστική ισχύ. Στις εικόνες που ακολουθούν φαίνονται τα αποτελέσματα της δημιουργίας του πλέγματος:



Σχήμα 25: Πλέγμα που κατασκευάστηκε στο Μοντέλο.



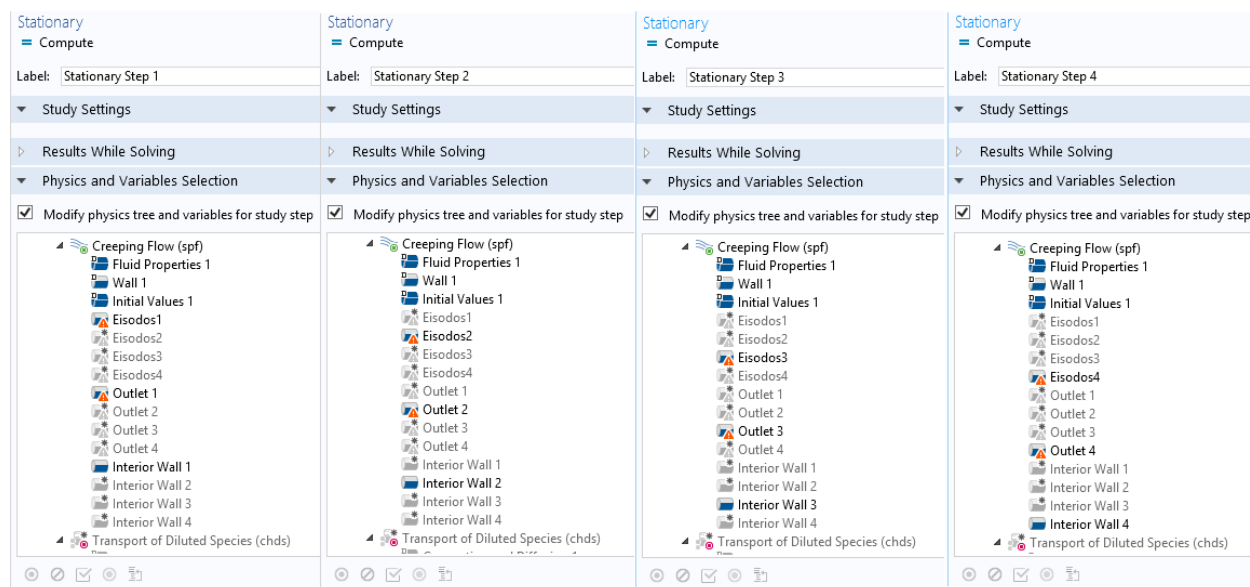
Σχήμα 26: Πλέγμα που κατασκευάστηκε στο μοντέλο, με προβολή του εσωτερικού μέρους του διαμερίσματος.

## Διαμόρφωση της μελέτης

Θα αποτελείται από δύο μέρη η επίλυση του προβλήματος που έχει καταστρωθεί ως τώρα. Το πρώτο μέρος αφορά την επίλυση του προβλήματος σε μόνιμες συνθήκες χωρίς προσθήκη ιχνηθέτη για να εξαχθεί το προφίλ της ταχύτητας και στη συνέχεια το δεύτερο μέρος θα χρησιμοποιεί τα ήδη υπολογισμένα προφίλ της ταχύτητας για να υπολογίσει σε εξαρτημένες από το χρόνο συνθήκες τη διάχυση του ιχνηθέτη εντός του αντιδραστήρα.

### Μόνιμες συνθήκες

Προστίθεται ένα «Stationary Study» και στη συνέχεια επιλέγεται και προστίθενται και άλλα τρία «Stationary Study Steps». Χρειάζονται τέσσερα από αυτά γιατί υπάρχουν τέσσερα προφίλ ταχύτητας, κάθε ένα από τα οποία προκύπτει από ένα ζεύγος εισόδου-εξόδου. Για να ενεργοποιηθούν απομονωμένα τα ζεύγη εισόδου-εξόδου-μεσαίου τοιχώματος χρησιμοποιείται η δυνατότητα τροποποίησης των φυσικών σχέσεων που ορίστηκαν στη «Μελέτη της ροής». Επιλέγοντας το «Step 1: Stationary» και την αντίστοιχη δυνατότητα «Modify Physics Tree and Variables for Study Step» απενεργοποιείται πλήρως το κομμάτι «Transport of Diluted Species» μαζί με τις τρεις εισόδους, τις τρεις εξόδους και τα τρία ενδιάμεσα τοιχώματα που δεν χρησιμοποιούνται. Γίνονται αντίστοιχες τροποποιήσεις στα υπόλοιπα τρία «Study Steps» δηλαδή απενεργοποιούνται κάθε φορά όλες οι εισοδοί, οι εξοδοί και τα ενδιάμεσα τοιχώματα εκτός από μια πλευρά από τις τέσσερις ανάλογα με την εναλλαγή διαμερισμάτων στον αντιδραστήρα. Παρατίθενται εικόνες με τα τέσσερα «Study Steps» και τις επιλογές που έχουν γίνει σε καθένα από αυτά:

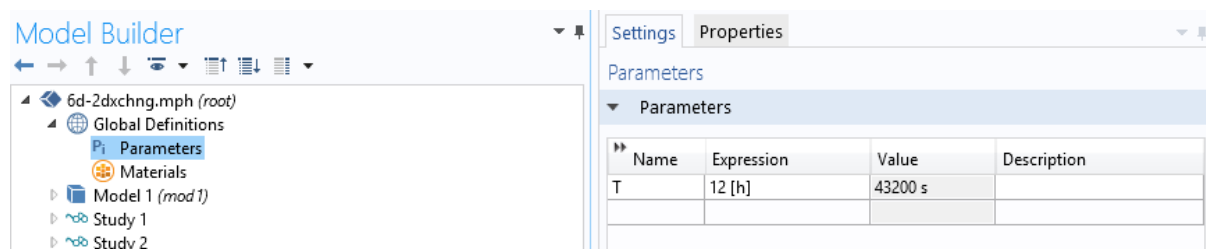


Σχήμα 27: Εναλλαγή των Εισόδων - Εξόδων - Ενδιάμεσων Τοιχωμάτων.

Στη συνέχεια πραγματοποιείται η διαμόρφωση του επιλύτη, επιλέγοντας το «Solver Configuration» και προσθέτοντας έναν «Stationary Solver», εμφανίζονται περαιτέρω επιλογές. Με την εξής σειρά επιλέγονται «Compile Equations: Stationary», «Dependent Variables», «Solvers > Stationary Solver 1», «Other > Solution Store» τέσσερις φορές μία για κάθε «Study Step». Στη συνέχεια, αντιστοιχίζονται τα «Study Steps» για το εκάστοτε «Compile Equations: Stationary», «Dependent Variables», «Stationary Solver» και χρησιμοποιείται το «Solution Store» για την αποθήκευση κάθε λύσης, οπότε και προκύπτουν τα τέσσερα προφίλ ταχύτητας.

### Μεταβατικές συνθήκες

Αρχικά, για να διευκολυνθεί η εισαγωγή διαφορετικών χρόνων λειτουργίας για το κάθε διαμερίσμα ανάλογα με τη συχνότητα λειτουργίας προστίθεται μια παράμετρος που θα μεταβάλλεται. Ανάλογα αν χρειάζεται ο χρόνος λειτουργίας του διαμερίσματος να είναι 12 ώρες ή 24 ώρες, αυτό επιτυγχάνεται επιλέγοντας το «Parameters» που βρίσκεται κάτω από το «Global Definitions» και όπως φαίνεται στη παρακάτω εικόνα χρησιμοποιείται η μεταβλητή «T», όπου αλλάζοντας την τιμή της μπορούν να προσομοιωθούν διαφορετικοί χρόνοι εναλλαγής του κάθε διαμερίσματος.

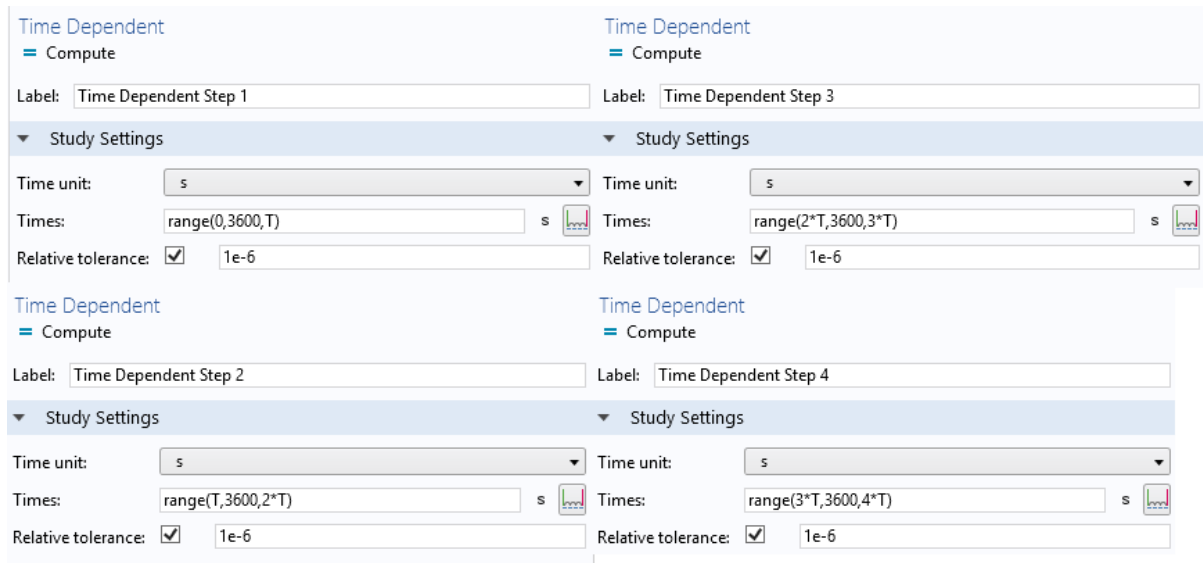


Σχήμα 28: Εισαγωγή Παραμέτρου για την διευκόλυνση της μεταβολής της Περιόδου Εναλλαγής.

Ο ολικός χρόνος που γίνεται το κάθε τρέξιμο είναι τρεις φορές ο χρόνος παραμονής του, δηλαδή για τέσσερις ημέρες χρόνο παραμονής θα χρειαστεί το τρέξιμο να είναι για δώδεκα ημέρες. Ανάλογα με το πόσες ώρες επιθυμείται να είναι ο χρόνος εναλλαγής των διαμερισμάτων επηρεάζονται και τα αντίστοιχα «Time Dependent Studies» που θα χρειαστούν, δηλαδή για  $T_{\text{διαμερίσματος}}=12$  ώρες και Χρόνο Παραμονής = 4 ημέρες θα χρειαστούν 48 ώρες, δηλαδή για το μισό χρόνο παραμονής χρειάζονται τέσσερα «Time Dependent Studies», άρα για ένα πλήρη χρόνο παραμονής στον αντιδραστήρα απαιτούνται οχτώ «Time Dependent Studies». Επομένως, για διάρκεια πειράματος ίση με τρεις φορές το χρόνο παραμονής απαιτούνται συνολικά 24 «Time Dependent Studies». Αντίστοιχα υπολογίζεται και για τους υπόλοιπους συνδυασμούς Χρόνου Παραμονής με Συχνότητα Εναλλαγής.

Μετά την εισαγωγή των «Time Dependent Studies» επιλέγεται το πρώτο και ορίζεται το εύρος του χρόνου για το οποίο θα τρέξει καθώς και το βήμα, για το δεύτερο «Time Dependent Study» διατηρείται ίδιο το βήμα και χρησιμοποιείται ο τελικός χρόνος του προηγούμενου «Time Dependent Study» ως αρχικός και τοποθετείται και το επιθυμητό τέλος αυτού, ανάλογα συμπληρώνονται οι χρόνοι τρεξίματος των υπόλοιπων «Time

Dependent Studies». Στις παρακάτω εικόνες φαίνεται ο καθορισμός των χρονικών ορίων σε ένα πρόβλημα με περίοδο εναλλαγής ίσο με 12 ώρες.



Σχήμα 29: Ορισμός χρονικών ορίων, χρησιμοποιώντας τη Παράμετρο της Περιόδου Εναλλαγής.

Σε κάθε μια καθορίζεται βήμα ίσο με 1 ώρα, δηλαδή ζητείται καταγραφή της λύσης κάθε 3600 δευτερόλεπτα. Ο επιλύτης αφήνεται να βηματίζει ελεύθερα χωρίς να εξαρτάται από το βήμα που ορίζεται για την παρουσίαση των λύσεων.

Ακολουθεί η επιλογή «Modify Physics Tree and Variables for Study Step». Αυτήν τη φορά απενεργοποιείται η μελέτη των ροών «Creeping Flow» και ενεργοποιείται η μελέτη διάχυσης του ιχνηθέτη «Transport of Diluted Species», επιλέγοντας να διατηρηθούν ως ενεργά το «Inflow 1 & Outflow 1» καθώς υπάρχει εισαγωγή του ιχνηθέτη από το πρώτο διαμέρισμα.

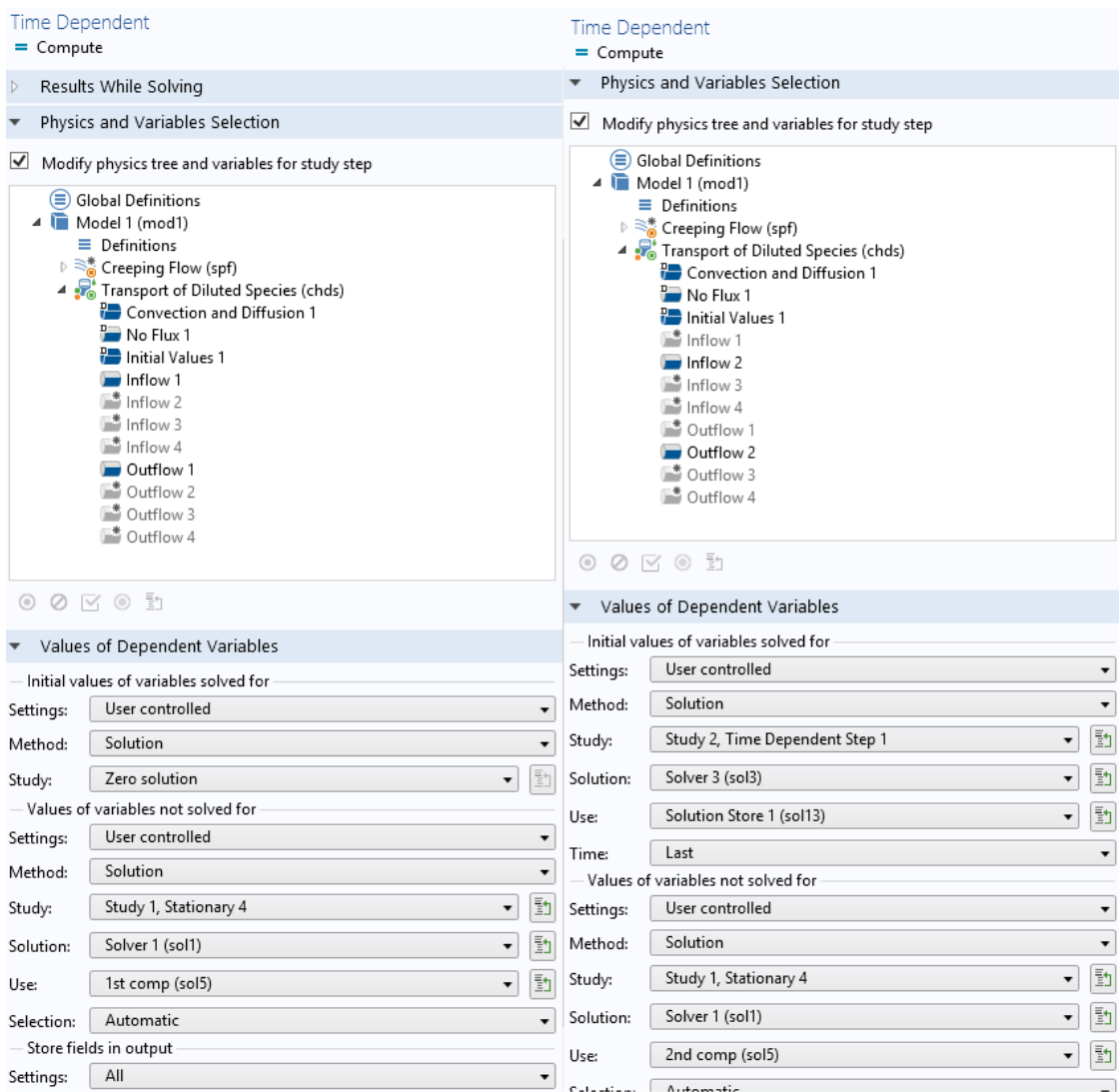
Στους υπολογισμούς με Μεταβατικές Συνθήκες χρόνου πρέπει να οριστούν οι αρχικές τιμές των μεταβλητών που επιλύονται και οι αντίστοιχες αρχικές τιμές των μεταβλητών που δεν επιλύονται. Στο συγκεκριμένο «Study» δεν υπάρχουν αρχικές τιμές για τις συγκεντρώσεις καθώς είναι το πρώτο επομένως γίνεται η επιλογή «Method: Initial Solution, Study: Zero Solution», ξεκινάει η επίλυση από την αρχή. Επιπλέον, ορίστηκαν τιμές για τις μεταβλητές που δεν επιλύονται, δηλαδή για την ταχύτητα, καθώς έχει απενεργοποιηθεί όπως προαναφέρθηκε. Αυτό επιτυγχάνεται επιλέγοντας «Initial Values of Variables not Solved for» και επιλέγοντας «Method: Solution > Study: Study 1 > Solution: Solver 1 > Use: Stored Solution 1», οδηγείται το πρόγραμμα στον Επιλύτη σε Μόνιμες Συνθήκες (Solver 1) και στην λύση για το πρώτο προφίλ ταχύτητας, με είσοδο και έξοδο από το πρώτο διαμέρισμα του αντιδραστήρα.

Στο δεύτερο «Time Dependent Study» με τις κατάλληλες αλλαγές στο εύρος του χρόνου που απεικονίζονται παραπάνω, διατηρείται απενεργοποιημένο το «Creeping Flow» και αντίστοιχα απενεργοποιούνται τα «Inflow 1 & Outflow 1» και ενεργοποιούνται τα «Inflow 2 & Outflow 2» αφού η τροφοδοσία στον αντιδραστήρα γίνεται από το δεύτερο διαμέρισμα. Επιπροσθέτως, πρέπει να χρησιμοποιηθεί και ως αρχική τιμή η λύση του προηγούμενου «Time Dependent Study» για τη συγκέντρωση του ιχνηθέτη που υπάρχει ήδη εντός του



αντιδραστήρα. Αυτή τη φορά στο μενού επιλογής Αρχικών Τιμών κάτω από «Initial Values of Variables Solved for», της μεταβλητής της συγκέντρωσης, επιλέγεται «Method: Solution > Study: Study 2 > Solver : Solver 3 > Use: Solution Store 1 > Time: Last», δηλαδή χρησιμοποιείται μέθοδος αρχικής τιμής, από τη μελέτη για Χρονικά Μεταβαλλόμενες Συνθήκες (Study 2), με τον αντίστοιχο επιλύτη (Solver 3), την λύση που αποθηκεύτηκε από το πρώτο «Time Dependent Study» (Solution Store 1) και παίρνοντας αρχική τιμή από την τελευταία χρονική στιγμή της αποθηκευμένης λύσης (Time: Last).

Ορίζονται τιμές για τις μεταβλητές που δεν επιλύονται ή «Variables not Solved for», κατά αντιστοιχία με το πρώτο «Time Dependent Study» επιλέγεται «Method: Solution > Study: Study 1 > Solution: Solver 1 > Use: Stored Solution 2», χρησιμοποιώντας αυτή τη φορά τη δεύτερη αποθηκευμένη λύση σε Μόνιμες Συνθήκες, του προφίλ ταχύτητας για την εισαγωγή και εξαγωγή του νερού από το δεύτερο διαμέρισμα του αντιδραστήρα. Στην εικόνα που ακολουθεί φαίνονται οι αλλαγές που έγιναν στο «Physics Tree» καθώς και στις μεταβλητές που χρησιμοποιούνται:



Σχήμα 30: Ορισμός των Χρησιμοποιούμενων Μεταβλητών.

Με τον ίδιο τρόπο συμπληρώνονται και τα υπόλοιπα «Time Dependent Studies» χρησιμοποιώντας κάθε φορά ως αρχική τιμή τη τελευταία λύση του προηγούμενου, επιλέγοντας παράλληλα το κατάλληλο προφίλ ταχύτητας από τα τέσσερα που έχουν υπολογιστεί, ένα για κάθε διαμέρισμα του αντιδραστήρα, αλλάζοντας κατάλληλα το εύρος του Χρόνου τρεξίματος κάθε φορά και ενεργοποιώντας την κατάλληλη είσοδο και έξοδο του ιχνηθέτη.

Μετά τον ορισμό των «Time Dependent Studies», επιλέγεται το «Solver Configuration» και ο αντίστοιχος Επιλύτης και εφαρμόζονται οι ίδιες ενέργειες με τον Επιλύτη για τις Μόνιμες Συνθήκες, δηλαδή προσθέτοντας έναν «Time Dependent Solver», εμφανίζονται περαιτέρω επιλογές. Με την εξής σειρά επιλέγονται «Compile Equations: Time Dependent», «Dependent Variables», «Solvers > Time Dependent Solver 1», «Other > Solution Store» και προστίθενται από μια φορά με αυτή τη σειρά για κάθε «Time Dependent Study».

Παρακάτω παρουσιάζονται τα διαφορετικά ζεύγη τιμών του HRT και του T που προσομοιώθηκαν και τα αντίστοιχα «Time Dependent Steps» που χρειάστηκαν:

Πίνακας 3: Ζεύγη HRT - T και τα αντίστοιχα "Time Dependent Steps" που χρησιμοποιήθηκαν σε κάθε προσομοίωση.

HRT (d)	T (d)	Time Dependent Steps
4	2	24
4	4	36
4	8	12
6	2	36
6	4	20
6	30	4
6	60	4
6	72	4
10.65	2	68
10.65	4	32
20	2	120
20	4	60
20	40	12

Έτσι, καθορίστηκε και ο Επιλύτης οπότε ολοκληρώθηκε ο σχεδιασμός της γεωμετρίας, η επιλογή των υλικών, ο ορισμός του φυσικού μοντέλου, η δημιουργία πλέγματος και είναι έτοιμη να γίνει η επίλυση του προβλήματος, οπότε επιλέχθηκε και η αντίστοιχη εντολή «Compute». Σε αυτό το σημείο παρουσιάζονται, από το πρόγραμμα, οι βαθμοί ελευθερίας του προβλήματος που ήταν 11006. Έγινε προσπάθεια διατήρησής τους στο ελάχιστο δυνατό προκειμένου να επιλυθεί γρήγορα το πρόβλημα.

## Αποτελέσματα – Συζήτηση

Η παρούσα διπλωματική αποτελεί συνέχεια προηγούμενης διπλωματικής εργασίας με τίτλο, «Υδραυλικά Χαρακτηριστικά για Κλιμάκωση Μεγέθους Περιοδικού Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες (P.A.B.R.)» που υλοποιήθηκε από τον Γ. Σεϊντή. Μέρος της συγκεκριμένης διπλωματικής αποτέλεσε η δημιουργία μοντέλου του πιλοτικού αντιδραστήρα όγκου 80 L στο πρόγραμμα Comsol Multiphysics® Version 4.4 και η επίλυσή του για  $HRT=4$  d, χωρίς εναλλαγή διαμερίσματος τροφοδοσίας. Η κατανομή της συγκέντρωσης που προέκυψε προσέγγιζε την κατανομή των πειραματικών αποτελεσμάτων και η ροή εντός του αντιδραστήρα προσέγγιζε την εμβολική ροή. Στην διερεύνηση που έγινε για τους ανακλαστήρες, παρατηρήθηκε ότι ο χρόνος της πρώτης μη μηδενικής συγκέντρωσης στην έξοδο δεν εξαρτάται από την ύπαρξή τους, αλλά συντελούν στην ανάμιξη του ρευστού και υποκαθιστούν την μηχανική ανάδευση. Επίσης, η ύπαρξη ανακλαστήρων αυξάνει τους «νεκρούς» χώρους. Καταλήγει η εργασία στο συμπέρασμα ότι χωρίς εναλλαγή τροφοδοσίας ο P.A.B.R. συμπεριφέρεται ως A.B.R.

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για τους διάφορους χρόνους παραμονής και τις διαφορετικές συχνότητες εναλλαγής διαμερίσματος που χρησιμοποιήθηκαν, για τον αντιδραστήρα με εναλλαγή εισόδου τροφοδοσίας και εξόδου αποβλήτων, στο πρόγραμμα Comsol Multiphysics® Version 5.2. Επίσης, υπολογίστηκε ο Υδραυλικός «νεκρός» όγκος του αντιδραστήρα για κάθε περίπτωση. Τέλος, για κάθε περίπτωση υπολογίστηκε ο ισοδύναμος αριθμός των αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης σε σειρά που προσεγγίζουν βέλτιστα τα αντίστοιχα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις, ώστε να διερευνηθεί η λειτουργία του αντιδραστήρα P.A.B.R. σε κάθε κατάσταση πλησιάζει στη συμπεριφορά αντιδραστήρα πλήρους ανάμειξης ή σε αυτή αντιδραστήρα εμβολικής ροής.

## Εξαγωγή δεδομένων

Μετά την επίλυση των προβλημάτων που ορίστηκαν παραπάνω, επιλέγεται στην κατηγορία «Results» η προβολή της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη σε όλο τον όγκο του αντιδραστήρα με τη μορφή λεπτών τεμαχίων.

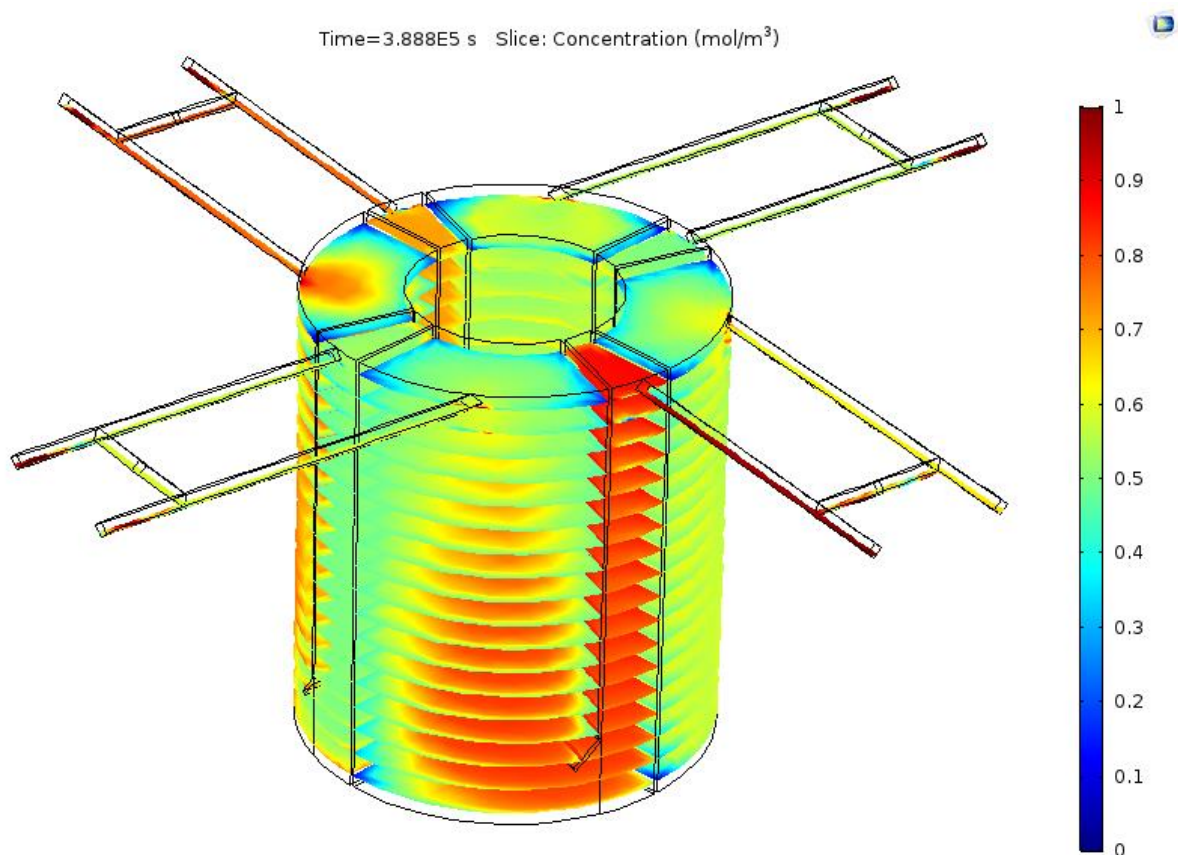
Επιπλέον, χρειάζονται και οι τιμές της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη κάθε χρονική στιγμή στην έξοδο που χρησιμοποιείται τη συγκεκριμένη χρονική στιγμή, προκειμένου να δημιουργηθεί το διάγραμμα συγκέντρωσης – χρόνου και να βρεθεί ο ισοδύναμος αριθμός των αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης που ταιριάζουν στα συγκεκριμένα αποτελέσματα. Στην κατηγορία «Results» επιλέγεται από τα «Derived Values» η προβολή των μέσω τιμών των αποτελεσμάτων σε μια επιφάνεια, «Surface Average», στη συνέχεια επιλέγεται η αποθηκευμένη λύση, οι χρόνοι για τους οποίους θα προβληθούν τα αποτελέσματα, η έκφραση που τα περιγράφει, στη συγκεκριμένη περίπτωση C γιατί επιθυμείται συγκέντρωση, και τέλος ορίζεται η επιφάνεια της εξόδου πάνω στην οποία θα υπολογιστεί η μέση τιμή της συγκέντρωσης. Εναλλάσσοντας τις αποθηκευμένες λύσεις και αντίστοιχα

περιστρέφοντας τη γεωμετρία και επιλέγοντας τις αντίστοιχες εξόδους εξάγονται όλα τα δεδομένα που είναι χρήσιμα σε περαιτέρω υπολογισμούς.

### Προσομοίωση κατανομής χρόνου παραμονής

Από την επίλυση του προβλήματος με το λογισμικό Comsol Multiphysics® Version 5.2 προκύπτουν τα αποτελέσματα. Αρχικά το προφίλ της ταχύτητας του νερού σε όλο τον αντιδραστήρα και στη συνέχεια με την εισαγωγή του ιχνηθέτη εξάγονται τρισδιάστατα σχήματα που δείχνουν τη κατανομή της συγκέντρωσής του σε όλο τον αντιδραστήρα κατά τη πάροδο του πειράματος, κάθε μια ώρα σε κάθε συνδυασμό χρόνο παραμονής με περίοδο εναλλαγής που προσομοιώθηκε.

