



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

**ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ**

**ΣΠΟΥΔΩΝ**

**ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ**

**2015-2017**

**Μοντελοποίηση Περιοδικού Αναερόβιου Βιοαντιδραστήρα  
με Ανακλαστήρες με χρήση Comsol Multiphysics**

**Μεταπτυχιακή Εργασία**

**Δημητρέλλος Γιώργος**

**Επιβλέπων:** Μπουντουβής Ανδρέας, Καθηγητής Ε.Μ.Π.

**Τριμελής Επιτροπή:**

Καραντώνης Αντώνης, Επίκουρος Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Μπουντουβής Ανδρέας, Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Λυμπεράτος Γεράσιμος, Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Στον κυρ Αντώνη,

## Ευχαριστίες

Για αρχή να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την βοήθεια και τη στήριξη που μου παρέχει όλα αυτά τα χρόνια.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή κύριο Γεράσιμο Λυμπεράτο για την εμπιστοσύνη και την υπομονή που μου επέδειξε καθ' όλη τη διάρκεια της συνεργασίας μας. Επίσης τον καθηγητή κύριο Ανδρέα Μπουντουβή που με την συμβολή του βοήθησε να πραγματοποιηθεί η παρούσα εργασία, αλλά και τον επίκουρο καθηγητή κύριο Αντώνη Καραντώνη για τη δική του συμβολή σε όλο αυτό το εγχείρημα.

Ευχαριστώ τον διδακτορικό Γιάννη Μιχαλόπουλο για την στήριξη, τον κόπο που κατέβαλε και την άψογη συνεργασία. Ευχαριστώ επίσης, τον Θεόφιλο Καμπερίδη και τον μεταδιδακτορικό τον Γιώργο Πάσχο για όλη την βοήθεια που μου έδωσαν.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω όλα τα μέλη από το Εργαστήριο Οργανικής Χημικής Τεχνολογίας και τους φίλους μου για όλη την υποστήριξη κατά τη διάρκεια του μεταπτυχιακού.

# Περιεχόμενα

Περίληψη.....	6
Abstract .....	7
1. Comsol Multiphysics® Version 5.2 .....	8
2. Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων .....	10
2.1 Εισαγωγή της Μεθόδου .....	10
2.2 Πλεονεκτήματα πεπερασμένων στοιχείων .....	13
2.3 Είδη στοιχείων (elements).....	14
2.4 Σφάλμα- Σύγκλιση μεθόδου .....	16
2.5 Σύγκλιση πλέγματος.....	17
3. Αναερόβια χώνευση .....	18
3.1 Ορισμός και στάδια της αναερόβιας χώνευσης .....	18
3.2 Πλεονεκτήματα-Μειονεκτήματα.....	19
4. Κινητική Monod.....	21
5. Περιοδικός Αναερόβιος Αντιδραστήρας με Ανακλαστήρες (PABR).....	26
5.1 Χαρακτηριστικά-Τρόπος λειτουργίας .....	26
5.2 Αντιδραστήρας συνεχούς λειτουργίας.....	29
6. Ρευστομηχανική μελέτη και μεταφορά μάζας στον PABR.....	30
6.1 Έρπουσα Ροή .....	30
6.2 Μεταφορά μάζας.....	31
7. Υπολογιστικό μέρος.....	33
7.1 Παραμετρική ανάλυση για την εύρεση της σταθεράς της κινητικής της αντίδρασης .....	33
7.2 Απλοποίηση της γεωμετρίας του αντιδραστήρα- κατάστρωση μοντέλου.....	35
7.2.1 Απλοποίηση γεωμετρίας.....	35
7.2.2 Ορισμός των υλικών που αποτελείται ο αντιδραστήρας.....	39
7.2.3 Ορισμός της φυσικής του προβλήματος.....	40
7.2.4 Γένεση Πλέγματος .....	43
7.2.5 Επίλυση των εξισώσεων του μοντέλου.....	44
7.3 Ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα.....	50
8. Αποτελέσματα-Συζήτηση.....	58
8.1 Ανασκόπηση διαδικασίας .....	58
8.2 Πείραμα αναερόβιας χώνευσης .....	59
8.3 Μοντελοποίηση αναερόβιας χώνευσης 4 <sup>ov</sup> κύκλων λειτουργίας σε PABR.....	61
8.3.1 Τρόπος εξαγωγής αποτελεσμάτων .....	61

8.3.2 Πρώτος κύκλος λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης.....	61
8.3.3 Δεύτερος κύκλος λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης.....	67
8.3.4 Τρίτος κύκλος λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης.....	72
8.3.5 Τέταρτος κύκλος λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης.....	78
8.3 Σύνοψη των αποτελεσμάτων .....	84
8.4 Συμπεράσματα- Προτάσεις για μελλοντική διερεύνηση.....	89
Βιβλιογραφία.....	91

## Περίληψη

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας ήταν η προσομοίωση της κατανάλωσης του οργανικού υποστρώματος (υπολογισμένου σε τιμές χημικά απαιτούμενου οξυγόνου) κατά τη διεργασία της αναερόβιας χώνευσης προς παραγωγή βιοαερίου σε έναν πιλοτικής κλίμακας Περιοδικό Αναερόβιο Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες (Periodic Anaerobic Baffled Reactor) ενεργού όγκου 77L (λίτρων).

Η μοντελοποίηση πραγματοποιήθηκε με την χρήση πεπερασμένων στοιχείων μέσω του υπολογιστικού πακέτου Comsol Multiphysics® Version 5.2. Αποτελεί δε, το μοντέλο αυτό, συνέχεια των διπλωματικών εργασιών (Γ. Σεϊντής, 2015, Θ. Καμπερίδης, 2016) στις οποίες είχε αποδοθεί η γεωμετρία του εν λόγω αντιδραστήρα και είχε χαρακτηριστεί η ρεολογική του συμπεριφορά ανάλογα με το λόγο του υδραυλικού χρόνου παραμονής (HRT) προς την περίοδο εναλλαγής  $T$  των διαμερισμάτων. Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε απλοποίηση της γεωμετρίας του αντιδραστήρα που είχε ως σκοπό τη μείωση των υπολογιστικών απαιτήσεων. Χρησιμοποιήθηκε αραιότερο πλέγμα από αυτό που απαιτούσε η προηγούμενη γεωμετρία δίνοντας ταυτόχρονα ικανοποιητικά αποτελέσματα.

Το δεύτερο και κυριότερο μέρος αφορούσε την εισαγωγή χημικής αντίδρασης η οποία προσομοιάζει την κατανάλωση του COD (chemical oxygen demand) που επιτυγχάνεται στον αντιδραστήρα με την ταυτόχρονη παραγωγή βιοαερίου. Για τη μελέτη αυτή πραγματοποιήθηκε παραμετρική ανάλυση, σε μοντέλο που αναπτύχθηκε σε περιβάλλον Aquasim που περιγράφει την κατανάλωση υποστρώματος σε αντιδραστήρα συνεχούς λειτουργίας. Η παράμετρος η οποία εκτιμήθηκε ήταν η σταθερά της αντίδρασης κατανάλωσης του COD με βάση τα πειραματικά δεδομένα ενός εργαστηριακού πειράματος τεσσάρων πειραματικών κύκλων λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης. Έγινε η παραδοχή από προηγούμενη ρεολογική μελέτη ότι ο PABR συμπεριφέρεται ως CSTR, ενώ η αντίδραση κατανάλωσης του COD ακολουθεί απλή κινητική τύπου Blackman ή μοντέλο δύο φάσεων για  $S < 2K_s$ .

Παρατηρήθηκε ότι ο ρυθμός αντίδρασης της μορφής  $r = \mu(S, X)X$  ( $\mu$ : ειδικός ρυθμός ανάπτυξης εκφρασμένος μέσω του μοντέλου δύο φάσεων,  $X$ : συγκέντρωση βιομάζας στον αντιδραστήρα), προβλέπει σε ικανοποιητικό βαθμό την κατανάλωση του υποστρώματος και την παραγωγή βιοαερίου βάση των πειραματικών συνθηκών λειτουργίας του αντιδραστήρα και για τους τέσσερις κύκλους αναερόβιας χώνευσης. Επιπλέον παρατηρείται ο περιοδικός τρόπος με τον οποίο μεταβάλλεται η συγκέντρωση του υποστρώματος καθ' ύψος των διαμερισμάτων του αντιδραστήρα. Τέλος προτείνεται περαιτέρω απλοποίηση της γεωμετρίας αλλά και η προσάρτηση περισσότερων μεταβολικών αντιδράσεων για λεπτομερέστερη περιγραφή της αναερόβιας χώνευσης, ενώ θα μπορούσε να γίνει μοντελοποίηση των συσσωματωμάτων (granules) της ιλύος στο εσωτερικό του αντιδραστήρα.

# Abstract

The aim of this thesis is the simulation of the organic substrate consumption in terms of chemical oxygen demand, during the process of anaerobic digestion for the production of biogas in a pilot Periodic Anaerobic Baffled Reactor with a useful volume of 77L.

The modeling was conducted with the use of finite elements through the simulation software Comsol Multiphysics<sup>®</sup>. This model is based on the thesis of George Seintis, 2015, and Theofilos Kamperidis, 2016, who have constructed the geometry of the reactor and studied the rheological behavior accordingly with the fraction of hydraulic retention time and the switching period (T) of the departments. In this thesis, a simplification of the reactor geometry was made, which intended to reduce the calculation demands. A coarser mesh was used than the one required in the previous geometry and produced satisfactory results.

The second and most important part was the introduction of a reaction which simulates the consumption of chemical oxygen demand (COD) that took place in the reactor with the simultaneous production of biogas. For this study, a parametric estimation was used for a model that was developed in an Aquasim environment which describes the consumption of substrate in a continuous stirred-tank reactor. The parameter that has been estimated was the reaction rate constant of COD based on the data of an experimental process of four experimental periods of anaerobic digestion. It has been taken as a fact from a previous rheological study that a PABR behaves like a CSTR but the reaction of the consumption of COD follows Blackman kinetics (a two phase model) when the COD concentration is sufficiently low.

It was observed that the rate of the reaction given in the form  $r = \mu(S, X)X$  (where  $\mu$ : the specific growth rate, X: the biomass concentration into the reactor), describes the consumption of substrate (COD) and the production of biogas at a satisfactory level, concerning the experimental operation requirements of the reactor and the results of the anaerobic digestion experiment. Furthermore, it was observed that the periodic operation modified the concentration of substrate in the compartments of the reactor. In conclusion, a further simplification of the geometry is proposed, as well as the inclusion of more detailed kinetics of anaerobic digestion, while a modeling of the granules formed inside the reactor could also be accomplished.

## 1. Comsol Multiphysics® Version 5.2

Το Comsol Multiphysics® πρόκειται για μια πλατφόρμα λογισμικού γενικής χρήσης, βασισμένη σε προηγμένες αριθμητικές μεθόδους με σκοπό τη μοντελοποίηση και την προσομοίωση προβλημάτων που βασίζονται στη φυσική. Χρησιμοποιεί αρκετές διαφορετικές μεθόδους επίλυσης των μοντέλων μέσα στις οποίες συμπεριλαμβάνονται η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων όγκων, η μέθοδος οριακού στοιχείου και οι μέθοδοι ανίχνευσης σωματιδίων. Η κύρια όμως μέθοδος που ειδικεύεται είναι αυτή των πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Method) με τον ταυτόχρονο έλεγχο σφάλματος, χρησιμοποιώντας μια ποικιλία αριθμητικών λύσεων έμμεσων και άμεσων ανάλογα με το πρόβλημα. Το Comsol Multiphysics® παρέχει εργαλεία μοντελοποίησης οποιαδήποτε γεωμετρίας (1D, 2D & 3D) ενώ μπορεί να εισαχθεί γεωμετρία από λειτουργικά όπως το CAD, το Rhinoceros κ.α. Το πρόγραμμα προσφέρει ενσωματωμένες βιβλιοθήκες επιστημονικών δεδομένων και ιδιοτήτων υλικών, αριθμητικούς επιλύτες, εργαλεία επεξεργασίας αποτελεσμάτων όπως και τη δυνατότητα ορισμού του μοντέλου με σχετικές φυσικές ποσότητες, όπως ιδιότητες υλικών, φορτίων, περιορισμών, πηγών και ροών, αντί για τον καθορισμό των εξισώσεων που διέπουν το μοντέλο (Comsol, COMSOL Multiphysics®, 2017). 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:

- Δίνεται η φυσική του προβλήματος που πρόκειται να μοντελοποιηθεί ή και ο συνδυασμός τους (π.χ. Μεταφορά Ρευστού και παράλληλα Μεταφορά Θερμότητας). Κάποιες από τις επιλογές των φαινομένων που παρέχει το λογισμικό παρουσιάζονται στη συνέχεια: Ακουστικά φαινόμενα, Ηλεκτρομαγνητικά Φαινόμενα, Μεταφορά Χημικών Ειδών, Ηλεκτροχημικά Φαινόμενα, Μεταφορά Ρευστών, Μεταφορά Θερμότητας, Επίλυση Διαφορικών Εξισώσεων κ.α.
- Δίνεται το είδος του προβλήματος το οποίο μελετάται, δηλαδή αν θα είναι χρονομεταβαλλόμενο ή όχι.



- Ορίζεται η γεωμετρία μέσω του ίδιου του λογισμικού πακέτου ή εισάγεται από άλλο συμβατό λογισμικό
- Ορίζονται τα υλικά, 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.
- Ορίζεται το πλέγμα. Δημιουργείται η γένεση ενός πλέγματος είτε αυτόματα, όπου ο χρήστης επιλέγει μόνο το μέγεθος των στοιχείων είτε 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, COMSOL Multiphysics®, 2017). 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.

## 2. Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων

### 2.1 Εισαγωγή της Μεθόδου

Η περιγραφή των νόμων της φυσικής για τα χωρικά και τα χρονικά μεταβαλλόμενα προβλήματα εκφράζονται συνήθως μέσω μερικών διαφορικών εξισώσεων (ΜΔΕ). Στην πλειοψηφία τους τα προβλήματα αυτά λόγω της πολυπλοκότητας των ΜΔΕ είναι αδύνατο να λυθούν με αναλυτικό τρόπο. Αντ' αυτού, μία καλή προσέγγιση των εξισώσεων αυτών μπορεί να κάνει τα πράγματα πολύ πιο εύκολα. Η προσέγγιση αυτή βασίζεται σε διάφορους τύπους **διακριτοποίησης** (discretization). Οι τύποι αυτοί αποσκοπούν στην προσέγγιση των ΜΔΕ δημιουργώντας ένα αριθμητικό μοντέλο εξισώσεων (αλγεβρικές εξισώσεις), που λύνονται με χρήση αριθμητικών μεθόδων. Η λύση του αριθμητικού μοντέλου είναι η προσέγγιση της ακριβούς λύσης της ΜΔΕ που χαρακτηρίζει το εκάστοτε πρόβλημα. Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιείται για τέτοιου είδους προσεγγίσεις. (Comsol, The Finite Element Method (FEM), 2017)

Η τυπική διατύπωση ενός προβλήματος συνοριακών τιμών είναι να βρεθεί η λύση  $u$ , η οποία είναι η εξαρτημένη μεταβλητή μιας ΜΔΕ (πχ θερμοκρασία, πίεση, πυκνότητα, ηλεκτρικό δυναμικό κ.α.).

$$\mathbf{L}u = f \text{ στο } D \quad (2.1)$$

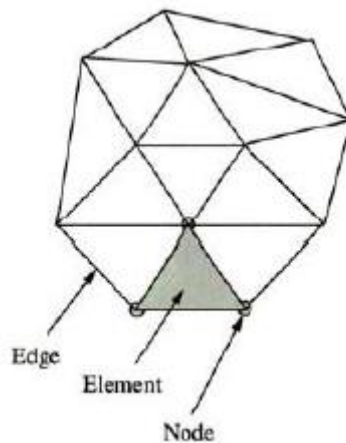
$$\mathbf{B}u = g \text{ στο } \partial D \quad (2.2)$$

Η λύση  $u$  είναι συνάρτηση της θέσης  $\underline{x}$  στο χωρίο  $D$  που είναι υποπεριοχή ενός μονο-, δι- ή τρι- διάστατου Ευκλείδειου χώρου. Το διάνυσμα θέσης,  $\underline{x}$ , ορίζεται από τις συντεταγμένες,  $x_i$ , κάθε σημείου στο  $D$ :

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^k x_i \underline{e}_i \quad (2.3)$$

Όπου  $\underline{e}_j$  είναι τα μοναδιαία διανύσματα στους άξονες συντεταγμένων και  $N$  διάσταση του Ευκλείδειου χώρου. Με  $\mathbf{L}$  συμβολίζεται ο μη απαραίτητα γραμμικός διαφορικός τελεστής που δρα στην  $u$  και με  $\mathbf{B}$  ένας συνοριακός τελεστής ορισμένος στο σύνορο  $\partial D$  του χωρίου  $D$ . Οι συναρτήσεις  $f$  και  $g$  είναι γνωστές συναρτήσεις θέσης, ορισμένες στα  $D$  και  $\partial D$  αντίστοιχα. Πρακτικά η περιοχή ενδιαφέροντος, με τη διαδικασία της

διακριτοποίησης, διαιρείται σε μικρότερα πεπερασμένα στοιχεία και προσεγγίζεται η λύση -με μικρού βαθμού πολυώνυμο-, σε κάθε ένα από αυτά. Με αυτό τον τρόπο, το χωρίο  $D$  και το σύνορο  $\partial D$  υποδιαιρούνται σε επάλληλα υποχωρία πεπερασμένου πλήθους με την ανάπτυξη ενός πλέγματος. Καθένα από τα υποχωρία ονομάζεται στοιχείο (element). Στα όρια των επάλληλων στοιχείων αλλά και στο εσωτερικό τους ορίζονται οι κόμβοι (nodes) του πλέγματος. Η εικόνα 1 δείχνει τα μέρη από τα οποία αποτελείται ένα πλέγμα όπως αυτά αναφέρθηκαν πιο πάνω.