Για την απεικόνιση της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη εντός του αντιδραστήρα χρησιμοποιούνται χρώματα, με τη μηδενική συγκέντρωση να αντιστοιχεί το βαθύ κυανό και τη μέγιστη συγκέντρωση το ερυθρόχρώμα και οι ενδιάμεσες τιμές να απεικονίζονται από τα χρώματα που βρίσκονται στο φάσμα του ορατού μεταξύ των δύο χρωμάτων όπως φαίνεται και στη παρακάτω εικόνα ( $t=108h$ ,  $HRT=4d$ ,  $T=2d$ ):

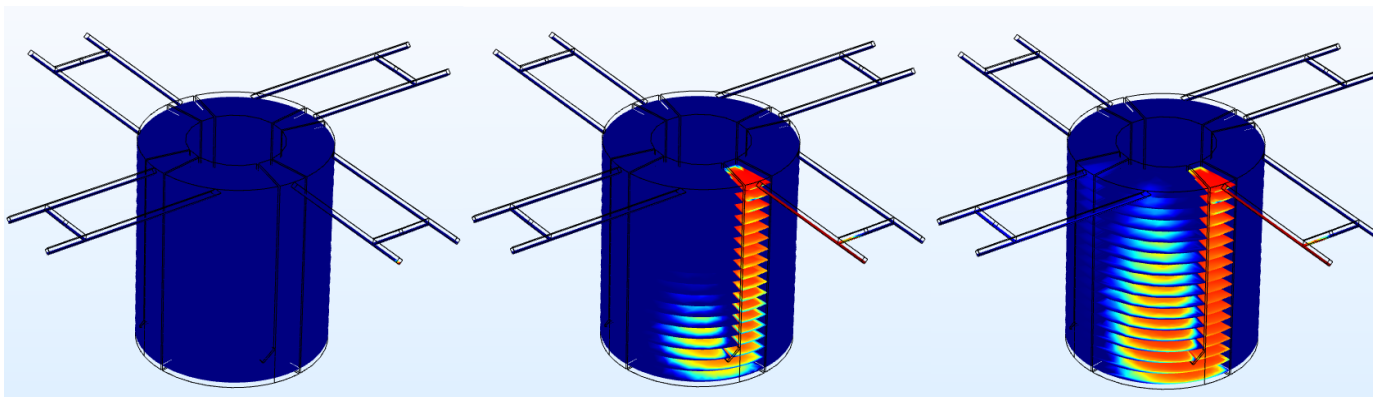


Σχήμα 31: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα για  $HRT=4d$ ,  $T=2d$  και  $t=108h$ .

### Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής 4 ημέρες

Ο πρώτος κύκλος προσομοιώσεων αφορούσε τη διατήρηση του υδραυλικού χρόνου παραμονής στις 4 ημέρες και τη μεταβολή της περιόδου εναλλαγής  $T$ , από 2 ημέρες σε 4 και στη συνέχεια σε 8. Αυτό σημαίνει ότι το κάθε διαμέρισμα δέχτηκε τροφοδοσία για 12, 24 και 48 ώρες αντίστοιχα πριν αλλάξει το σημείο εισροής και εκροής. Ο υδραυλικός χρόνος παραμονής 4 ημερών σημαίνει για τον αντιδραστήρα 80 L ότι τροφοδοτήθηκε με  $2.31e-7 \text{ m}^3/\text{s}$ .

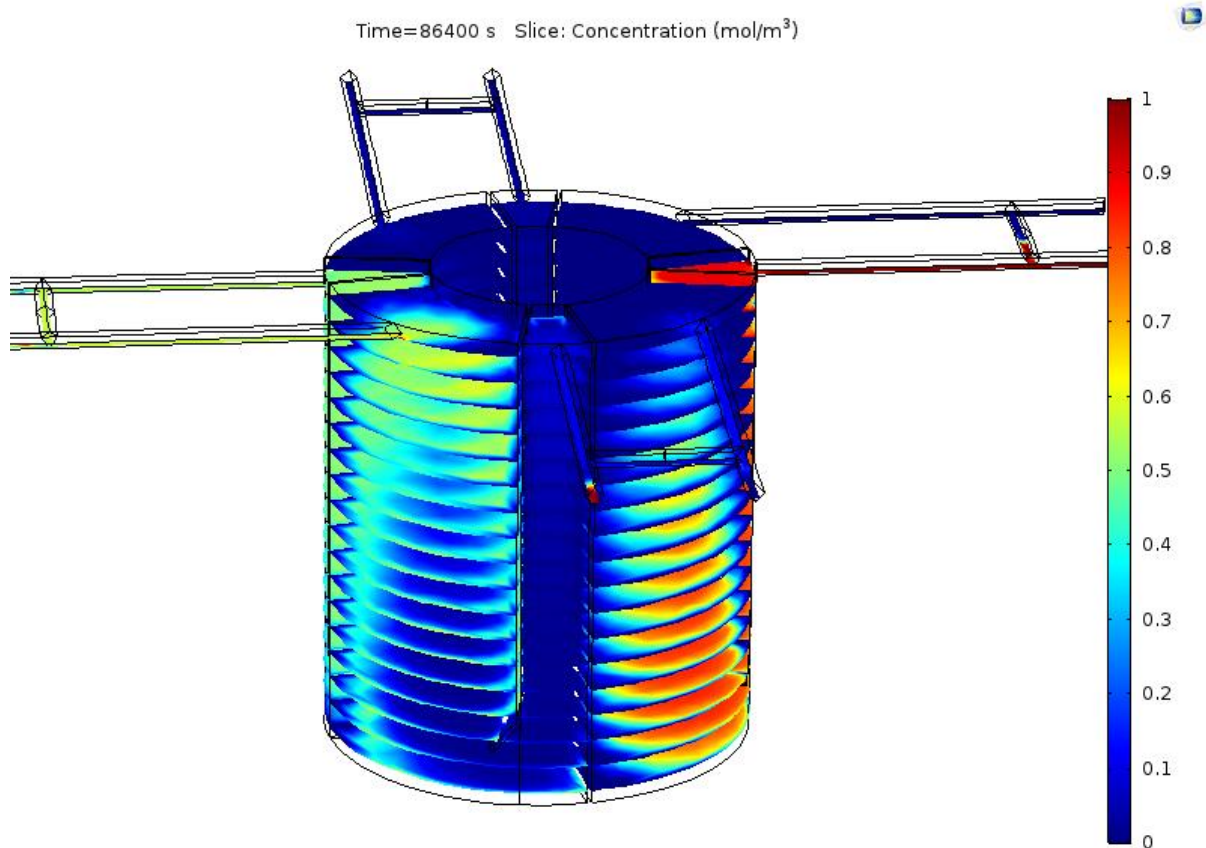
Στη συνέχεια παρατίθενται τα στιγμιότυπα για τις χρονικές στιγμές  $t=0 \text{ h}$ ,  $t=6 \text{ h}$  και  $t=12 \text{ h}$  που παρουσιάζουν την κατανομή του ιχνηθέτη για το πείραμα με  $T=2 \text{ d}$ , δηλαδή το χρόνο που αντιστοιχεί στην τροφοδοσία του πρώτου διαμερίσματος για πρώτη φορά:



Σχήμα 32: Τροφοδοσία Πρώτου Διαμερίσματος για  $HRT=4d$  και  $T=2d$ , τις χρονικές στιγμές  $t=0h$ ,  $t=6h$  και  $t=12h$  αντίστοιχα.

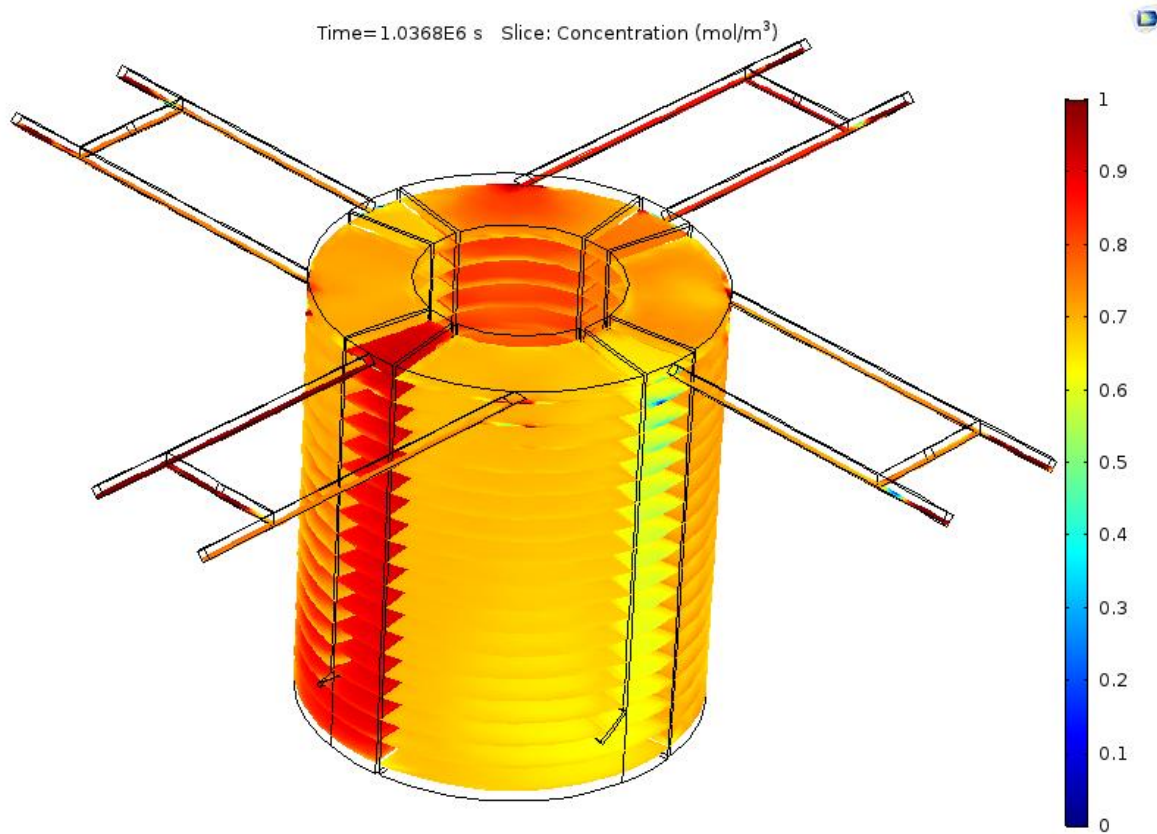
Παρατηρείται ότι η συγκέντρωση του ιχνηθέτη στη σωλήνωση και στο πρώτο τμήμα της καθόδου είναι  $1 \text{ mol} / \text{m}^3$ , ενώ καθώς εισέρχεται στο τμήμα της ανόδου του διαμερίσματος αρχίζει να ελαττώνεται. Παρατηρείται η διάχυση του ιχνηθέτη στις περιοχές που έχουν γαλάζιο χρώμα από τις περιοχές με το πιο κόκκινο, καθώς έχουν μεγαλύτερη συγκέντρωση. Με το πέρας των 12 h μικρές ποσότητες ιχνηθέτη έχουν φτάσει στο ανώτερο μέρος του τμήματος ανόδου,  $C = 0.2 \text{ mol}/\text{m}^3$ . Στη συνέχεια, ακολουθεί η εναλλαγή διαμερισμάτων, παύει να τροφοδοτείται το πρώτο διαμέρισμα και ξεκινά να τροφοδοτείται το τέταρτο, με φορά αντίθετη από αυτή των δεικτών του ρολογιού. Η αρίθμηση των διαμερισμάτων γίνεται σύμφωνα με τη ροή, δεξιόστροφα.

Μετά από 12 h η εικόνα της κατανομής του ιχνηθέτη εντός του αντιδραστήρα έχει μεταβληθεί. Έχει επέλθει αραίωση στην ποσότητα που είχε εισαχθεί από το πρώτο διαμέρισμα, Ο όγκος του νερού από το δεύτερο διαμέρισμα εισέρχεται στο πρώτο και διαχέεται σε αυτό η ποσότητα του ιχνηθέτη που δε μετατοπίστηκε αρκετά γρήγορα καθώς βρέθηκε σε περιοχές με μικρότερη ταχύτητα ή ακόμα και με μηδενική. Με κόκκινο χρώμα στην παρακάτω εικόνα φαίνεται η είσοδος του νερού με τον ιχνηθέτη στο δεύτερο διαμέρισμα που είναι παρόμοια με αυτή της κατανομής του πρώτου διαμερίσματος:



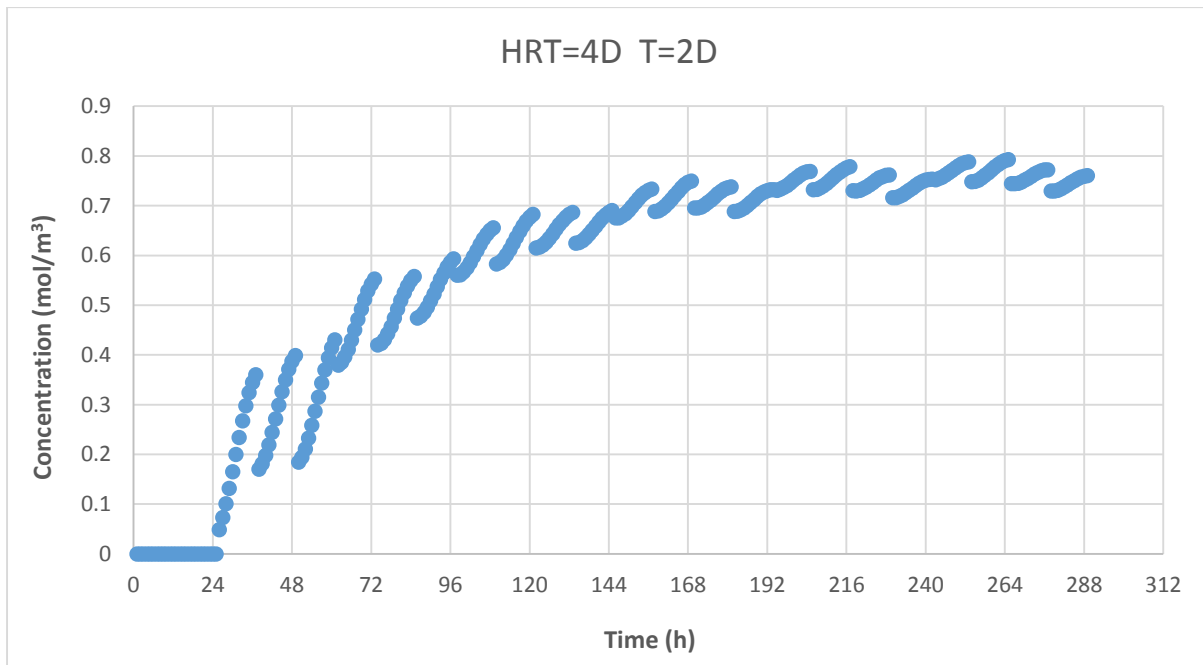
Σχήμα 33: Τελική χρονική στιγμή Τροφοδοσίας Δεύτερου Διαμερίσματος.

Ακολουθούν εναλλαγές διαμερισμάτων ανά 12 h για χρόνο ίσο με 3 υδραυλικούς χρόνους παραμονής, δηλαδή για 12 ημέρες και η τελική εικόνα της κατανομής της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη παρουσιάζεται παρακάτω:



Σχήμα 34: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=4d$  και  $T=2d$ .

Η τροφοδοσία βρίσκεται στο τέταρτο διαμέρισμα, η συγκέντρωση εντός του αντιδραστήρα έχει αυξηθεί όπως φαίνεται στην εικόνα, ο αντιδραστήρας έχει αποκτήσει πορτοκαλί χρώμα, κυρίως, που αντιστοιχεί σε συγκέντρωση μεγαλύτερη από  $0.7 \text{ mol/m}^3$ . Η κατανομή των συγκεντρώσεων της εκάστοτε εκροής του αντιδραστήρα σε όλη τη χρονική διάρκεια της προσομοίωσης παρουσιάζεται στο ακόλουθο διάγραμμα:



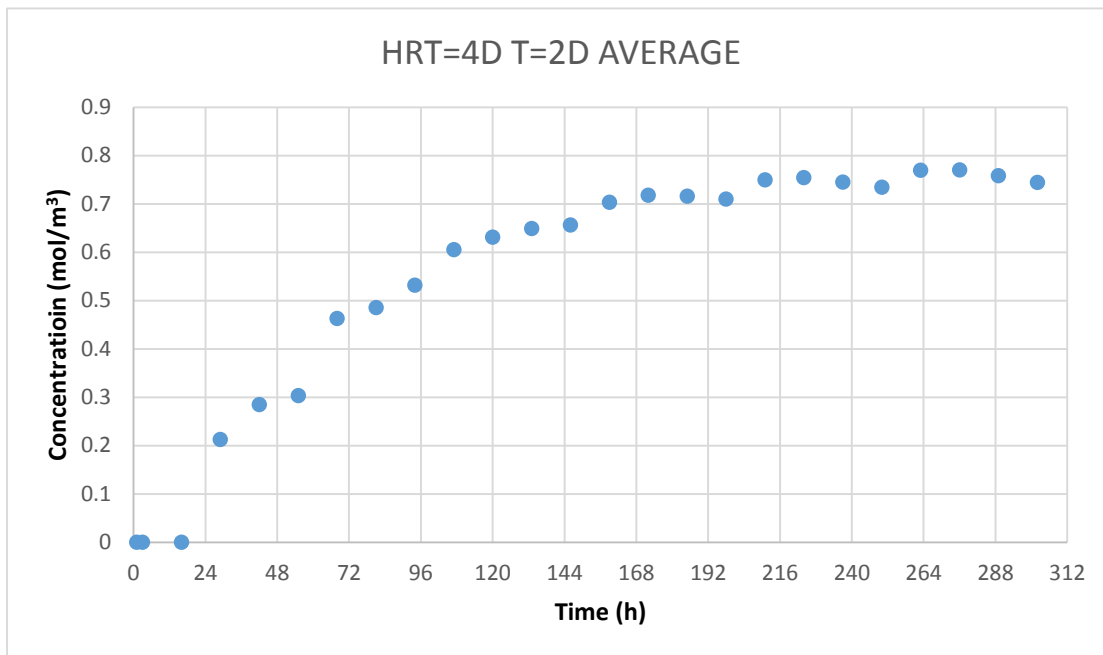
Διάγραμμα 1: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα για  $HRT=4d$  και  $T=2d$ .

Κατά την εκκίνηση παρατηρούνται μηδενικές συγκεντρώσεις για τις πρώτες χρονικές στιγμές καθώς ο ιχνηθέτης δεν έχει μεταφερθεί εως την αντίστοιχη έξοδο στην επιφάνεια της οποίας υπολογίζεται η συγκέντρωσή του. Με την πάροδο του χρόνου και τη μετατόπιση του διαμερίσματος τροφοδοσίας και της εξόδου αρχίζει η καταγραφόμενη συγκέντρωση να αυξάνεται όπως φαίνεται στο διάγραμμα, φτάνοντας σε ένα μέγιστο  $C_{MAX}=0.793 \text{ mol/m}^3$  και στη συνέχεια καταλήγει στα  $0.76 \text{ mol/m}^3$ . Από το διάγραμμα φαίνεται μεγάλη διακύμανση στις τιμές της συγκέντρωσης σε κάθε διαμέρισμα, οι οποία μειώνεται με το πέρασμα του χρόνου καταλήγοντας να είναι παραπλήσια καθώς ο αντιδραστήρας πλησιάζει σε κατάσταση ισορροπίας.

Φαίνεται πως οι συγκεντρώσεις του ιχνηθέτη στην έξοδο προσομοιάζουν απόκριση αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης που έχει υποστεί βηματική επιβολή. Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του ισοδύναμου αριθμού αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά, όπως περιγράφηκε για τα συγκεκριμένα δεδομένα συγκέντρωσης προκύπτει  $N=1$ , άρα το σύστημα όντως συμπεριφέρεται ως ένας αντιδραστήρας C.S.T.R.



Επίσης, υπολογίστηκε η μέση τιμή της συγκέντρωσης για κάθε διαμέρισμα οπότε το Διάγραμμα (1) πήρε νέα μορφή η οποία παραθέτεται παρακάτω:

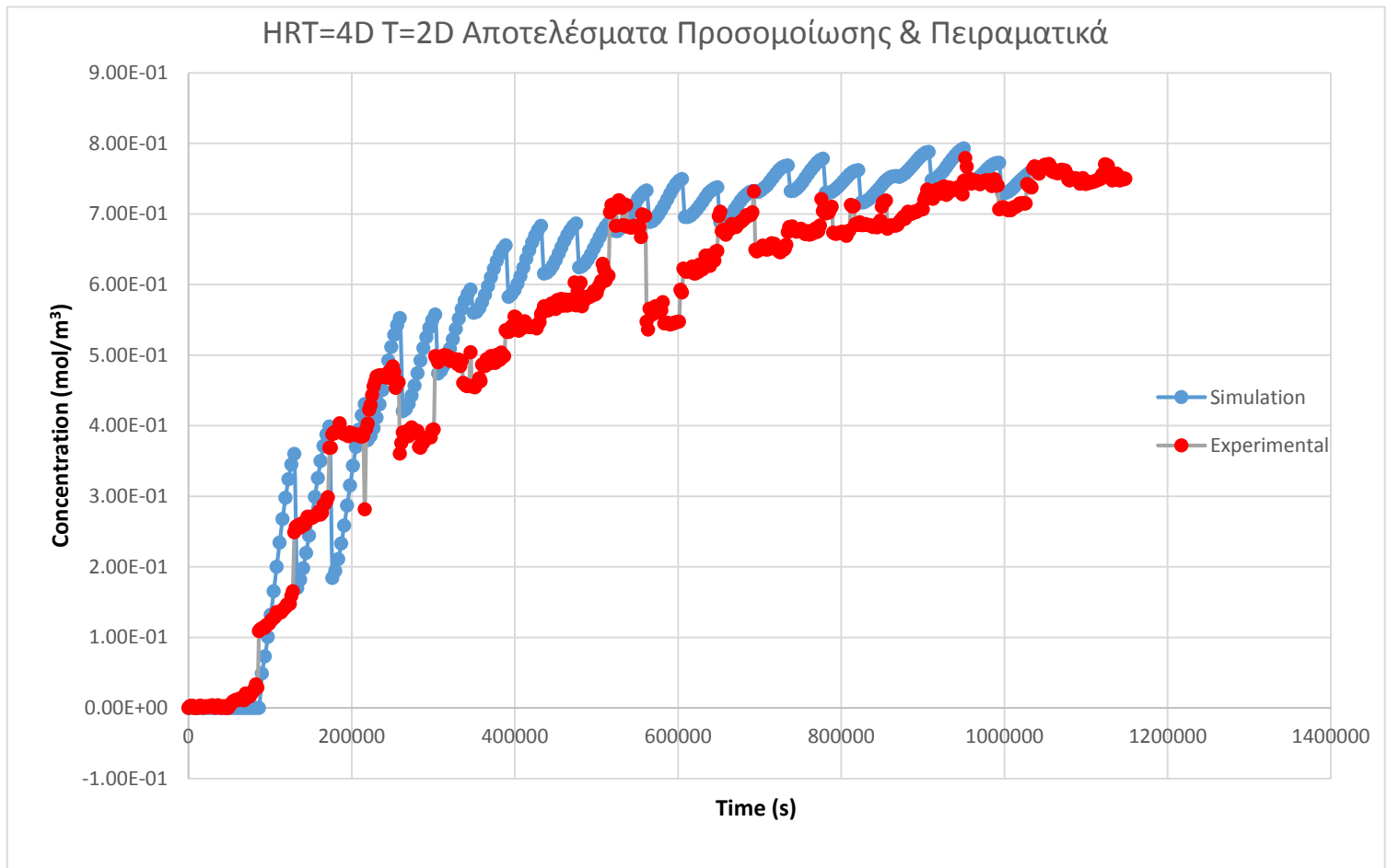


Διάγραμμα 2: Κατανομή Μέσων τιμών Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=4d και T=2d.

Από το νέο διάγραμμα προκύπτει ότι  $C_{MAX}=0.77 \text{ mol/m}^3$  και υπολογίστηκε ο ισοδύναμος αριθμός των C.S.T.R. που επίσης προέκυψε  $N=1$ . Οι μέγιστες συγκεντρώσεις που παρατηρούνται στις δύο περιπτώσεις είναι παραπλήσιες και ο ισοδύναμος αριθμός των αντιδραστήρων είναι ίδιος. Αυτό που διαφοροποιείται είναι το ποσοστό του «νεκρού» όγκου, που με τα αρχικά αποτελέσματα υπολογίστηκε  $V_{DEAD}=45.3\%$  ενώ με τις μέσες τιμές  $V_{DEAD}=37.8\%$ . Με τη χρήση των μέσων τιμών, ομαλοποιείται το διάγραμμα της κατανομής του χρόνου παραμονής, το οποίο πράγματι προσομοιάζει στη συμπεριφορά ενός αντιδραστήρα πλήρους ανάμειξης.

Επίσης, για τις συγκεκριμένες συνθήκες προσομοίωσης, δηλαδή HRT=4d και T=2d πραγματοποιήθηκε πείραμα κατανομής χρόνου παραμονής στον αντιδραστήρα P.A.B.R. όπως παρουσιάστηκε στη διπλωματική εργασία του Γ.Σεϊντή.

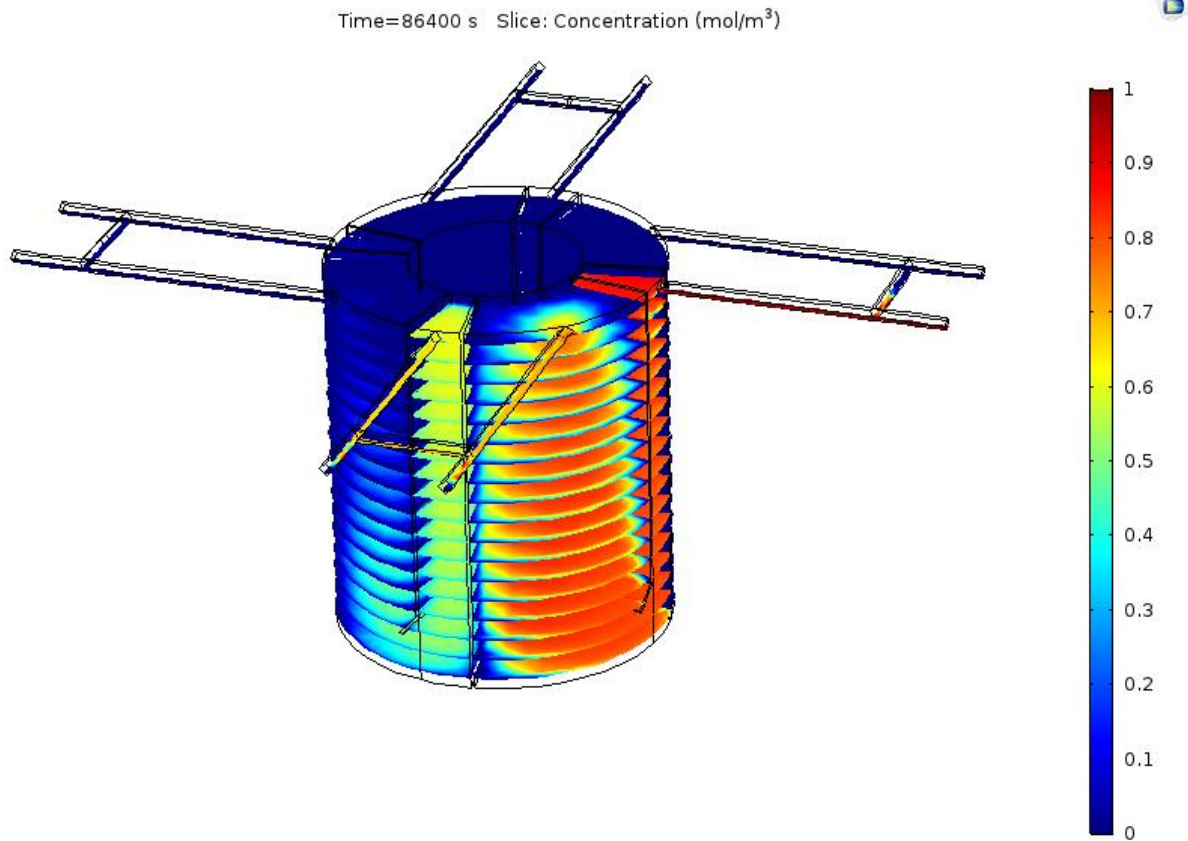
Τα αποτελέσματα της κατανομής της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη που καταγράφηκαν συγκρίνονται στη συνέχεια με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη προσομοίωση, στο διάγραμμα(4):



Διάγραμμα 3: Σύγκριση Πειραματικών Αποτελεσμάτων και Αποτελεσμάτων Προσομοίωσης για HRT=4d και T=2d.

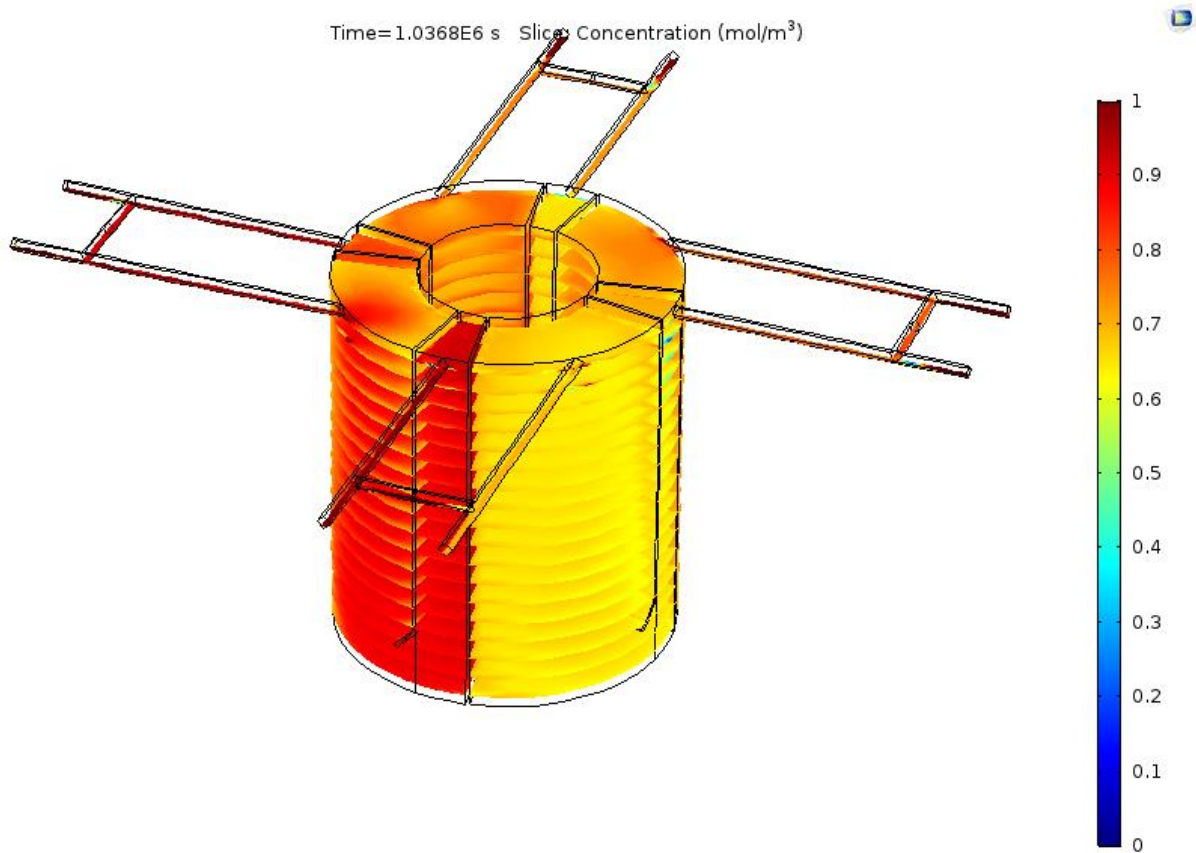
Τα αποτελέσματα των δύο πειραμάτων – με κόκκινο χρώμα αυτά του εργαστηριακού πειράματος – συγκλίνουν σε ικανοποιητικό βαθμό, επικυρώνοντας τα αποτελέσματα της προσομοίωσης. Οι αποκλίσεις που παρατηρούνται είναι σχετικά μικρές και οφείλονται σε πιθανά εργαστηριακά σφάλματα και στο γεγονός ότι η προσομοίωση γίνεται σε ιδανικές συνθήκες χωρίς να επηρεάζεται από τον εξοπλισμό που χρησιμοποιήθηκε για το πείραμα. Επίσης, συμβάλει στη διαφοροποίηση η χρήση πλέγματος χαμηλής ποιότητας.