**Εικόνα 1:** Τυπικό πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων-finite element mesh (edge- όριο πλέγματος, element-στοιχείο, node-κόμβος) (Lewis R.W., Nithiarasu P., Seetharamu K.N., 2012)

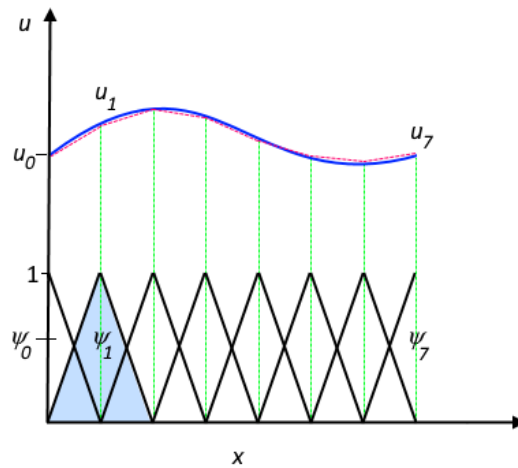
Η λύση  $u$  λοιπόν, μπορεί να προσεγγιστεί από μία άλλη συνάρτηση  $u_h$  η οποία θα είναι γραμμικός συνδιασμός των συναρτήσεων βάσης  $\varphi^i$ , όπως φαίνεται στην παρακάτω έκφραση:

$$u \approx u_h \quad (2.4)$$

Και

$$u_h = \sum_i u_i \varphi^i \text{ για } i = 1, 2, \dots, N \text{ (συνολικός αριθμός κόμβων)} \quad (2.5)$$

Οι συναρτήσεις  $\varphi^i$  είναι πολυώνυμα, συνήθως πρώτου ή δευτέρου βαθμού, των συντεταγμένων του διανύσματος θέσης. Οι συντελεστές  $u_i$  (κομβικοί άγνωστοι) είναι οι τιμές της προσεγγιστικής λύσης στους κόμβους (διάγραμμα 1).



**Διάγραμμα 1:** Η συνάρτηση  $u$  (μπλε καμπύλη) προσεγγίζεται από την  $u_h$  (διακεκομμένη κόκκινη καμπύλη), η οποία είναι γραμμικός συνδυασμός των συναρτήσεων βάσης ( $\psi_i$  που απεικονίζονται με μαύρο χρώμα). Οι συντελεστές είναι:  $u_0$  έως  $u_7$ . (Comsol, The Finite Element Method (FEM), 2017)

Με αυτόν τον τρόπο αναζητώντας την προσεγγιστική πλέον λύση  $\mathbf{u}$  η εξίσωση της μορφής 1.1 θα έχει υπόλοιπο:

$$R \equiv \mathbf{L}u - f \quad (2.6)$$

Η μέθοδος Galerkin σταθμίζει τα υπόλοιπα, πολλαπλασιάζοντας εσωτερικά τη συνάρτηση βάσης  $\varphi^i$  με το υπόλοιπο  $R_i$  για κάθε κόμβο και ολοκληρώνοντας το στο πεδίο που ορίζεται το πρόβλημα, αναζητά λύση που μηδενίζει κάθε ένα από τα σταθμισμένα υπόλοιπα. (Μπουντουβής, 1992)

$$\int \langle R_i, \varphi^i \rangle dS = 0 \quad (2.7)$$

$$R_i \equiv \int_D (\mathbf{L}u - f) \varphi^i dS \quad \text{με } i = 1, 2, \dots, N \text{ και } R_i = 0 \quad (2.8)$$

Αντικαθιστώντας την  $\mathbf{u}$  από την παραπάνω έκφραση έχουμε:

$$R_i \equiv \int_D \varphi^i (\mathbf{L}(\sum_{j=1}^N u_j \varphi^j)) dS - \int_D f \varphi^i \quad (2.9)$$

Αν η διαφορική εξίσωση είναι γραμμική τότε ο διαφορικός τελεστής μπορεί να μπει μέσα στην άθροιση και η έκφραση γίνεται:

$$R_i \equiv \sum_{j=1}^N u_j \int_D \varphi^i L \varphi^j dS - \int_D f \varphi^i dS \quad (2.10)$$

μηδενίζοντάς την προκύπτει ένα γραμμικό σύστημα N εξισώσεων με N αγνώστους,

$$\sum_{j=1}^N a_{ij} u_j - b_i = 0 \quad \text{για } i = 1, 2, \dots, N \quad (2.11)$$

της μορφής δηλαδή:

$$\bar{\bar{A}} \mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (2.12)$$

## 2.2 Πλεονεκτήματα πεπερασμένων στοιχείων

Ένα από τα πλεονεκτήματα των πεπερασμένων στοιχείων είναι ότι παρέχουν σημαντική ελευθερία όσον αφορά στην επιλογή της διακριτοποίησης, τόσο στα στοιχεία που επιλέγονται για να διακριτοποιήσουν τον χώρο όσο και στις συναρτήσεις βάσης.

Ένα δεύτερο πολύ σημαντικό πλεονέκτημα της μεθόδου είναι ότι επιτυγχάνεται καλύτερη συνολική προσέγγιση της λύσης, αφού ελαχιστοποιείται το ολοκληρωτικό υπόλοιπο της διαφορικής εξίσωσης. (G. Strang & G.J. Fix, 1973)

Ενώ από τότε που η μέθοδος αυτή επέτρεψε ένα είδος ελευθερίας στη σχηματοποίηση των στοιχείων ή των υποπεριοχών, είναι εφικτή μία ακριβής αναπαράσταση των οριακών συνθηκών ακόμη και ενός πολύπλοκου πεδίου ορισμού (domain). Η πληθώρα των συστημάτων της επιστήμης των Μηχανικών θα μπορούσαν να απλοποιηθούν με την υποδιαίρεσή τους σε μικρότερα στοιχεία. Αυτά τα στοιχεία μπορούν εύκολα να αναλυθούν από βασικές αρχές και με τον συνδυασμό όλων αυτών των αρχών, αναδομείται η ανάλυση του πλήρους αρχικού συστήματος. Τα συστήματα αυτά αναφέρονται ως discrete systems (διακριτά συστήματα), (Lewis R.W., Nithiarasu P., Seetharamu K.N., 2012). Στις περιπτώσεις όπου τα χαρακτηριστικά του προβλήματος μπορούν να επιλυθούν με αξιόπιστες απλοποιημένες εξισώσεις, το πρόβλημα μπορεί να αναλυθεί χρησιμοποιώντας έναν πεπερασμένο αριθμό συνιστωσών.

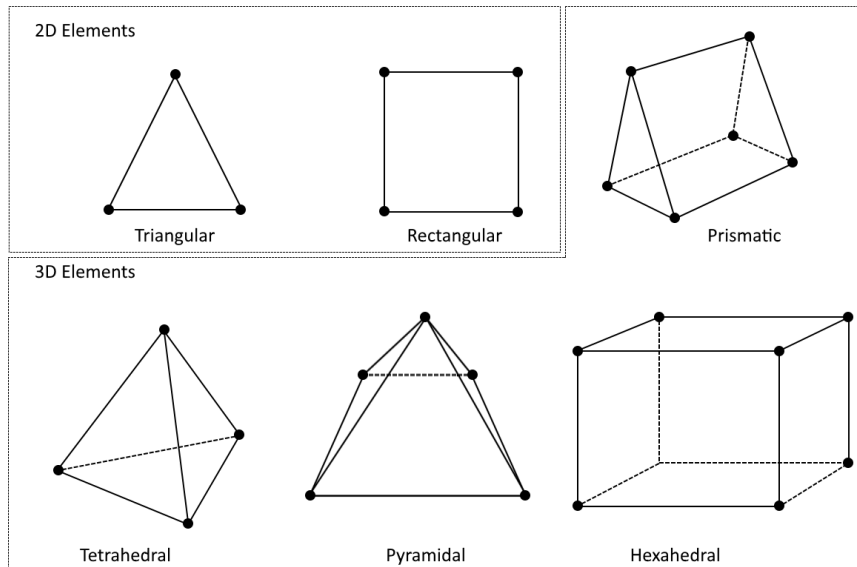
Τα βήματα που ακολουθούνται κατά την ανάλυση των διακριτών συστημάτων είναι τα ακόλουθα:

- Εξιδανίκευση του προβλήματος - Idealization of system, διαδικασία κατά την οποία το σύστημα θεωρείται ιδανικά ως ένα σύνολο από μεμονωμένα στοιχεία.
- Χαρακτηριστικά των στοιχείων - Element characteristics, δηλαδή η διαδικασία της καταγραφής των θεμελιωδών χαρακτηριστικά κάθε στοιχείου.
- Η συναρμολόγηση - Assembly, όπου ένα σύνολο ταυτόχρονων εξισώσεων διαμορφώνονται μέσω της συναρμολόγησης των χαρακτηριστικών των στοιχείων για τις άγνωστες μεταβλητές.
- Η επίλυση των εξισώσεων - Solution of equations, όπου οι εξισώσεις επιλύονται ταυτόχρονα με σκοπό να καθοριστούν όλες οι μεταβλητές (Lewis R.W., Nithiarasu P., Seetharamu K.N., 2012).

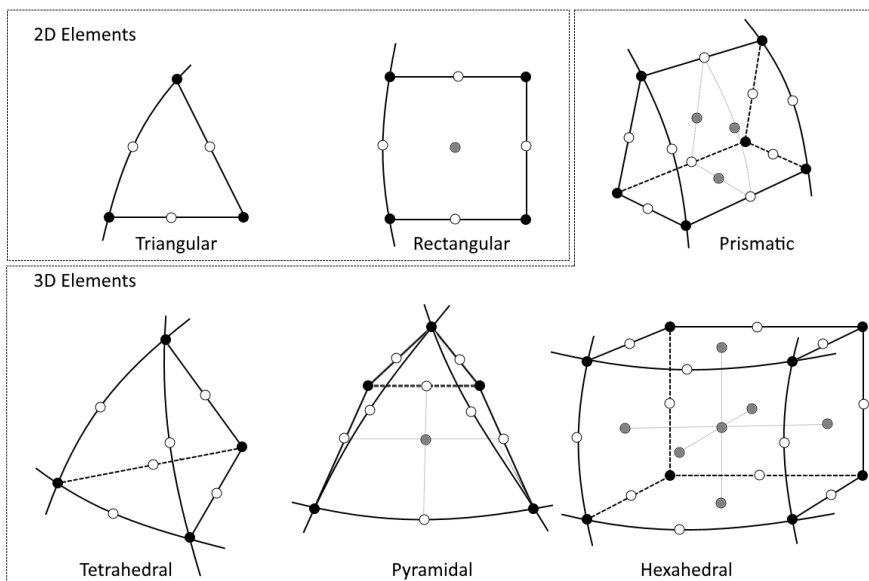
Η σημαντικότητα της Μεθόδου των Πεπερασμένων Στοιχείων, έγκειται στο ότι βρίσκει εφαρμογή σε τέτοιες περιπτώσεις και σε συνδυασμό με τον ηλεκτρονικό υπολογιστή έχει κατορθώσει την αριθμητική εξιδανίκευση και την επίλυση των συνεχών συστημάτων σε συστηματική βάση. Το γεγονός αυτό έχει πρακτική επίδραση και εφαρμογή τόσο σε κλασικές διαδικασίες όσο και σε πολύπλοκα προβλήματα της επιστήμης των Μηχανικών.

### **2.3 Είδη στοιχείων (elements)**

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, η μέθοδος Galerkin χρησιμοποιεί το ίδιο σύνολο συναρτήσεων για τις συναρτήσεις βάσεις. Ωστόσο, ακόμη και για τη μέθοδο αυτή υπάρχουν πολλοί τρόποι (άπειροι θεωρητικά) για τον ορισμό των συναρτήσεων βάσης. Για γραμμικές συναρτήσεις βάσης για ένα πρόβλημα  $2D$  και  $3D$  μερικά από τα κοινά στοιχεία (elements) παρουσιάζονται παρακάτω. Η εικόνα 2 παρουσιάζει τη γεωμετρία και τους κόμβους για δι- και τρι-διάστατα γραμμικά στοιχεία, ενώ η εικόνα 3 παρουσιάζει τη γεωμετρία και τους κόμβους για δι- και τρι-διάστατα δεύτερης τάξης στοιχεία.



**Εικόνα 2:** Τυπικές γεωμετρίες για δι- και τρι-διάστατα γραμμικά στοιχεία. (Comsol, The Finite Element Method (FEM), 2017)



**Εικόνα 3:** Δεύτερης τάξης στοιχεία. Οι μαύροι, λευκοί και γκρι κόμβοι παρουσιάζονται στα Lagrange στοιχεία. (Comsol, The Finite Element Method (FEM), 2017)

## 2.4 Σφάλμα- Σύγκλιση μεθόδου

Ένα σημαντικό μέρος κάθε μεθόδου που αξίζει να αναφερθεί είναι η εκτίμηση σφάλματος καθώς, όταν το σφάλμα περιοριστεί σε ένα εκτιμώμενο - επιθυμητό όριο τότε υπάρχει σύγκλιση της λύσης. Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων, όπως σημειώθηκε και παραπάνω, δίνει μια προσεγγιστική λύση στο μαθηματικό μοντέλο του προβλήματος. Η διαφορά της ακριβούς και της αριθμητικής λύσης μας δίνει το σφάλμα:

$$e = u - u_h \quad (2.13)$$

Σε πολλές των περιπτώσεων, το σφάλμα μπορεί να προσδιοριστεί προτού λυθούν οι αλγεβρικές εξισώσεις (δηλαδή εκτίμηση σφάλματος). Το εκτιμώμενο σφάλμα χρησιμοποιείται συχνά μόνο για την πρόβλεψη της τάξης σύγκλισης της μεθόδου FEM. Για παράδειγμα, εάν το πρόβλημα είναι καλά ορισμένο και η αριθμητική μέθοδος συγκλίνει, η νόρμα του σφάλματος μειώνεται ανάλογα με τον παράγοντα  $O(h^a)$ , όπου το  $a$  είναι η τάξη σύγκλισης. Αυτό δείχνει το πόσο γρήγορα η νόρμα του σφάλματος αναμένεται να μειωθεί με την πύκνωση του πλέγματος. Η εκτίμηση λύσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για απλές περιπτώσεις προβλημάτων. Επιπλέον, οι εκτιμήσεις περιέχουν συχνά διαφορετικές άγνωστες σταθερές, καθιστώντας με αυτό τον τρόπο αδύνατες τις ποσοτικές προβλέψεις. Μία εκτίμηση η οποία έχει γίνει εκ των υστέρων χρησιμοποιεί την κατά προσέγγιση λύση, σε συνδυασμό με άλλες προσεγγίσεις σε συναφή προβλήματα, προκειμένου να εκτιμηθεί η νόρμα του σφάλματος.

Μία αρκετά απλή αλλά και γενική μέθοδος εκτίμησης σφάλματος μια αριθμητικής μεθόδου και ενός διαφορικού προβλήματος είναι να τροποποιηθεί σε ένα μικρό ποσοστό το πρόβλημα, έτσι ώστε μια προκαθορισμένη αναλυτική έκφραση να είναι η αληθινή λύση στο τροποποιημένο πρόβλημα. Το πλεονέκτημα εδώ είναι ότι δεν υπάρχουν υποθέσεις σχετικά με την αριθμητική μέθοδο ή το υποκείμενο μαθηματικό πρόβλημα. Επιπλέον, δεδομένου ότι η λύση είναι γνωστή, το σφάλμα μπορεί εύκολα να αξιολογηθεί. Επιλέγοντας με προσοχή την αναλυτική έκφραση, μπορούν να μελετηθούν διάφορες πτυχές της μεθόδου και του προβλήματος. (Comsol, The Finite Element Method (FEM), 2017)



## 2.5 Σύγκλιση πλέγματος

Η σύγκλιση πλεγμάτων είναι μια απλή μέθοδος που συγκρίνει τις προσεγγιστικές λύσεις που λαμβάνονται για τα διάφορα πλέγματα. Ιδανικά η πολύ πυκνή διακριτοποίηση του χώρου μπορεί να ληφθεί ως προσέγγιση της πραγματικής λύσης. Το σφάλμα προσέγγισης στα πιο αραιά πλέγματα μπορεί να θεωρηθεί ως:

$$e = u_{h1} - u_h \quad (2.14)$$

Πρακτικά, ο υπολογισμός μια προσεγγιστικής λύσης μέσω ενός πολύ πυκνού πλέγματος δεν είναι καθόλου εύκολος. Η εκτίμηση της σύγκλισης μπορεί να επιτευχθεί από την αλλαγή της λύσης που προκύπτει από την πύκνωση ή την αραίωση του πλέγματος. Η αλλαγή στη λύση πρέπει να μην αλλάζει αισθητά όσο βελτιώνεται το πλέγμα εάν η κατά προσέγγιση λύση βρίσκεται σε περιοχή σύγκλισης, έτσι ώστε να κινείται προς την πραγματική λύση. (Comsol, The Finite Element Method (FEM), 2017)

## 3. Αναερόβια χώνευση

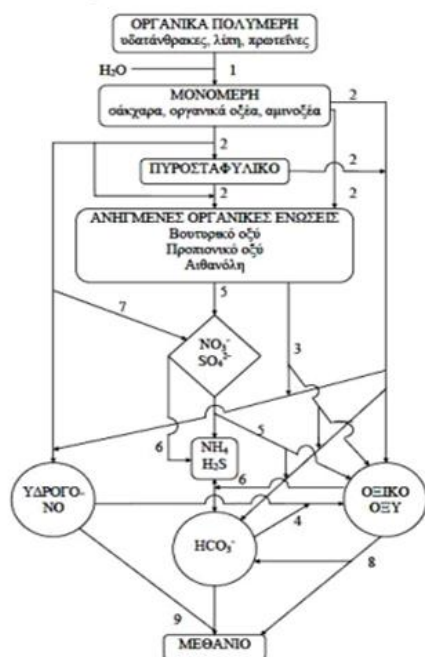
### 3.1 Ορισμός και στάδια της αναερόβιας χώνευσης

Η βιολογική διεργασία κατά την οποία παράγεται βιοαέριο, CH<sub>4</sub> (μεθάνιο) και CO<sub>2</sub> (διοξείδιο του άνθρακα), από οργανική ύλη ύστερα από συνδυασμένη δράση μεικτού πληθυσμού μικροοργανισμών απουσία O<sub>2</sub> (μοριακού οξυγόνου), ονομάζεται αναερόβια χώνευση. Η διεργασία αυτή λαμβάνει χώρα σε τέσσερα στάδια:

- 1<sup>ο</sup> στάδιο: Υδρόλυση
- 2<sup>ο</sup> στάδιο: Οξεογένεση
- 3<sup>ο</sup> στάδιο: Οξικογένεση
- 4<sup>ο</sup> στάδιο: Μεθανογένεση

Στο πρώτο στάδιο οι μεγάλοι μοριακού βάρους οργανικές ενώσεις υδρολύονται προς απλούστερες μονομερές ενώσεις. Αποτέλεσμα αυτού είναι η ευκολότερη αφομοίωση τους και ο καταβολισμός αυτών από τα οξεογόνα βακτήρια σε συστατικά ακόμα χαμηλότερου μοριακού βάρους. Το δεύτερο και το τρίτο στάδιο λοιπόν είναι υπεύθυνα κυρίως για την παραγωγή οξικού οξέος (3<sup>ο</sup> στάδιο), διοξειδίου του άνθρακα και υδρογόνου. Τέλος, στο τέταρτο στάδιο γίνεται η μετατροπή των παραπάνω μεταβολικών προϊόντων σε μεθάνιο και διοξείδιο του άνθρακα από την επίδραση των μεθανοβακτηρίων (Holland, 1987), (Wolin, 1979). Στην εικόνα 4 δίνεται διάγραμμα ροής της αναερόβιας χώνευσης.

Τα μεθανοβακτήρια είναι ευαίσθητοι μικροοργανισμοί καθώς επηρεάζουν την απόδοση ενός χωνευτήρα με την μεταβολή σε πολλές λειτουργικές παραμέτρους όπως είναι η θερμοκρασία, ο υδραυλικός χρόνος παραμονής, το pH, η μικρή πίεση H<sub>2</sub>, η συγκέντρωση λιπαρών οξέων, η χημική σύσταση της τροφοδοσίας και η συγκέντρωση τοξικών ουσιών.



- 1) Ενζυμική υδρόλυση των οργανικών πολυμερών σε ενδιάμεσα οργανικά μονομερή, όπως σάκχαρα, λιπαρά οξέα και αμινοξέα
- 2) Ζέμωση των οργανικών μονομερών για τη παραγωγή υδρογόνου (ή κεραμικού οξέος), διτανθρακικού οξέος, πυροσταφυλικού οξέος, αλκοολών, και λιπαρών οξέων χαμηλού μοριακού βάρους (οξικό, βουτυρικό και προπιονικό)
- 3) Οξείδωση των ανηγμένων οργανικών προϊόντων σε υδρογόνο (ή κεραμικού οξέος), διτανθρακικού οξέος και οξικό οξύ μέσω των οξικογόνων βακτηριών που παράγουν υδρογόνο (obligate hydrogen-producing acetogens, OHPA)
- 4) Οξικογόνος αναπνοή του διτανθρακικού από ομοοξικούς μικροοργανισμούς (homocetogens, HA)
- 5) Οξείδωση των ανηγμένων οργανικών προϊόντων σε υδρογόνο (αλκοόλες, βουτυρικό και προπιονικό οξύ) σε διτανθρακικό οξύ και οξικό οξύ μέσω των οξικογόνων βακτηριών που παράγουν υδρογόνο (obligate hydrogen-producing acetogens, OHPA)
- 6) Οξείδωση του οξικού οξέος προς διτανθρακικό οξύ από βακτήρια που ανάγουν νιτρικά ιόντα (nitrate-reducing bacteria, NRB) και από βακτήρια που ανάγουν θειικά ιόντα (sulfate-reducing bacteria, SRB)
- 7) Οξείδωση του υδρογόνου (ή του κεραμικού οξέος) από βακτήρια που ανάγουν νιτρικά ιόντα (nitrate-reducing bacteria, NRB) και από βακτήρια που ανάγουν θειικά ιόντα (sulfate-reducing bacteria, SRB)
- 8) Οξικογρηστική ζέμωση μεθανίου
- 9) Μεθανογενής αναπνοή του διτανθρακικού οξέος

Εικόνα 4: Διάγραμμα ροής αναερόβιας χώνευσης. (Τσιμπερδώνης, 2014)

### 3.2 Πλεονεκτήματα-Μειονεκτήματα

Μερικά πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της αναερόβιας χώνευσης όπως τα παρακάτω αρχίζοντας από τα πλεονεκτήματα (G. Lettinga, 1980):

- Παρέχει η διεργασία αυτή τη δυνατότητα σταθεροποίησης υγρών αποβλήτων υψηλής ρυπαντικής ισχύος σε σχετικά υψηλούς ρυθμούς οργανικής φόρτισης.
- Χαρακτηρίζεται από μικρή απαίτηση σε θρεπτικά συστατικά σε σχέση με την αερόβια χώνευση.
- Καταναλώνει μικρά ποσά ενέργειας καθώς δεν απαιτείται αερισμός
- Η αναερόβια λάσπη μπορεί να παραμείνει ενεργή για μεγάλο χρονικό διάστημα
- Παραγωγή μεθανίου

Ενώ σε αντιδιαστολή με τα παραπάνω:

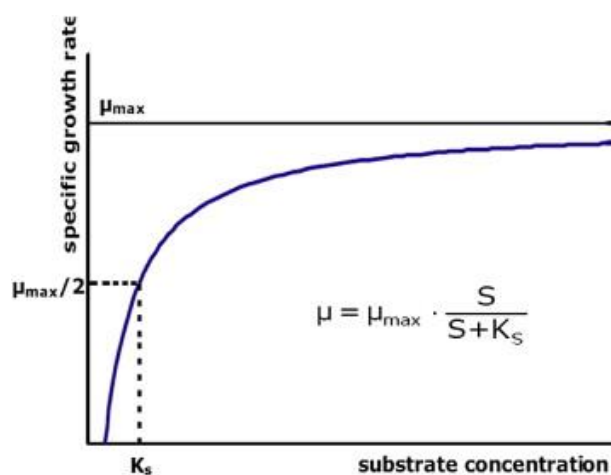
- Η αρχική εκκίνηση της διεργασίας απαιτεί αρκετά μεγάλο χρονικό διάστημα προσαρμογής.
- Η αναερόβια χώνευση παρουσιάζει ευαισθησία σε συστατικά όπως CHCl<sub>3</sub>, CCl<sub>4</sub>, CN<sup>-</sup>.
- Ο χαμηλός ρυθμός ανάπτυξης των μεθανογόνων απαιτεί σχετικά μεγάλους χρόνους παραμονής.

Η πολυπλοκότητα της αναερόβιας χώνευσης καθιστά χρήσιμη την μαθηματική προσομοίωση, με σκοπό την αποφυγή χρονοβόρων και δαπανηρών πειραμάτων καθώς μπορεί να προβλεφθεί η επίδραση των χαρακτηριστικών των τροφοδοτούμενων αποβλήτων στην απόδοση της διεργασίας. Επίσης μπορεί να υποδειχθεί ο καταλληλότερος κάθε φορά χειρισμός για την επαναφορά της μονάδας σε συνθήκες ομαλής λειτουργίας. (Σκιαδάς, 1998)

Τα τελευταία χρόνια έχουν αναπτυχθεί μαθηματικά μοντέλα, είτε πιο σύνθετα είτε πιο απλά, που προσομοιάζουν την διεργασία της αναερόβιας χώνευσης. Ένα από τα πιο αξιόπιστα που περιγράφει με αρκετά μεγάλη ακρίβεια την διεργασία αυτή είναι το Anaerobic Digestion Model No1 (ADM1) (D.J. Batstone, 1997).

## 4. Κινητική Monod

Η βασική υπόθεση της κινητικής που χαρακτηρίζει τη βιοδιάσπαση, είναι ότι το υπόστρωμα καταναλώνεται μέσω καταλυτικών αντιδράσεων οι οποίες γίνονται μόνο από μικροοργανισμούς που έχουν το απαιτούμενο ένζυμο. Για τον λόγο αυτό, ο ρυθμός της κατανάλωσης του υποστρώματος είναι γενικά ανάλογος της συγκέντρωσης-πληθυσμού των μικροοργανισμών που είναι σε θέση να καταναλώσουν το υπόστρωμα και εξαρτάται από τη συγκέντρωση του. Αυτό είναι χαρακτηριστικό της κινητικής κορεσμού που περιγράφεται από τις κινητικές Monod και Michaelis-Menten η ποιοτική συμπεριφορά των οποίων αποτυπώνεται στην παρακάτω εικόνα (εικόνα 5). Η κινητική κορεσμού προτείνει ότι στις χαμηλές συγκεντρώσεις υποστρώματος (ανάλογες του μισού της σταθεράς κορεσμού), οι ρυθμοί κατανάλωσης είναι ανάλογοι της συγκέντρωσης (πρώτης τάξης αντίδραση ως προς το υπόστρωμα), ενώ για υψηλές συγκεντρώσεις υποστρώματος, ο ρυθμός της αντίδρασης είναι ανεξάρτητος της συγκέντρωσης (μηδενικής τάξης ως προς το υπόστρωμα). (G.C. Okpokwasili & C.O. Nweke, 2005)



Εικόνα 5: Μοντέλο Monod για τον ειδικό ρυθμό ανάπτυξης

Στην περίπτωση όπου ένα υπόστρωμα περιορίζει την ανάπτυξη των μικροοργανισμών, οι ρυθμοί κατανάλωσης του συνδέονται με τον ρυθμό ανάπτυξης των μικροοργανισμών (η συγκέντρωση της βιομάζας αυξάνεται με την εξάντληση του υποστρώματος). Η μαθηματική ανάλυση συστημάτων που συνδέονται με την ανάπτυξη

των μικροοργανισμών είναι πιο σύνθετη σε σχέση με τις περιπτώσεις όπου αμελείται ο ρυθμός ανάπτυξης. Υπάρχουν δε περιπτώσεις που δεν είναι δυνατή η ποσοτικοποίηση της συγκέντρωσης των μικροοργανισμών που διασπούν το υπόστρωμα σε μια ετερογενή μικροβιακή αποικία. Παρ' όλα αυτά, ο ρυθμός με τον οποίο καταναλώνεται το υπόστρωμα μπορεί να μετρηθεί. Υπάρχουν επίσης περιπτώσεις όπου η συγκέντρωση των μικροοργανισμών παραμένει ουσιαστικά σταθερή ακόμα και με την ταυτόχρονη κατανάλωση του υποστρώματος (ψευδομόνιμη κατάσταση). Συμπεριλαμβανομένων των παραπάνω περιπτώσεων έχουν χρησιμοποιηθεί διαφορετικά μαθηματικά μοντέλα για την προσομοίωση των συστημάτων αυτών.

Η κινητική της βιοδιάσπασης χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη της συγκέντρωσης ενός υποστρώματος. Στις περισσότερες περιπτώσεις η πληροφορία για την πρόβλεψη ενός συστήματος βρίσκεται στην σχετική έλλειψη της ουσίας από την οποία εξαρτάται μία διεργασία. Για το λόγο αυτό η αποτελεσματικότητα της βιοδιάσπασης βασίζεται στις χημικές μετρήσεις. Η απλούστερη υπόθεση βιολογικού μετασχηματισμού μιας ένωσης είναι όταν αυτή είναι ταυτόχρονα πηγή άνθρακα και πηγή ενέργειας για την ανάπτυξη ενός είδους βακτηριδίων. Η ένωση αυτή πρέπει να είναι υδατοδιαλυτή, μη τοξική ενώ να μην υπάρχει περιορισμός των υπόλοιπων υποστρωμάτων ή των παραγόντων ανάπτυξης.

Στην περίπτωση της διεργασίας όπου υπάρχει περιορισμός ενός υποστρώματος  $S$ , η εξίσωση Monod χρησιμοποιείται με επιτυχία για την περιγραφή της μικροβιακής ανάπτυξης και της διεργασίας αυτής καθ' αυτής.

$$\mu = \frac{\mu_{max}S}{K_s + S} \quad (4.1)$$

$$q = \frac{q_{max}S}{K_s + S} \quad (4.2)$$

Όπου  $\mu$  = ειδικός ρυθμός ανάπτυξης,  $q$  = ειδικός ρυθμός χρήσης/κατανάλωσης υποστρώματος, και  $\mu = Yq$ , με  $Y$  = συντελεστής απόδοσης ανάπτυξης (σύνθεση μάζας βιομάζας ανά μονάδα υποστρώματος),  $K_s$  = σταθερά κορεσμού, η οποία είναι ίση με την συγκέντρωση του υποστρώματος, που αντιστοιχεί σε ρυθμό ίσο με το μισό του μέγιστου ρυθμού  $\mu_{max}$ .

Η υπερβολική εξίσωση που παρουσιάστηκε από τον Monod, τροποποιήθηκε από τους Lawrence και McCarthy (1970) για να περιγράψει τα αποτελέσματα που έχει η

συγκέντρωση της βιομάζας ( $S$ ) στον ρυθμό με τον οποίο μια δοθείσα μικροβιακή συγκέντρωση ( $X$ ) καταναλώνει το υπόστρωμα από το οποίο εξαρτάται η διεργασία ( $-dS/dt$ ). Εναλλακτικά, η εξίσωση Monod μπορεί να γραφεί σε όρους μικροβιακής ανάπτυξης αφού συμπεριληφθεί και ο συντελεστής απόδοσης ( $Y$ ) που σχετίζει το υπόστρωμα με την ανάπτυξη των μικροοργανισμών.

$$r_S = -\frac{q_{max}SX}{K_S + S} \quad (4.3)$$

$$r_X = -Yr_S = \frac{Yq_{max}SX}{K_S + S} \quad (4.4)$$

Η κινητική Monod συχνά απλοποιείται σε μια εξίσωση η οποία είναι είτε μηδενικής είτε πρώτης τάξης ως προς τη συγκέντρωση του υποστρώματος και η κινητική χρησιμοποιείται ευρέως για να περιγράψει την βιοαποικοδόμηση των οργανικών αποβλήτων σε συστήματα υδροφορέων (Alvarez PJJ A. P., 1991), (Alvarez PJJ A. P., 1994), (Borden RC, 1986), (Chen YM. Abriola LM, 1992). Η ευελιξία της εξίσωσης του Monod αποδίδεται στην ικανότητά της να περιγράφει τα ποσοστά βιοαποικοδόμησης που ακολουθούν κινητική μηδενικής έως πρώτης τάξης σε σχέση με τη συγκέντρωση του υποστρώματος. Σε μεγαλύτερο βαθμό, το μοντέλο Monod περιγράφει την εξάρτηση του ρυθμού βιοαποικοδόμησης από τη συγκέντρωση της βιομάζας.

Έτσι η κινητική της ανάπτυξης της βιομάζας θα είναι της μορφής:

$$r_X = \mu(S, X)X \quad (4.5)$$

Όπου από την εξίσωση 4.1 παρατηρείται ότι ο ειδικός ρυθμός ανάπτυξης  $\mu$ , εξαρτάται μόνο από την συγκέντρωση  $S$  του υποστρώματος. Εκτός από την έκφραση Monod έχουν χρησιμοποιηθεί και άλλες εκφράσεις για τον ειδικό ρυθμό ανάπτυξης  $\mu$ . Οι κυριότερες είναι οι ακόλουθες: (Γεράσιμος Λυμπεράτος & Σταύρος Παύλου, 2011)

Teissier:

$$\mu = \mu_{max} \left( 1 - e^{-\frac{S}{K_s}} \right) \quad (4.6)$$

Moser:

$$\mu = \frac{\mu_{max} S^n}{K_s + S^n} \quad (4.7)$$

Contois:

$$\mu = \frac{\mu_{max} S}{AX + S} \quad (4.8)$$

Blackman (ή μοντέλο δύο φάσεων):

$$\mu = \begin{cases} \mu_{max} \frac{S}{2K_s}, & S < 2K_s \\ \mu_{max}, & S > 2K_s \end{cases} \quad (4.9)$$

Dabes:

$$S = \mu A + \frac{\mu B}{\mu_{max} - \mu} \quad (4.10)$$

Konak:

$$\frac{d}{dX} \left( \frac{\mu}{\mu_{max}} \right) = k \mu_{max}^{p-1} \left( 1 - \frac{\mu}{\mu_{max}} \right)^p \quad (4.11)$$

Η έκφραση που χρησιμοποιήθηκε για τον ειδικό ρυθμό ανάπτυξης στην παρούσα διπλωματική εργασία, ήταν το μαθηματικό μοντέλο δύο φάσεων για συγκέντρωση  $S < 2K_s$  όπως προκύπτει από τα πειραματικά δεδομένα. Επομένως, ο ρυθμός με τον οποίο παράγεται η βιομάζα θα είναι της μορφής:

Από εξίσωση (4.5 και 4.9):

$$r_X = \frac{\mu_{max}}{2K_s} SX \quad (4.12)$$



Όμως ο ρυθμός κατανάλωσης του υποστρώματος εξαρτάται από τον ρυθμό παραγωγής της βιομάζας (από την εξίσωση 4.4):

$$r_S = -\frac{r_X}{Y} \quad (4.13)$$

και από την εξίσωση 4.12 έχουμε ότι:

$$r_S = -\frac{\mu_{max}}{2K_S Y} SX \quad (4.14)$$

Όμως ως  $Y$  ορίζεται ο λόγος του ρυθμού παραγωγής βιομάζας προς τον λόγο του ρυθμού κατανάλωσης του υποστρώματος, επομένως μπορεί να γραφτεί ως  $Y = \frac{X-X_0}{S_0-S}$ , με  $X_0$ : αρχική συγκέντρωση βιομάζας στο σύστημα και  $S_0$ : αρχική συγκέντρωση υποστρώματος. Θεωρώντας ότι η αρχική συγκέντρωση βιομάζας στο εξεταζόμενο σύστημα είναι μηδενική τότε:

$$X = Y(S_0 - S) \quad (4.15)$$

επομένως ο ρυθμός κατανάλωσης (από εξισώσεις 4.14 και 4.15) παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$r_S = -\frac{\mu_{max}}{2K_S} S(S_0 - S) \quad (4.16)$$

Ενώ τέλος θέτοντας  $k = \frac{\mu_{max}}{2K_S}$ , η εξίσωση ρυθμού κατανάλωσης του υποστρώματος θα δίνεται ως εξής:

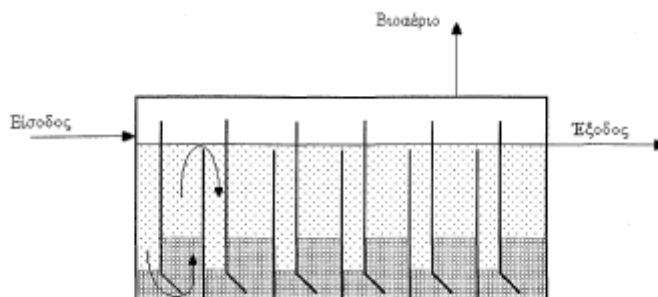
$$r_S = -kS(S_0 - S) \quad (4.17)$$

## 5. Περιοδικός Αναερόβιος Αντιδραστήρας με Ανακλαστήρες (PABR)

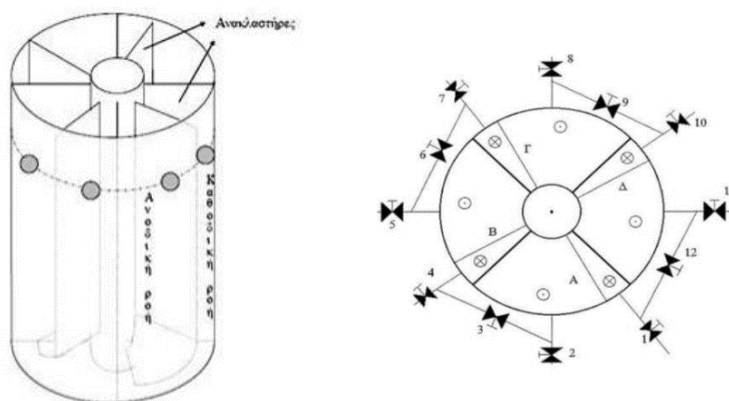
### 5.1 Χαρακτηριστικά-Τρόπος λειτουργίας

Ο αντιδραστήρας PABR (Periodic Anaerobic Baffled Reactor) αναπτύχθηκε από τους Γεράσιμο Λυμπεράτο και Ιωάννη Σκιαδά στο Εργαστήριο Βιοχημικής Μηχανικής και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος του Πανεπιστημίου Πατρών στο τμήμα Χημικών Μηχανικών. Χαρακτηρίζεται ως ένας ταχύρρυθμος και ευέλικτος αντιδραστήρας καθώς είναι ικανός να επεξεργαστεί υψηλά οργανικά φορτία με μικρούς χρόνους παραμονής.