Το επόμενο πείραμα που προσομοιώθηκε ήταν αυτό με συχνότητα εναλλαγής  $T=4$  d, χρησιμοποιήθηκε η ίδια παροχή αφού δε μεταβλήθηκε ο υδραυλικός χρόνος παραμονής, αυτή τη φορά όμως τα διαμερίσματα εναλλάσσονταν ανά 24 h. Στην παρακάτω εικόνα φαίνεται πως ο ιχνηθέτης έχει ξεπεράσει το διαμέρισμα τροφοδοσίας (πρώτο) και βρίσκεται στο τέταρτο διαμέρισμα, σε αραιή συγκέντρωση:



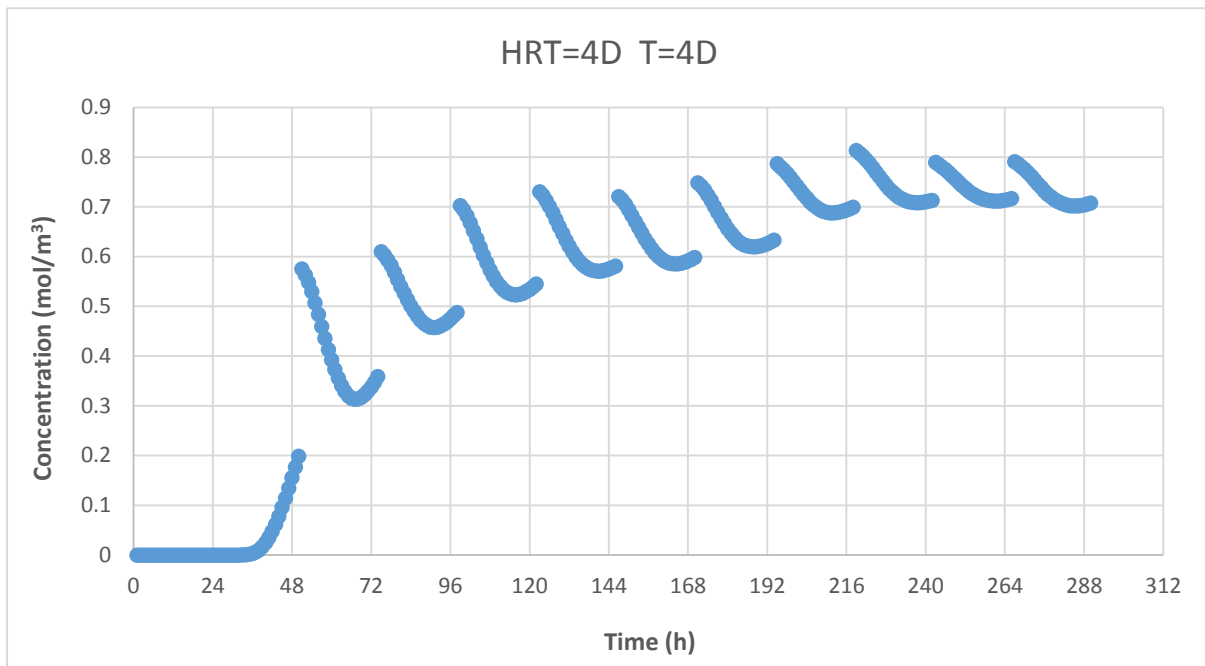
Σχήμα 35: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη, τη χρονική στιγμή  $t=24h$ , για  $HRT=4d$  και  $T=4d$ .

Ο χρόνος της προσομοίωσης ήταν πάλι ο τριπλάσιος του χρόνου παραμονής δηλαδή 12 ημέρες και όπως φαίνεται η τελική κατανομή του ιχνηθέτη στον αντιδραστήρα ήταν παρόμοια με αυτή για  $T=2d$ :



Σχήμα 36: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=4d$  και  $T=4d$ .

Το διάγραμμα της συγκέντρωσης σε σχέση με το χρόνο παρουσιάζεται παρακάτω:

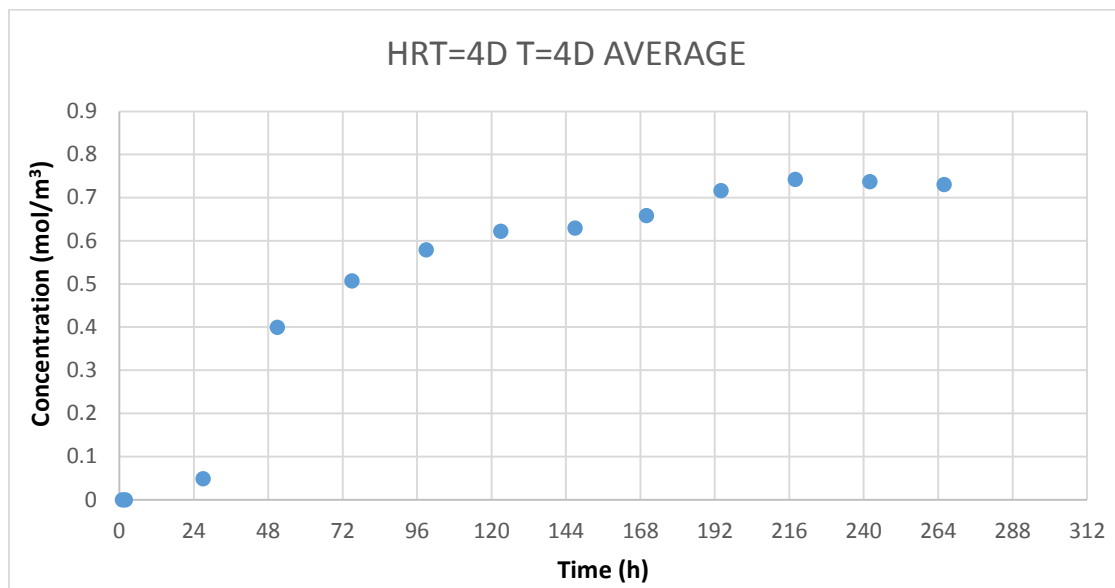


Διάγραμμα 4: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=4d$  και  $T=4d$ .

Αρχικά, η συγκέντρωση είναι μηδενική για μεγαλύτερο χρόνο από την προηγούμενη περίπτωση, στη συνέχεια όμως αυξάνεται και μιμείται την ανταπόκριση αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης. Είναι προφανής η διαφορά στις συγκεντρώσεις που καταγράφονται σε κάθε διαμέρισμα για  $T=4d$  από ότι για  $T=2d$  και οφείλεται στην μεταβολή της συχνότητας εναλλαγής των διαμερισμάτων. Όπως φαίνεται στο διάγραμμα μετά από την αρχική αύξηση της συγκέντρωσης εναλλάσσεται το διαμέρισμα τροφοδοσίας και η έξοδος που υπολογίζεται η συγκέντρωση και μεταβαίνει στην επόμενη έξοδο που βρίσκεται μεγαλύτερη ποσότητα ιχνηθέτη. Σε αυτό οφείλεται το άλμα που παρατηρείται στις τιμές. Αυτό το φαινόμενο επαναλαμβάνεται κάθε φορά που εναλλάσσονται τα διαμερίσματα. Επιπλέον, μετά τη μεγάλη συγκέντρωση που καταγράφεται ακολουθεί ποσότητα νερού που περιέχει χαμηλότερη συγκέντρωση ιχνηθέτη, έως ένα ελάχιστο το οποίο ακολουθείται από αύξηση της συγκέντρωσης. Παρά την αυξομείωση που παρουσιάζουν τα αποτελέσματα της συγκέντρωσης κάθε διαμερίσματος, τείνουν με τη συμπλήρωση των τριών χρόνων παραμονής να μειωθούν οι διακυμάνσεις αυτές όσο αυξάνεται η συγκέντρωση του ιχνηθέτη σε κάθε διαμέρισμα.

Σε αυτή την περίπτωση η μέγιστη συγκέντρωση του ιχνηθέτη είναι  $C_{MAX}=0.81 \text{ mol/m}^3$  και ο ισοδύναμος αριθμός των C.S.T.R. είναι  $N=2$ . Ο νεκρός όγκος που υπολογίστηκε ισοδυναμεί με το 38.2%.

Με τον υπολογισμό των μέσων τιμών της συγκέντρωσης για κάθε διαμέρισμα προκύπτει το ακόλουθο διάγραμμα:



Διάγραμμα 5: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=4d και T=4d.

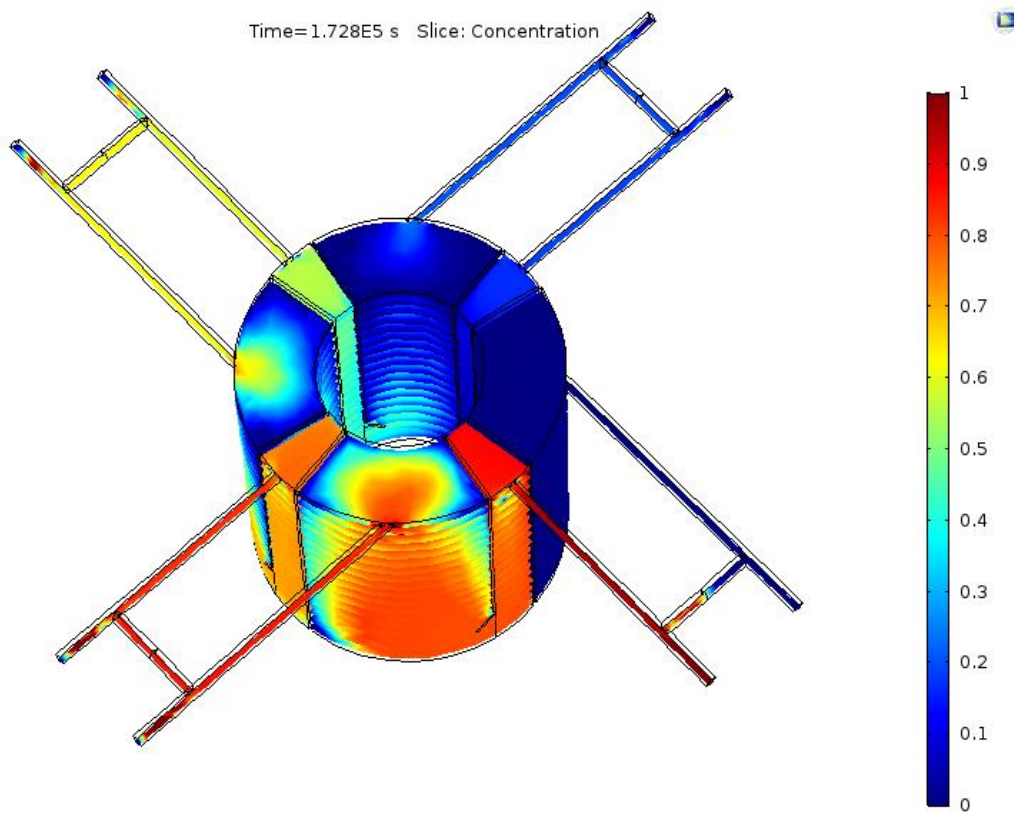
Η απόκριση του αντιδραστήρα φαίνεται ευκρινέστερα σε αυτό το διάγραμμα ότι προσομοιάζει με απόκριση C.S.T.R. και με την απόκριση για T=2 d,. Η μέγιστη συγκέντρωση σε αυτή την περίπτωση είναι 0.74 mol/m<sup>3</sup>, ο ισοδύναμος αριθμός C.S.T.R. στη σειρά είναι N=2 και ο νεκρός όγκος ισοδυναμεί με το 35.6% του συνολικού.

Στη συγκεκριμένη περίπτωση ο προσδιορισμός των μέσων τιμών της συγκέντρωσης για κάθε διαμέρισμα λειτουργεί βοηθητικά στην εξακρίβωση του ισοδύναμου αριθμού C.S.T.R. στη σειρά, καθώς προέκυπτε ισοδύναμος αριθμός CSTR ανάμεσα στις τιμές 1 και 2.

Οι νεκροί όγκοι και στις δύο περιπτώσεις είναι παραπλήσιοι.

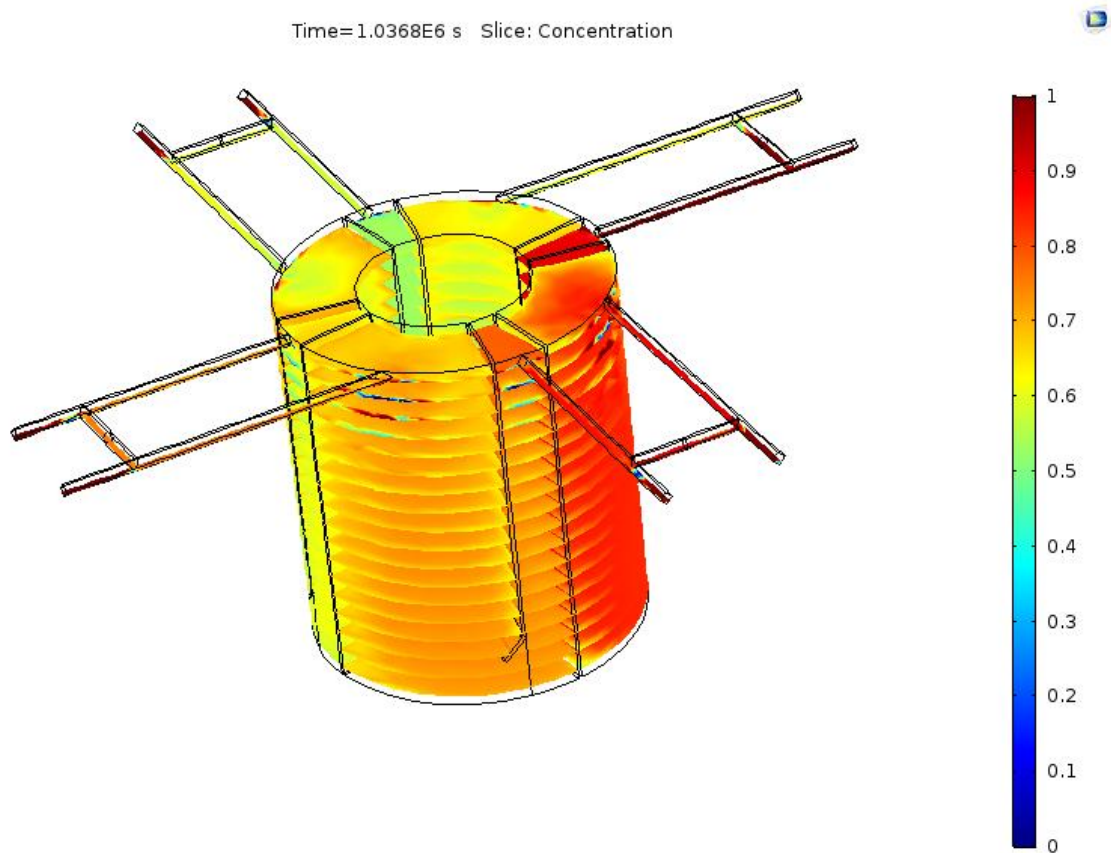
Το τελευταίο πείραμα προσομοίωσης που πραγματοποιήθηκε για υδραυλικό χρόνο παραμονής HRT=4 d και συχνότητα εναλλαγής T=8 d. Όπως, γίνεται αντιληπτό σε χρόνο ίσο με τρεις χρόνους παραμονής, 12 d, θα έχει γίνει ένας πλήρης κύκλος των διαμερισμάτων του αντιδραστήρα και άλλος ένας κατά το ήμισυ.

Παρακάτω παρουσιάζεται το στιγμιότυπο της κατανομής της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη για  $t=48h$ :



Σχήμα 37: Κατανομή Συγκεντρώσεων Ιχνηθέτη, τη χρονική στιγμή  $t=48h$ , για  $HRT=4d$  και  $T=8d$ .

Η εικόνα που ακολουθεί είναι η εικόνα με το πέρας των τριών χρόνων παραμονής:

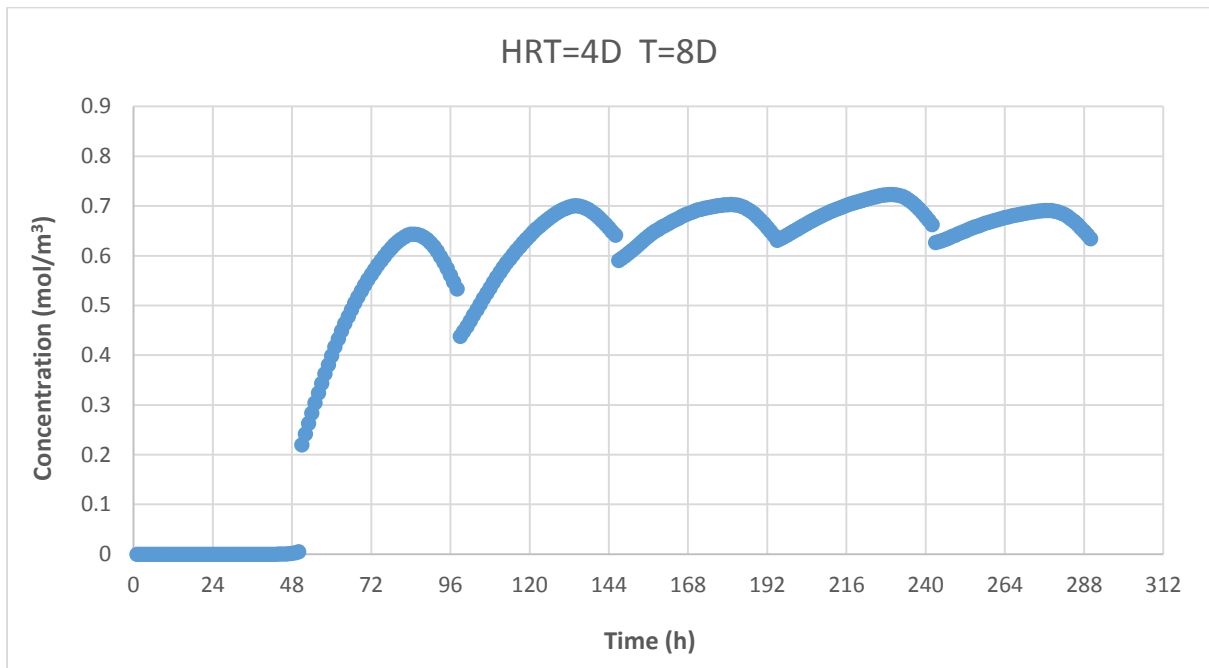


Σχήμα 38: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=4d$  και  $T=8d$ .

Φαίνεται πως παρά τη τροφοδότηση με ιχνηθέτη και την εναλλαγή ανά μεγάλα χρονικά διαστήματα, ένα μέρος του όγκου έχει σημαντικά μικρότερη συγκέντρωση από τον υπόλοιπο αντιδραστήρα(πράσινο γαλάζιο χρώμα).

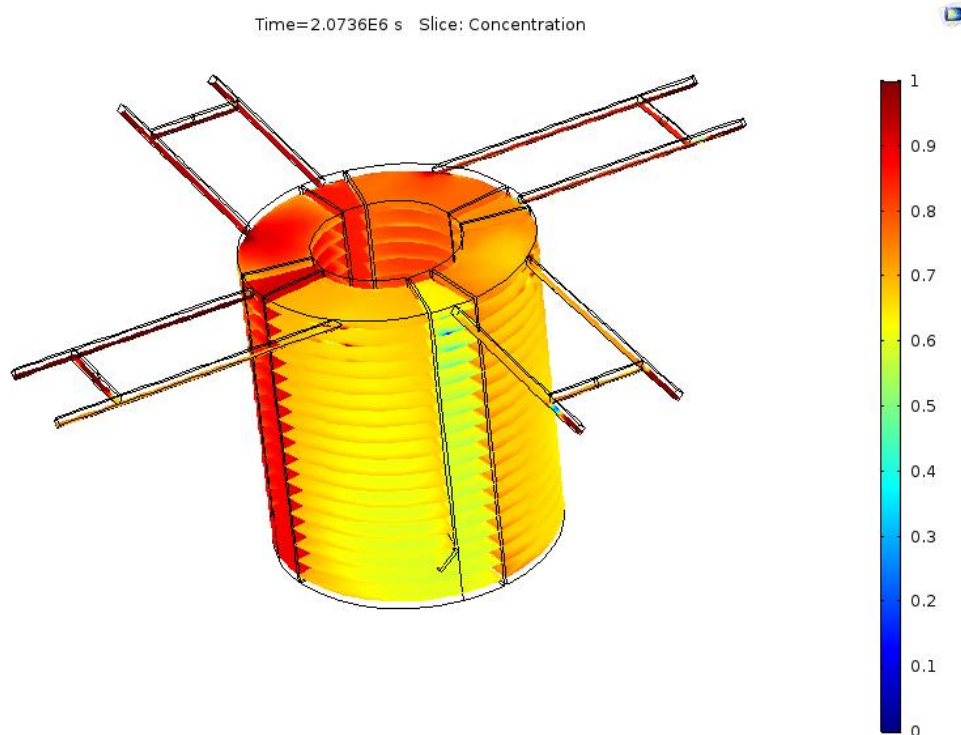


Το διάγραμμα για τρεις χρόνους παραμονής, δηλαδή για 12 ημέρες είναι το ακόλουθο:

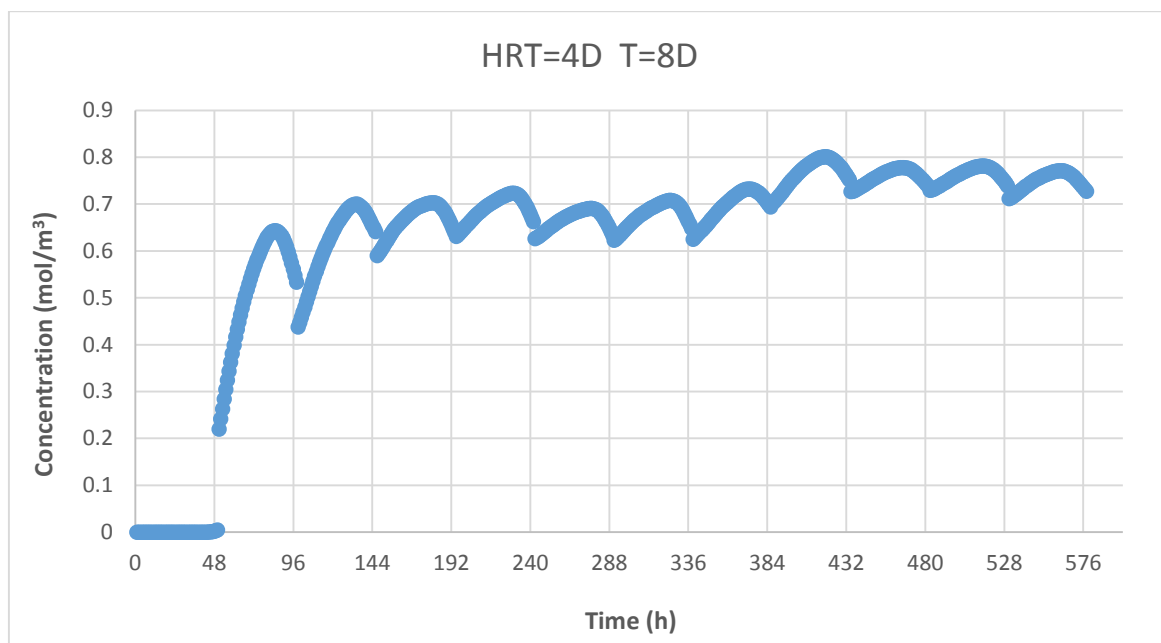


Διάγραμμα 6: Κατανομή Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=4d$  και  $T=8d, t=12d$

Εν συνεχεία επιχειρήθηκε η συνέχεια της προσομοίωσης για άλλους τρεις χρόνους παραμονής με σκοπό να παρατηρηθούν οι αλλαγές, αρχικά στην κατανομή των συγκεντρώσεων στο εσωτερικό του αντιδραστήρα και αφετέρου στο διάγραμμα συγκεντρώσεων(7) όπως φαίνεται έχει αυξηθεί η συγκέντρωση του ιχνηθέτη σε όλο τον αντιδραστήρα, κάτι που γίνεται αντιληπτό από τα χρώματα που επικρατούν:



Σχήμα 39: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας έξι χρόνων παραμονής για  $HRT=4d$  και  $T=8d$ .



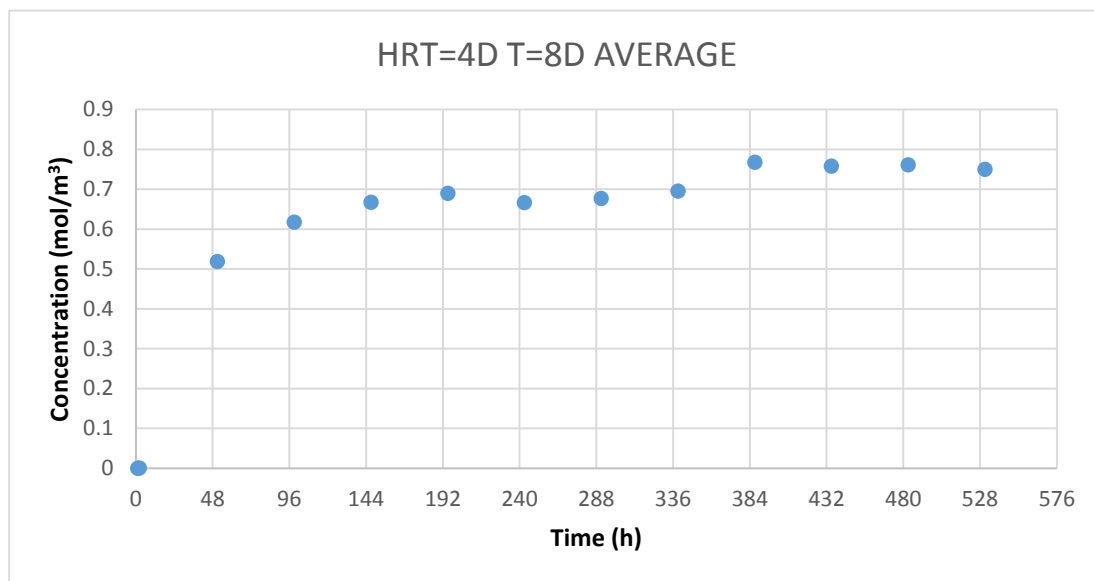
Διάγραμμα 7: Κατανομή Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=4d$  και  $T=8d$ ,  $t=24d$

Στο διάγραμμα (7) φαίνεται ότι σταθεροποιείται η τιμή της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη αρχικά, σε μια τιμή γύρω από το  $0.7 \text{ mol/m}^3$ , ύστερα από αυξομειώσεις, προσεγγίζει την τιμή  $0.75 \text{ mol/m}^3$ . Έτσι αποδुकνύεται ότι υπήρχε ένα κομμάτι ρευστού εντός του αντιδραστήρα το οποίο υποβοηθούσε στην αραίωση του νερού και μέσω διάχυσης μείωνε τη συγκέντρωση

που υπολογιζόταν στην εκάστοτε έξοδο. Ύστερα από 6 χρόνους παραμονής φαίνεται ότι επιτυγχάνεται νέα ισορροπία σε υψηλότερη τιμή ιχνηθέτη εντός του αντιδραστήρα η οποία βρίσκεται σε παρόμοιο επίπεδο με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις δύο προαναφερθείσες προσμοιώσεις για τον ίδιο χρόνο παραμονής.

Εφαρμόζοντας το μοντέλο του αριθμού αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά, προκύπτει ότι  $N=2$  και ο «νεκρός» όγκος είναι ίσος με 43.2%.

Υπολογίστηκαν οι μέσες τιμές και δημιουργήθηκε το αντίστοιχο διάγραμμα συγκέντρωσης – χρόνου:



Διάγραμμα 8: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=8d$  και  $T=8d$

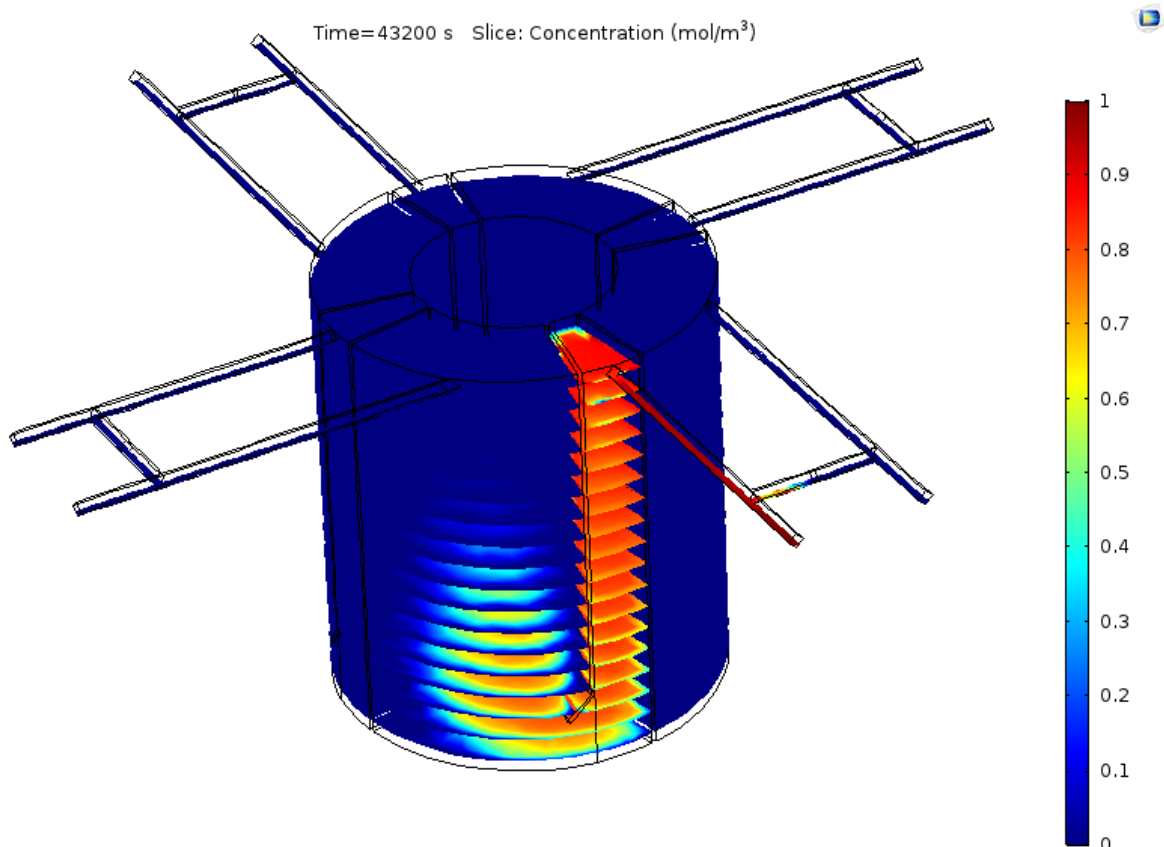
Από τις μέσες τιμές που προκύπτουν, η μέγιστη συγκέντρωση που επιτυγχάνεται είναι  $0.77 \text{ mol/m}^3$ , ο ισοδύναμος αριθμός C.S.T.R. στη σειρά είναι 1-2, ενώ ο «νεκρός» όγκος είναι 41%.