Ο PABR αποτελείται από δύο ομόκεντρα κυλινδρικά δοχεία τα οποία χωρίζονται σε τέσσερα διαμερίσματα (compartments). Η διάταξη του μοιάζει με αυτή ενός ABR εικόνα 6 μόνο που τα διαμερίσματα βρίσκονται σε κυκλική διάταξη εικόνα 7.



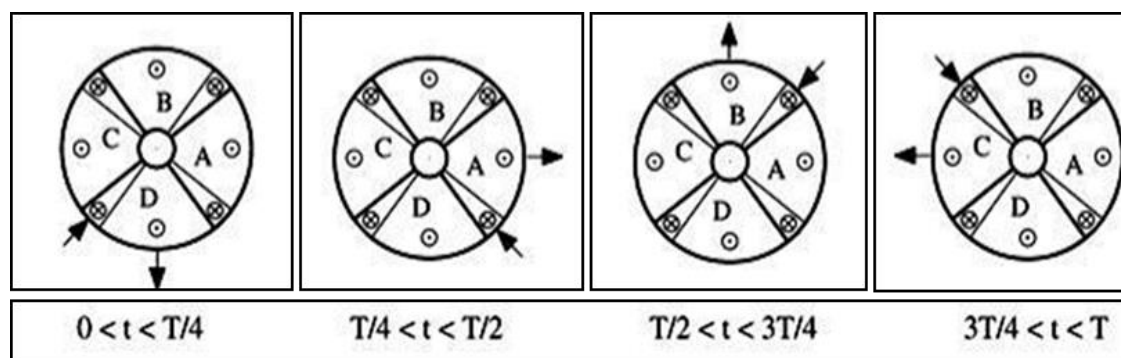
**Εικόνα 6:** Αναερόβιος Χωνευτήρας Εναλλασσόμενης Ανοδικής και Καθοδικής Ροής (ABR) (Σκιαδάς, 1998)



**Εικόνα 7:** Περιοδικός Αναερόβιος Αντιδραστήρας με Ανακλαστήρες. Αριστερά απεικονίζεται η πρόσοψη ενώ δεξιά η κάτωψη του αντιδραστήρα (Α-Δ: διαμερίσματα αντιδραστήρα, 1-12:βάνες αντιδραστήρα). (Σκιαδάς, 1998)

Κάθε διαμέρισμα από (Α-Δ) του αντιδραστήρα (εικόνα 7) αποτελείται από δύο τμήματα, το τμήμα καθοδικής ροής (down flow section) και το τμήμα ανοδικής ροής (up flow section). Η τροφοδοσία εισέρχεται στο εκάστοτε διαμέρισμα μέσω μιας οπής στο πάνω μέρος του καθοδικού τμήματος, περνάει στο ανοδικό τμήμα όπου εξέρχεται από αυτό χάρις των εξωτερικών σωληνώσεων οι οποίες χρησιμεύουν ως διάλυλοι αποκοπής ή επικοινωνίας μεταξύ των διαμερισμάτων. Τέλος εξέρχεται του αντιδραστήρα από το ανοδικό τμήμα του διαμερίσματος από όπου γίνεται η απορροή. Η ροή μεταξύ των διαμερισμάτων πραγματοποιείται σύμφωνα με τη φορά των δεικτών του ρολογιού. Ο ρόλος των βανών στις εξωτερικές σωληνώσεις είναι ο έλεγχος του κυκλοφορικού στον αντιδραστήρα, δηλαδή εάν το καθοδικό μέρος ενός διαμερίσματος θα τροφοδοτηθεί με την απορροή του προηγούμενου ή από καινούρια τροφοδοσία.

Αναλυτικότερα (εικόνα 7) όταν το διαμέρισμα που τροφοδοτείται είναι το Α (κάτω αριστερά), τότε το διαμέρισμα από το οποίο εξέρχεται η απορροή είναι το Δ, με τις βάνες 1, 3, 6, 9, 11, 12 να είναι ανοικτές και τις υπόλοιπες κλειστές. Ομοίως όταν στο διαμέρισμα Δ γίνεται η τροφοδοσία, η απορροή εξέρχεται από το διαμέρισμα Γ κ.ο.κ. Το διαμέρισμα τροφοδοσίας αντίθετα από τη φορά των δεικτών του ρολογιού σύμφωνα με μια περίοδο εναλλαγής ( $T$ ), επομένως ανά ένα τέταρτο της περιόδου αυτής αλλάζει το τροφοδοτούμενο διαμέρισμα (εικόνα 8).



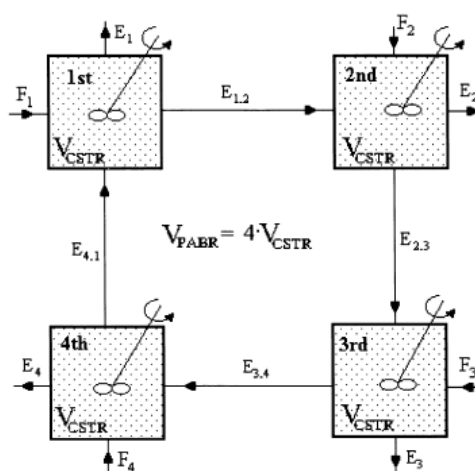
**Εικόνα 8:** Περιοδική αλλαγή των διαμερισμάτων τροφοδοσίας και εναλλαγής

Η συχνότητα εναλλαγής της τροφοδοσίας του αντιδραστήρα αποτελεί μία από τις κύριες παραμέτρους της λειτουργίας του. Στην ακραία περίπτωση όπου η συχνότητα εναλλαγής είναι μηδέν, ο αντιδραστήρας συμπεριφέρεται σαν αντιδραστήρας ABR, ενώ όταν η συχνότητα εναλλαγής τείνει στο άπειρο, η λειτουργία του αντιδραστήρα προσομοιάζει τη λειτουργία ενός αντιδραστήρα ανοδικής ροής τύπου UASB (G. Lettinga, 1980).

Ρυθμίζοντας έτσι την συχνότητα εναλλαγής της τροφοδοσίας σε μία ενδιάμεση τιμή, ο αντιδραστήρας λειτουργεί σε μια κατάσταση «ενδιάμεση» (“something between”) των δύο ακραίων καταστάσεων, γεγονός που του προσδίδει το πλεονέκτημα της ευελιξίας. (Σεϊντής, 2015)

Ο αναερόβιος χωνευτήρας που μελετάται είναι πιλοτικής κλίμακας ωφέλιμου όγκου 77L (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 υδραυλική συμπεριφορά του PABR ισοδυναμεί με την υδραυλική συμπεριφορά 4<sup>ων</sup> CSTR σε σειρά (εικόνα 9) (I. V. Skiadas, 2000), η παραδοχή αυτή όμως εξαρτάται από τον λόγο  $\frac{HRT}{T}$ , ο PABR μπορεί να συμπεριφερθεί και σαν ένας αντιδραστήρας συνεχούς ανάμειξης (CSTR) για μικρούς λόγους  $\frac{HRT}{T}$  (Καμπερίδης, 2016)



**Εικόνα 9:** Κυκλικό σύστημα 4<sup>ων</sup> CSTR σε σειρά που ισοδυναμεί με έναν PABR 4<sup>ων</sup> διαμερισμάτων.

Τα πλεονεκτήματα του PABR όπως αυτά αναφέρονται στο (Σκιαδάς, 1998) είναι κατά κύριο λόγο η ευελιξία λειτουργίας ως UASBR, ABR ή ενδιάμεσα, επίσης έχει τη δυνατότητα χρήσης του εσωτερικού κυλίνδρου ως εναλλάκτη θερμότητας, ενώ τέλος ελαχιστοποιεί τις θερμικές απώλειες λόγω του σχήματος του (ελάχιστη επιφάνεια ανά μονάδα όγκου).

## 5.2 Αντιδραστήρας συνεχούς λειτουργίας.

Σε έναν αντιδραστήρα συνεχούς λειτουργίας το ισοζύγιο μάζας στην γενική περίπτωση παίρνει την μορφή:

$$\frac{d(V_R c_i)}{dt} = F(c_{i0} - c_i) + V_R r_{fi} \quad (5.1)$$

με  $F$ : ογκομετρική παροχή,  $c_{i0}$ : η συγκέντρωση του συστατικού  $i$  στην τροφοδοσία,  $c_i$ : συγκέντρωση του συστατικού στην εκροή,  $V_R$ : όγκος αντιδραστήρα,  $r_{fi}$ : ρυθμός αντίδρασης συστατικού  $i$ .

Θεωρώντας ότι η ογκομετρική παροχή δίνεται από τον τύπο  $F = \frac{V_R}{HRT}$ , με  $HRT$ : υδραυλικός χρόνος παραμονής και ότι ο όγκος του αντιδραστήρα μένει αμετάβλητος τότε η εξίσωση (5.1) θα έχει την μορφή (Γεράσιμος Λυμπεράτος & Σταύρος Παύλου, 2011):

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{HRT} (c_{i0} - c_i) + r_{fi} \quad (5.2)$$

Όπου  $HRT$  (Hydraulic Retention Time) είναι ο Υδραυλικός χρόνος παραμονής.

## 6. Ρευστομηχανική μελέτη και μεταφορά μάζας στον PABR.

### 6.1 Έρπουσα Ροή

Για την προσομοίωση των ρεολογικών χαρακτηριστικών του αντιδραστήρα υπολογίστηκε ο αριθμός Reynolds (εξίσωση 6.1) ο οποίος ήταν πολύ κοντά στη μονάδα. Ως αριθμός Reynolds ορίζεται ο λόγος των δυνάμεων αδράνειας προς τις ιξώδεις δυνάμεις που δρουν πάνω σε ένα ρευστό. Το αποτέλεσμα αυτό οδήγησε στην παραδοχή ότι η κατάλληλη ροή για τον υπολογισμό του προφίλ της ταχύτητας στον αντιδραστήρα είναι η έρπουσα. Όταν το ρευστό ρέει με πάρα πολύ μικρή ταχύτητα, λέμε ότι η ροή του είναι έρπουσα.

$$Re = \frac{\rho V D_H}{\mu} \quad (6.1)$$

Όπου  $\rho$ : η πυκνότητα του ρευστού [ $\text{kg/m}^3$ ],  $V$ : η μέση ταχύτητα του ρευστού [ $\text{m/s}$ ],  $D_H$ : η υδραυλική διάμετρος του αγωγού [ $\text{m}$ ] και  $\mu$ : το δυναμικό ιξώδες του ρευστού στις συνθήκες στις οποίες βρίσκεται [ $\text{mm}^2/\text{s}$ ].

Παρακάτω δίνεται η εξίσωση Navier–Stokes (εξίσωση 6.2) για ασυμπίεστο ρευστό και σταθερό ιξώδες, καθώς και η εξίσωση της συνέχειας (εξίσωση 6.3) κατά την οποία ορίζεται η αρχή διατήρησης της μάζας, δηλαδή ο ρυθμός με τον οποίο η μάζα εισβάλλει σε ένα σύστημα ισούται με το ρυθμό με τον οποίο η μάζα φεύγει από αυτό συν την συσσώρευση της μέσα σε αυτό (Αθανασιάδη, 1989).

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} = -\nabla w + \mathbf{g} \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (6.3)$$

Όπου  $\nu = \frac{\mu}{\rho_0}$ : κινηματικό ιξώδες,  $\mathbf{g}$ : δυνάμεις εξωτερικών πηγών (βαρύτητας),  $w$ : βαθμίδες εσωτερικών πηγών (πίεση).

Θεωρώντας λοιπόν την ροή έρπουσα και επιπλέον έχοντας μόνιμη κατάσταση στο πρόβλημα το οποίο μελετάται, καθώς η ταχύτητα θεωρείται στατικό μέγεθος σε

σύγκριση με τη συγκέντρωση του υποστρώματος. Η παραδοχή αυτή στηρίζεται στο ότι 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. Οι εξισώσεις οι οποίες λύνονται για την εύρεση του προφίλ της ταχύτητας στον αντιδραστήρα είναι οι παρακάτω:

$$0 = v\Delta\mathbf{u} - \nabla w + \mathbf{g} \quad (6.4)$$

$$\rho\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6.5)$$

Ο όρος  $v\Delta\mathbf{u} = \nabla \cdot [\mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)]$  είναι όρος διάχυσης, ως βαθμίδα εσωτερικής πηγής στην παρούσα περίπτωση έχουμε την βαθμίδα πίεσης δηλαδή  $w = p$ , ενώ η ροή έχει θεωρηθεί ασυμπίεστη δηλαδή η πυκνότητα παραμένει σταθερή. Επομένως η 6.4 και 6.5 παίρνουν την παρακάτω τελική μορφή.

$$\nabla \cdot [\mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)] - \nabla p + \mathbf{g} = 0 \quad (6.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6.7)$$

## 6.2 Μεταφορά μάζας

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 ολικού COD 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:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla S - D\Delta S = r \quad (6.8)$$

- Με «S» συμβολίζεται η συγκέντρωση του υποστρώματος (COD).

- 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
- Με «r» ο ρυθμός με τον οποίο παράγεται ή καταναλώνεται η ουσία.

Από τους όρους της εξίσωσης (6.8) 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, τρίτος περιγράφει την κίνηση λόγω διάχυσης, ενώ ο τελευταίος όρος περιγράφει τον ρυθμό της αντίδρασης της οποίας ο τύπος δίνεται στο κεφάλαιο 4 από την εξίσωση (4.17).



## 7. Υπολογιστικό μέρος

### 7.1 Παραμετρική ανάλυση για την εύρεση της σταθεράς της κινητικής της αντίδρασης

Για την παραμετρική ανάλυση που είχε ως σκοπό την εύρεση της σταθεράς αντίδρασης καταπόνησης του υποστρώματος χρησιμοποιήθηκε το ισοζύγιο μάζας για ένα αντιδραστήρα τύπου CSTR, καθώς έγινε η παραδοχή ότι ο PABR για λόγους  $\frac{HRT}{T}$  πάνω του ένα, συμπεριφέρεται σαν ένας αντιδραστήρας πλήρους ανάμειξης. Το ισοζύγιο αυτό αναλυτικότερα δίνεται στο κεφάλαιο 5.2.

Η παραδοχή αυτή στηρίζεται σε προηγούμενη μελέτη της υδραυλικής συμπεριφοράς του αντιδραστήρα (Καμπερίδης, 2016) όπου, για διάφορους λόγους υδραυλικού χρόνου παραμονής προς περίοδο εναλλαγής των διαμερισμάτων του PABR, αντιστοιχίζεται ο αριθμός ( $N_r$ ) των αντιδραστήρων CSTR οι οποίοι σε σειρά μπορούν να προσομοιάσουν την λειτουργία του PABR. Παρακάτω παρουσιάζεται ο πίνακας 1 αντιστοιχίας λόγου HRT/T με αριθμό CSTR, καθώς επίσης και ο λόγος HRT/T των πειραμάτων για τα οποία έγινε η προσομοίωση στην εν λόγω εργασία πίνακας 2. Παρατηρείται ότι και για τις 4 φάσεις πειραματικής λειτουργίας της αναερόβιας χώνευσης μπορεί να γίνει η προσομοίωση του PABR με έναν αντιδραστήρα πλήρους ανάμειξης (CSTR).

**Πίνακας 1:** Πίνακας αντιστοιχίας λόγου HRT/T με αριθμό ( $N_r$ ) αντιδραστήρων CSTR σε σειρά (Καμπερίδης, 2016)

HRT (d)	T (d)	HRT/T	$N_r$
6	72	0.08333	7
6	60	0.1	5 έως 9*
6	30	0.2	8
4	8	0.5	2
20	40	0.5	2
4	4	1	2
6	4	1.5	1
4	2	2	1
10.65	4	2.6625	1
6	2	3	1

20	4	5	1
10.65	2	5.325	1
20	2	10	1

**Πίνακας 2:** Πίνακας πειραματικών ρεολογικών συνθηκών αντιδραστήρα PABR.

	HRT	T	HRT/T
Phase 1	12.2	2	6.1
Phase 2	10	2	5
Phase 3	8.7	2	4.35
Phase 4	5	2	2.5

Η εκτίμηση της σταθεράς  $k$  πραγματοποιήθηκε με παραμετρική ανάλυση των εξισώσεων του ισοζυγίου με οδηγό τις πειραματικές μετρήσεις κατανάλωσης του ολικού COD ενός πειράματος τεσσάρων κύκλων λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης. Η παραμετρική ανάλυση πραγματοποιήθηκε με την μέθοδο Secant με τη χρήση του λογισμικού Aquasim Version 2.1.

Το σύστημα των εξισώσεων για τον προσδιορισμό της κινητικής σταθεράς της αντίδρασης κατανάλωσης του υποστρώματος για τις τέσσερις διαφορετικές φάσεις πειραμάτων στον αντιδραστήρα PABR δίνεται παρακάτω (εξίσωση 7.3):

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{1}{HRT} (S_{i0} - S_i) - kS_i(S_{i0} - S_i) \quad i = 1, \dots, 4 \quad (7.3)$$

Στον παρακάτω πίνακα δίνονται οι τιμές της κινητικής σταθεράς για κάθε μία από τις φάσεις πειραμάτων.

**Πίνακας 3:** Σταθερές κινητικής των 4<sup>ων</sup> φάσεων του πειράματος.

	Phase1	Phase2	Phase3	Phase4
$k [L/gd]$	0.097	0.160	0.075	0.158

Η βέλτιστη τιμή της κινητικής σταθεράς η οποία ικανοποιεί τα πειραματικά δεδομένα και των τεσσάρων φάσεων είναι ίση με,  $k = 0.105026$ .

## **7.2 Απλοποίηση της γεωμετρίας του αντιδραστήρα- κατάστρωση μοντέλου.**

Για την απλοποίηση της γεωμετρίας του αντιδραστήρα χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο της γεωμετρίας που αναπτύχθηκε από τον Θ. Καμπερίδη στην διπλωματική του εργασία με θέμα «Υπολογιστική Μελέτη Υδραυλικής Συμπεριφοράς Περιοδικού Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες». Στη συνέχεια αφαιρέθηκε ο κύριος όγκος των σωληνώσεων μέσα από το πεδίο σχεδιασμού του Comsol Multiphysics® καθώς η ανάπτυξη της ροής το επέτρεπε και δημιουργήθηκαν διάυλοι επικοινωνίας του ενός διαμερίσματος του αντιδραστήρα με το άλλο. Έγινε σύγκριση των αποτελεσμάτων για τις δύο διαφορετικές γεωμετρίες και διαπιστώθηκε η ορθότητα του εγχειρήματος.

Για την κατάστρωση του μοντέλου της περιγραφής του πειράματος των τεσσάρων φάσεων αναερόβιας χώνευσης, χρησιμοποιήθηκε η απλοποιημένη πλέον γεωμετρία του αντιδραστήρα. 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.

### **7.2.1 Απλοποίηση γεωμετρίας.**

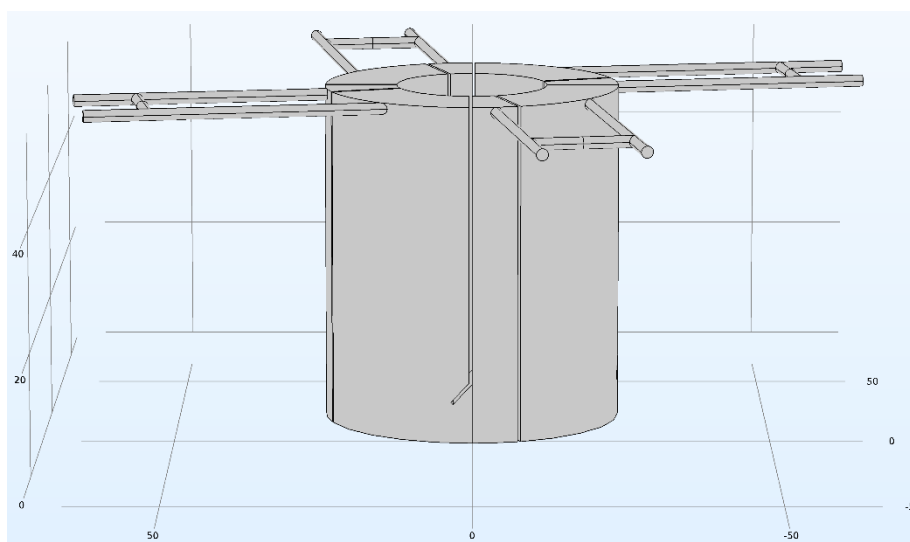
Το πρώτο βήμα της προσομοίωσης ήταν η κατασκευή της γεωμετρίας του αντιδραστήρα η οποία, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, στηρίχθηκε στην ήδη υπάρχουσα αποτύπωσή της από προηγούμενες μελέτες που είχαν πραγματοποιηθεί πάνω σε αυτόν. Το δεύτερο βήμα ήταν η απλοποίηση της, κατά την οποία αφαιρέθηκαν οι σωληνώσεις και δημιουργήθηκαν διάυλοι επικοινωνίας του ενός διαμερίσματος με το άλλο στο εσωτερικό του αντιδραστήρα. Στη συνέχεια πραγματοποιήθηκε η γένεση του πλέγματος από το λογισμικό Comsol Multiphysics®. Τέλος έγινε η σύγκριση των αποτελεσμάτων της παλιάς με τη νέα γεωμετρία βάση των αποτελεσμάτων ρεολογικής συμπεριφοράς, μιας και ανάλογα με τον τρόπο κατασκευής της σε συνδυασμό με την εισαγωγή του πλέγματος μπορεί να αυξηθούν ή να μειωθούν οι βαθμοί ελευθερίας του προβλήματος.

Στην παρακάτω εικόνα (εικόνα 10) απεικονίζεται η αρχική γεωμετρία του αντιδραστήρα όπως αυτή μελετήθηκε από τον Γ. Σεϊντή και τον Θ. Καμπερίδη σε προηγούμενες διπλωματικές εργασίες. Παρατηρείται ότι η επικοινωνία μεταξύ των διαμερισμάτων πραγματοποιείται από μία διάταξη εξωτερικών σωληνώσεων. Στον

πίνακα 4 καταγράφονται οι διαστάσεις του αντιδραστήρα όπως αυτός είχε δημιουργηθεί.

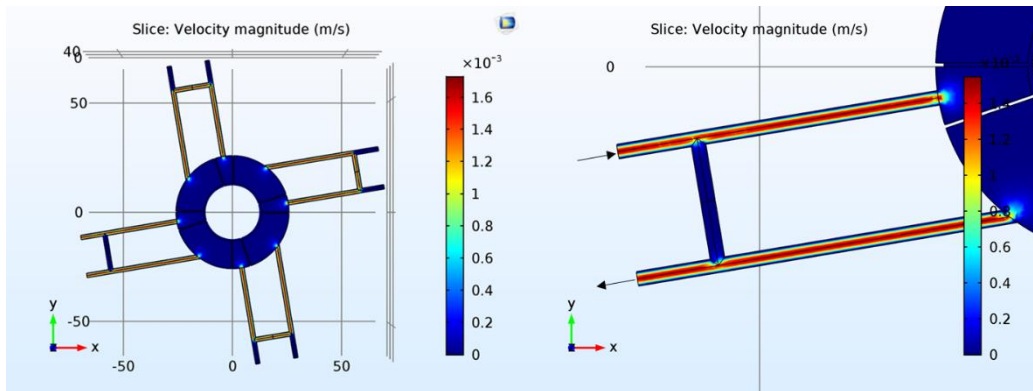
**Πίνακας 4:** Διαστάσεις του αντιδραστήρα PABR πιλοτικής κλίμακας.

Υψος Αντιδραστήρα	55.7 cm
Ακτίνα εσωτερικού κυλίνδρου	12.5 cm
Ακτίνα εξωτερικού κυλίνδρου	24.5 cm
Μήκος Σωλήνα	42.4 cm
Διάμετρος Σωλήνα	0.96 cm



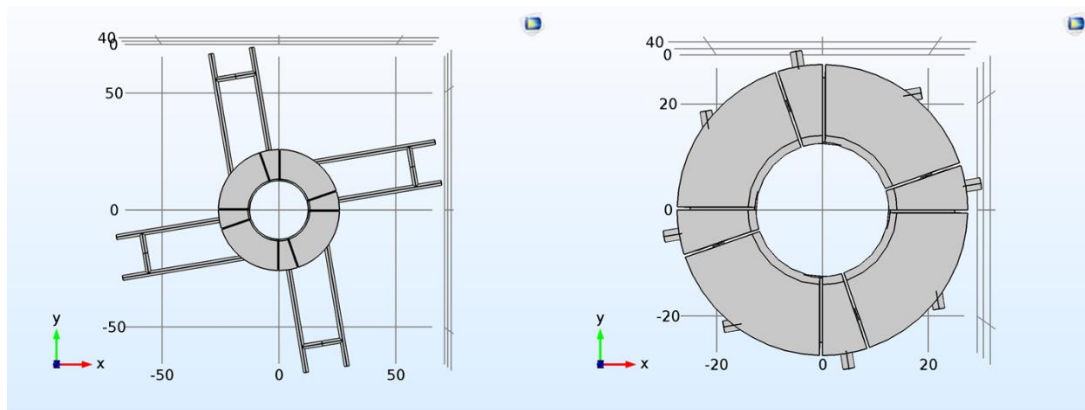
**Εικόνα 10:** Γεωμετρία Περιοδικού Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες (PABR) πιλοτικής κλίμακας.

Στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά όπως αυτά απεικονίζονται παραπάνω στηρίχθηκε η απλοποίηση της γεωμετρίας του αντιδραστήρα. Χρησιμοποιήθηκε δηλαδή ο κύριο όγκος του αντιδραστήρα χωρίς τις σωληνώσεις. Ο λόγος που θεωρήθηκε πώς οι σωληνώσεις αποτελούν παράτερο μέρος του υπολογιστικού μοντέλου ήταν εξαιτίας των ρεολογικών χαρακτηριστικών του αντιδραστήρα. Το είδος της ροής που είχε επιλεχθεί για την μοντελοποίηση του, βάση του πειράματος, ήταν η έρπουσα ροή μιας και η παροχή στον αντιδραστήρα ήταν της τάξης του  $10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  και ο αριθμός Reynolds πολύ μικρός. Επιπλέον θεωρήθηκε μόνιμη κατάσταση με αποτέλεσμα να έχει αναπτυχθεί πλήρως η ροή στο εσωτερικό των σωληνώσεων. Η παρακάτω εικόνα (εικόνα 11) δείχνει χαρακτηριστικά το ανεπτυγμένο προφίλ της ταχύτητας.



**Εικόνα 11:** Προφίλ ταχύτητας στο εσωτερικό των σωληνώσεων. Αριστερά η κάτοψη του αντιδραστήρα με το ανεπτυγμένο προφίλ ταχύτητας. Δεξιά μεγέθυνση σε ένα ζευγάρι σωληνώσεων εισόδου της τροφοδοσίας και εξόδου της απορροής.

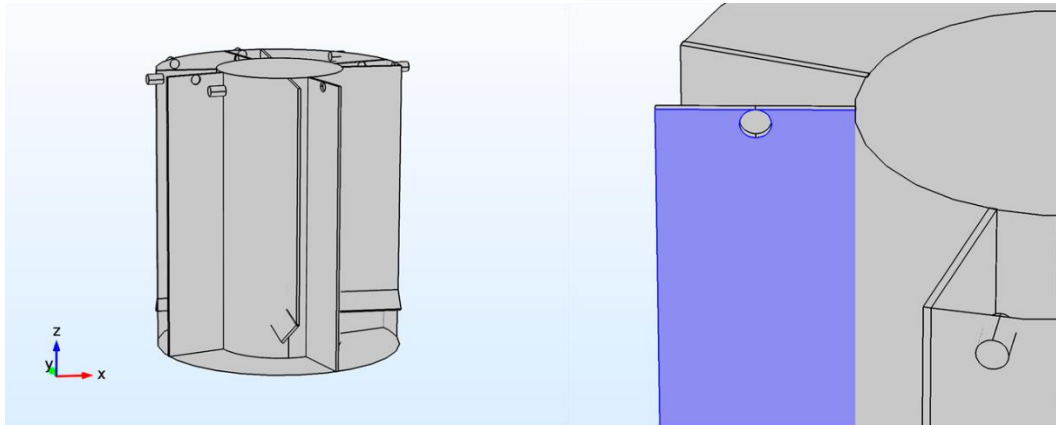
Επομένως έγινε η παραδοχή πως η τροφοδοσία και η απορροή στον αντιδραστήρα μπορεί να γίνει κατευθείαν από τον κύριο όγκο του. Σε αυτό το μοντέλο λοιπόν μειώθηκε κατά πολύ το αρχικό μήκος των εξωτερικών σωληνώσεων του αντιδραστήρα (εικόνα 12) οι οποίες λειτουργούν και ως βάνες για την αλλαγή της τροφοδοσίας ανάλογα με το διαμερίσμα που πρέπει να τροφοδοτηθεί κάθε φορά.



**Εικόνα 12:** Δεξιά αρχικό μήκος σωληνώσεων αντιδραστήρα πιλοτικής κλίμακας PABR. Αριστερά μήκος σωληνώσεων μετά από απλοποίηση γεωμετρίας.

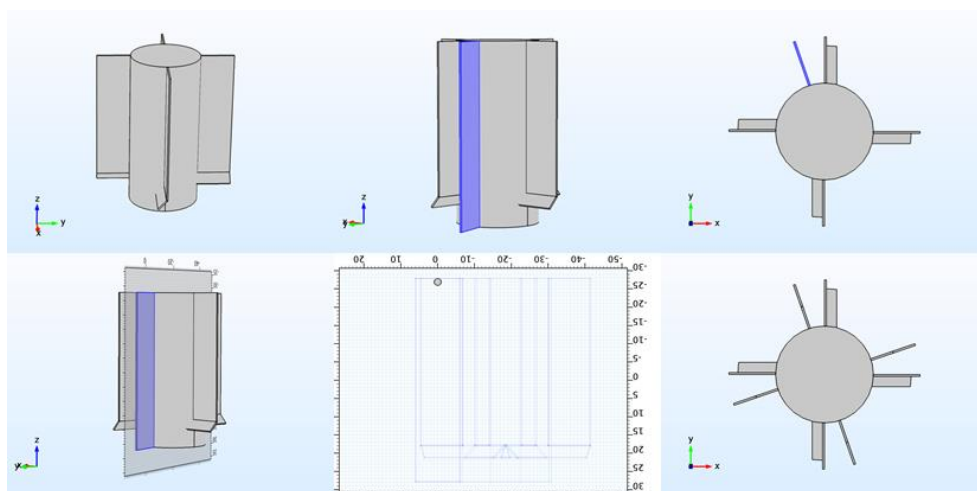
Η σύνδεση μεταξύ των διαμερισμάτων έγινε στον εσωτερικό όγκο του αντιδραστήρα. Στο διαχωριστικό κάθε διαμερίσματος δημιουργήθηκε ένας διάυλος με ακτίνα όσο η

ακτίνα των σωληνώσεων πίνακας 4 και μήκος ίσο με το πάχος του τοιχώματος που διαχωρίζει τα δύο διαμερίσματα μεταξύ τους εικόνα 13.



**Εικόνα 13:** Αριστερά παρουσιάζεται το διαχωριστικό τοίχωμα που διακρίνει τα δύο διαμερίσματα μεταξύ τους. Δεξιά παρουσιάζεται σε μεγέθυνση ο διάυλος επικοινωνίας των δύο διαμερισμάτων.

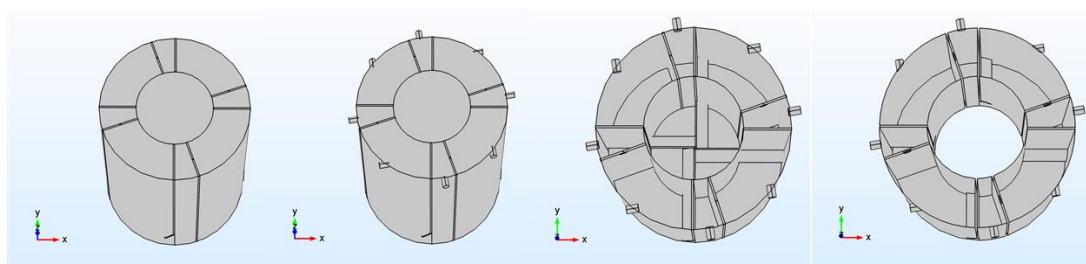
Αρχικά δημιουργήθηκαν οι ανακλαστήρες και στη συνέχεια προστέθηκε στην κατάλληλη απόσταση το τοίχωμα διαχωρισμού δύο διαμερισμάτων εικόνα 13. Στο τοίχωμα αυτό εισήχθει παράλληλα ένα περιβάλλον εργασίας (Work plane) και πάνω σε αυτό δημιουργήθηκε μια τομή στο πάνω μέρος του με ακτίνα ίση με την ακτίνα των σωληνώσεων πίνακας 4. Η τομή αυτή αποτελεί δίοδο επικοινωνίας των δύο διαμερισμάτων. Για τον διαχωρισμό των 4<sup>ων</sup> διαμερισμάτων χρησιμοποιήθηκε η εντολή «rotate» με «input» τις κατάλληλες μοίρες στροφής του τοιχώματος για την δημιουργία των υπολοίπων εικόνα 14.



**Εικόνα 14:** Πάνω αριστερά απεικονίζονται οι ανακλαστήρες στον εσωτερικό όγκο του αντιδραστήρα. Πάνω στη μέση και πάνω δεξιά απεικονίζεται το τοίχωμα που διαχωρισμού δύο διαμερισμάτων (πρόσψη-κάτοψη). Κάτω αριστερά φαίνεται το περιβάλλον εργασίας (Work plane) παράλληλα στο τοίχωμα. Κάτω στη μέση φαίνεται η θέση

της τομής πάνω στο τοίχωμα διαχωρισμού. Κάτω δεξιά φαίνονται τα 4 διαμερίσματα πλέον μετά το «rotate» του τοιχώματος. Το κάθε διαμέρισμα έχει και έναν ανακλαστήρα.