Και οι δύο αποκρίσεις προσομοιώνουν αυτήν της πλήρους ανάμιξης, ενώ η διαφορά που παρατηρείται στη μέγιστη συγκέντρωση οφείλεται στην περαιτέρω αύξηση της συχνότητας εναλλαγής, μειώνοντας τον αριθμό των διαμερισμάτων και επομένως αυξάνοντας τον παρονομαστή για τον υπολογισμό της μέσης συγκέντρωσης στα υπόλοιπα διαμερίσματα. Οι «νεκροί» όγκοι και στις δύο περιπτώσεις είναι παραπλήσιοι, ενώ από τη μέθοδο υπολογισμού ισοδύναμου αριθμού αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά προκύπτει ότι  $N=2$ .

## Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής 6 ημέρες

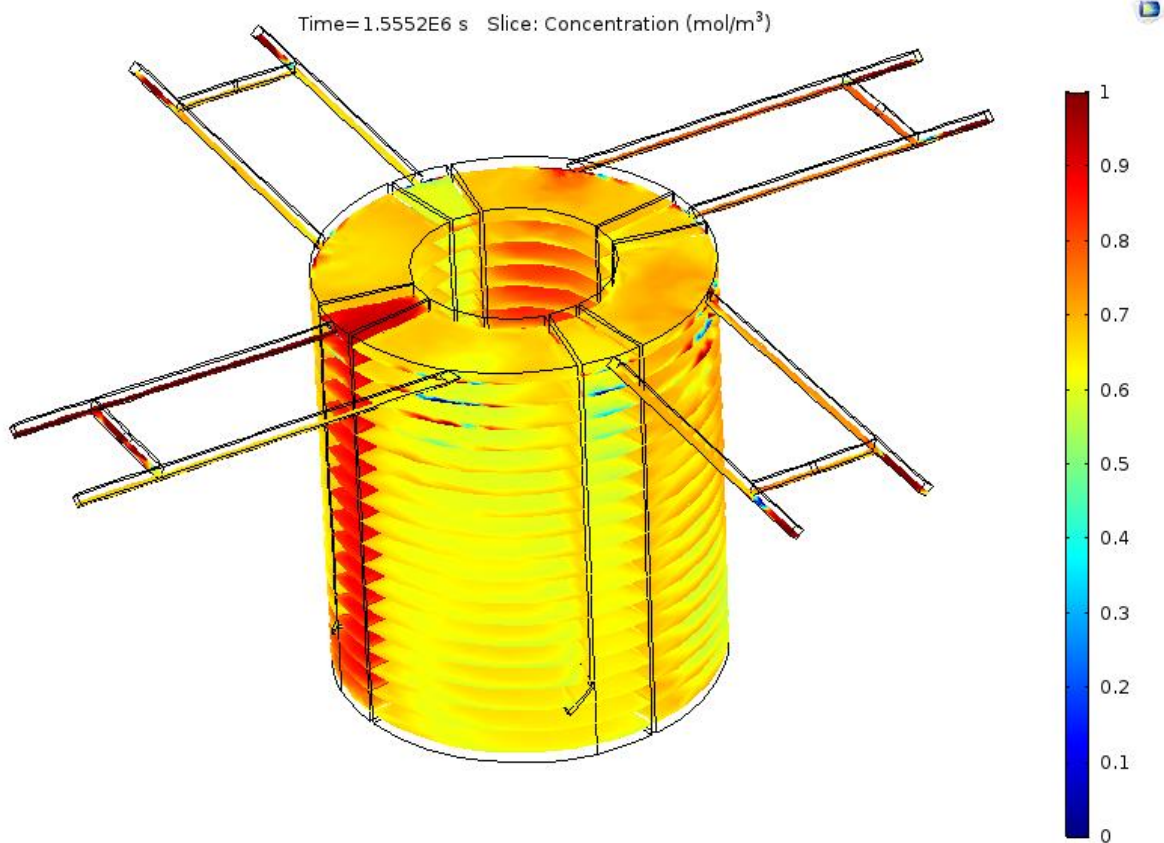
Ο δεύτερος κύκλος προσομοιώσεων έγινε με υδραυλικό χρόνο παραμονής 6 ημέρες και μεταβάλλοντας τη συχνότητα εναλλαγής από 2, 4, 30, 60 και 72 ημέρες, δηλαδή με τροφοδότηση των διαμερισμάτων για 12, 24, 180, 360, 432 ώρες με υδατικό διάλυμα παρουσία ιχνηθέτη αντίστοιχα. Η τροφοδοσία ρυθμίζεται στα  $1.5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$ , επειδή επιθυμείται υδραυλικός χρόνος παραμονής 6 ημερών σε αντιδραστήρα 80 λίτρων.

Επλύθηκε το πρόβλημα πρώτα για  $T=2\text{d}$ . Με την αλλαγή του υδραυλικού χρόνου παραμονής αυξήθηκε και ο συνολικός χρόνος επίλυσης που είναι ίσος με τρεις χρόνους παραμονής. Για χρόνο 18 ημερών υπολογίζεται η κατανομή του ιχνηθέτη εντός του δοχείου. Αρχικά εξάγεται η παρακάτω εικόνα από το λογισμικό προσομοίωσης, για  $t=12\text{h}$  που δείχνει εως ποιο σημείο έχει διαχυθεί ο ιχνηθέτης με τις νέες συνθήκες:



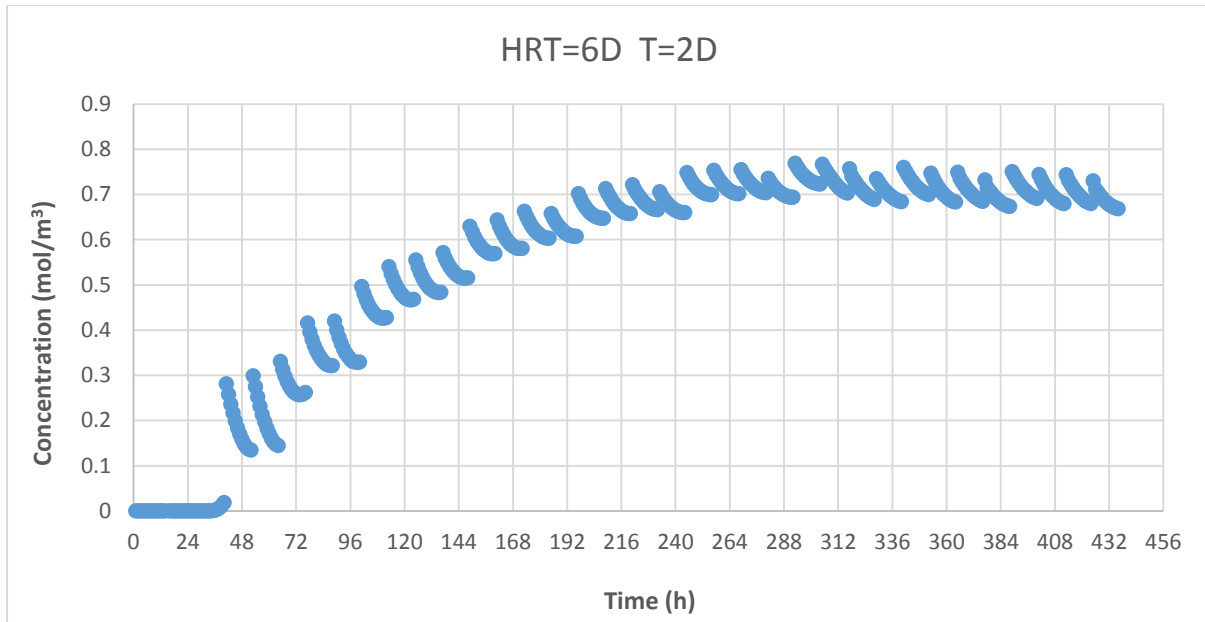
Σχήμα 40: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=12\text{h}$ , για  $HRT=6\text{d}$  και  $T=2\text{d}$ .

Φαίνεται πως ο ιχνηθέτης έχει αραιωθεί και δεν έχει εισχωρήσει στο τμήμα ανόδου του πρώτου διαμερίσματος πέρα από τη μέση του, κάτι που οφείλεται στην αύξηση του υδραυλικού χρόνου παραμονής και στην μείωση της ταχύτητας μέσω αυτής της αλλαγής. Στη συνέχεια απεικονίζεται ο αντιδραστήρας μετά το τέλος της προσομοίωσης:



Σχήμα 41: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=6d$  και  $T=2d$ .

Είναι προφανές ότι ο ιχνηθέτης βρίσκεται σε κάθε σημείο του αντιδραστήρα σε συγκέντρωση μεταξύ  $0.6 - 0.7 \text{ mol/m}^3$ , για καλύτερη κατανόηση της λύσης εξάγονται οι τιμές της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη που υπολογίστηκαν και διαμορφώνεται διάγραμμα συγκέντρωση – χρόνου:

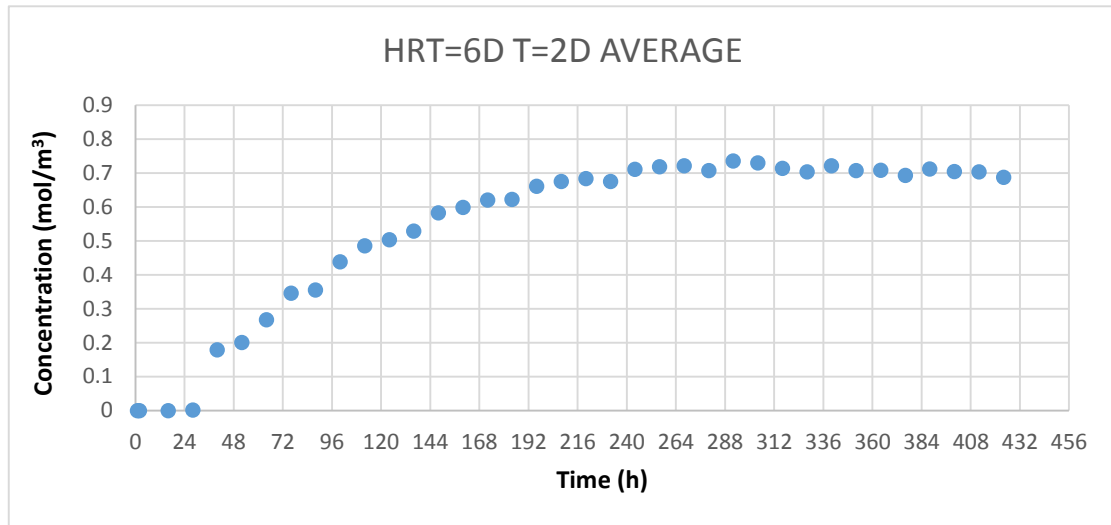


Διάγραμμα 9: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=6d$  και  $T=2d$ .

Ο τρόπος απόκρισης μοιάζει αρκετά με αυτούς που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις για  $HRT=4 \text{ d}$  και  $T=2, 4, 8 \text{ d}$ .

Η μέγιστη συγκέντρωση που παρατηρείται είναι  $0.77 \text{ mol/m}^3$ , ο ισοδύναμος αριθμός αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά είναι  $N=1$  και ο «νεκρός» όγκος υπολογίζεται στο 40%.

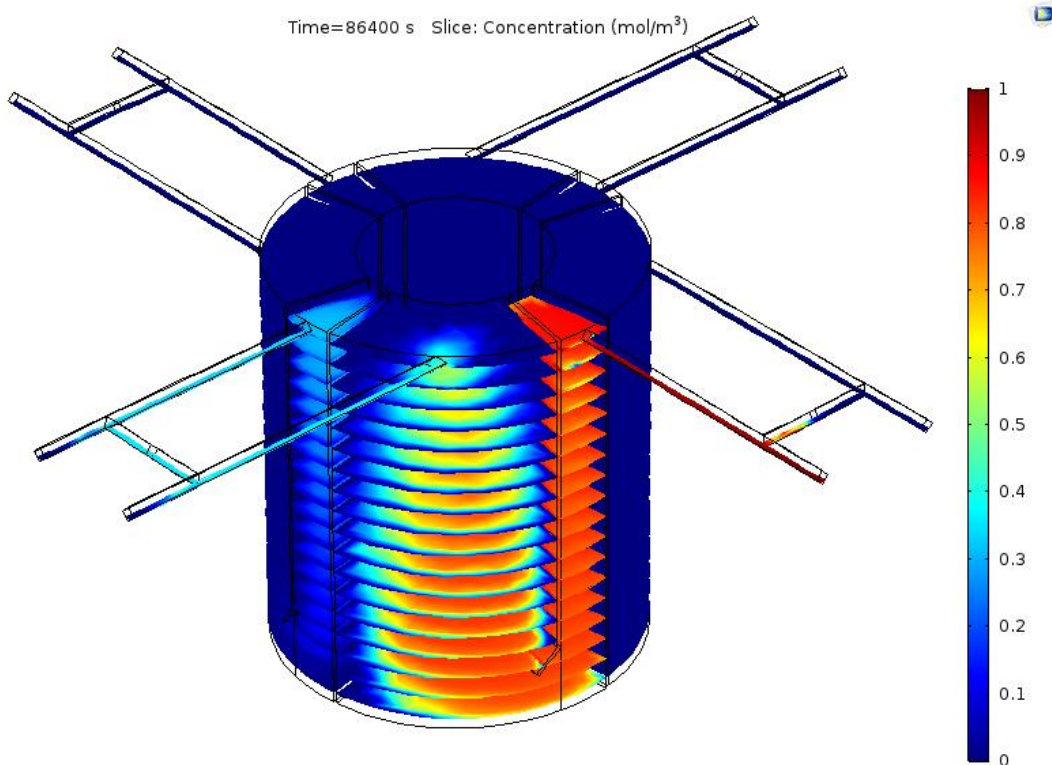
Στη συνέχεια υπολογίστηκε η μέση τιμή της συγκέντρωσης σε κάθε «πέρασμα» από κάθε διαμέρισμα και προκύπτει το ακόλουθο διάγραμμα:



Διάγραμμα 10: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=6d και T=2d

Από τις τιμές που προκύπτουν, η μέγιστη συγκέντρωση που καταγράφεται είναι  $0.74 \text{ mol/m}^3$ , ο ισοδύναμος αριθμός C.S.T.R. ίσος με 1 και ο «νεκρός» όγκος υπολογίζεται στο 39.2%. Στη συγκεκριμένη προσομοίωση από την επεξεργασία των αποτελεσμάτων προκύπτουν παραπλήσια αποτελέσματα. Το μοντέλο του αντιδραστήρα όταν λειτουργεί υπό αυτές τις συνθήκες συμπεριφέρεται ως ένας αντιδραστήρας πλήρους ανάμιξης.

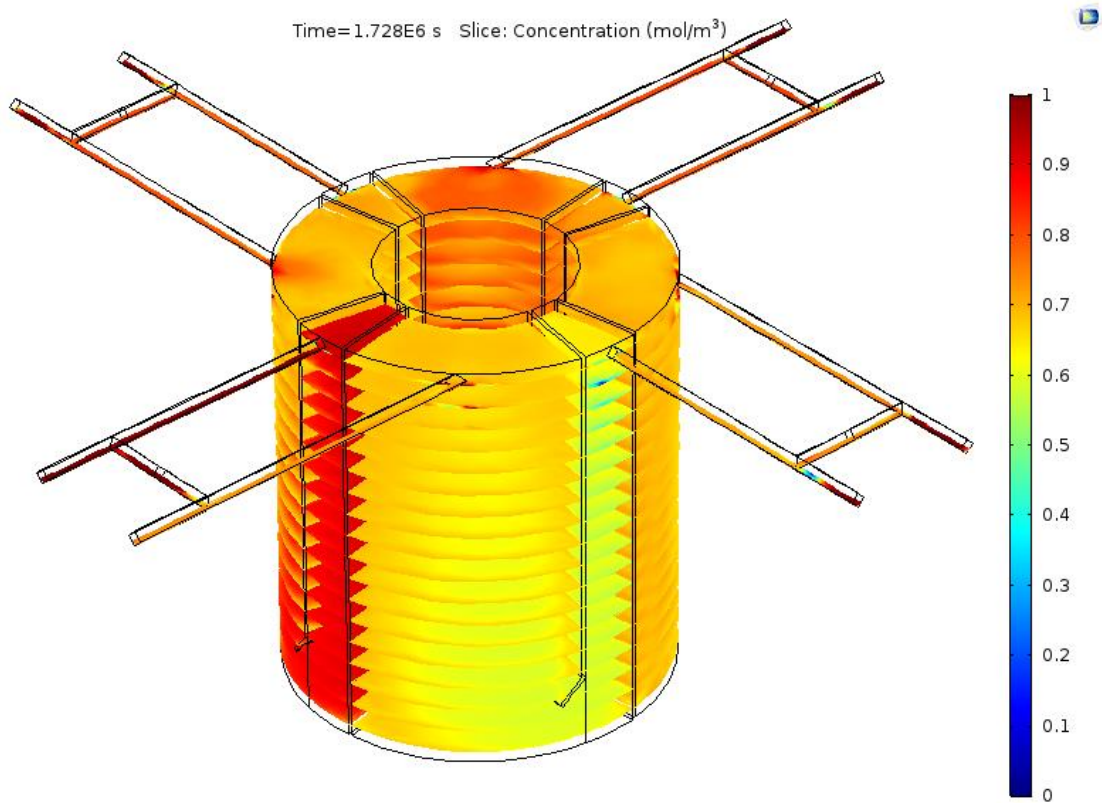
Μεταβλήθηκε ο χρόνος εναλλαγής διαμερίσματος από 12 h σε 24 h για την επόμενη επίλυση του μοντέλου. Επιπλέον, επειδή για χρόνο παραμονής 6 ημερών και συχνότητα εναλλαγής 4 ημερών, στους τρεις χρόνους παραμονής η τροφοδοσία βρίσκεται σε ενδιάμεσο διαμέρισμα και όχι στο τελευταίο, η συγκεκριμένη προσομοίωση επεκτάθηκε για να κλείσει ο κύκλος των διαμερισμάτων του αντιδραστήρα. Παρακάτω παρουσιάζεται η κατανομή της συγκέντρωσης στο εσωτερικό του αντιδραστήρα μετά το περάς της τροφοδότησης του διαμερίσματος 1 για πρώτη φορά:



Σχήμα 42: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=24h$ , για  $HRT=6d$  και  $T=4d$ .



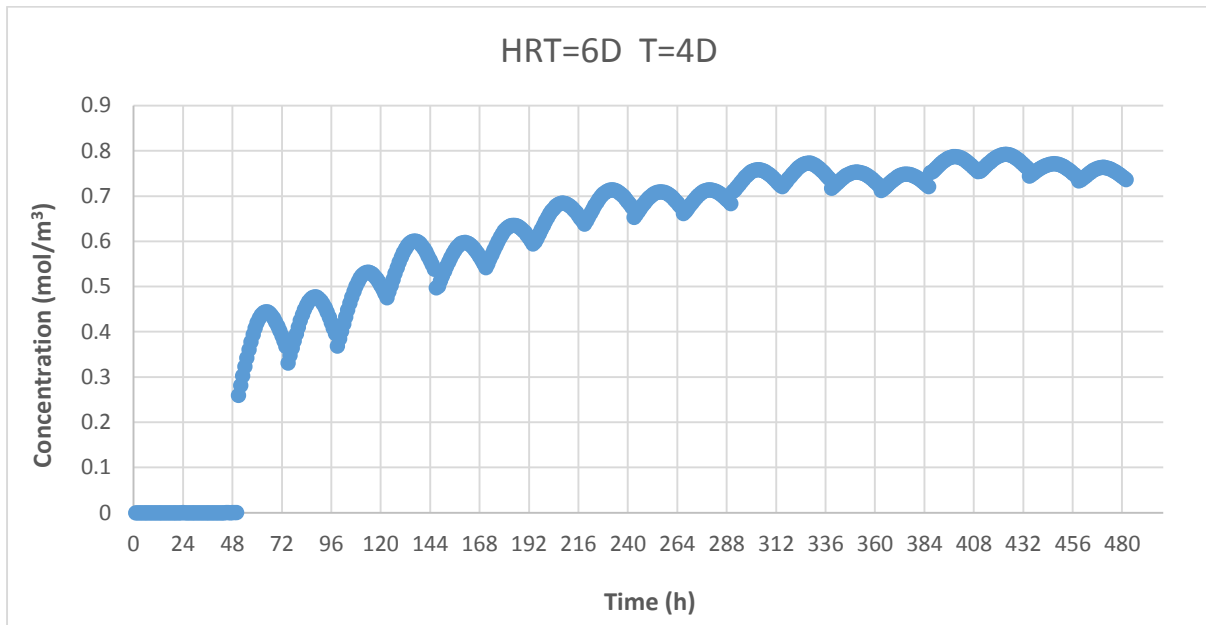
Ακολουθεί η εικόνα κατανομής του ιχνηθέτη τη τελευταία χρονική στιγμή του πειράματος προσομοίωσης:



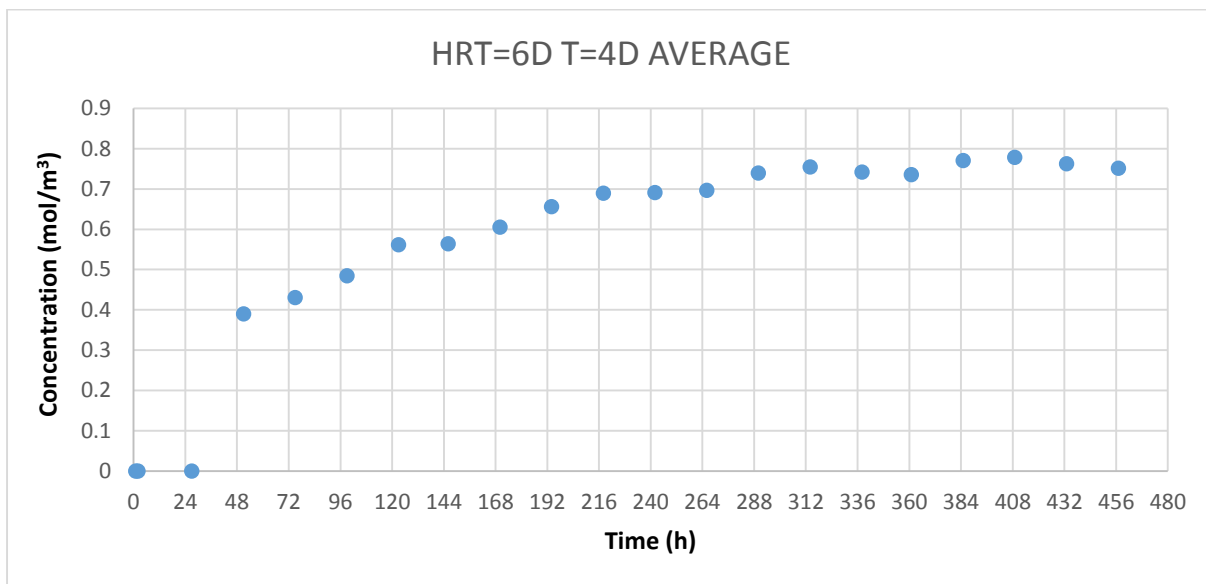
Σχήμα 43: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=6d$  και  $T=4d$ .

Επίσης, δημιουργήθηκε και το διάγραμμα συγκέντρωσης – χρόνου και βρέθηκε η μέγιστη συγκέντρωση να είναι  $0.79 \text{ mol/m}^3$ , υπολογίστηκαν ο ισοδύναμος αριθμός C.S.T.R. και ο «νεκρός» όγκος ίσοι με 1 και 40.5% αντίστοιχα.

Για καλύτερη μελέτη των αποτελεσμάτων εξήχθησαν οι μέσες τιμές της συγκέντρωσης σε κάθε διαμέρισμα και σχηματίστηκε το παρακάτω διάγραμμα:



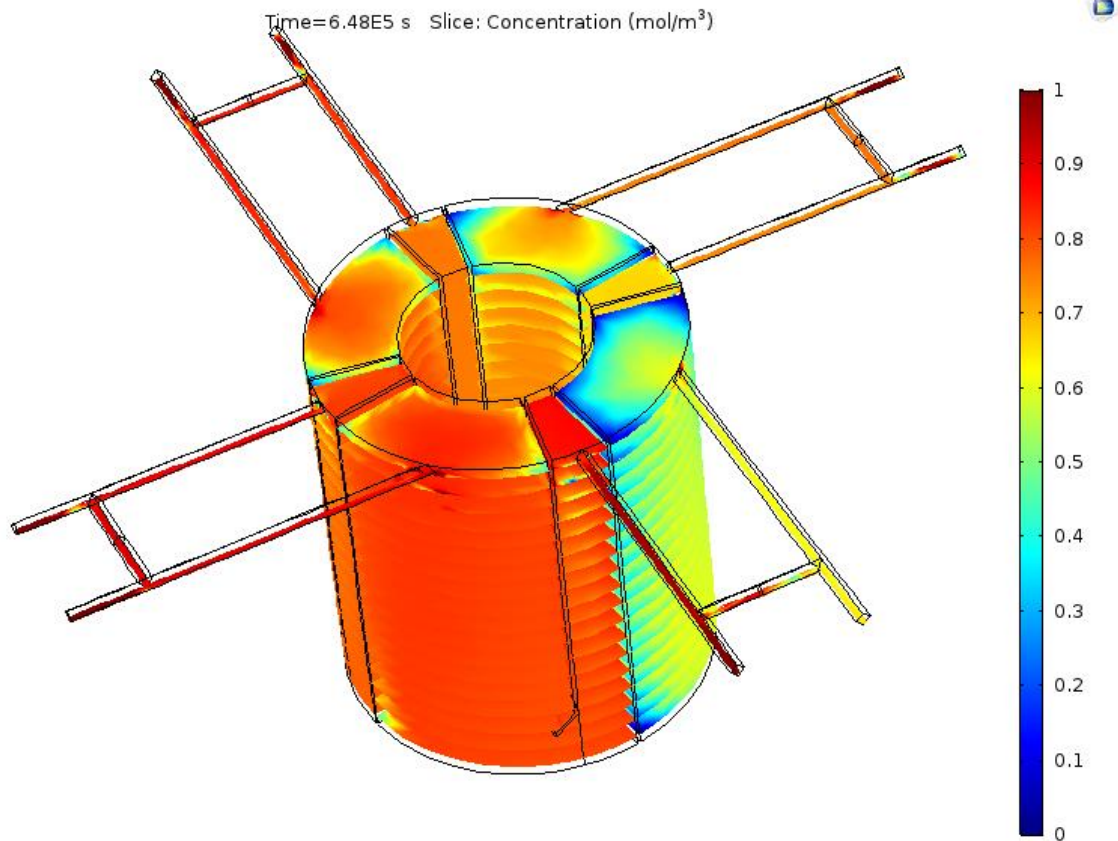
Διάγραμμα 11: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=6d και T=4d.



Διάγραμμα 12: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=6d και T=4d

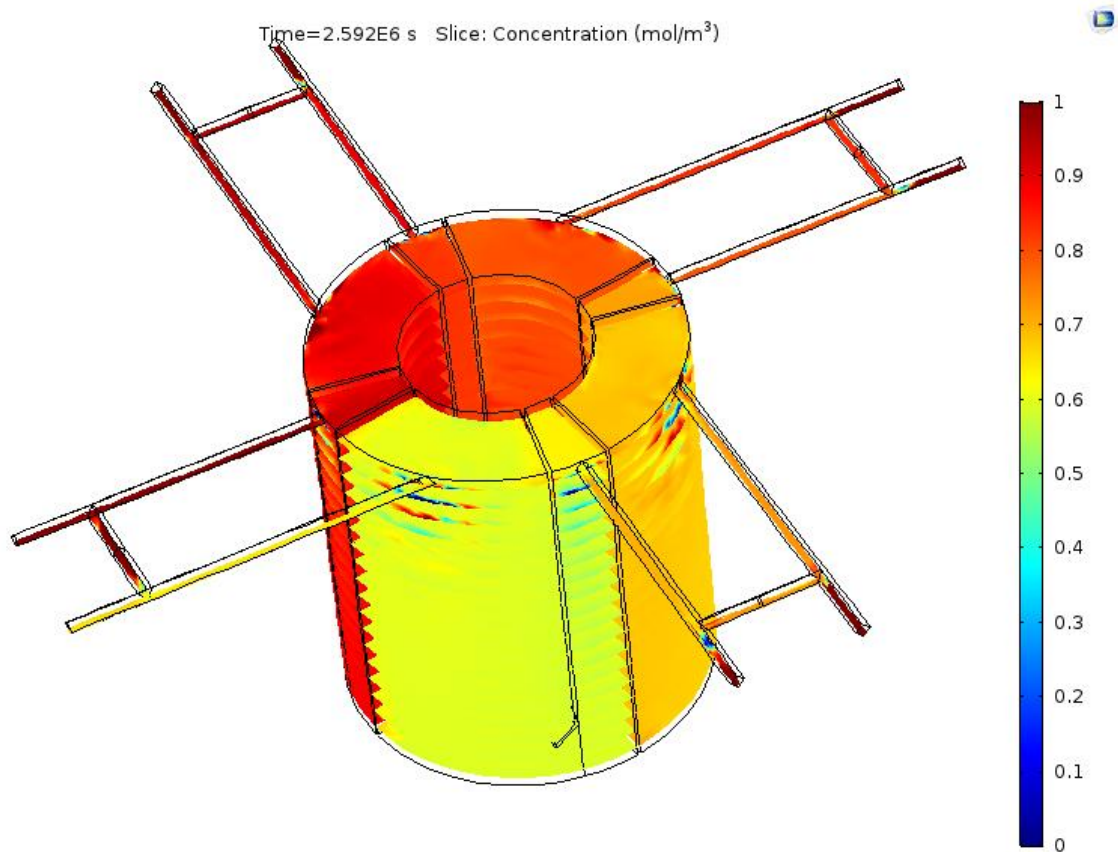
Βρέθηκε  $C_{MAX}=0.78 \text{ mol/m}^3$  και στη συνέχεια υπολογίστηκαν  $N_{C.S.T.R.}=1$ ,  $V_{DEAD}=39.2\%$ .