Επόμενο βήμα για την τελειοποίηση της απλοποιημένης γεωμετρίας ήταν η προσάρτηση, του εξωτερικού κυλίνδρου, ως το κέλυφος του αντιδραστήρα, και οι εξωτερικές σωληνώσεις σε κάθε διαμέρισμα για την είσοδο και έξοδο σε αυτό. Αφού ολοκληρώθηκε η γεωμετρία ορίστηκε ο κύριος όγκος του αντιδραστήρα με τις επιλογές στο περιβάλλον δημιουργίας της γεωμετρίας του Comsol Multiphysics: Geometry > Booleans and Partitions με την ενέργεια Difference. Με την ενέργεια αυτή αφαιρέθηκαν οι όγκοι του αντιδραστήρα στους οποίους δεν γίνεται οποιαδήποτε διεργασία. Επίσης έγινε η αφαίρεση κάποιων επιφανειών, με την ενέργεια: Geometry > Virtual Operations > Ignore Faces, οι οποίες βρίσκονταν εντός του όγκου ροής του ρευστού και θα επιβάρυναν το πρόβλημα. Όλα τα παραπάνω βήματα απεικονίζονται στην εικόνα 15.



**Εικόνα 15:** Από αριστερά προς τα δεξιά: Δημιουργία κελύφους του αντιδραστήρα, Εισαγωγή σωληνώσεων για την είσοδο και την έξοδο σε κάθε διαμέρισμα, Μεικτός όγκος του αντιδραστήρα, Τελική μορφή αντιδραστήρα μετά από τις εντολές Difference και Ignore faces.

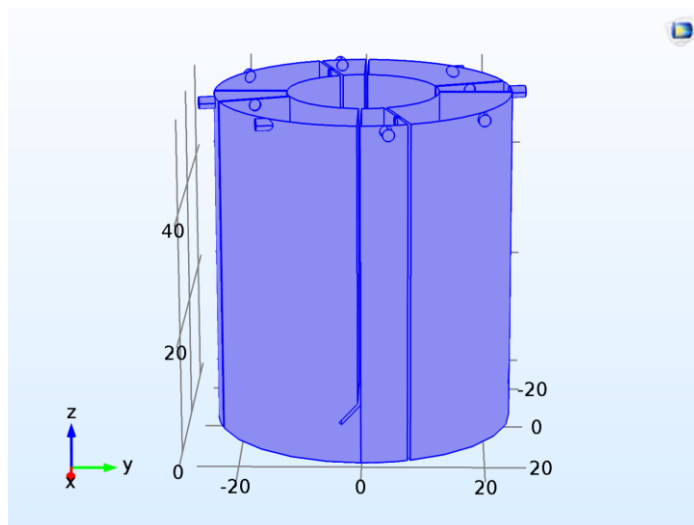
### 7.2.2 Ορισμός των υλικών που αποτελείται ο αντιδραστήρας.

Με την ολοκλήρωση της γεωμετρίας του αντιδραστήρα επόμενο βήμα ήταν ο ορισμός των υλικών από τα οποία αποτελείται. Ορίστηκε λοιπόν μέσω της βιβλιοθήκης του Comsol Multiphysics® ως υλικό δόμησης όλων των επιφανειών του PABR ο χάλυβας «Steel AISI 4340» καθώς, ο πιλοτικός αντιδραστήρας που μοντελοποιήθηκε είναι κατασκευασμένος από ανοξείδωτο ατσάλι. Το ρευστό στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα θεωρήθηκε ότι έχει παρόμοιες ιδιότητες με το νερό «Water,liquid» μιας και το απόβλητο που τροφοδοτείται στον αντιδραστήρα είναι υδατικό διάλυμα.

### 7.2.3 Ορισμός της φυσικής του προβλήματος.

Για την μοντελοποίηση του αντιδραστήρα και αφού ολοκληρώθηκαν τα βήματα της αποτύπωσης της γεωμετρίας και του ορισμού των υλικών του, επόμενο βήμα ήταν ο ορισμός της φυσικής του προβλήματος. Για την προσομοίωση των τεσσάρων κύκλων του πειράματος της αναερόβιας χώνευσης λύθηκαν οι εξισώσεις ορμής και συνέχειας για τον χαρακτηρισμό της υδραυλικής συμπεριφοράς του αντιδραστήρα. Στη συνέχεια λύθηκαν οι εξισώσεις μεταφοράς μάζας για την εύρεση του προφίλ της συγκέντρωσης του υποστρώματος στον αντιδραστήρα και του ρυθμού που αυτό καταναλώνεται. Η εξίσωση ορμής λύθηκε για μόνιμη κατάσταση καθώς θεωρείται ότι έχει αναπτυχθεί πλήρως η ροή στον αντιδραστήρα σε σχέση με την διάχυση του υποστρώματος, ενώ η εξίσωση μεταφοράς μάζας για μεταβαλλόμενο χρονικό διάστημα.

Πιο συγκεκριμένα ως τύπος ροής επιλέχθηκε η έρπουσα για τους λόγους που αναφέρθηκαν κεφάλαιο 6.1 μιας και η ροή Stokes (έρπουσα) χαρακτηρίζεται από μικρή ταχύτητα ρευστού και αριθμό Reynolds πολύ μικρότερους της μονάδας. Επιλέχθηκε κατά αυτόν το τρόπο μέσω των βημάτων Add Physics> Fluid Flow > Single Phase Flow το είδος της ροής «Creeping Flow» και ορίστηκε όπως φαίνεται στην εικόνα 16 όλος ο όγκος του αντιδραστήρα. Στη συνέχεια ορίστηκε το είδος της ροής ως ασυμπίεστη καθώς δεν μεταβάλλεται η πυκνότητα του νερού στις συνθήκες λειτουργίας του πειράματος, ενώ ως πίεση αναφοράς δόθηκε η ατμοσφαιρική πίεση 1[atm]. Επιπλέον ορίστηκε και η τάξη διακριτοποίησης για το πεδίο πίεσης και ταχύτητας. Η πίεση προσδιορίστηκε με πρώτης τάξης συναρτήσεις βάσης ενώ η ταχύτητα με δεύτερης τάξης.



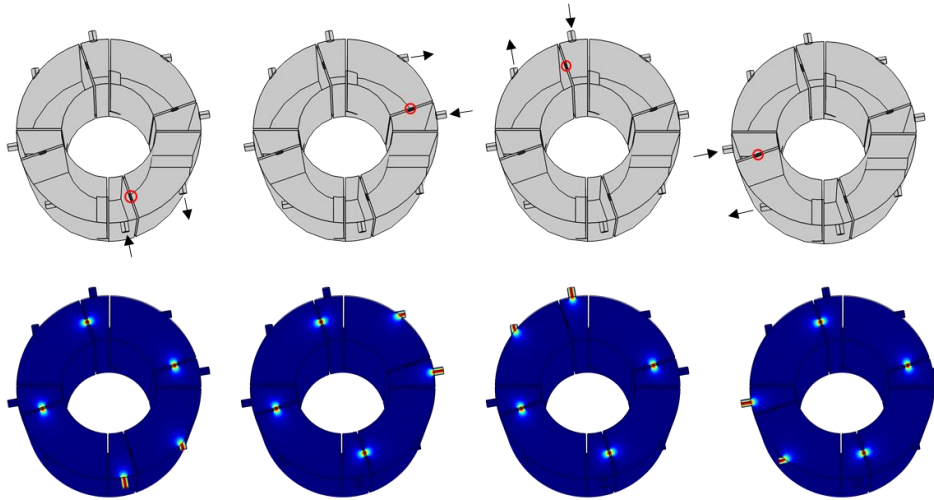
**Εικόνα 16:** Όγκος ελέγχου που ορίστηκε για την λύση της ροής στον αντιδραστήρα.



Επόμενο βήμα για την μελέτη της ροής στον αντιδραστήρα, ήταν ο προσδιορισμός των ιδιοτήτων του ρευστού «Fluid Properties». Στο επίπεδο αυτό ορίστηκε η θερμοκρασία που λαμβάνει χώρα το πείραμα, 293.15 [K] ενώ η πυκνότητα  $\rho$  και το δυναμικό ιξώδες  $\mu$  δίνονται από το ίδιο το πρόγραμμα με βάση το υλικό που έχει επιλεγεί εκ της βιβλιοθήκης. Ως αρχικές τιμές των συνιστωσών της ταχύτητας του ρευστού και της πίεσης στο εσωτερικό του αντιδραστήρα δόθηκε η τιμή μηδέν. Επίσης ορίστηκε η οριακή συνθήκη τριβή μη ολίσθησης για όλες τις επιφάνειες-τοιχώματα του αντιδραστήρα. Το επόμενο βήμα για την ολοκλήρωση της φυσικής του προβλήματος της ροής του αντιδραστήρα ήταν η δημιουργία 4<sup>ων</sup> ζευγών-εισόδου εξόδου. Κάθε ζεύγος ήταν υπεύθυνο για το συγκεκριμένο διαμέρισμα από το οποίο θα γινόταν η τροφοδοσία και το συγκεκριμένο διαμέρισμα από το οποίο θα γινόταν η απορροή. Επίσης για την επίτευξη της κάθε ροής θα έπρεπε να παραμένουν κλειστοί οι κατάλληλοι διάυλοι επικοινωνίας μεταξύ των διαμερισμάτων. Με αυτό τον τρόπο λοιπόν, δημιουργήθηκαν τέσσερα ζεύγη εντολών «Inlet», «Interior Wall», «Outlet»:

- Inlet: Στην εντολή αυτή ορίστηκε η επιφάνεια κάθε φορά που θα γινόταν η τροφοδοσία, δίνοντας ως πληροφορία την οριακή συνθήκη του προβλήματος. Στην παρούσα εργασία ως οριακή συνθήκη δόθηκε η ταχύτητα της ροής, ενώ η ροή θεωρήθηκε στρωτή «laminar flow» λόγω του αριθμού Reynolds. Η τιμή της παροχής καθορίστηκε κάθε φορά από τον εκάστοτε χρόνο παραμονής που χαρακτήριζε το πείραμα.
- Interior Wall: Στην εντολή αυτή ορίστηκε το ποιος διάυλος επικοινωνίας κάθε φορά αναλόγως με την τροφοδοσία θα παραμείνει κλειστός. Ουσιαστικά με αυτό τον τρόπο έγινε η προσομοίωση των εργαστηριακών βανών που ήταν υπεύθυνες για την κυκλοφορική συμπεριφορά του ρευστού στον αντιδραστήρα. Για την παρεμπόδιση του ρευστού να ρεύσει προς το διαμέρισμα που δεν πρέπει να τροφοδοτηθεί, ορίστηκε κάθε φορά στην κατάλληλη τομή συνθήκη μη ολίσθησης.
- Outlet: Τέλος η εντολή outlet ήταν υπεύθυνη για τον ορισμό της επιφάνειας που θα πραγματοποιούταν η απορροή, ενώ σαν οριακή συνθήκη η συνθήκη «Pressure, No Viscous Stress», γιατί η εκροή γίνεται σε ατμοσφαιρική πίεση και εξαρτάται μόνο από την ταχύτητα εισόδου

Στην παρακάτω εικόνα (17) απεικονίζονται κάθε φορά ποια είναι η επιφάνεια εισόδου του ρευστού, ποιος διάυλος επικοινωνίας μεταξύ των διαμερισμάτων έχει φραχθεί και ποια είναι η επιφάνεια από την οποία γίνεται η απορροφή.

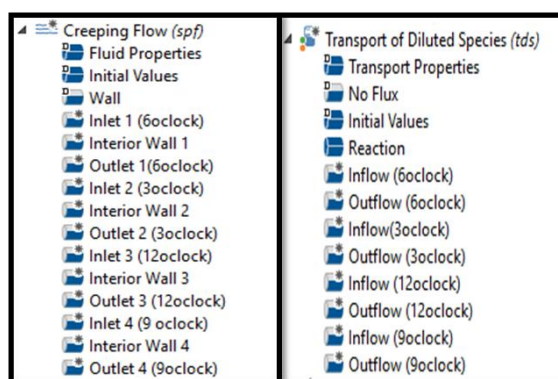


**Εικόνα 17:** Πάνω από αριστερά προς τα δεξιά. Παρουσιάζεται κάθε φορά το ζεύγος «Inlet», «Outlet», «Interior Wall» (κόκκινος κύκλος), με την φορά κατά την οποία εναλλάσσονται και στις πειραματικές συνθήκες. Κάτω από αριστερά προς τα δεξιά: Το ανεπτυγμένο προφίλ ταχύτητας για τις ίδιες περιπτώσεις. Παρατηρείται ότι κάθε φορά στο interior wall η ταχύτητα είναι μηδενική (τριβή μη ολίσθησης).

Το επόμενο στάδιο μελέτης που δεν έχει να κάνει πια με τα υδραυλικά χαρακτηριστικά του αντιδραστήρα αλλά εξαρτάται άμεσα από το προφίλ ταχύτητας που έχει αναπτυχθεί στο εσωτερικό του, είναι το πώς μεταβάλλεται η συγκέντρωση του υποστρώματος καθώς διαχέεται μέσα σε αυτόν. Ορίστηκε λοιπόν το μοντέλο «Transport of diluted species» κατά το οποίο λύνονται οι εξισώσεις μεταφοράς μάζας για κάθε ένα συστατικό που λαμβάνει μέρος στην διεργασία που πραγματοποιείται στον ενεργό όγκο του αντιδραστήρα. Ως μηχανισμός μεταφοράς μάζας εκτός της διάχυσης επιλέχθηκε η συναγωγή «Convection» η οποία βασίζεται στο ανεπτυγμένο προφίλ της ταχύτητας στον αντιδραστήρα. Για την διακριτοποίηση της μεταβλητής της συγκέντρωσης επιλέχθηκαν γραμμικές συναρτήσεις βάσεις ενώ ως εξαρτημένη μεταβλητή ορίστηκε η συγκέντρωση ενός συστατικού που στο συγκεκριμένο πείραμα ήταν το υπόστρωμα εκφρασμένο σε ολικό COD [g/L]. Στο πεδίο «Transport Properties» επιλέχθηκε το προφίλ της ταχύτητας να δίνεται από την λύση της εξίσωσης ορμής και συνέχειας που πραγματοποιήθηκε προγενέστερα ενώ ο συντελεστής διάχυσης του COD δόθηκε βάση βιβλιογραφικής έρευνας ίσος με  $D_c = 5E - 10 \text{ m}^2/\text{s}$  (Chihhao Fan, 2017), η διάχυση

θεωρήθηκε ισοτροπική. Ως αρχική συνθήκη ορίστηκε η αρχική συγκέντρωση  $C_0$  του υποστρώματος στον αντιδραστήρα. Η τιμή της αρχικής συγκέντρωσης κάθε φορά διέφερε ανάλογα με τον κύκλο της αναερόβιας χώνευσης που μοντελοποιήθηκε. Η εισαγωγή της αντίδρασης εισήχθει στο πεδίο «Reaction» όπου και δόθηκε ο ρυθμός (εξίσωση 4.17) της αντίδρασης (αναφέρεται στο κεφάλαιο 4), ενώ ορίστηκε και ο όγκος στον οποίο γίνεται η κατανάλωση του υποστρώματος όπου και θεωρήθηκε ότι συμβαίνει σε όλο τον όγκο του αντιδραστήρα. Τέλος δόθηκαν 4 ζεύγη εισόδου-εξόδου (Inflow-Outflow) της συγκέντρωσης του υποστρώματος τα οποία συνάδουν με τα ζεύγη εισροής-εκροής (Inlet-Outlet) στο πεδίο «Creeping Flow» εικόνα 18. Ως συγκέντρωση εισόδου εισήχθη η συγκέντρωση του COD στην τροφοδοσία κάθε εργαστηριακού κύκλου πειράματος αναερόβιας χώνευσης.

Όλα τα πεδία που χρειάστηκε να συμπληρωθούν για κάθε μία από τις φυσικές επίλυσης «Creeping Flow» και «Transport of Diluted species» όπως αναλυτικά αναφέρονται παραπάνω δίνονται και στην παρακάτω εικόνα η οποία περιγράφει το πώς αυτά παρουσιάζονται στο περιβάλλον του Comsol Multiphysics®.

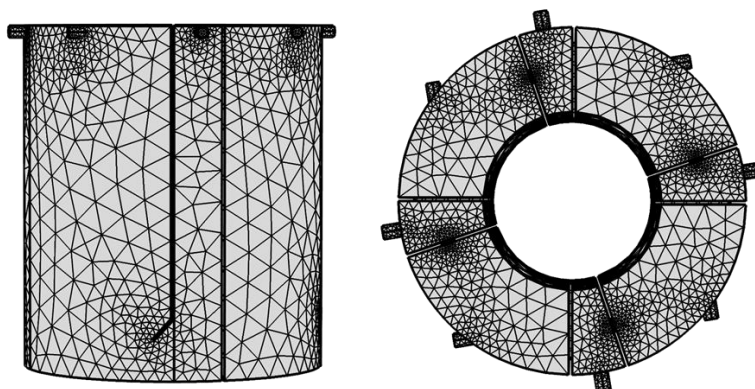


**Εικόνα 18:** Αριστερά δίνεται η λίστα των παραγόντων που χρειάζονται για την επίλυση των εξισώσεων ροής ενώ δεξιά για την επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς μάζας.

#### 7.2.4 Γένεση Πλέγματος

Κατά το πέρας του ορισμού του φυσικού προβλήματος σειρά είχε η γένεση πλέγματος με σκοπό την διακριτοποίηση του όγκου του αντιδραστήρα και την επίλυση των εξισώσεων βάση της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων. Η γένεση του πλέγματος στο παρών μοντέλο πραγματοποιήθηκε χωρίς την παρέμβαση του χρήστη με την εντολή «Physics controlled mesh». Η εντολή αυτή διακριτοποιεί τον χώρο βάση των αναγκών της φυσικής του εκάστοτε προβλήματος. Η μόνη επιλογή του χρήστη ήταν

σχετικά με το μέγεθος των στοιχείων που χαρακτηρίζει το πόσο πυκνό ή αραιό είναι ένα πλέγμα. Ο χρήστης είχε εννέα επιλογές από το αραιότερο στο πυκνότερο: *extremely coarse, extra coarse, coarser, coarse, normal, fine, finer, extra fine, extremely fine*. Η επιλογή αυτή καθορίζει άμεσα την ποιότητα της λύσης καθώς σε ένα πολύ πυκνό πλέγμα θα υπάρχει μεγαλύτερη ακρίβεια καθώς η διακριτοποίηση θα πλησιάζει το συνεχές αλλά το υπολογιστικό κόστος θα είναι ασύμφορο, ενώ σε ένα αραιό πλέγμα ναί μεν το υπολογιστικό κόστος θα μειωθεί ραγδαία αλλά η ακρίβεια της λύσης θα είναι πολύ μικρή. Η δόκιμη στρατηγική που ακολουθείται για το ποιο πλέγμα είναι κατάλληλο είναι το να μην επηρεάζει κατά την πύκνωσή του την ακρίβεια της λύσης σε κρίσιμο βαθμό. Στο παρόν υπολογιστικό μοντέλο επιλέχθηκε ως μέγεθος στοιχείων το «coarse» (εικόνα 19). Παρατηρείται πώς τα στοιχεία του πλέγματος είναι πιο μικρά στις ενώσεις του αντιδραστήρα (επιφάνειες εισόδου και εξόδου, διάλυλοι επικοινωνίας διαμερισμάτων, ανακλαστήρες) αυτό συμβαίνει λόγω της ασυνέχειας της γεωμετρίας, ενώ στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα και όσο απομακρύνονται από τις ενώσεις το μέγεθος των στοιχείων αυξάνεται. Στο παρακάτω κεφάλαιο γίνεται η σύγκριση της ποιότητας του πλέγματος της απλοποιημένης γεωμετρίας με πλέγμα «coarse» και της μη απλοποιημένης γεωμετρίας με πλέγμα «coarse» και με πλέγμα «fine».