Τα υπόλοιπα υπολογιστικά πειράματα που έγιναν για υδραυλικό χρόνο παραμονής 6 ημερών είχαν μεγαλύτερη περίοδο εναλλαγής. Αρχικά, ένας κύκλος διαμερισμάτων του αντιδραστήρα γίνεται σε 30 ημέρες. Από τη τροφοδοσία στο πρώτο διαμέρισμα φαίνεται η διάχυση του ιχνηθέτη στο μεγαλύτερο μέρος του αντιδραστήρα και λίγες περιοχές όπου υπάρχει μηδενική ποσότητα ιχνηθέτη, κυρίως στις γωνίες του διαμερίσματος εξόδου:



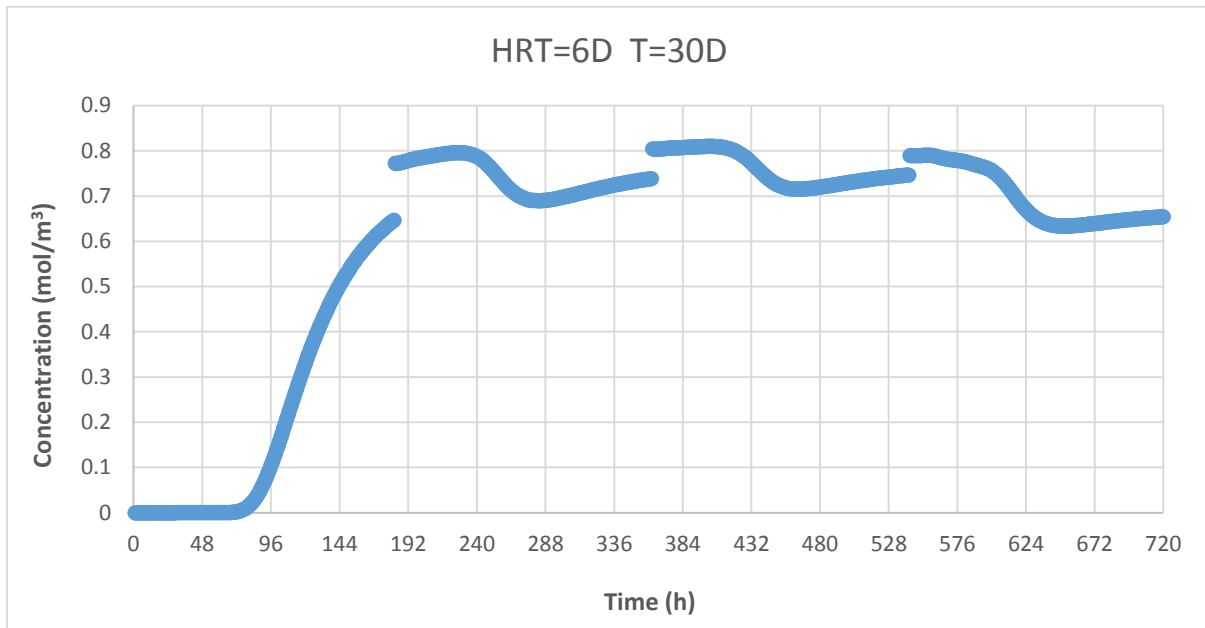
Σχήμα 44: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=180h$ , για  $HRT=6d$  και  $T=30d$ .

Η συγκεκριμένη προσομοίωση πραγματοποιήθηκε για ένα πλήρη κύκλο των διαμερισμάτων του αντιδραστήρα, δηλαδή 30 ημέρες, η τελική εικόνα κατανομής της συγκέντρωσης είναι η ακόλουθη:



Σχήμα 45: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας χρόνου προσομοίωσης, για  $HRT=6d$  και  $T=30d$ .

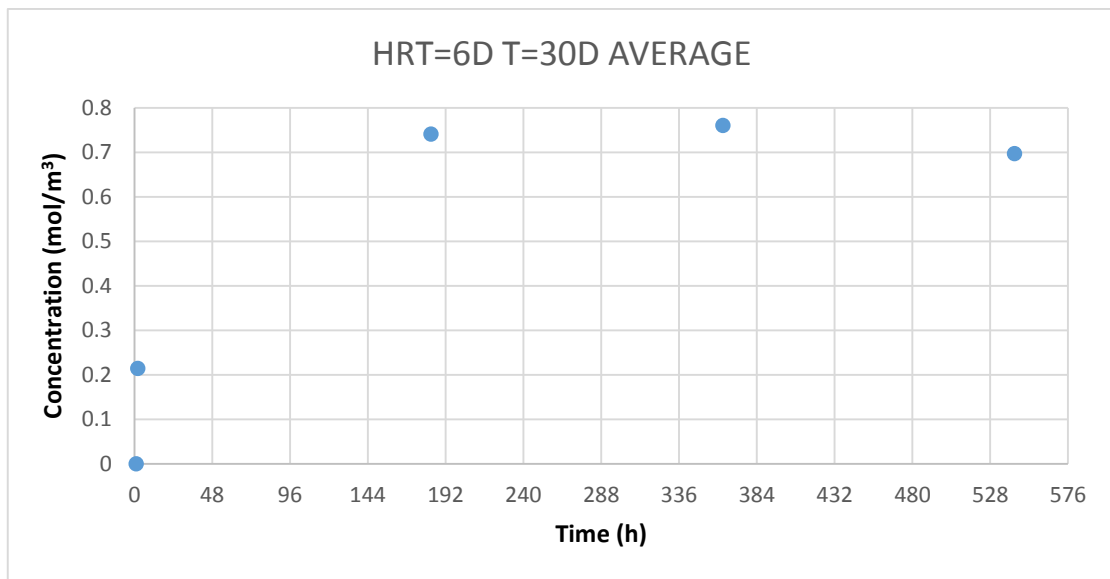
Από τις τιμές που προέκυψαν καταστρώθηκε το διάγραμμα συγκέντρωσης - χρόνου και υπολογίστηκε ο  $N_{C.S.T.R.}=8$  και ο  $V_{DEAD}=42\%$ :



Διάγραμμα 13: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=6d$  και  $T=30d$ .

Στο συγκεκριμένο διάγραμμα παρατηρείται πιο αργή αύξηση της συγκέντρωσης στις εξόδους και η απόκριση μοιάζει πιο πολύ με αυτή αντιδραστήρα εμβολικής ροής σε βηματική επιβολή. Η μέγιστη συγκέντρωση είναι ίση με  $0.81 \text{ Mol/m}^3$ . Οι καμπύλες που δημιουργούνται από τις τιμές της συγκέντρωσης πιθανό να οφείλονται στην χαμηλή ποιότητα πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε σε συνδυασμό με τον μεγάλο χρόνο προσομοίωσης που απαιτεί το συγκεκριμένο πρόβλημα.

Υπολογίστηκαν οι μέσες τιμές της συγκέντρωσης για κάθε διαμέρισμα και παρουσιάζονται στο παρακάτω διάγραμμα, επίσης η μέγιστη συγκέντρωση σε αυτή την περίπτωση είναι  $0.76 \text{ Mol/m}^3$ , ο  $N_{C.S.T.R.}=3$  και ο «νεκρός» όγκος ίσος με 34.1%:

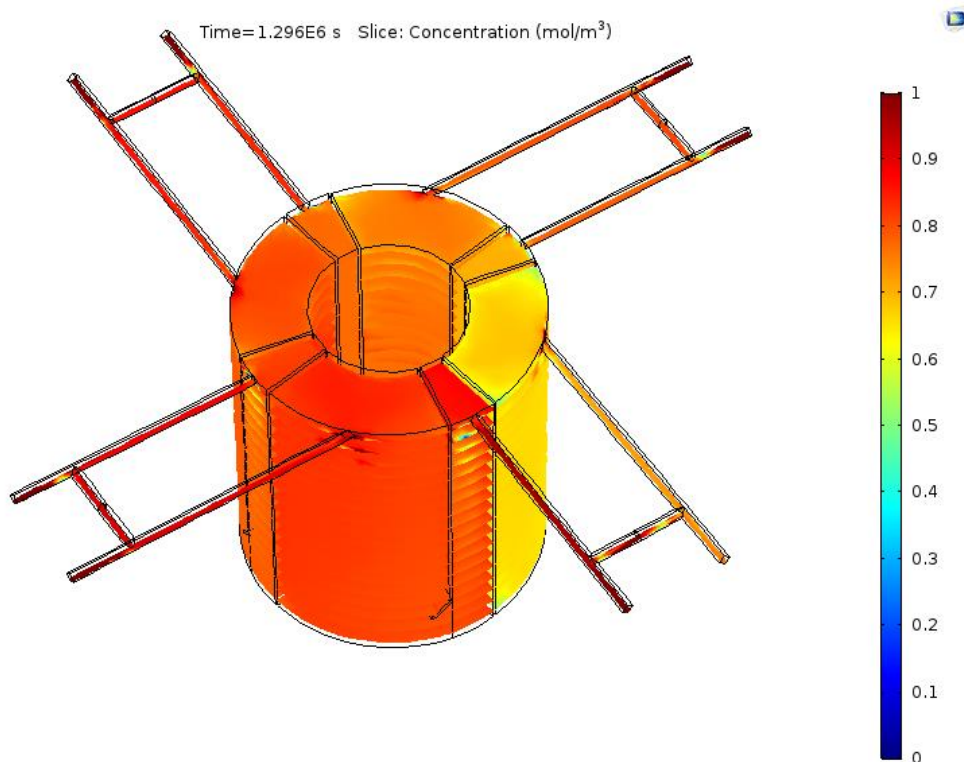


Διάγραμμα 14: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=6d$  και  $T=30d$ .

Παρατηρείται ότι η μελέτη με τις μέσες τιμές για το συγκεκριμένο υπολογιστικό πείραμα αποκλίνει σημαντικά και δεν είναι βοηθητικό για την εξαγωγή ασφαλών συμπερασμάτων εξαιτίας του μικρού πλήθους τιμών που χρησιμοποιούνται.

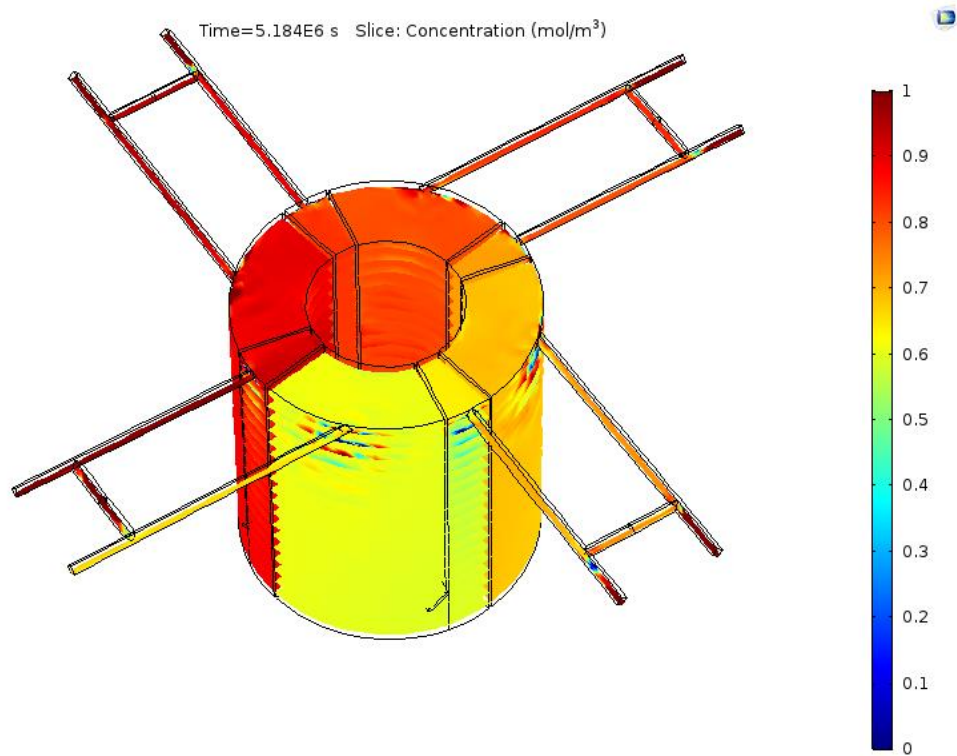
Το επόμενο πείραμα έγινε με τον ίδιο υδραυλικό χρόνο παραμονής και με συχνότητα εναλλαγής 60 ημερών, όπου κάθε διαμέρισμα τροφοδοτείται για 15 μέρες πριν αλλάξει το σημείο τροφοδοσίας και η αντίστοιχη έξοδος. Όμοια με την προηγούμενη προσομοίωση ο χρόνος διάρκειας του προβλήματος ήταν 60 ημέρες και όχι τρεις χρόνοι παραμονής, δηλαδή 18 ημέρες.

Από την τροφοδοσία του πρώτου διαμερίσματος φαίνεται η αυξημένη συγκέντρωση σε όλο τον όγκο του αντιδραστήρα, στην παρακάτω εικόνα:



Σχήμα 46: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=360h$ , για  $HRT=6d$  και  $T=60d$ .

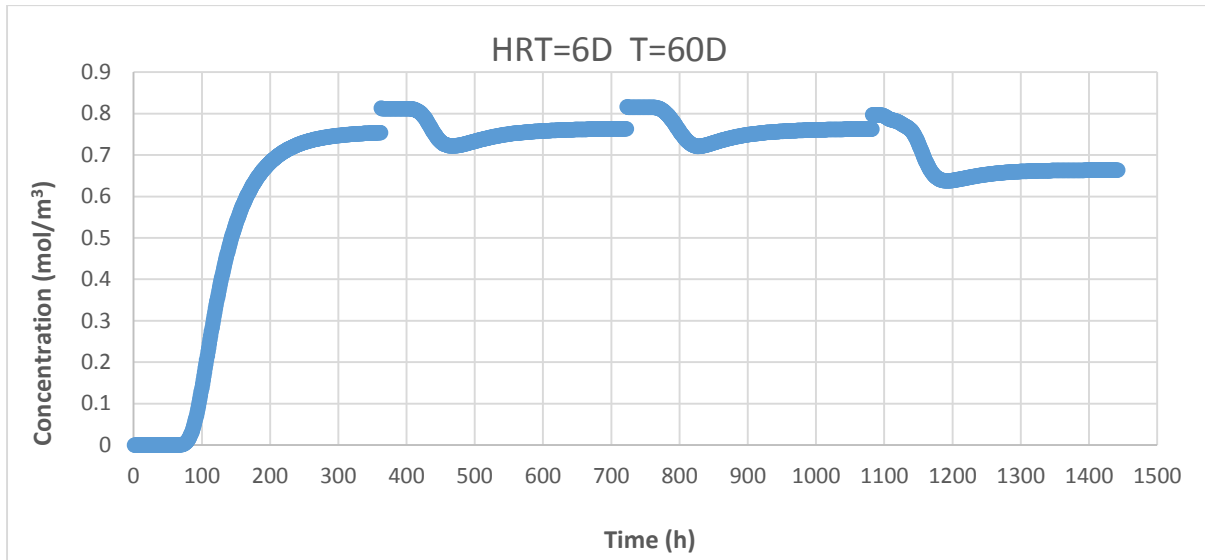
Στο προφίλ της συγκέντρωσης στον αντιδραστήρα για την τελευταία χρονική στιγμή της προσομοίωσης παρατηρείται πως η συγκέντρωση στο πρώτο διαμέρισμα έχει μειωθεί σημαντικά σε σχέση με τον υπόλοιπο αντιδραστήρα.



Σχήμα 47: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας χρόνου προσομοίωσης, για  $HRT=6d$  και  $T=60d$ .

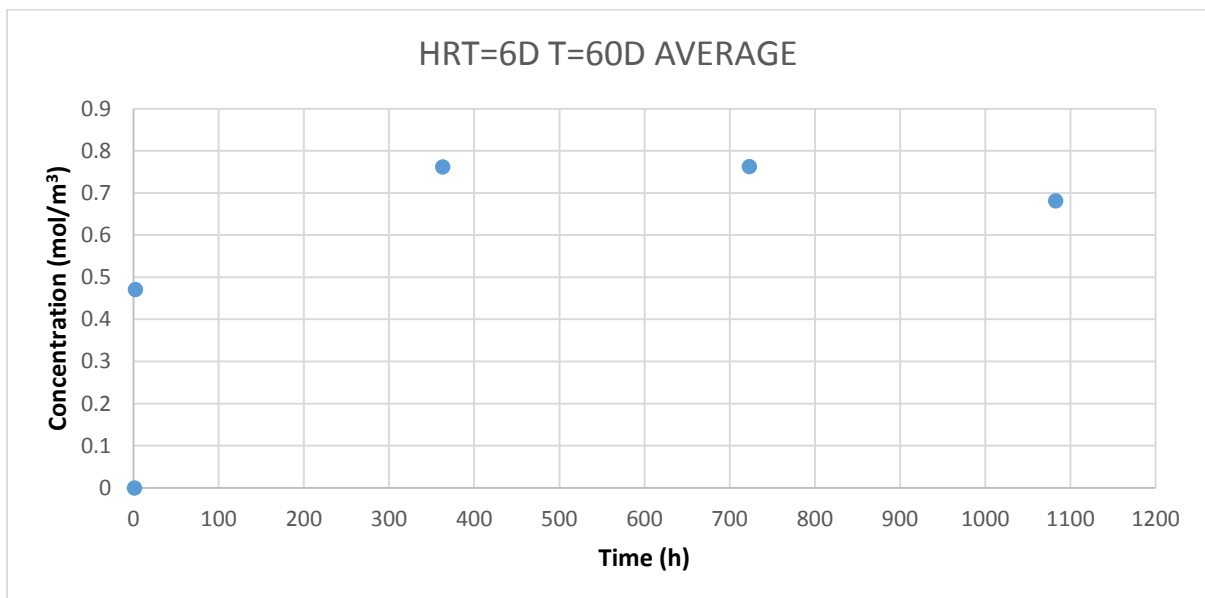


Για καλύτερη κατανόηση των φαινομένων που εξελίσσονται παρουσιάζεται και το διάγραμμα συγκεντρώσεων – χρόνου, στο οποίο φαίνεται ο τρόπος απόκρισης να τείνει σε αυτόν αντιδραστήρα εμβολικής ροής με τη συγκέντρωση αφού αποκτά μέγιστη τιμή  $0.82 \text{ mol/m}^3$  να μειώνεται και στη συνέχεια να σταθεροποιείται πριν αυξηθεί ξανά και μειωθεί κατόπιν, όπως παρουσιάζεται στο επόμενο διάγραμμα:



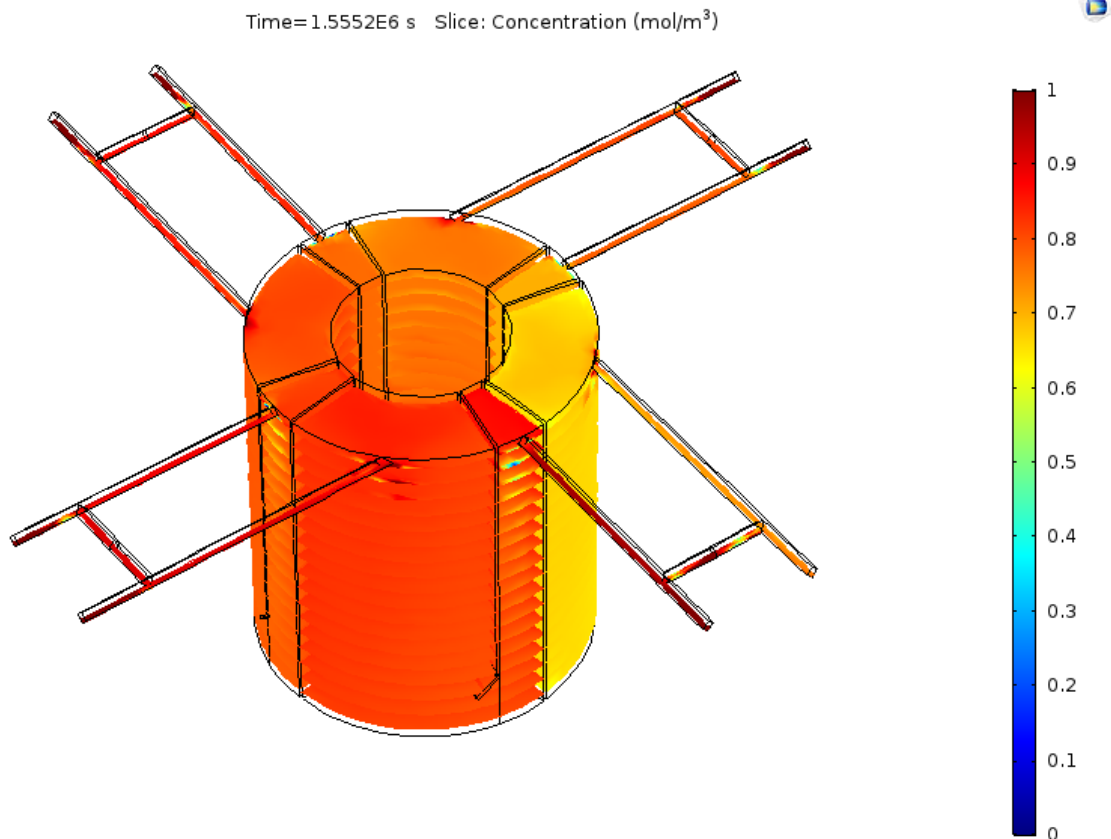
Διάγραμμα 15: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=6d$  και  $T=60d$ .

Η ύπαρξη εμβολικής ροής αποδεικνύεται και από τον υπολογισμό ισοδύναμου αριθμού αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά που είναι  $N_{C.S.T.R.}=5-9$ . Επιπλέον, υπολογίστηκε ο «νεκρός» όγκος του αντιδραστήρα ίσος με 46.4%



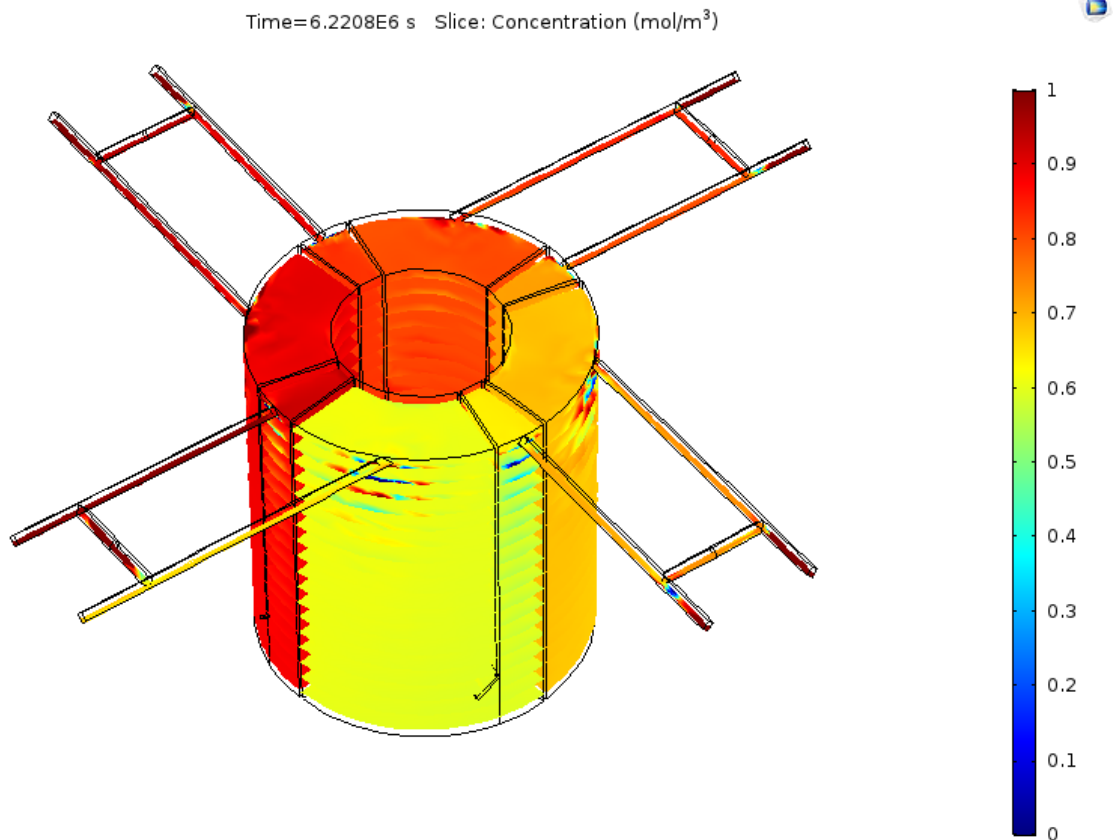
Διάγραμμα 16: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=6d$  και  $T=60d$ .

Το τελευταίο πείραμα προσομοίωσης που έγινε είχε συχνότητα εναλλαγής  $T=72$  d. Με τον τρόπο αυτό το κάθε διαμέρισμα τροφοδοτήθηκε για 18 ημέρες, δηλαδή για 3 υδραυλικούς χρόνους παραμονής. Στην εικόνα της τροφοδοσίας του πρώτου διαμερίσματος η συγκέντρωση έχει αυξηθεί σε όλο τον αντιδραστήρα σε τιμές κοντά στο  $0.7 \text{ mol/m}^3$ , όπως υποδεικνύεται από το χρώμα που έχει πάρει ο αντιδραστήρας:

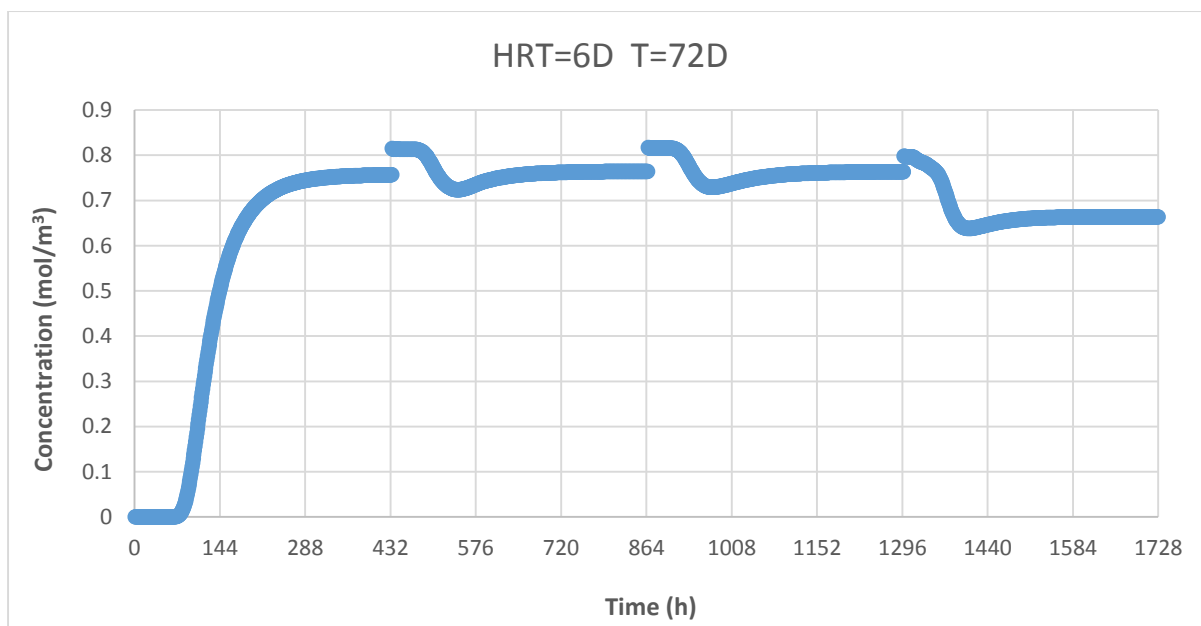


Σχήμα 48: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=432h$ , για  $HRT=6d$  και  $T=72d$ .

Στη συνέχεια παρουσιάζεται και η τελευταία χρονική στιγμή της προσομοίωσης, όπως έγινε για συχνότητα εναλλαγής 30 d και 60 d μειώνεται η συγκέντρωση του ιχνηθέτη σταδιακά, εμφανίζοντας ένα μέγιστο στη συνέχεια ένα ελάχιστο και μετά να ισορροπεί για το υπόλοιπο χρονικό διάστημα του εκάστοτε διαμερίσματος:

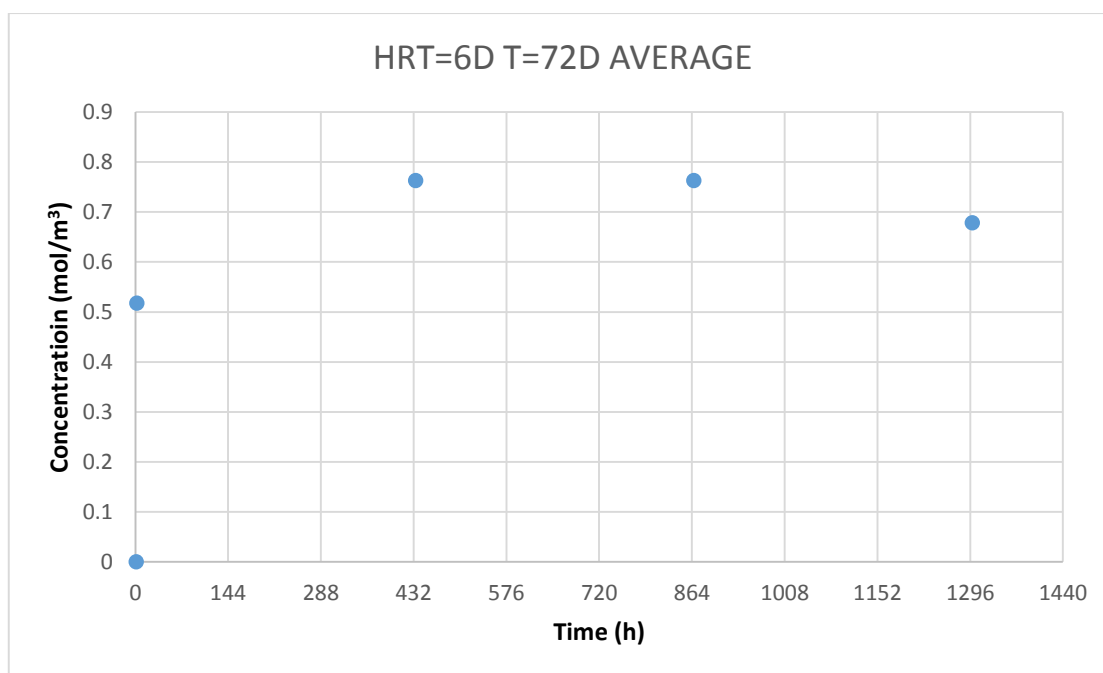


Σχήμα 49: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας χρόνου προσομοίωσης, για  $HRT=6d$  και  $T=72d$ .



Διάγραμμα 17: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=6d και T=72d.

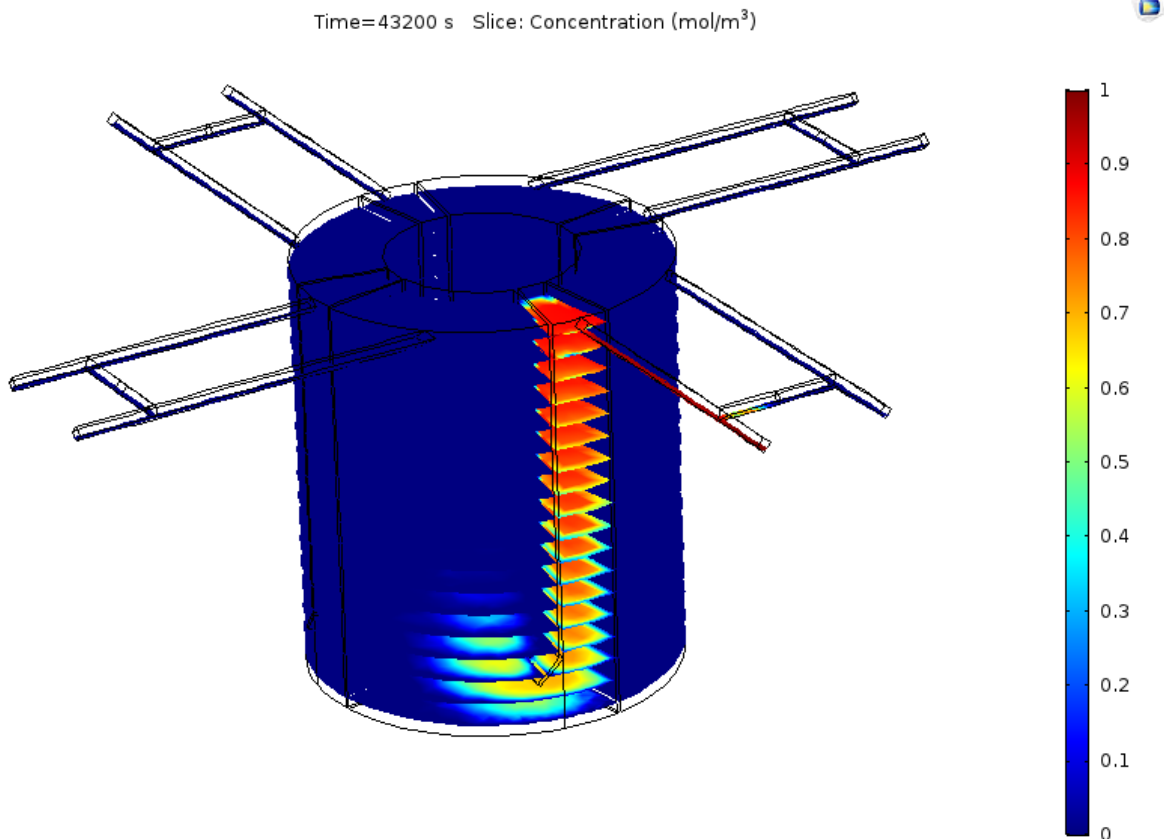
Η μέγιστη τιμή συγκεντρώσεων που καταγράφεται είναι  $0.82 \text{ mol/m}^3$ , υπολογίζεται επίσης ο ισοδύναμος αριθμός αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά ίσος με 7 και ο «νεκρός» όγκος ίσος με 47.2%.



Διάγραμμα 18: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=6d και T=72d.

## Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής 10.65 ημέρες

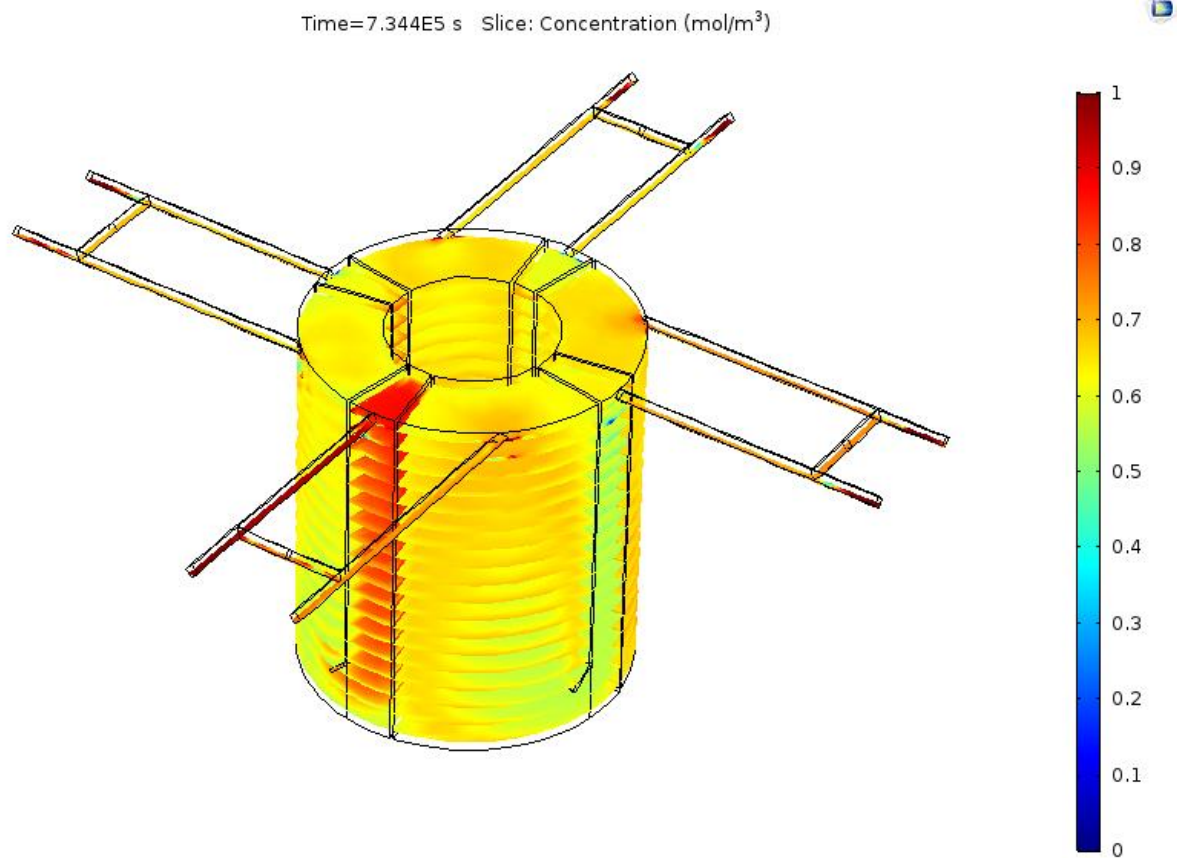
Οι επόμενες δύο προσομοιώσεις έγιναν με υδραυλικό χρόνο παραμονής ίσο με 10.65 μέρες και οι συχνότητες εναλλαγής που χρησιμοποιήθηκαν ήταν για 2 και 4 ημέρες. Ο συγκεκριμένος υδραυλικός χρόνος παραμονής αντιστοιχεί σε  $8.7 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$  νερού και ιχνηθέτη στην τροφοδοσία.



Σχήμα 50: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=12h$ , για  $HRT=10.65d$  και  $T=2d$ .

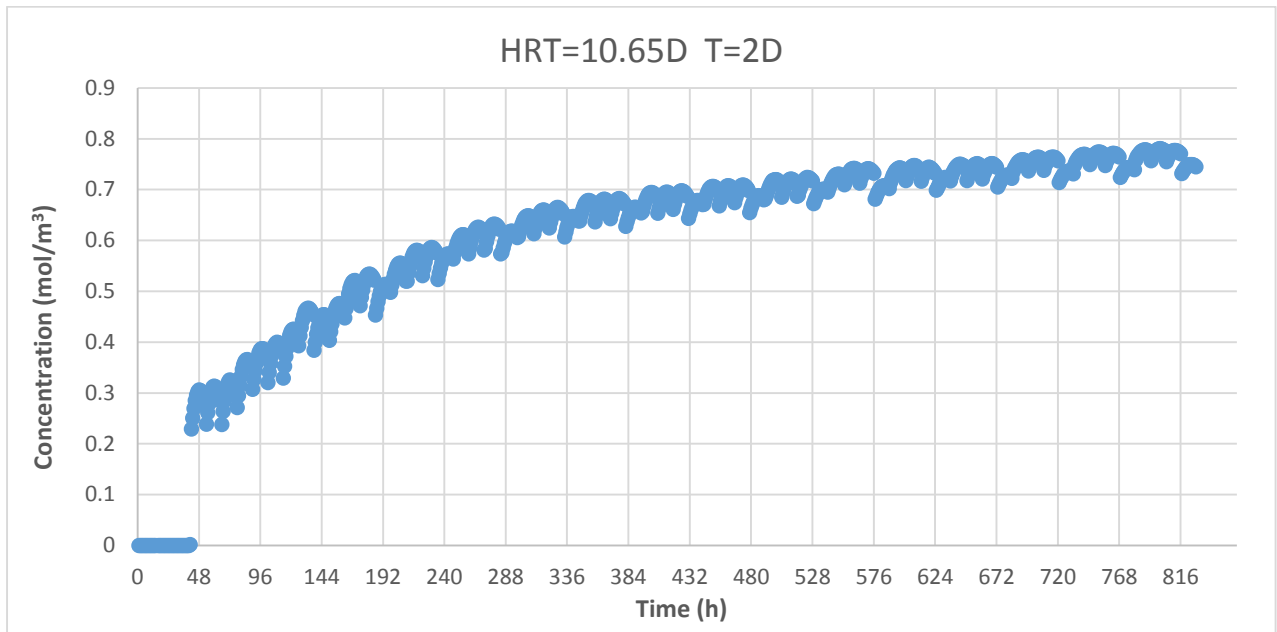
Με την ολοκλήρωση της τροφοδοσίας του πρώτου διαμερίσματος παρατηρείται πως ο ιχνηθέτης έχει φτάσει σε ακόμα χαμηλότερο επίπεδο στο τμήμα της ανόδου του διαμερίσματος, αφού έχει αυξηθεί περαιτέρω ο υδραυλικός χρόνος παραμονής.

Στο τέλος της προσομοίωσης παρατηρείται αυξημένη συγκέντρωση ιχνηθέτη σε όλο τον αντιδραστήρα με εξαίρεση κάποια σημεία που διατηρούν χαμηλότερη συγκέντρωση :



Σχήμα 51: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=10.65d$  και  $T=2d$ .

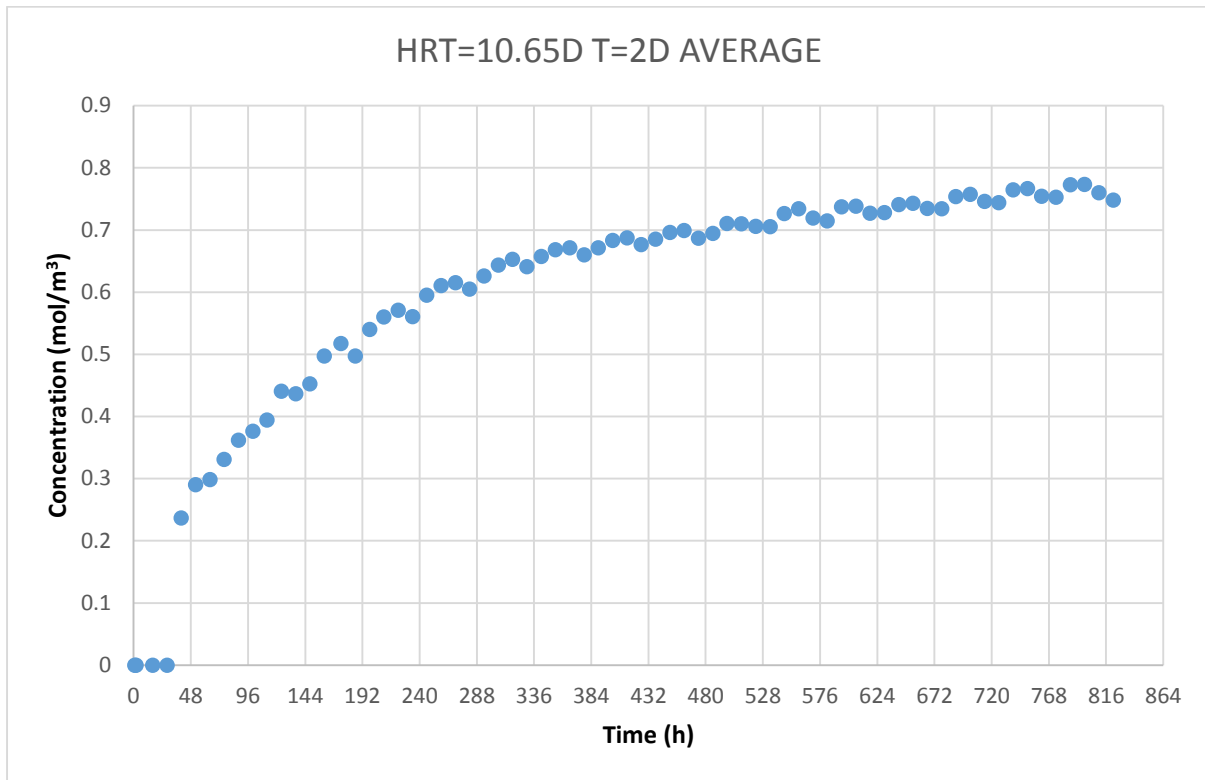
Λαμβάνοντας τις τιμές της συγκέντρωσης για τις εξόδους του αντιδραστήρα προκύπτει το ακόλουθο διάγραμμα:



Διάγραμμα 19: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=10.65d και T=2d.

Υπάρχει μια συνεχόμενη τάση για αύξηση του ιχνηθέτη στην έξοδο. Παρατηρείται ότι ανά κάποιες τιμές οι συγκεντρώσεις μειώνονται και στη συνέχεια αυξάνονται, έτσι παρουσιάζονται οι όγκοι νερού που έχουν μικρότερη συγκέντρωση ιχνηθέτη, που όπως φαίνεται εξαλείφονται σταδιακά. Η μέγιστη συγκέντρωση που παρατηρείται είναι 0.78 mol/m<sup>3</sup>, ο ισοδύναμος αριθμός  $N_{C.S.T.R.}=1$  και ο «νεκρός» όγκος υπολογίζεται στο 42.6%.

Καταστρώθηκε επίσης το διάγραμμα μέσων συγκεντρώσεων – χρόνου το οποίο παραθέτεται παρακάτω:

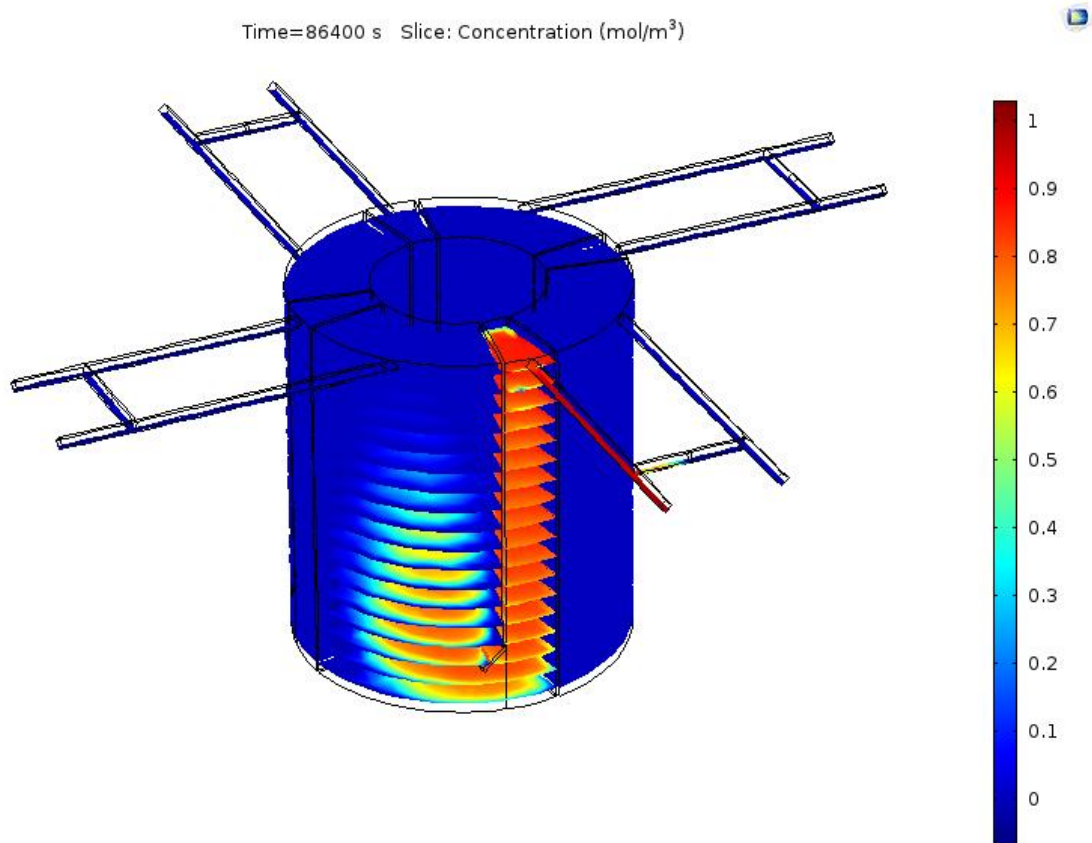


Διάγραμμα 20: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=10.65d και T=2d.

Από αυτό προκύπτει ότι  $C_{MAX}=0.77 \text{ mol/m}^3$ ,  $N_{C.S.T.R.}=1$  και  $V_{DEAD}=42\%$ , τιμές που βρίσκονται αρκετά κοντά σε αυτές που προέκυψαν αρχικά.

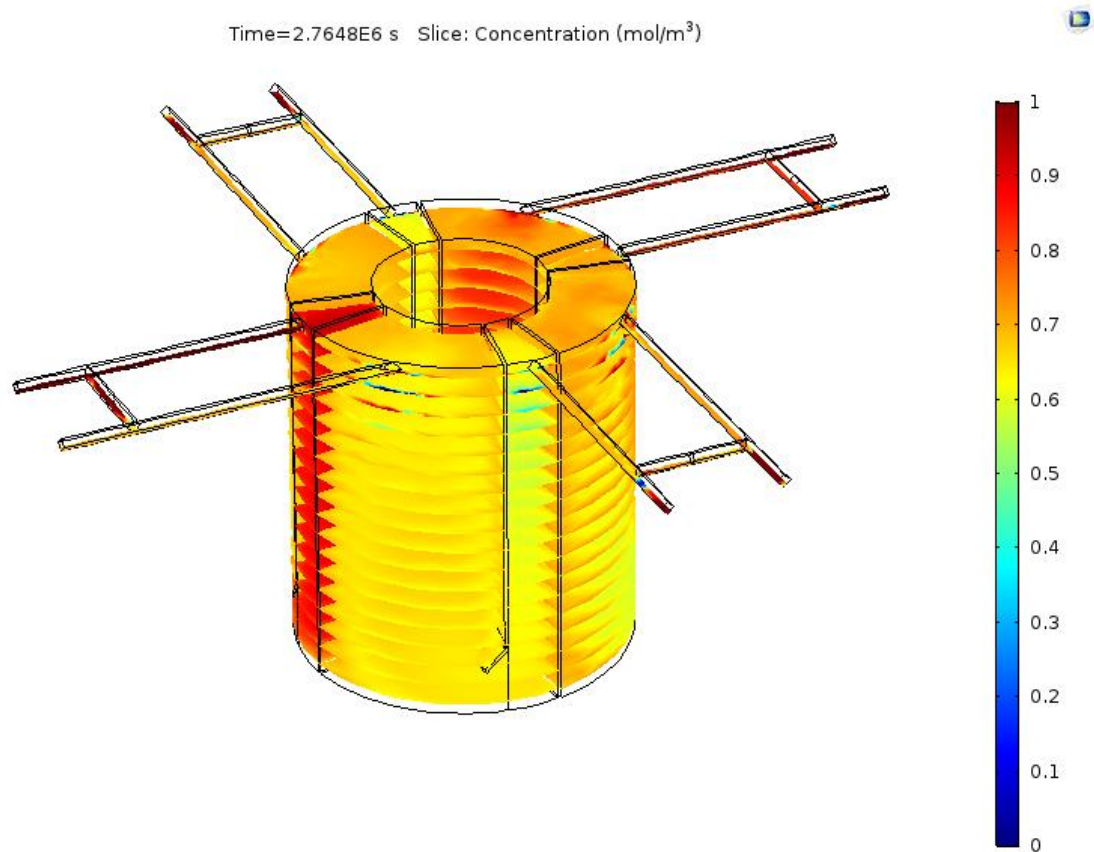


Στο δεύτερο πείραμα που έγινε για τον ίδιο υδραυλικό χρόνο παραμονής, μεταβλήθηκε η συχνότητα εναλλαγής κάθε διαμερίσματος στις 24 h. Ο ιχνηθέτης μετά τις πρώτες 24 ώρες παρουσιάζεται στην επόμενη εικόνα, έχει εισέλθει στο τμήμα ανόδου του πρώτου διαμερίσματος. Η διαφορά μεταξύ αυτού και του προηγούμενου πειράματος οφείλεται στο ότι δόθηκε περισσότερη ώρα στον ιχνηθέτη να απλωθεί σε μεγαλύτερο μέρος του αντιδραστήρα.



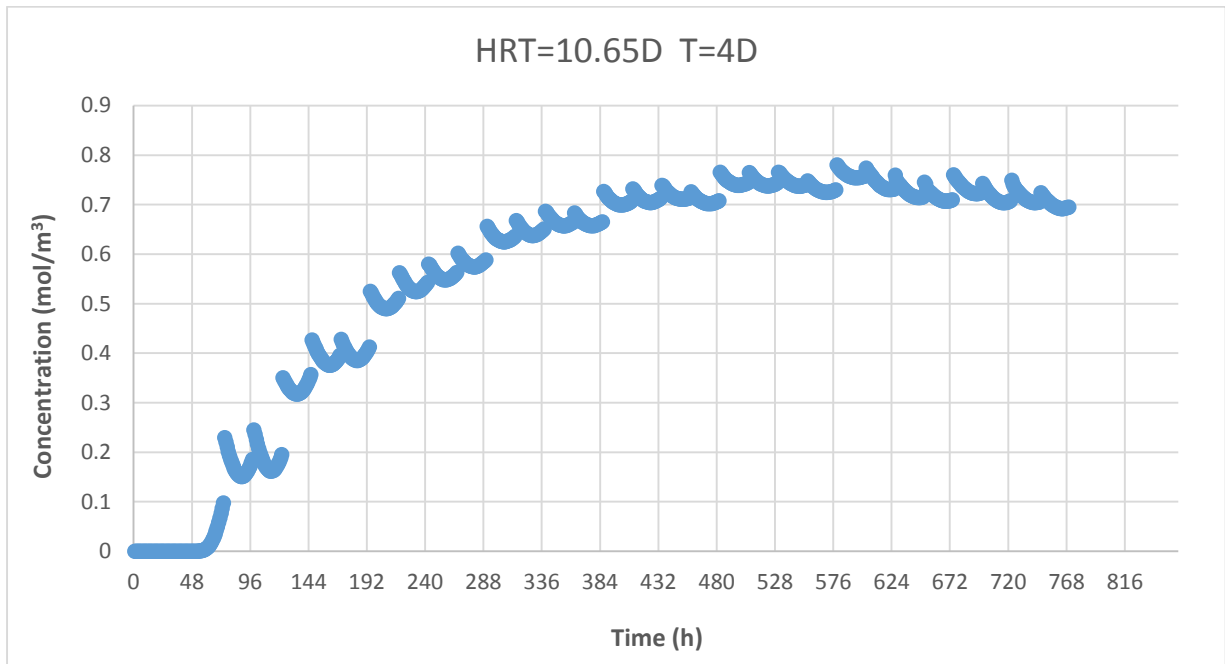
Σχήμα 52: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=24h$ , για  $HRT=10.65d$  και  $T=4d$ .

Με το τέλος της προσομοίωσης όλος ο ενεργός όγκος του αντιδραστήρα έχει πληρωθεί από ιχνηθέτη, υπάρχουν κάποιες περιοχές που έχουν μικρότερη συγκέντρωση από τις υπόλοιπες, ξεχωρίζουν καθώς έχουν πιο ανοιχτό χρώμα.



Σχήμα 53: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=10.65d$  και  $T=4d$ .

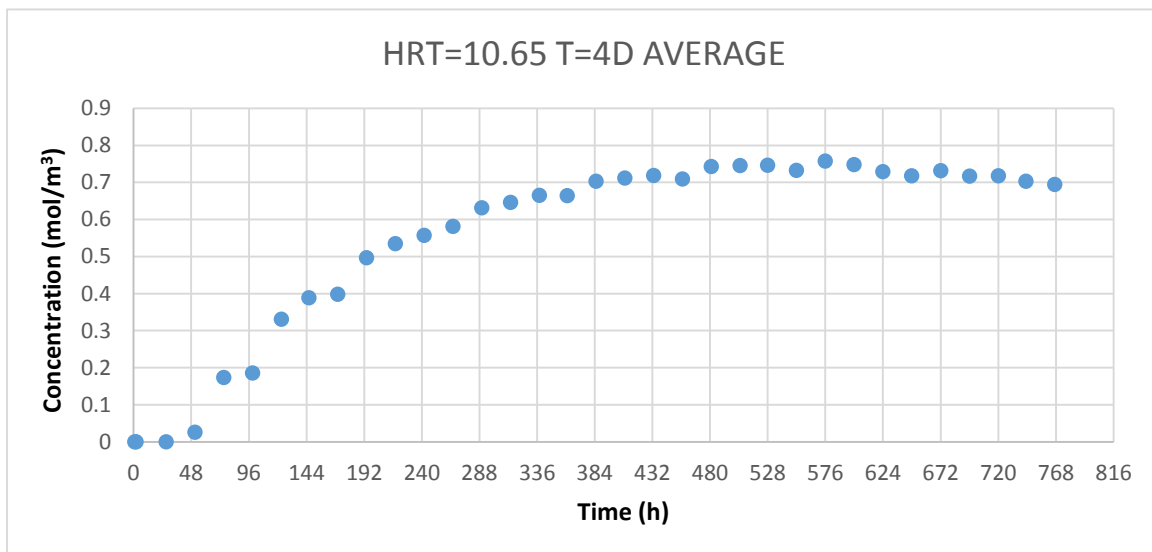
Στη συνέχεια κατασκευάστηκε το διάγραμμα συγκεντρώσεων – χρόνου το οποίο παραθέτεται παρακάτω:



Διάγραμμα 21: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=10.65d και T=4d.

Η μέγιστη συγκέντρωση που παρατηρείται είναι 0.78 mol/m<sup>3</sup>, ο ισοδύναμος αριθμός αντιδραστήρων πλήρους ανάδευση στη σειρά είναι 1 και ο «νεκρός» όγκος υπολογίζεται 38.2%. Η απόκριση του συστήματος στη βηματική επιβολή μοιάζει με απόκριση αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης, κάτι που επιβεβαιώνεται από τον  $N_{C.S.T.R.}$  που υπολογίζεται. Επιπλέον, σε κάθε ομάδα αποτελεσμάτων συγκέντρωσης στην έξοδο του αντιδραστήρα σχηματίζεται ένα ελάχιστο, γεγονός που οφείλεται στην ύπαρξη των χώρων με μικρότερη συγκέντρωση ιχνηθέτη, σε όλο τον όγκο του αντιδραστήρα.

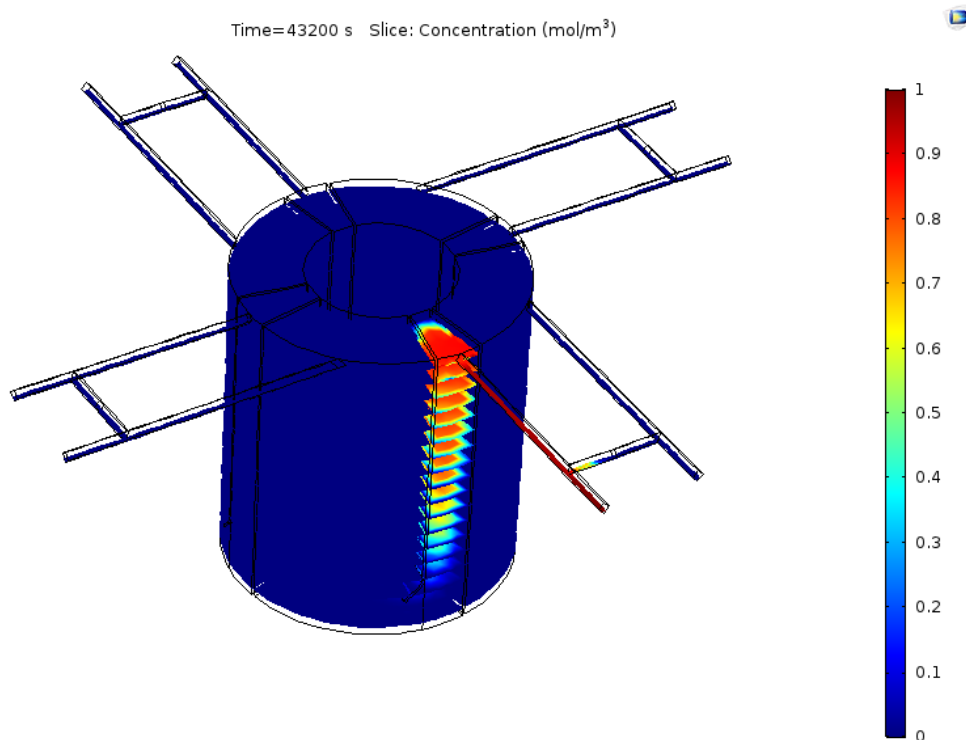
Από το διάγραμμα με τις μέσες συγκεντρώσεις προκύπτει  $C_{MAX}=0.76$  mol/m<sup>3</sup>,  $N_{C.S.T.R.}=2$  και  $V_{DEAD}=38.2\%$ .



Διάγραμμα 22: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=10.65d και T=4d.