**Εικόνα 19:** Γένεση πλέγματος κατασκευασμένο από το μοντέλο. Αριστερά δίνεται το επιφανειακό πλέγμα στην πρόσοψη του αντιδραστήρα ενώ δεξιά στην κάτοψη του αντιδραστήρα.

### 7.2.5 Επίλυση των εξισώσεων του μοντέλου.

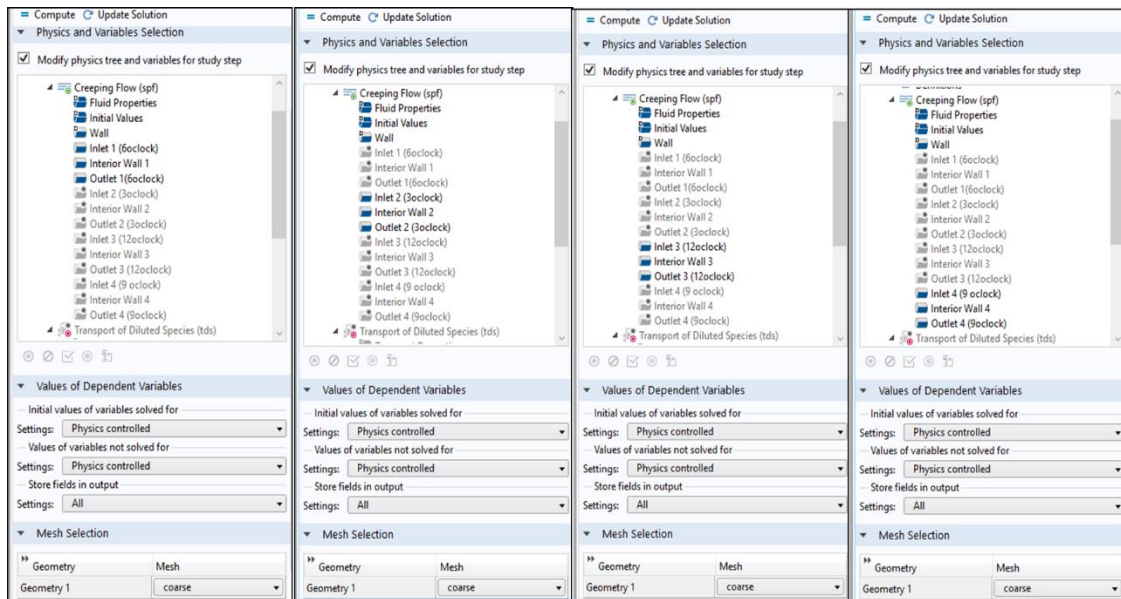
Επόμενο βήμα μετά την γένεση του πλέγματος και την διακριτοποίηση του χώρου ήταν, η επίλυση των εξισώσεων που προέκυψαν από την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Στην παρούσα μελέτη ορίστηκαν δύο διαφορετικά μοντέλα το πρώτο είχε

να κάνει με την επίλυση των εξισώσεων ροής (Navier-Stokes) και της εξίσωσης της συνέχειας για μόνιμη κατάσταση, ενώ το δεύτερο μοντέλο ήταν υπεύθυνο για την επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς μάζας για χρονικά μεταβαλλόμενο πρόβλημα. Η σύνδεση των δύο έγκειται στο ότι η εξίσωση μεταφοράς μάζας χρησιμοποιεί τα δεδομένα του προφίλ της ταχύτητας από την επίλυση των εξισώσεων ροής για την μεταφορά μάζας μέσω συναγωγής.

#### **7.2.5.a Μοντέλο επίλυσης εξισώσεων ορμής**

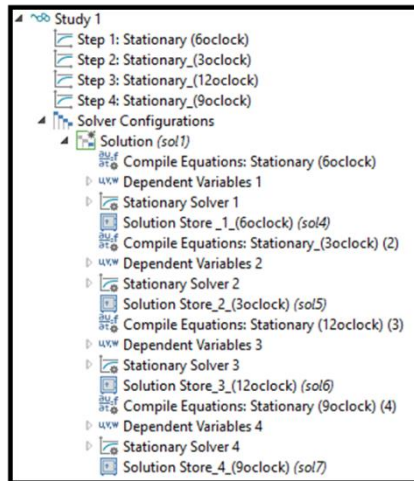
Για την επίλυση λοιπόν των εξισώσεων ορμής και συνέχειας ορίστηκε στο περιβάλλον του Comsol Multiphysics® το πεδίο «Study 1». Στο πεδίο αυτό λύνονται όλα τα βήματα «Steps» που έχουν να κάνουν με την λύση της ρεολογικής συμπεριφοράς του αντιδραστήρα. Στην περίπτωση αυτή λύθηκαν τέσσερα βήματα «steps» ένα για κάθε εναλλαγή διαμερίσματος του αντιδραστήρα επομένως προέκυψαν και τέσσερα διαφορετικά προφίλ ταχυτήτων ανάλογα με το ποιο διαμέρισμα τροφοδοτούνταν και από ποιο διαμέρισμα γινόταν η εκροή κάθε φορά.

Σε κάθε βήμα «step» ενεργοποιήθηκε το μοντέλο το οποίο επρόκειτο να είχε λυθεί και ορίστηκαν και οι μεταβλητές επίλυσης, οι συνθήκες επίλυσης, οι ιδιότητες ρευστού, οι αρχικές συνθήκες και οι οριακές συνθήκες του προβλήματος. Στην συγκεκριμένη περίπτωση λύθηκε το μοντέλο της έρπουσας ροής «Creeping Flow» ενώ απενεργοποιημένο παρέμεινε το μοντέλο «Transport of diluted species». Για κάθε ένα από τα βήματα που έπρεπε να λυθούν ενεργοποιήθηκαν διαφορετικά πεδία οριακών συνθηκών. Στην παρακάτω εικόνα (20) δίνονται τα επιλεγμένα πεδία για κάθε βήμα «step» επίλυσης. Επίσης όλες οι αρχικές τιμές των εξαρτημένων και των ανεξάρτητων μεταβλητών καθορίστηκαν από τη φυσική του προβλήματος ενώ ορίστηκε και η διακριτοποίηση βάση του πλέγματος που επιλέχθηκε σε προηγούμενο βήμα της μελέτης.



**Εικόνα 20:** Από αριστερά προς τα δεξιά: Τα πεδία που είναι ενεργοποιημένα για τα βήματα επίλυσης step1, step2, step3 & step4 αντίστοιχα.

Δόθηκαν λοιπόν όλες οι παράμετροι στο πεδίο «Study 1» το οποίο είναι υπεύθυνο για την προετοιμασία της λύσης του μοντέλου. Συλλέγει δηλαδή, όλες τις πληροφορίες που χρειάζονται για να γίνει η διακριτοποίηση των εξισώσεων με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων για την λύση του συστήματος  $Ax = b$ . Η διαδικασία αυτή πραγματοποιείται στο πεδίο ρύθμισης των παραμέτρων του επιλύτη «Solver configuration». Στο πεδίο αυτό επιλέγεται επίσης και ο επιλύτης που πρόκειται να χρησιμοποιηθεί, ενώ δίνεται η δυνατότητα στον χρήστη να επιλέξει και τη μέθοδο που επιθυμεί να εφαρμοστεί (άμεση μέθοδος ή έμμεση μέθοδος) για τη λύση του συστήματος. Έτσι λοιπόν για κάθε βήμα «step» που έχει δημιουργηθεί στο πεδίο «Study1» ορίζεται και ξεχωριστός επιλύτης. Για την επίλυση της ροής σε μόνιμη κατάσταση εφαρμόστηκε ο επιλύτης για προβλήματα που δεν εξαρτώνται από το χρόνο «Stationary solver», ενώ χρησιμοποιήθηκε η άμεση μέθοδος παράλληλης επίλυσης αραιών μητρώων (MUMPS). Στην εικόνα 21 δίνονται τα πεδία που έχουν δημιουργηθεί για την ρύθμιση των παραμέτρων του επιλύτη «Solver configuration» για κάθε ξεχωριστό βήμα «Step» της μελέτης του μοντέλου «Study1» ρεολογικής συμπεριφοράς του αντιδραστήρα.



**Εικόνα 21:** Διαμόρφωση του επιλύτη για τις 4 εναλλαγές εισόδου εξόδου στον αντιδραστήρα.

Πραγματοποιείται κατά αυτό τον τρόπο 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.

#### **7.2.5.b Μοντέλο επίλυσης εξισώσεων μεταφοράς μάζας.**

Για την επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς μάζας δημιουργήθηκε το πεδίο «Study 2» βάση του οποίου θα επιλυθεί το χρονικά μεταβαλλόμενο πρόβλημα εύρεσης της συγκέντρωσης του υποστρώματος στον αντιδραστήρα.

Όπως με την περίπτωση της επίλυσης των εξισώσεων ροής «Study 1», έτσι και στην περίπτωση αυτή «Study 2» προστέθηκαν επιμέρους πεδία «Steps» με σκοπό να οριστούν οι μεταβλητές, οι αρχικές συνθήκες, οι οριακές συνθήκες και το πλέγμα με το οποίο θα γίνει η διακριτοποίηση. Κάθε βήμα που προστίθεται στη μελέτη για την μοντελοποίηση του χρονικά μεταβαλλόμενου προβλήματος, αναφέρεται στην είσοδο του υποστρώματος και την έξοδο αυτού από συγκεκριμένο διαμέρισμα. Σε κάθε επόμενο βήμα αλλάζει η είσοδος και η έξοδος μέχρις ότου συμπληρωθεί μια περίοδος εναλλαγής T και καλυφθούν και τα τέσσερα διαμερίσματα του αντιδραστήρα. Η περίοδος εναλλαγής και ο τρόπος με τον οποίο γίνεται (σειρά διαμερισμάτων που

γίνεται η τροφοδοσία και η απορροή) καθορίζεται από τα χαρακτηριστικά του πειράματος. Επομένως, ένας κύκλος εναλλαγής κλείνει όταν έχουν δημιουργηθεί τέσσερα βήματα «Steps». Ο αριθμός των βημάτων εξαρτάται από την περίοδο εναλλαγής και από τον πραγματικό χρόνο που θέλουμε να προσομοιάσουμε. Άρα, ο αριθμός των βημάτων «Steps» που πρόκειται να δημιουργηθούν σε ένα «Study» για τον αντιδραστήρα PABR ( $4^{\text{ov}}$  διαμερισμάτων), μια περίοδο εναλλαγής  $T$  και για διάρκεια ενός πειράματος  $Y$  θα είναι ίσος με:  $4 \frac{Y}{T}$ . Σε περίπτωση που ο αριθμός αυτός δεν είναι ακέραιος τότε το πλήθος των βημάτων θα ισούται με το ακέραιο μέρος του επόμενου αριθμού (πχ εάν  $Y=90$  ημέρες,  $T=7$  ημέρες τότε  $4 \frac{Y}{T}=51.428$  επομένως ο αριθμός των «Steps» θα είναι ίσος με 52).

Στο πεδίο λοιπόν για το πρώτο βήμα χρονικά μεταβαλλόμενης μελέτης «Step 1: Time Dependent» δηλώθηκε το εύρος του χρόνου στο οποίο θα γίνει η προσομοίωση αλλά και το χρονικό βήμα με το οποίο θα καλυφθεί το χρονικό διάστημα. Στη συνέχεια ενεργοποιήθηκε το μοντέλο της εξίσωσης μεταφοράς μάζας, ενώ από αυτό επιλέχθηκαν οι αρχικές συνθήκες, οι οριακές συνθήκες και όποια άλλη πληροφορία χρειάστηκε για την επίλυση του πρώτου βήματος. Στις οριακές συνθήκες ορίστηκε η είσοδος της τροφοδοσίας και η έξοδος αυτής ενώ το προφίλ της ταχύτητας πάρθηκε από την μελέτη των ρεολογικών χαρακτηριστικών του αντιδραστήρα που έγινε στο «Study 1». Ως αρχική συνθήκη για το πρώτο βήμα επιλέχθηκε η μηδενική λύση όσον αφορά την εξαρτημένη μεταβλητή (συγκέντρωση υποστρώματος), ενώ για την ταχύτητα χρησιμοποιήθηκε το προφίλ των ταχυτήτων που είχε βρεθεί στο βήμα «Step» του «Study 1» που είχε τις οριακές του συνθήκες στην ίδια θέση του αντιδραστήρα με το εκάστοτε βήμα «Step» του «Study 2».

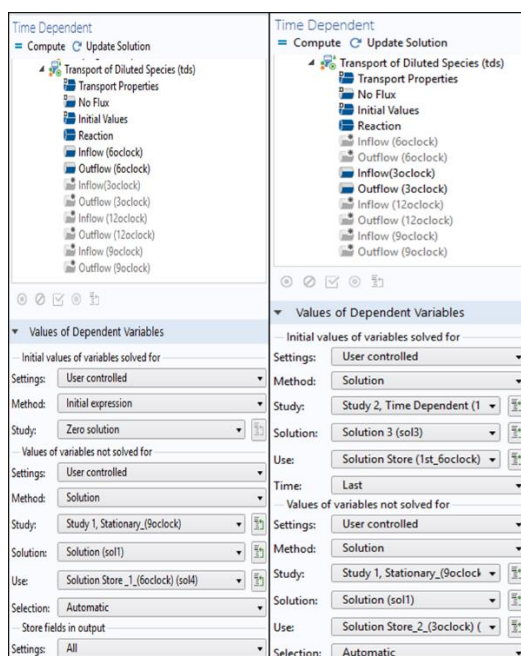
Για κάθε επόμενο βήμα ακολουθήθηκε ο ίδιος μπούσουλας με την διαφορά ότι το εύρος του χρόνου άρχιζε από εκεί που τελείωνε το εύρος του προηγούμενου «Step» έχοντας το ίδιο χρονικό βήμα, ενώ ως αρχική συνθήκη των τιμών της συγκέντρωσης χρησιμοποιήθηκε η τελευταία χρονικά αποθηκευμένη λύση συγκεντρώσεων του προηγούμενου «Step». Για το προφίλ της ταχύτητας οδηγήθηκε το πρόγραμμα στον επιλύτη σε μόνιμες συνθήκες (Solver 1) και επιλέχθηκε το προφίλ ταχύτητας με είσοδο και έξοδο (Inlet-Outlet) από το διαμέρισμα του αντιδραστήρα που είχε οριστεί ως τροφοδοσία του υποστρώματος και έξοδο ως απορροή (Inflow-Outflow). Στην εικόνα



22 παρουσιάζονται τα συμπληρωμένα επίπεδα για το «Step 1» και το «Step 2» του «Study 2».

Μετά την δημιουργία όλων των «Time Dependent Studies», που χρειάστηκαν για την επίλυση του πειραματικού μοντέλου επιλέγεται το «Solver Configuration» και ο αντίστοιχος «Solver» ο οποίος βηματίζει ανάλογα με την σύγκλιση 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».

Αφού ολοκληρώθηκαν όλα τα επιμέρους βήματα για τον ορισμό του «Study 2», το μοντέλο ήταν έτοιμο για την επίλυση των 4<sup>ων</sup> κύκλων αναερόβιας χώνευσης που έγιναν στον αντιδραστήρα PABR (περιοδικό αντιδραστήρα με ανακλαστήρες) προσαρμόζοντας κάθε φορά τις συνθήκες του πραγματικού πειράματος στο μοντέλο προσομοίωσης.



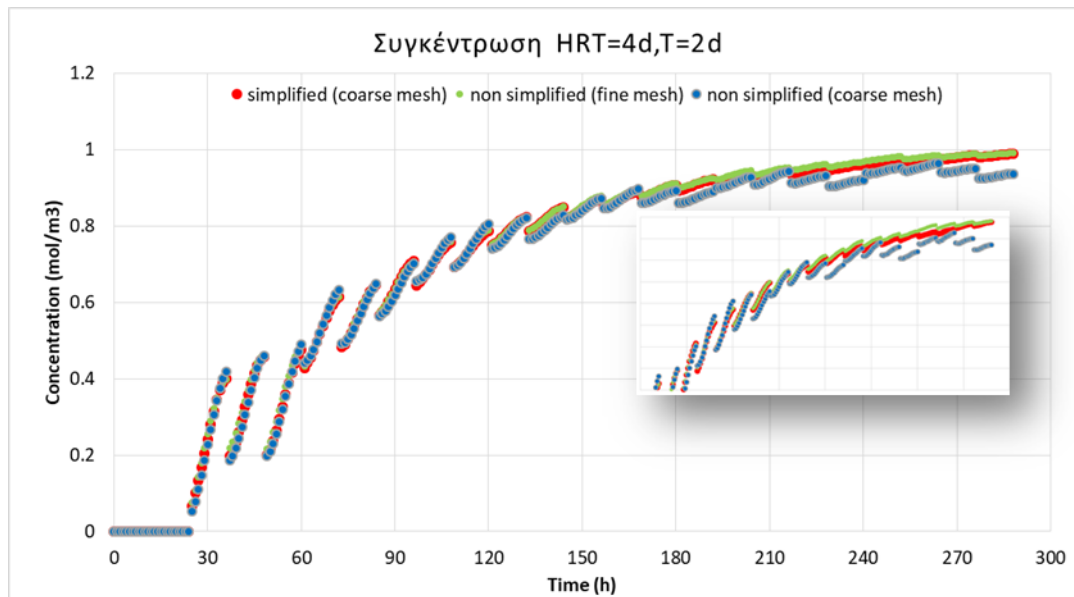
**Εικόνα 22:** Ενδεικτικός ορισμός αρχικών και οριακών συνθηκών για τα «Step 1» και «Step 2» του «Study 2» αντίστοιχα.

### 7.3 Ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα.

Στο σημείο αυτό μελετήθηκε η ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα βάση της σύγκρισης που πραγματοποιήθηκε μεταξύ της μη απλοποιημένης γεωμετρίας που είχε δοθεί από την διπλωματική εργασία του Θ. Καμπερίδη και του Γ. Σεϊντή και της απλοποιημένης γεωμετρίας που ήταν μέρος της παρούσας εργασίας.

Πιο συγκεκριμένα έγινε η σύγκριση των αποτελεσμάτων της συγκέντρωσης του ιχνηθέτη σε ένα πείραμα τα χαρακτηριστικά του οποίου ήταν περίοδος εναλλαγής (T) ίση με 2 ημέρες και υδραυλικός χρόνος παραμονής (HRT) ίσος με 4 ημέρες. Το πείραμα αυτό είχε χρησιμοποιηθεί για τον χαρακτηρισμό της ρεολογικής συμπεριφοράς του πιλοτικού περιοδικού αντιδραστήρα με ανακλαστήρες (PABR). Ως συγκέντρωση (C) τροφοδοσίας του ιχνηθέτη ορίστηκε  $1 [mol/m^3]$  και ως συντελεστής διάχυσης ( $D_c$ ) ίσος με  $4E-10 [m^2/s]$ . Το πείραμα διήρκεσε τρεις χρόνους παραμονής δηλαδή 12 ημέρες και καταγράφηκε η συγκέντρωση του ιχνηθέτη, κάθε φορά λόγω εναλλαγής των διαμερισμάτων, στο εκάστοτε διαμέρισμα εξόδου. Συνολικά πραγματοποιήθηκαν 24 εναλλαγές διαμερισμάτων καθώς ο χρόνος λειτουργίας ήταν 12 ημέρες, η περίοδος εναλλαγής 2 ημέρες και 4 τα διαμερίσματα του αντιδραστήρα ( $4 \frac{Y}{T} = 4 \frac{12}{2} = 24$ ). Παρακάτω δίνεται συγκριτικά το διάγραμμα (2) των αποτελεσμάτων της συγκέντρωσης για τα εξής μοντέλα:

- μη απλοποιημένη γεωμετρία πυκνού (non simplified fine mesh) και αραιού πλέγματος (non simplified coarse mesh) σε σύγκριση με την απλοποιημένη γεωμετρία αραιού πλέγματος (simplified coarse mesh).



**Διάγραμμα 2:** Συγκριτικό διάγραμμα συγκέντρωσης για τα μοντέλα: απλοποιημένης γεωμετρίας (αραιό πλέγμα), μη απλοποιημένης γεωμετρίας (πυκνό πλέγμα), μη απλοποιημένης γεωμετρίας (αραιό πλέγμα).

Στο παραπάνω διάγραμμα παρατηρείται ότι και στις τρεις περιπτώσεις ποιοτικά υπάρχει το ίδιο αποτέλεσμα δηλαδή με την πάροδο του χρόνου η συγκέντρωση του ιχνηθέτη στον αντιδραστήρα αυξάνεται. Στο μοντέλο της απλοποιημένης γεωμετρίας με το αραιό πλέγμα (**περίπτωση 1**) και της μη απλοποιημένης γεωμετρίας με το πυκνό πλέγμα (**περίπτωση 3**) φαίνεται πως μετά από τρεις χρόνους παραμονής υπάρχει πλήρης ανάμειξη στον αντιδραστήρα και η συγκέντρωση έχει φτάσει τη μέγιστη τιμή  $1 [mol/m^3]$ . Το αποτέλεσμα αυτό συνάδει με τα πειραματικά δεδομένα. Στην περίπτωση της λύσης του μοντέλου με αραιό πλέγμα και μη απλοποιημένη γεωμετρία (**περίπτωση 2**) φαίνεται πως δεν έχει επέλθει ακόμα η πλήρης ανάμειξη στον αντιδραστήρα ενώ το προφίλ της συγκέντρωσης παρουσιάζει ανομοιομορφίες. Στις προηγούμενες μελέτες όπου δεν είχε πραγματοποιηθεί απλοποίηση στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αντιδραστήρα χρησιμοποιήθηκε αρχικά το αραιό πλέγμα το οποίο δεν έδινε ικανοποιητική λύση με αποτέλεσμα να γίνει πύκνωση σε αυτό. Παρατηρείται πως με την απλοποίηση της γεωμετρίας μπορούν να δοθούν ικανοποιητικά αποτελέσματα με μικρότερη πύκνωση.

Για την σύγκριση των λύσεων των τριών αυτών περιπτώσεων καταγράφηκαν οι τιμές των αποκλίσεων την λύσης με το πυκνότερο πλέγμα και την μη απλοποιημένη γεωμετρία σε σχέση με τα υπόλοιπα δύο μοντέλα. Επίσης υπολογίστηκε η ανοιγμένη

νόρμα ( $\| \cdot \|_2$ ) στο πλήθος των μετρήσεων σε κάθε χρονική στιγμή  $N$ , από τον παρακάτω τύπο:

$$\frac{\|S - s_i\|_2}{N} = \frac{\sqrt{\sum_{k=1}^N (S_k - s_{i_k})^2}}{N}, k = 1, \dots, N, i = 1, 2 \quad (7.4)$$

με  $C$ : οι τιμές των συγκεντρώσεων του μη απλοποιημένου μοντέλου με το πυκνό πλέγμα, με  $c_i$ : οι τιμές των συγκεντρώσεων για  $i$ : 1 μη απλοποιημένο μοντέλο αραιό πλέγμα,  $i$ : 2 απλοποιημένο μοντέλο αραιό πλέγμα και με  $N$ : πλήθος μετρήσεων.

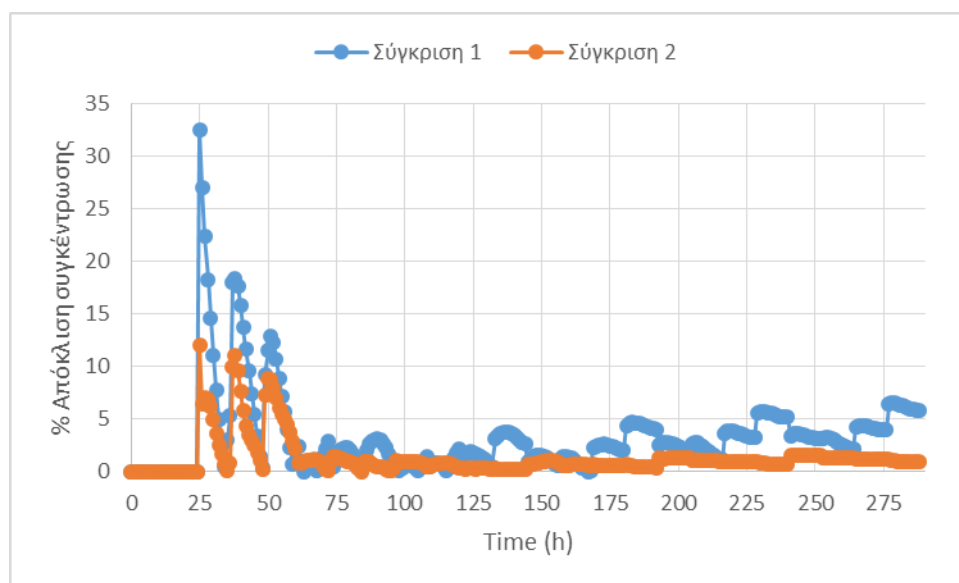
Στον παρακάτω πίνακα παρατίθενται οι τιμές των αποκλίσεων και των ανοιγμένων ως προς το πλήθος των μετρήσεων νορμών. Για λόγους ευκολίας ως **σύγκριση 1** καλείται η σύγκριση του μοντέλου μη απλοποιημένης γεωμετρίας πυκνού πλέγματος (fine mesh) με το μοντέλο επίσης μη απλοποιημένης γεωμετρίας αραιού πλέγματος (coarse mesh), ενώ ως **σύγκριση 2** καλείται αυτή του μοντέλου μη απλοποιημένης γεωμετρίας πυκνού πλέγματος (fine mesh) με αυτό της απλοποιημένης γεωμετρίας αραιού πλέγματος (coarse mesh).

**Πίνακας 5:** Συγκριτικός πίνακας αποκλίσεων και ανοιγμένων νορμών για τις 2 περιπτώσεις.

Σύγκριση	Σύγκριση 1	Σύγκριση 2
Μέγιστη % απόκλιση	32.49	12.1
Ελάχιστη % απόκλιση	4.79E-3	1.37E-2
Μ.Ο. % απόκλισης	4.30	1.30
$\ S - s_i\ _2/N$	1.54E-3	1.38E-4

Στον παραπάνω πίνακα παρατηρείται ότι η μέγιστη επί τοις εκατό απόκλιση μεταξύ των τιμών των συγκεντρώσεων είναι μεγαλύτερη στην σύγκριση 1 σε σχέση με την σύγκριση 2 ενώ όσον αφορά την ελάχιστη που σημειώθηκε, αυτή της πρώτης παρουσιάζει την μικρότερη τιμή. Ο μέσος όρος του ποσοστού των αποκλίσεων δηλώνει την μέση ποσοστιαία απόκλιση των τιμών της συγκέντρωσης των συγκρινόμενων μοντέλων. Η σύγκριση 2 παρουσιάζει μικρότερο μ.ό. επί τοις εκατό απόκλιση σε σχέση με την 1. Το παρακάτω διάγραμμα (3) δείχνει την διακύμανση της απόκλισης των δύο περιπτώσεων για κάθε μία τιμή της συγκέντρωσης ξεχωριστά. Η δεύτερη σύγκριση παρουσιάζει μικρότερη διακύμανση σε σχέση με την πρώτη με αποτέλεσμα να

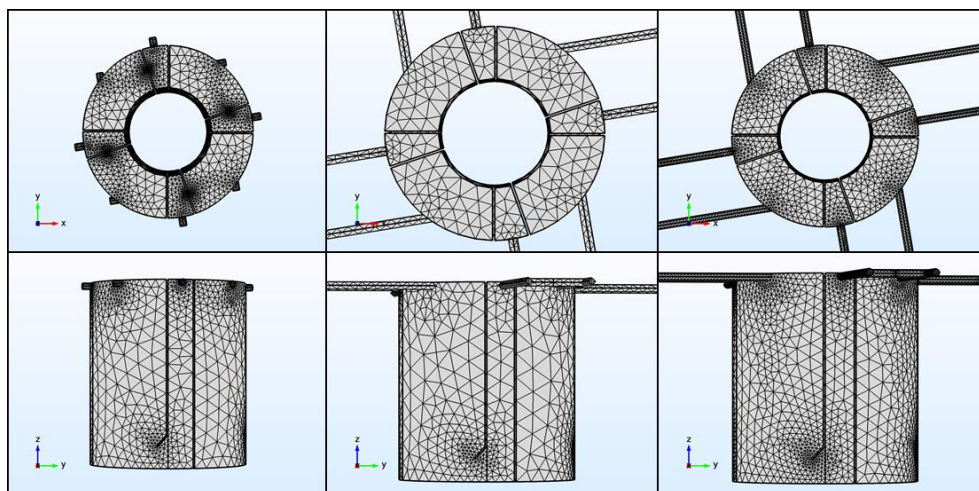
διαπιστώνεται ότι η χρήση του μοντέλου της απλοποιημένης γεωμετρίας με αραιό πλέγμα εξάγει ικανοποιητικά αποτελέσματα. Το συμπέρασμα αυτό επαληθεύεται και με την παρατήρηση της ανοιγμένης νόρμας κατά την οποία στην σύγκριση 2 παρατηρείται η διαφοροποίηση της τιμής των συγκεντρώσεων εν γένει στο 4<sup>ο</sup> δεκαδικό ψηφίο σε αντίθεση με την σύγκριση 1 όπου υπάρχει μικρότερη ακρίβεια.



**Διάγραμμα 3:** Διάγραμμα διακύμανσης απόκλισης συγκεντρώσεων των περιπτώσεων 1 και 2.

Όπως αναφέρθηκε στο κεφάλαιο της γένεσης του πλέγματος, η γένεση έγινε βάση του προγράμματος Comsol Multiphysics<sup>®</sup> χωρίς την παρέμβαση του χρήστη ανάλογα με τη φυσική του προβλήματος. Οι αποκλίσεις λοιπόν στην τιμή των συγκεντρώσεων, των περιπτώσεων της απλοποιημένης γεωμετρίας με αραιό πλέγμα και της μη απλοποιημένης γεωμετρίας με επίσης αραιό πλέγμα σε σύγκριση με το μοντέλο που είχε χρησιμοποιηθεί για την μελέτη των ρεολογικών χαρακτηριστικών (μη απλοποιημένη γεωμετρία πυκνό πλέγμα), οφείλεται στην ποιότητα του πλέγματος. Με τον όρο ποιότητα εννοείται το κατά πόσο ορθά μπορεί το πλέγμα να διακριτοποιήσει το χώρο και να καλύψει κάθε ασυνέχεια της γεωμετρίας χωρίς να την αλλοιώσει (π.χ. διακριτοποίηση ενός κύκλου ως τετράγωνο). Στην παρακάτω εικόνα (23) παρουσιάζεται η γένεση πλέγματος για τις τρεις περιπτώσεις σε πρόσοψη και κάτοψη. Επίσης παρουσιάζονται και σε μεγέθυνση τα σημεία της γεωμετρίας τα οποία δείχνουν να είναι πιο ευαίσθητα στην γένεση του πλέγματος εικόνα (23, 24). Τα σημεία αυτά

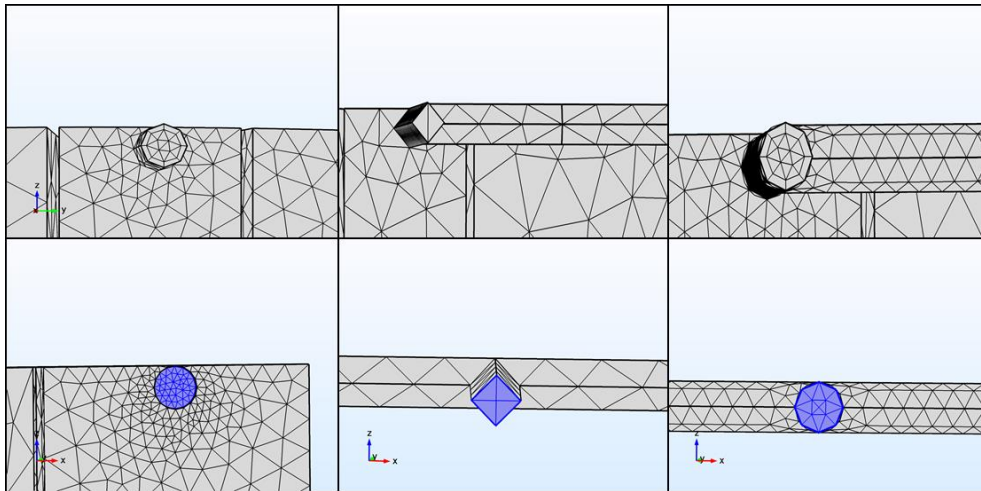
είναι οι εξωτερικές σωληνώσεις και οι ανακλαστήρες όπου ο αλγόριθμος του προγράμματος γένεσης πλέγματος αναγκάστηκε να πυκνώσει παίρνοντας ως κριτήριο το μέγεθος των στοιχείων που του έχει δώσει ο χρήστης.



**Εικόνα 23:** Πάνω από αριστερά προς τα δεξιά κάτωψη PABR/Κάτω από αριστερά προς τα δεξιά πρόσοψη PABR: αραιό πλέγμα (coarse mesh) απλοποιημένης γεωμετρίας, αραιό πλέγμα (coarse mesh) μη απλοποιημένης γεωμετρίας, πυκνό πλέγμα (fine mesh) μη απλοποιημένης γεωμετρίας.

Βάσει της παραπάνω εικόνας φαίνεται πως στο πάνω μέρος του αντιδραστήρα στην περίπτωση της απλοποιημένης γεωμετρίας και του αραιού πλέγματος, υπάρχουν περιοχές μεγαλύτερης πυκνώσης σε σχέση με τις άλλες δύο περιπτώσεις. Οι περιοχές αυτές βρίσκονται στα σημεία που έχουν οριστεί οι εσωτερικοί διάυλοι επικοινωνίας μεταξύ των διαμερισμάτων. Όσον αφορά το κύριο κορμό του αντιδραστήρα (πρόσοψη) μεγαλύτερη πυκνώση παρουσιάζει η 3<sup>η</sup> περίπτωση ενώ η 1<sup>η</sup> και η 2<sup>η</sup> έχουν παρόμοιο αριθμό στοιχείων ίδιου μεγέθους.

Μεγεθύνοντας τις περιοχές που παρουσιάζονται οι ασυνέχειες στην γεωμετρία (εξωτερικές σωληνώσεις) παρατηρείται ότι στην περίπτωση 1 και στην περίπτωση 3 έχει αποδοθεί σε ικανοποιητικό βαθμό η διακριτοποίηση του χώρου καθώς δεν υπάρχουν μεγάλες αποκλίσεις μετά το «άπλωμα» του επιφανειακού πλέγματος ως προς την αρχική γεωμετρία. Στην περίπτωση 2 υπάρχει θέμα στην ποιότητα του επιφανειακού πλέγματος των σωληνώσεων καθώς έχουν αποδοθεί ως κύλινδροι ενώ με την γένεση του πλέγματος δεν φαίνεται να τηρείται κάτι τέτοιο καθώς έχουν μετατραπεί σε ρόμβοι (εικόνα 24).



**Εικόνα 24:** Πάνω από αριστερά προς τα δεξιά επιφανειακό πλέγμα εξωτερικών σωληνώσεων αντιδραστήρα/ Κάτω από αριστερά προς τα δεξιά επιφανειακό πλέγμα διαύλου επικοινωνίας μεταξύ διαμερισμάτων: αραιό πλέγμα (coarse mesh) απλοποιημένης γεωμετρίας, αραιό πλέγμα (coarse mesh) μη απλοποιημένης γεωμετρίας, πυκνό πλέγμα (fine mesh) μη απλοποιημένη γεωμετρία.