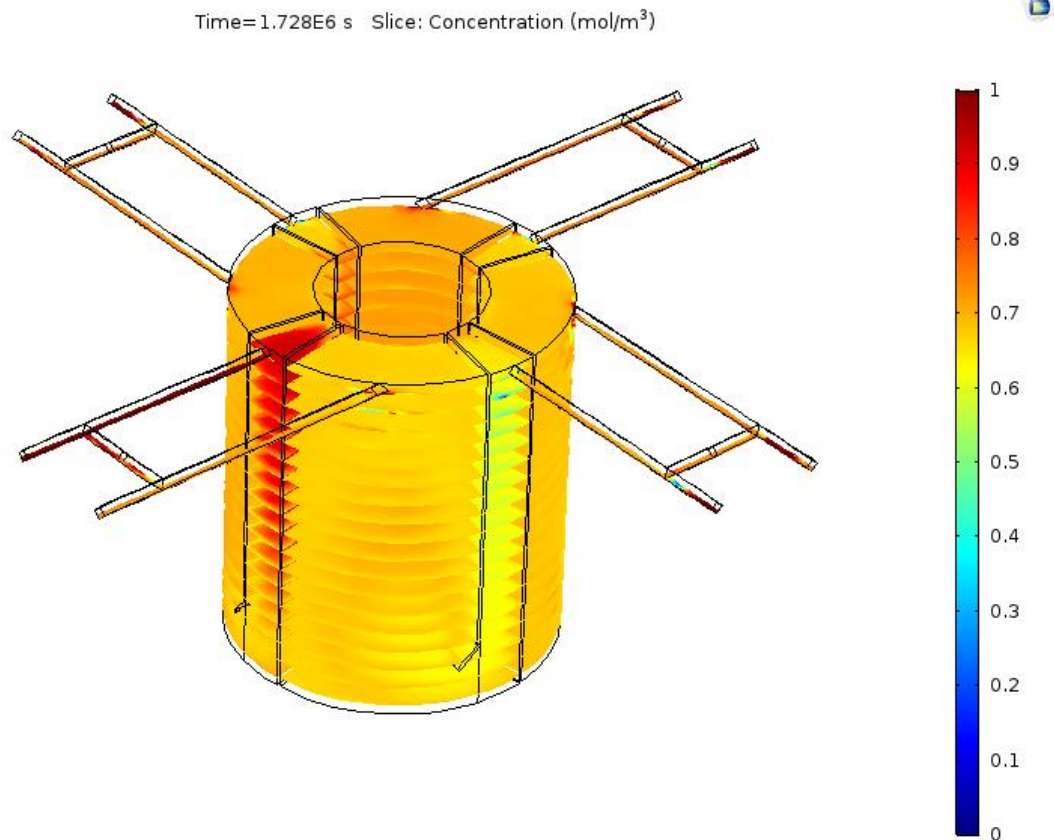
## Υδραυλικός Χρόνος Παραμονής 20 ημέρες

Οι τελευταίες προσομοιώσεις έγιναν με υδραυλικό χρόνο παραμονής τις 20 ημέρες, με περίοδο εναλλαγής τις 2, 4, 40 ημέρες, δηλαδή τροφοδότηση του κάθε διαμερίσματος για 12, 24 και 240 ώρες αντίστοιχα. Όπως είναι αναμενόμενο στον μεγαλύτερο χρόνο παραμονής από αυτούς που προσομοιώθηκαν, αντιστοιχεί η πιο μικρή παροχή διαλύματος νερού και ιχνηθέτη από τις υπόλοιπες προσομοιώσεις, η οποία είναι  $4.6 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$ . Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται η συγκέντρωση του ιχνηθέτη, δεν έχει ξεπεράσει το τμήμα της καθόδου του πρώτου διαμερίσματος:

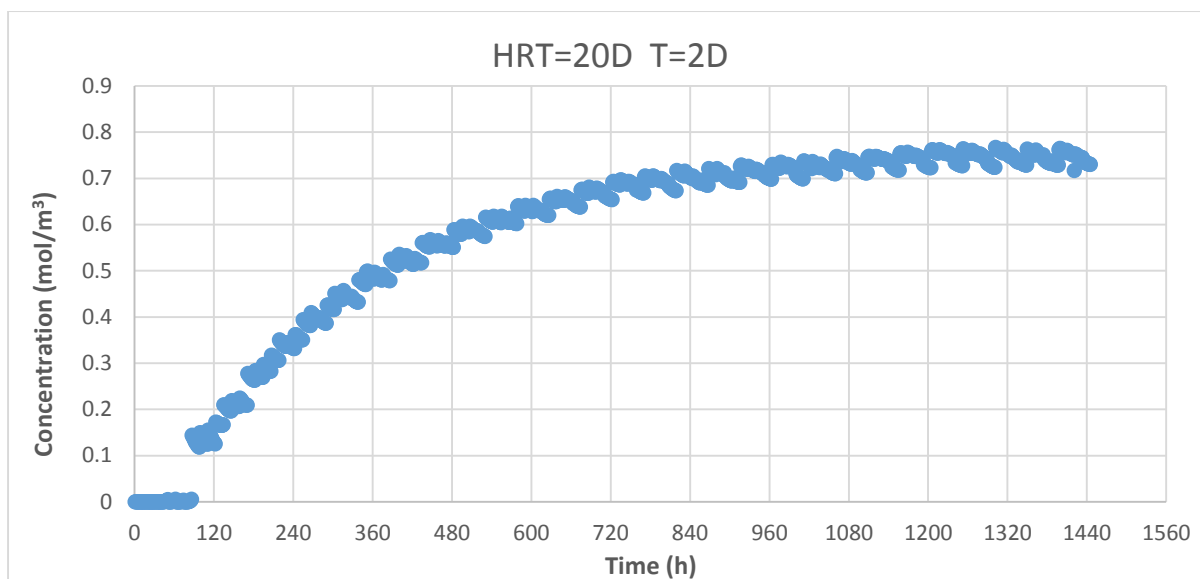


Σχήμα 54: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=12\text{h}$ , για  $HRT=20\text{d}$  και  $T=2\text{d}$ .

Η τελευταία εικόνα κατανομής της συγκέντρωσης που λαμβάνεται από τον αντιδραστήρα, παρουσιάζεται παρακάτω, φαίνεται ότι έχει αυξηθεί η συγκέντρωση του ιχνηθέτη σε όλους τους χώρους σε τιμές  $0.7 \text{ mol/m}^3$  και μεγαλύτερες, ενώ η μέγιστη καταγραφόμενη τιμή είναι  $0.77 \text{ mol/m}^3$ .



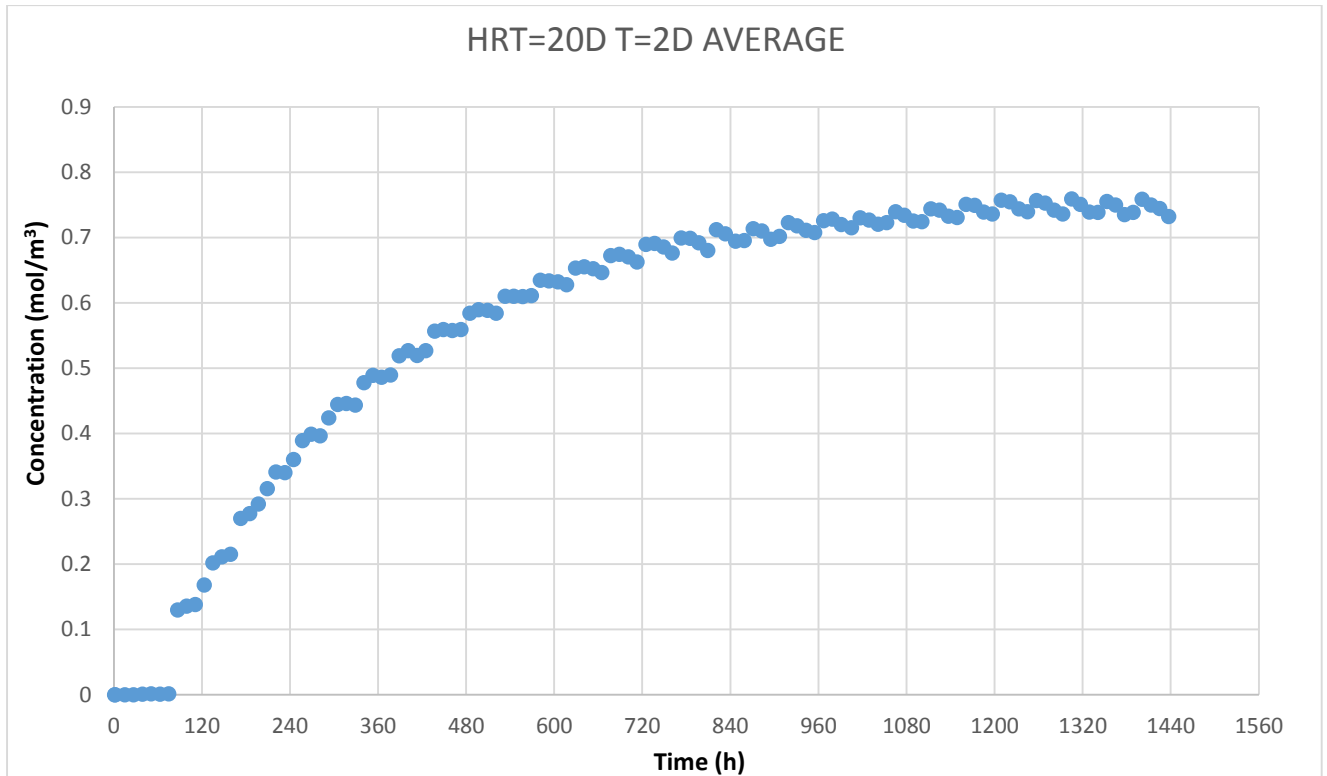
Σχήμα 55: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=20d$  και  $T=2d$ .



Διάγραμμα 23: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=20d$  και  $T=2d$ .

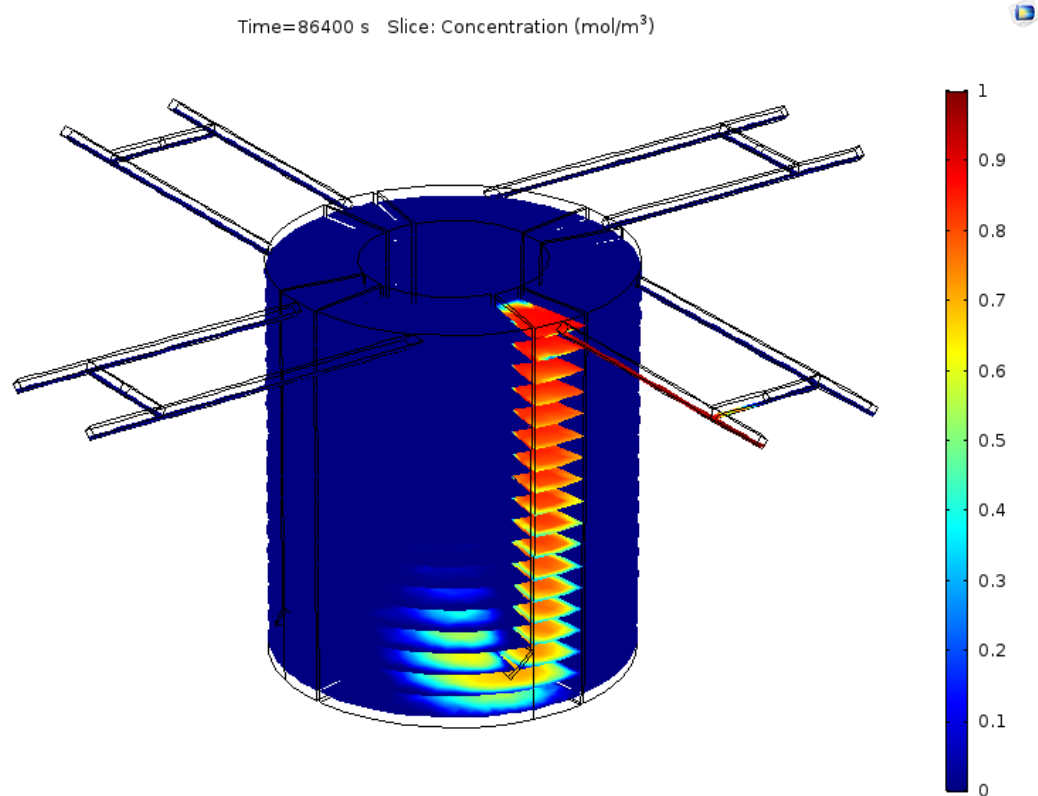
Από το διάγραμμα συγκεντρώσεων – χρόνου, η απόκριση στη βηματική επιβολή ιχνηθέτη στην είσοδο του αντιδραστήρα πλησιάζει αυτή αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης, κάτι που επιβεβαιώνεται από τον υπολογισμό του ισοδύναμου αριθμού C.S.T.R. στη σειρά που προκύπτει 1. Ο «νεκρός» όγκος του αντιδραστήρα είναι το 40.4%.

Στη συνέχεια υπολογίζονται οι μέσες τιμές της συγκέντρωσης σε κάθε διαμέρισμα και με τη σειρά τους ο ισοδύναμος αριθμός των C.S.T.R. στη σειρά και ο «νεκρός» όγκος του αντιδραστήρα ίσοι με 1 και 40.1%. Η μέγιστη συγκέντρωση που προκύπτει είναι  $0.76 \text{ mol/m}^3$ . Στο συγκεκριμένο πείραμα τα αποτελέσματα που προκύπτουν και στις δύο περιπτώσεις είναι παραπλήσια.



Διάγραμμα 24: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=20d$  και  $T=2d$ .

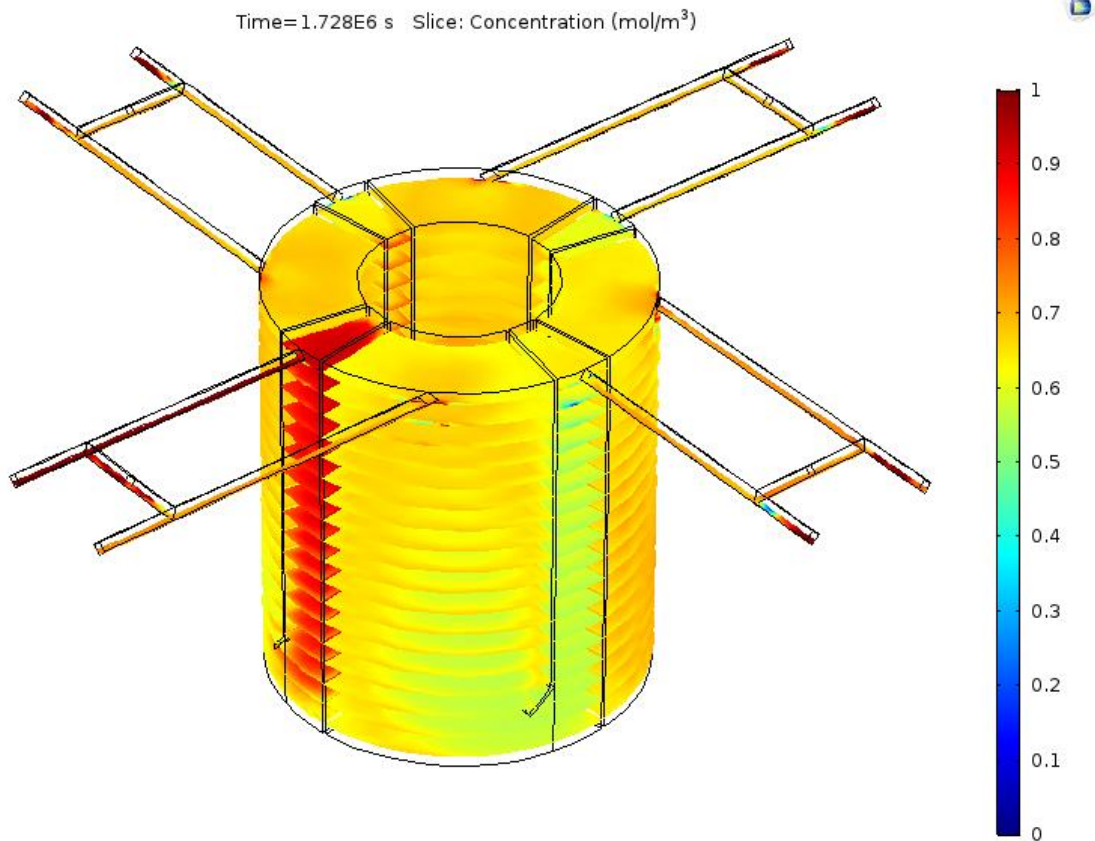
Κατόπιν μεταβλήθηκε η συχνότητα εναλλαγής διαμερίσματος στις 24 ώρες και πραγματοποιήθηκαν οι υπολογισμοί. Για το πρώτο διαμέρισμα φαίνεται πως ο διπλασιασμός του χρόνου τροφοδοσίας του επιτρέπει στην συγκέντρωση του ιχνηθέτη να εισέλθει στο τμήμα ανόδου:



Σχήμα 56: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=24h$ , για  $HRT=20d$  και  $T=4d$ .

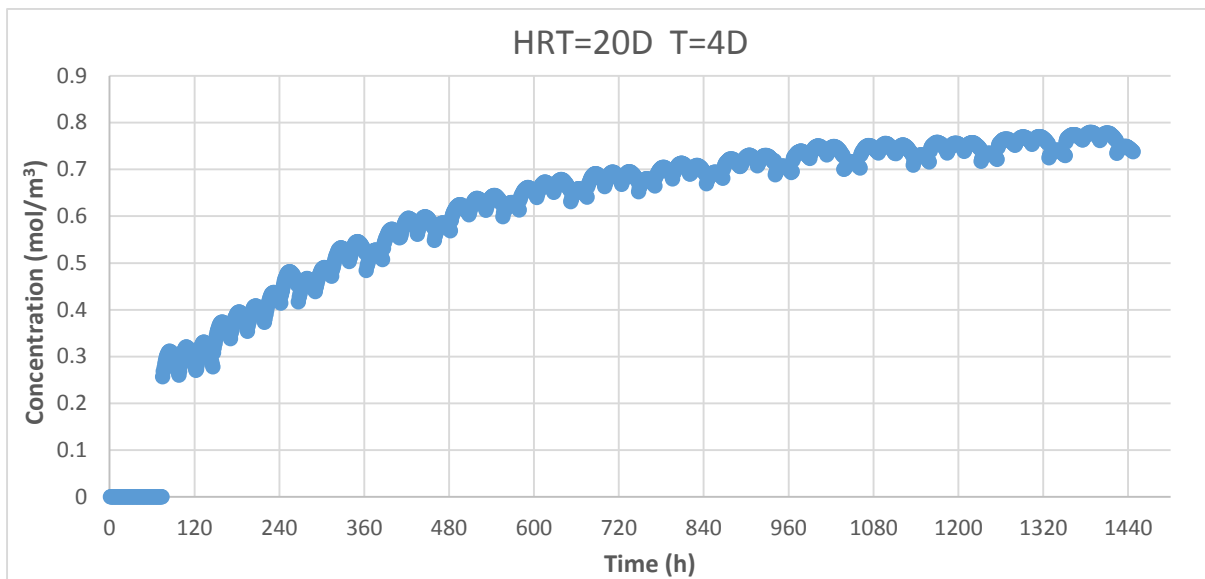


Με το πέρας των τριών χρόνων παραμονής η συγκέντρωση του ιχνηθέτη εντός του αντιδραστήρα έχει αυξηθεί σε τιμές κοντά στα  $0.7 \text{ mol/m}^3$ . Κάποιοι όγκοι ρευστού έχουν λιγότερη ποσότητα ιχνηθέτη, το οποίο γίνεται αντιληπτό από τα χρώματα που χρησιμοποιούνται για την απεικόνισή της. (γαλαζο-πράσινο που υποδεικνύει συγκέντρωση  $0.5 \text{ mol/m}^3$ )



Σχήμα 57: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=20d$  και  $T=4d$ .

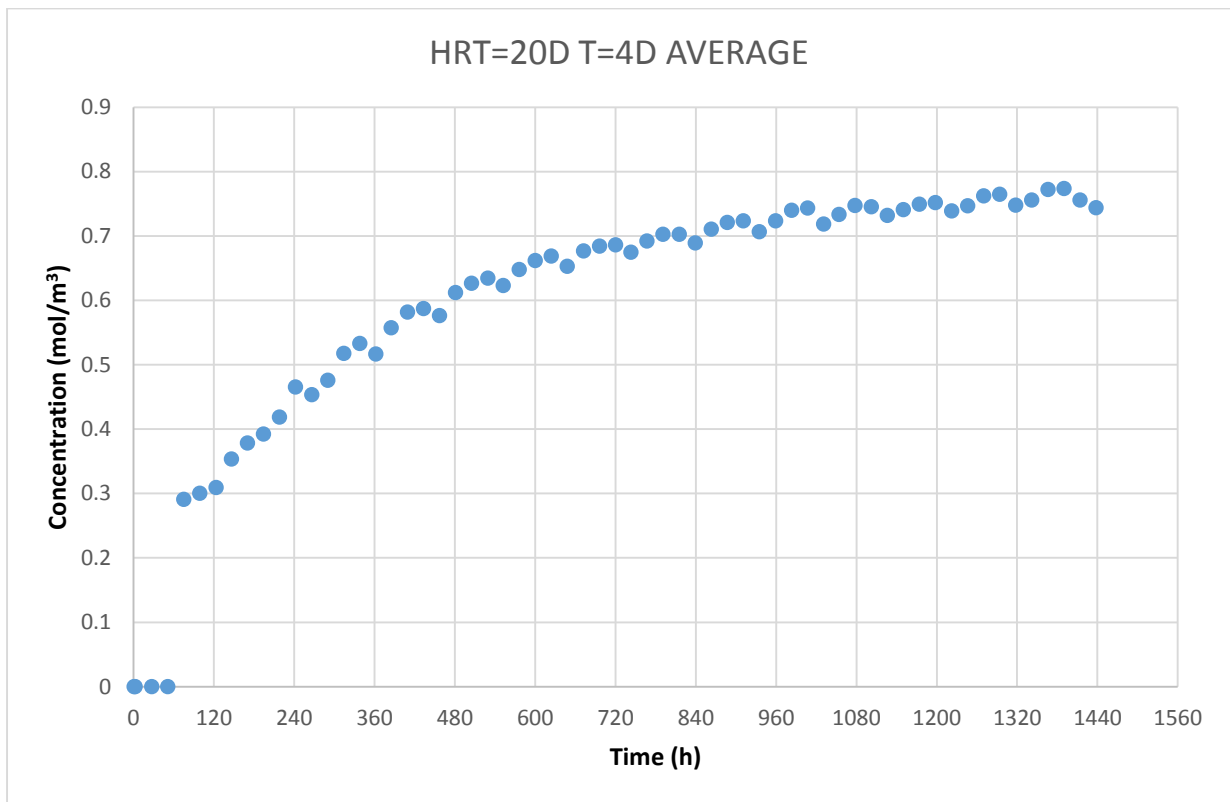
Από το διάγραμμα των συγκεντρώσεων που εξάγεται παρατηρείται περιοδική μείωση των συγκεντρώσεων σε μια συγκεκριμένη έξοδο, που οφείλεται στους χώρους του αντιδραστήρα που έχουν ελαττωμένη συγκέντρωση ιχνηθέτη όπως προαναφέρθηκε.



Διάγραμμα 25: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για HRT=20d και T=4d.

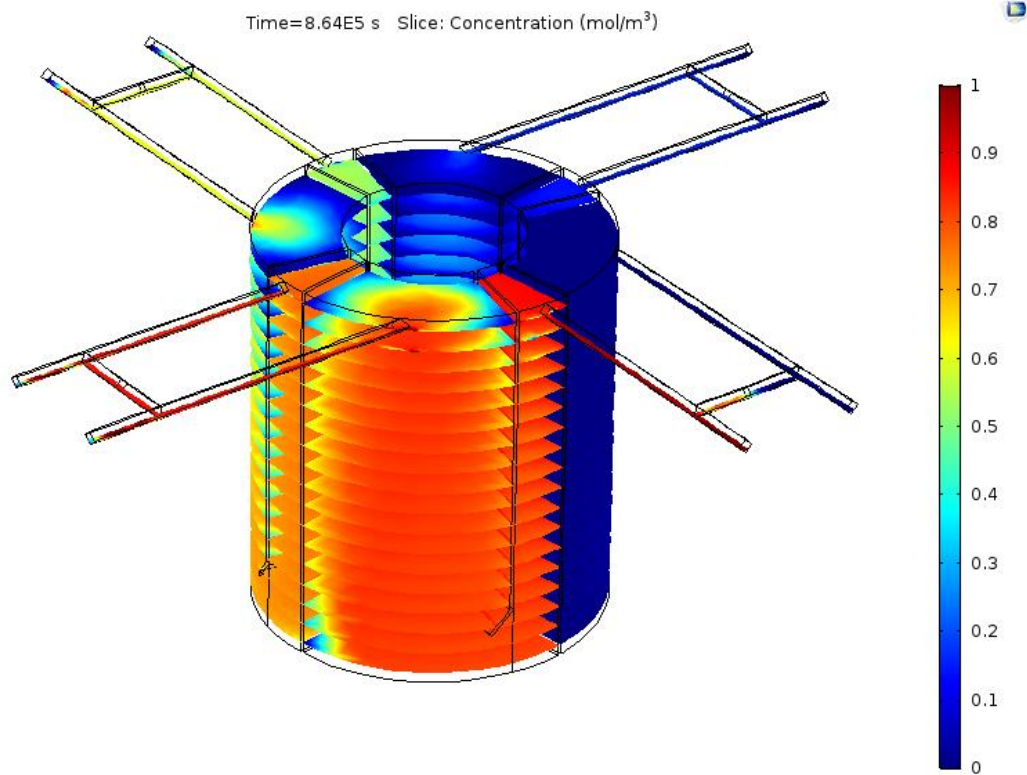
Η απόκριση του αντιδραστήρα στη συγκεκριμένη περίπτωση μοιάζει με αυτή C.S.T.R. που έχει υποστεί βηματική επιβολή στην είσοδό του και το μοτίβο αύξησης της συγκέντρωσης προσομοιάζει με το αντίστοιχο διάγραμμα που έγινε για υδραυλικό χρόνο παραμονής 10.65 ημερών και συχνότητα εναλλαγής 2 ημερών. Η μέγιστη συγκέντρωση που παρατηρείται είναι  $0.78 \text{ mol/m}^3$ , ο ισοδύναμος αριθμός αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά είναι 1, όπως είναι αναμενόμενο, ενώ ο «νεκρός» όγκος υπολογίζεται 42.2.%.

Από την εξαγωγή των μέσων τιμών της συγκέντρωσης προκύπτει μέγιστη συγκέντρωση  $0.77 \text{ mol/m}^3$ ,  $N_{C.S.T.R.}=1$  και ο «νεκρός» όγκος ίσος με 41.5%.



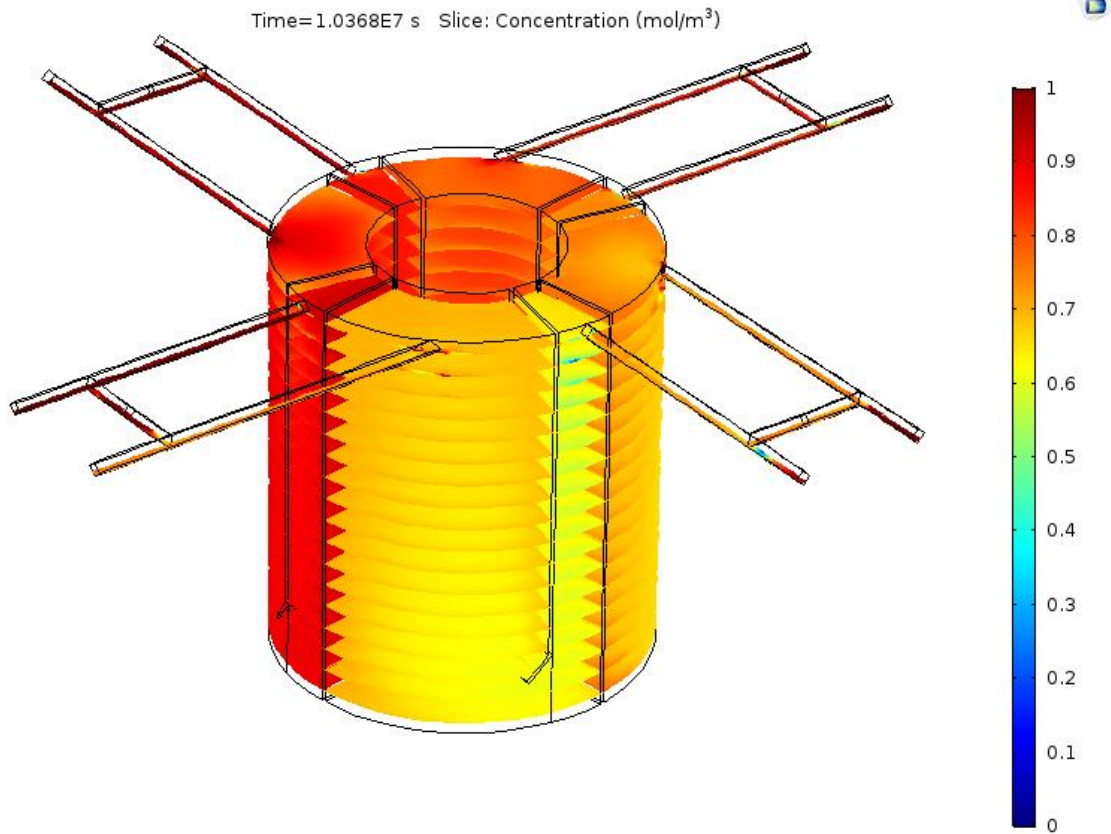
Διάγραμμα 26: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=20d$  και  $T=4d$

Το τελευταίο πείραμα προσομοίωσης έγινε με τροφοδότηση του κάθε διαμερίσματος για 240 ώρες υδατικό διάλυμα παρουσία ιχνηθέτη. Η προσομοίωση επεκτάθηκε παραπάνω από τους τρεις χρόνους παραμονής για να ολοκληρωθεί η εναλλαγή των διαμερισμάτων, καταλήγοντας στο τελευταίο.



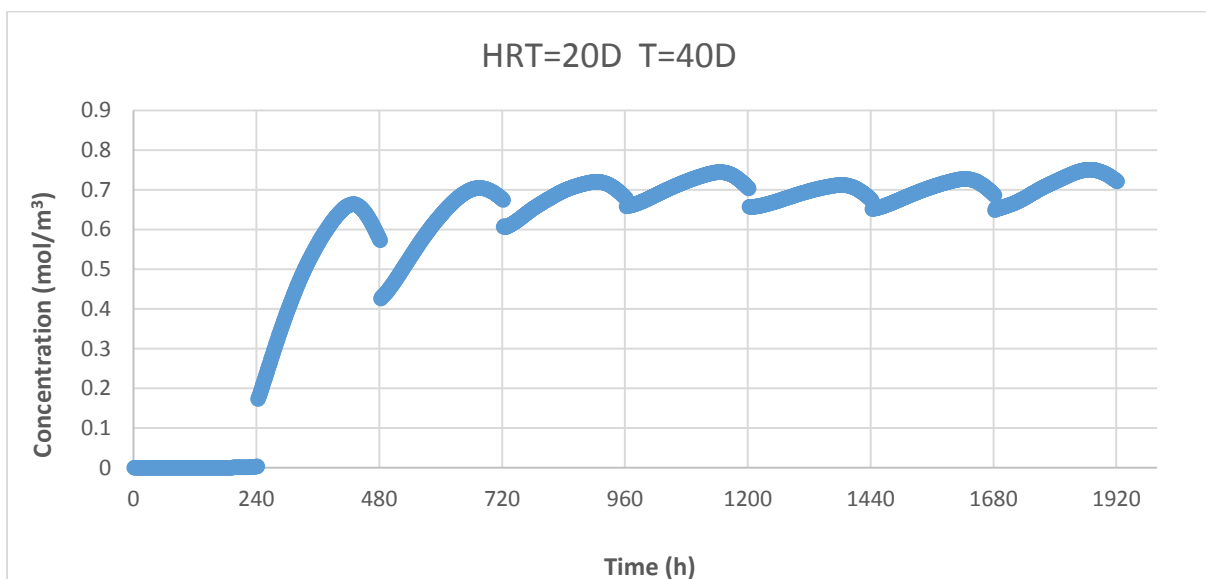
Σχήμα 58: Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα, τη χρονική στιγμή  $t=240h$ , για  $HRT=20d$  και  $T=40d$ .

Η διασπορά του ιχνηθέτη έχει φτάσει στο τρίτο διαμέρισμα επειδή το κάθε διαμέρισμα τροφοδοτείται για διάστημα 10 ημερών.



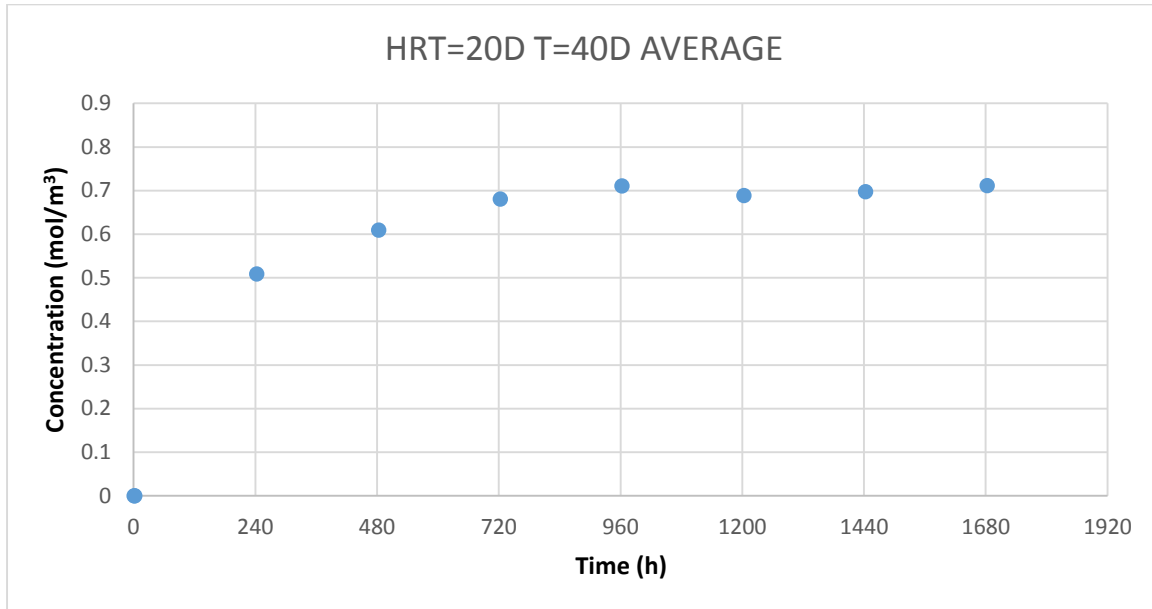
Σχήμα 59: Τελική Κατανομή Συγκέντρωσης Ιχνηθέτη στον Αντιδραστήρα με το πέρας τριων χρόνων παραμονής για  $HRT=20d$  και  $T=40d$ .

Εξάγονται τα αποτελέσματα της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη στις εξόδους του αντιδραστήρα και δημιουργείται το διάγραμμα συγκέντρωσης – χρόνου. Η μέγιστη συγκέντρωση είναι  $0.75 \text{ mol/m}^3$ , ο  $N_{C.S.T.R.}=2$  και το ποσοστό του «νεκρού» όγκου  $41.3\%$ .



Διάγραμμα 27: Κατανομή Συγκεντρώσεων στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=20d$  και  $T=40d$ .

Από τον υπολογισμό των μέσων τιμών των συγκεντρώσεων προκύπτει ότι η μέγιστη συγκέντρωση είναι  $0.71 \text{ mol/m}^3$ , ο  $N_{C.S.T.R.}=2$  και το ποσοστό του «νεκρού» όγκου ίσο με 37.7%. Κατασκευάζεται και το αντίστοιχο διάγραμμα της μέσης συγκέντρωσης με το χρόνο.



Διάγραμμα 28: Μέσες τιμές Συγκέντρωσης στην εκάστοτε έξοδο του αντιδραστήρα, για  $HRT=20d$  και  $T=40d$ .

## Σύνοψη των αποτελεσμάτων

Μετά τη συλλογή αποτελεσμάτων, την επεξεργασία τους και την παράθεση κάποιων συμπερασμάτων κρίθηκε απαραίτητο να γίνει μια συνολική παρουσίαση των δεδομένων που συνελέγησαν και εκ νέου εξαγωγή συμπερασμάτων για όλο τον κύκλο προσομοιώσεων.

Για μεγαλύτερη ευκολία στην παρατήρηση της συμπεριφοράς των πολλαπλών προσομοιώσεων και για διευκόλυνση της σύγκρισης μεταξύ των αποτελεσμάτων, χρησιμοποιήθηκε ο λόγος υδραυλικού χρόνου παραμονής προς περίοδο εναλλαγής, (HRT/T).

Υπολογίστηκε, επίσης, η διαφορά μέγιστων και ελάχιστων τιμών συγκέντρωσης που εμφανίζονται σε κάθε διαμερίσμα, και για κάθε λόγο HRT/T βρέθηκε η μέση τιμή της.

Στη συνέχεια παρατίθενται πίνακας που περιέχει την ομαδοποίηση αυτή, με HRT συμβολίζεται ο υδραυλικός χρόνος παραμονής, με T η περίοδος εναλλαγής, με  $C_{MAX}$  η μέγιστη συγκέντρωση που παρατηρήθηκε στην εκροή, με  $N_r$  ο ισοδύναμος αριθμός αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά, με  $V_d(\%)$  το ποσοστό του «νεκρού» όγκου στον αντιδραστήρα και με  $Var_{AVG}$  η μέση διαφορά που παρατηρείται στις συγκεντρώσεις των προσομοιώσεων. Για περαιτέρω διευκόλυνση οργανώθηκε ο πίνακας ανάλογα με το λόγο HRT/T σε αύξουσα σειρά:

Πίνακας 4: Σύνοψη Αποτελεσμάτων και ταξινόμησή τους με Αύξων λόγο HRT/T.

HRT (d)	T (d)	HRT/T	Cmax (mol/m <sup>3</sup> )	Nr	Vd (%)	VARavg
6	72	0.08333	0.81699	7	47.1702	0.27378
6	60	0.1	0.81681	5 έως 9*	46.3935	0.27527
6	30	0.2	0.81012	8	42.0022	0.25101
4	8	0.5	0.80143	2	43.2417	0.11793
20	40	0.5	0.75084	2	41.3126	0.15099
4	4	1	0.81329	2	38.23	0.13933
6	4	1.5	0.79272	1	40.5561	0.07254
4	2	2	0.79285	1	45.259	0.08525
10.65	4	2.6625	0.78077	1	39.5424	0.04356
6	2	3	0.769	1	39.9523	0.08169
20	4	5	0.77915	1	42.1512	0.03662
10.65	2	5.325	0.78092	1	42.6282	0.0483
20	2	10	0.76694	1	40.3836	0.017653

\*Οι τιμές που προέκυψαν από το στατιστικό κριτήριο ήταν παραπλήσιες για τις τιμές N=5 έως N=9.

Αρχικά, παρατηρείται πως όσο αυξάνεται ο λόγος HRT/T τόσο πιο πολύ τείνει στο μοντέλο της πλήρους ανάμιξης ο αντιδραστήρας κρίνοντας από τον  $N_R$ . Επιβεβαιώνεται και από τα διαγράμματα για αυτές τις περιπτώσεις, τα οποία εμφανίζουν απόκριση αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης σε πείραμα βηματικής επιβολής. Για τιμές του λόγου HRT/T κοντά στο 1 τα δεδομένα πλησιάζουν το μοντέλο δύο αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης στη σειρά, ενώ όσο μειώνεται ο λόγος HRT/T σε τιμές χαμηλότερες της μονάδας τόσο αυξάνονται οι ισοδύναμοι αντιδραστήρες πλήρους ανάμιξης στη σειρά, προσομοιώνοντας εμβολική ροή. Έτσι επιβεβαιώνεται η ευελιξία αυτού του PABR, να λειτουργεί σε συνθήκες από πλήρη ανάμιξη έως και εμβολική ροή με κατάλληλη ρύθμιση των παραμέτρων λειτουργίας του. Στα αντίστοιχα διαγράμματα υπάρχει τάση αύξησης του ιχνηθέτη και μετά του τρεις χρόνους παραμονής και το σύστημα ισορροπεί σε μεγάλη τιμή συγκέντρωσης σε σχέση με την αρχική. Με τη χρήση μικρών λόγων HRT/T, δηλαδή με τη συμπεριφορά της απόκρισης του αντιδραστήρα να μοιάζει αυτή εμβολικής ροής, υπάρχει αύξηση της συγκέντρωσης, στη συνέχεια όμως παρατηρούνται διακυμάνσεις και δεν διατηρείται μια σταθερή κατάσταση, με τη συγκέντρωση να μειώνεται σταδιακά.

Γενικά, σε όλες τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε συγκέντρωση ιχνηθέτη στην τροφοδοσία ίση με  $1 \text{ mol/m}^3$ , δόθηκε στο σύστημα χρόνος ίσο με τον τριπλάσιο του χρόνου παραμονής κάθε πειράματος και στη συνέχεια μετρήθηκε η συγκέντρωση στην έξοδο, η οποία κυμαινόταν από  $0.75 - 0.82 \text{ mol/m}^3$ . Σε κανένα από τα πειράματα δεν εξισώθηκε η συγκέντρωση της εξόδου με τη συγκέντρωση εισόδου, αλλά επιτεύχθηκε τουλάχιστον το 75% αυτής. Σε μεγαλύτερα χρονικά διαστήματα προσομοίωσης στα μοντέλα που πλησιάζουν την πλήρη ανάμιξη τα διαγράμματα φαίνεται να έχουν την τάση να αυξηθεί και άλλο η συγκέντρωση στο εσωτερικό του αντιδραστήρα. Περιορισμό στη συγκεκριμένη περίπτωση επιβάλλει η χαμηλή ποιότητα πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε και η υπολογιστική δύναμη που απαιτεί ένα πιο σύνθετο πλέγμα καθώς και μεγαλύτεροι χρόνοι προσομοίωσης. Ήδη σε προβλήματα που χρειάστηκε μεγάλος χρόνος για την προσομοίωση της κατανομής χρόνου παραμονής όπως για  $HRT=20 \text{ d}$  και  $T=2 \text{ d}$  κάποια σημεία του αντιδραστήρα παρουσιάζουν μεγάλες αποκλίσεις στη συγκέντρωση σε σχέση με τα παραπλήσιά τους. Οι αποκλίσεις αυτές αναφέρονται στη βιβλιογραφία ως «artifacts» και είναι αριθμητικές αστοχίες που δεν επηρεάζουν την αξιοπιστία των λύσεων. Οι διακυμάνσεις αυτές (artifacts) παρατηρούνται πιθανότατα εξαιτίας της ποιότητας του πλέγματος και έχουν προκύψει σε συγκεκριμένα σημεία όπως η ένωση των σωληνώσεων με τον αντιδραστήρα ή στη σύζευξη των σωλήνων εισόδου και εξόδου.

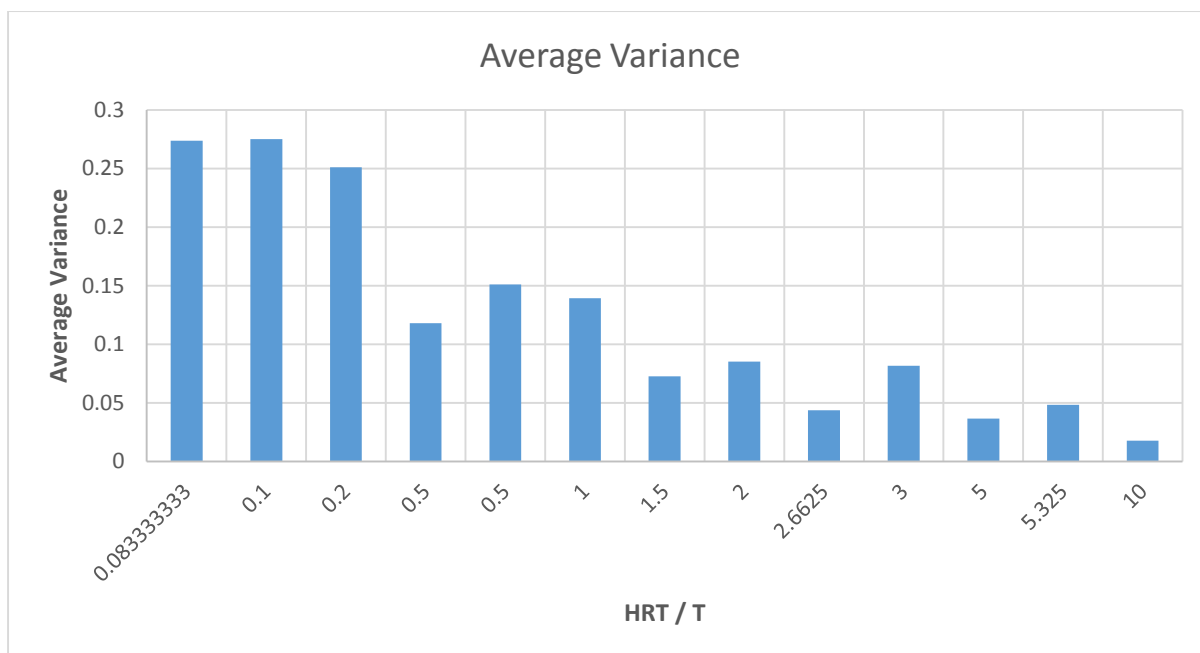
Οι μεγαλύτερες συγκεντρώσεις εξόδου προέκυψαν στα πειράματα με μικρούς λόγους HRT/T, όπως φαίνεται από τον παραπάνω πίνακα, πιο συγκεκριμένα για  $HRT/T= 0.2, 0.1, 0.0833$ . Οι τιμές αυτές του HRT/T υποδεικνύουν εμβολική ροή, δίνοντας στον ιχνηθέτη τη δυνατότητα να πληρώσει το μεγαλύτερο μέρος του αντιδραστήρα πριν διακοπεί η τροφοδοσία του και μετακινηθεί στο επόμενο διαμέρισμα προκαλώντας της παραπάνω ανάμιξη του υπάρχοντος όγκου του νερού με το εισαγόμενο διάλυμα. Έτσι εμφανίζεται μια μείωση στις συγκεντρώσεις παρά την αρχική αύξηση, αποτρέποντας τον αντιδραστήρα από την ολοκληρωτική επίτευξη εμβολικής ροής.



Τα αποτελέσματα της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη στα διαγράμματα παρουσιάζουν καμπύλες, οι οποίες οφείλονται στις διαφορετικές συγκεντρώσεις που υπολογίζονται στις αντίστοιχες εξόδους. Αυτές οι καμπύλες εμφανίζουν μέγιστα ή ελάχιστα και είναι διαφορετικές για διαφορετικό HRT/T. Στις περιπτώσεις που δύο προσομοιώσεις έχουν τον ίδιο HRT/T, όπως για HRT=20, T=4 και HRT=10.65, T=2 οι συγκεκριμένες καμπύλες εμφανίζουν παρόμοια συμπεριφορά όπως αναφέρθηκε στην παράθεση των αντίστοιχων διαγραμμάτων τους. Αντίστοιχη συμπεριφορά εμφανίζουν και οι προσομοιώσεις με HRT=20d, T=40 d και HRT=4 d, T=8 d, με τις καμπύλες σε αυτά τα διαγράμματα να εμφανίζουν μέγιστο και έχουν τα κοίλα στραμμένα προς τα κάτω. Αντίστροφη συμπεριφορά παρουσιάζουν, δηλαδή έχουν τα κοίλα στραμμένα προς τα πάνω και εμφανίζουν ελάχιστο, οι προσομοιώσεις με HRT=4 d, T=4 d και HRT=10.65 d, T=4 d. Ο κάθε κύκλος των διαμερισμάτων του αντιδραστήρα, με τις αντίστοιχες συγκεντρώσεις σε κάθε διαμέρισμα, εμφανίζει μια περιοδική κατάσταση παρουσιάζοντας όμοια συμπεριφορά σε διαφορετικές χρονικές στιγμές.

Η εξαγωγή μέσων τιμών συγκεντρώσεων και η επανάληψη των υπολογισμών που έγιναν, βοηθούν στην επιβεβαίωση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν για μεγάλους λόγους HRT/T. Μειώνοντας το λόγο HRT/T άρα και τις εναλλαγές στα διαμερίσματα του αντιδραστήρα, δε λαμβάνονταν αποτελέσματα που να συγκλίνουν με τα ήδη υπάρχοντα, κάτι που επιβεβαιώνεται από τη μεγαλύτερη διαφορά στις τιμές των συγκεντρώσεων που παρατηρείται για τους μικρότερους λόγους HRT/T. Για λόγο HRT/T μεγαλύτερο από τη μονάδα, η επεξεργασία των μέσων συγκεντρώσεων επιφέρει αποτελέσματα κοντά στα αντίστοιχα που προέκυψαν από το πρόγραμμα, σε κάποιες περιπτώσεις βοηθά στον προσδιορισμό του ισοδύναμου αριθμού αντιδραστήρων πλήρους ανάμιξης και στον έλεγχο των αποτελεσμάτων.

Οι διακυμάνσεις της συγκέντρωσης παρουσιάζουν αύξηση όσο μειώνεται ο λόγος HRT/T. Δημιουργήθηκε διάγραμμα από τον πίνακα με τα δεδομένα να είναι σε αύξουσα σειρά λόγου HRT/T που παρατίθεται παρακάτω:



Διάγραμμα 29: Μέση Διαφορά Συγκεντρώσεων Ιχνηθέτη στα διαμερίσματα του Αντιδραστήρα, ανάλογα με το λόγο HRT/T.

Η μικρότερη διακύμανση των τιμών εμφανίζεται για λόγο HRT/T=10, αντιστοιχεί στο πείραμα με HRT=20 d, T=2 d, ενώ η μεγαλύτερη για HRT/T=0.0833, για το πείραμα HRT=6 d, T=72 d. Στις περιπτώσεις που ο αντιδραστήρας τείνει στη συμπεριφορά πλήρους ανάμειξης μειώνεται η διακύμανση που παρατηρείται στις συγκεντρώσεις, αφού είναι πιο ομαλή η απόκριση του αντιδραστήρα και δεν παρουσιάζει την απότομη αύξηση που εμφανίζεται στην απόκριση εμβολικής ροής.

Οι «νεκροί» όγκοι που υπολογίστηκαν δεν εμφανίζουν άμεση εξάρτηση από τον λόγο HRT/T, οι τιμές τους κυμαίνονται από 38.23% έως 47.2%. Το μεγαλύτερο ποσοστό νεκρού όγκου εμφανίζεται για τον μικρότερο λόγο HRT/T=0.0833 ενώ το μικρότερο αντιστοιχεί σε HRT/T=1. Όσον αφορά τις περιπτώσεις όπου η ρεολογική συμπεριφορά του αντιδραστήρα προσεγγίζει την εμβολική ροή, από τα πειραματικά αποτελέσματα που προέκυψαν στη διπλωματική εργασία του Γ. Σεϊντή προέκυψε «νεκρός» χώρος της τάξης του 20.8% για την περίπτωση της εναλλαγής του διαμερίσματος τροφοδοσίας (HRT=4d, T=2d) και 7.5% για την περίπτωση της μη εναλλαγής. Τα δεδομένα των προσομοιώσεων παρουσιάζουν σημαντική απόκλιση από τα πειραματικά δεδομένα (π.χ. HRT=4d, T=2d,  $V_{DEAD}=45.3\%$ ).

Στις περιπτώσεις όπου η ρεολογική συμπεριφορά του αντιδραστήρα προσεγγίζει την πλήρη ανάμειξη (N=1), τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων είναι πλησιέστερα στα δεδομένα της βιβλιογραφίας όσον αφορά τους «νεκρούς» χώρους σε αντιδραστήρες τύπου CSTR. Σε μελέτη που πραγματοποιήθηκε για αντιδραστήρα πλήρους ανάμειξης με HRT=25.3d, οι Torres et al. (Torres et al., 2000) υπολόγισαν το «νεκρό» χώρο σε τιμές που προσεγγίζουν το 52.5%.

## Συμπεράσματα

Από τα αποτελέσματα των υπολογιστικών πειραμάτων κατανομής χρόνου παραμονής για τον P.A.B.R., προκύπτει πως οι παράμετροι λειτουργίας που καθορίζουν τη συμπεριφορά του είναι ο υδραυλικός χρόνος παραμονής και η περίοδος εναλλαγής των διαμερισμάτων. Μεταβάλλοντας το λόγο HRT/T, ο αντιδραστήρας συμπεριφέρεται ως πλήρους ανάμειξης για μεγάλες τιμές, ενώ όσο μικραίνει το κλάσμα τόσο αποκλίνει από αυτή τη συμπεριφορά και τείνει προς αντιδραστήρα εμβολικής ροής. Παράλληλα αυξάνεται ο ισοδύναμος αριθμός αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης στη σειρά.

Σε όλες τις προσομοιώσεις η τελική συγκέντρωση που επιτεύχθηκε στην έξοδο για χρόνο προσομοίωσης ίσο με τρεις χρόνους παραμονής ήταν το 75 – 82% της αρχικής. Συγκρίθηκαν τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με πειραματικά αποτελέσματα για υδραυλικό χρόνο παραμονής 4 ημερών και περίοδο εναλλαγής 2 ημερών, τα οποία συνέκλιναν σε ικανοποιητικό βαθμό, έχοντας παρόμοια συμπεριφορά.

Οι τιμές της συγκέντρωσης σε κάθε προσομοίωση, για παραπλήσιες χρονικές στιγμές, δημιουργούν καμπύλες που αντιστοιχούν στην εκάστοτε έξοδο που χρησιμοποιείται. Η μορφή τους μεταβάλλεται ανάλογα με το λόγο HRT/T. Για μεγάλες τιμές HRT/T εμφανίζουν μικρή καμπυλότητα, ενώ καθώς μειώνεται ο λόγος εμφανίζουν κοίλα που είναι στραμμένα προς τα κάτω ή προς τα πάνω, δημιουργώντας μέγιστα και ελάχιστα αντίστοιχα. Από τη συμπεριφορά αυτή γίνεται αντιληπτή η απομάκρυνση από την πλήρη ανάμειξη ( $N_R=1$ ). Για μεγαλύτερους ισοδύναμους αριθμούς αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης στη σειρά μεταβάλλεται το διάγραμμα της συγκέντρωσης με το χρόνο εντελώς, προσομοιάζοντας την απόκριση αντιδραστήρα εμβολικής ροής σε βηματική επιβολή. Επιπλέον, οι τιμές της συγκέντρωσης εμφανίζουν περιοδική κατάσταση, ανά τέσσερις καμπύλες, δηλαδή σε κάθε κύκλο του αντιδραστήρα.

Οι «νεκροί» όγκοι που υπολογίστηκαν δεν εμφανίζουν άμεση εξάρτηση από το λόγο HRT/T. Σε σύγκριση με τιμές από βιβλιογραφική ανασκόπηση, για τις περιπτώσεις μεγάλου λόγου HRT/T, οι τιμές των «νεκρών» όγκων προσέγγιζαν τα βιβλιογραφικά δεδομένα, αντιθέτως για μικρούς λόγους HRT/T παρουσίασαν σημαντική απόκλιση.

## Προτάσεις για Μελλοντική Εργασία

Από τα συμπεράσματα και τη σύνοψη των αποτελεσμάτων κρίνεται απαραίτητη η επέκταση της μελέτης, αναβαθμίζοντας και το μοντέλοπροσομοίωσης.

Αρχικά προτείνεται η διεξαγωγή των προσομοιώσεων με τη χρήση πιο πυκνού πλέγματος, για την διερεύνηση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Επίσης, συνίσταται η αξιοποίηση μεγαλύτερης υπολογιστικής δύναμης, καθώς οι προσομοιώσεις έγιναν σε προσωπικό υπολογιστή καθημερινής χρήσης και όχι σε εξειδικευμένο υπολογιστή που έχει κατασκευαστεί με σκοπό την επίλυση υπολογιστικών προβλημάτων.

Στη συνέχεια, για τη βελτίωση του μοντέλου, προτείνεται η εισαγωγή χημικής αντίδρασης για την προσομοίωση της λειτουργίας του Περιοδικού Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες. Μετά την επίτευξη της εναλλαγής των διαμερισμάτων και των πολλαπλών πειραμάτων κατανομής χρόνου παραμονής που έγιναν στην παρούσα διπλωματική εργασία το επόμενο στάδιο είναι η εξέλιξη του μοντέλου ώστε να περιέχει τη διαδικασία της αναερόβιας χώνευσης.

Τα υπολογιστικά αποτελέσματα που προέκυψαν, χρειάζονται επαλήθευση από αντίστοιχα εργαστηριακά πειράματα κατανομής χρόνου παραμονής στον αντιδραστήρα, για τη μελέτη της επίδρασης του λόγου HRT/T στη λειτουργία του. Επιπροσθέτως, προτείνεται η διεξαγωγή προσομοιώσεων κατανομής χρόνου παραμονής στο μοντέλο της παρούσας διπλωματικής για περισσότερους λόγους HRT/T, με σκοπό την καταγραφή των διακυμάνσεων που παρατηρούνται στη συμπεριφορά του αντιδραστήρα. Η απόκτηση γνώσεων για το ευρύτερο φάσμα λειτουργίας του αντιδραστήρα, οδηγεί στην καλύτερη κατανόησή του και στην κατάλληλη προσαρμογή των παραμέτρων λειτουργίας του ανάλογα με τις απαιτήσεις που υπάρχουν στις διάφορες εφαρμογές του.

Τέλος, επιθυμητή θα ήταν και η μελέτη της επίδρασης μεταβολών στη γεωμετρία του αντιδραστήρα στα ρεολογικά του χαρακτηριστικά. Έχοντας ως απώτερο σκοπό την εισαγωγή του P.A.B.R. στη βιομηχανία επεξεργασίας αποβλήτων, είναι απαραίτητη η ανάπτυξη ενός μοντέλου που θα προσομοιώνει με επιτυχία την αναερόβια χώνευση σε αντιδραστήρα βιομηχανικών διαστάσεων.

## Βιβλιογραφία

### Ελληνική Βιβλιογραφία

Ασημακόπουλος Δ.Κ., Λυγερού Β.Ι., Αραμπατζής Γ.Α., 2012. Μεταφορά Θερμότητας και Μάζας. Εκδόσεις Παπασωτηρίου, Αθήνα.

Γρηγοροπούλου Ε. και Φιλιππόπουλος Κ., 2013. Μηχανική Χημικών Διεργασιών Ι (σημειώσεις παραδόσεων), Εκδόσεις Ε.Μ.Π., Αθήνα.

Κοψαχείλης, Α. (2009). Αναερόβια Χώνευση Υγρών Αποβλήτων Ελαιοτριβείου Σε Ένα Περιοδικό Αναερόβιο Αντιδραστήρα Με Ανακλαστήρες (Pabr) Και Κλασματοποίηση Των Εκροών.

Παπαϊωάννου Α.Θ., 2002. Μηχανική των Ρευστών. Τόμος Ι, 2<sup>η</sup> έκδοση. Εκδόσεις Κοράλι, Αθήνα,.

Παπαϊωάννου Α.Θ., 2002. Μηχανική των Ρευστών. Τόμος ΙΙ, 2<sup>η</sup> έκδοση. Εκδόσεις Κοράλι, Αθήνα,.

Σειντής, Γ. (2015). Υδραυλικά Χαρακτηριστικά και Κλιμάκωση Μεγέθους Περιοδικού Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες ( PABR ).

Σκιαδάς, Ι. (1998). Περιοδικός Αναερόβιος Χωνευτήρας εναλλασσόμενης καθοδικής και ανοδικής ροής. Πάτρα: Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Χημικών Μηχανικών.

### Ξενόγλωσση Βιβλιογραφία

Borroto, J. I., Dominguez, J., Griffith, J., Fick, M., & Leclerc, J. P. (2003). Technetium-99m as a tracer for the liquid RTD measurement in opaque anaerobic digester: Application in a sugar wastewater treatment plant. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 42(11), 857–865. [http://doi.org/10.1016/S0255-2701\(02\)00109-5](http://doi.org/10.1016/S0255-2701(02)00109-5)

Fogler H.S., 2006., Elements of Chemical Reaction Engineering, 4<sup>th</sup> Ed., Pearson Education Inc. (Απόδοση στα Ελληνικά: Μηχανική Χημικών Αντιδρασεών & Σχεδιασμός Αντιδραστήρων (Φιλιππόπουλος Κ.Ι. και Μαρνέλλος Γ.), Εκδ. Τζιόλα, Αθήνα 2009)

IWA. (2007). *Biological Wastewater Treatment Vol.4: Anaerobic Reactors. Biological wastewater treatment in warm climate regions* (Vol. 4).

Ji, J., Zheng, K., Xing, Y., & Zheng, P. (2012). Hydraulic characteristics and their effects on working performance of compartmentalized anaerobic reactor. *Bioresource Technology*, 116, 47–52. <http://doi.org/10.1016/j.biortech.2012.04.026>

LIU, X. lei, REN, N. qi, & WAN, C. li. (2007). Hydrodynamic characteristics of a four-compartment periodic anaerobic baffled reactor. *Journal of Environmental Sciences*, 19(10), 1159–1165. [http://doi.org/10.1016/S1001-0742\(07\)60189-2](http://doi.org/10.1016/S1001-0742(07)60189-2)

Kinyua, M. N., Zhang, J., Camacho-Céspedes, F., Tejada-Martinez, A., & Ergas, S. J. (2016). Use of physical and biological process models to understand the performance of tubular anaerobic digesters. *Biochemical Engineering Journal*, 107, 35–44. <http://doi.org/10.1016/j.bej.2015.11.017>

Levenspiel O., 1999. Chemical Reaction Engineering, 3<sup>rd</sup> Ed., J. WileyandSohs, NewYork (Απόδοση στα Ελληνικά: Μηχανική Χημικών Διεργασιών (Πομώνης Φ., κ.ά.), Εκδ. Κωσταράκη, Αθήνα 2011).

Liu, X., Ren, N., & Yuan, Y. (2009). Performance of a periodic anaerobic baffled reactor fed on chinese traditional medicine industrial wastewater. *Bioresource Technology*, 100(1), 104–110. <http://doi.org/10.1016/j.biortech.2008.06.007>

Nanda, S. (2008). Reactors and Fundamentals of Reactors Design for Chemical Reaction. *Pharmaceutical Engineering*.

Torres, J. J., Soler, A., Sáez, J., & Llorens, M. (2000). Hydraulic performance of a deep stabilisation pond fed at 3.5 m depth. *Water Research*, 34(3), 1042–1049. [http://doi.org/10.1016/S0043-1354\(99\)00192-X](http://doi.org/10.1016/S0043-1354(99)00192-X)

Zhong, J., Stevens, D. K., & Hansen, C. L. (2015). Optimization of anaerobic hydrogen and methane production from dairy processing waste using a two-stage digestion in induced bed reactors (IBR). *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(45), 15470–15476. <http://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.09.085>

## Ιστοσελίδες

Comsol. (2012). Comsol Multiphysics User's Guide. <https://www.comsol.com/>

<http://www.openfoam.com/>

<http://www.ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent>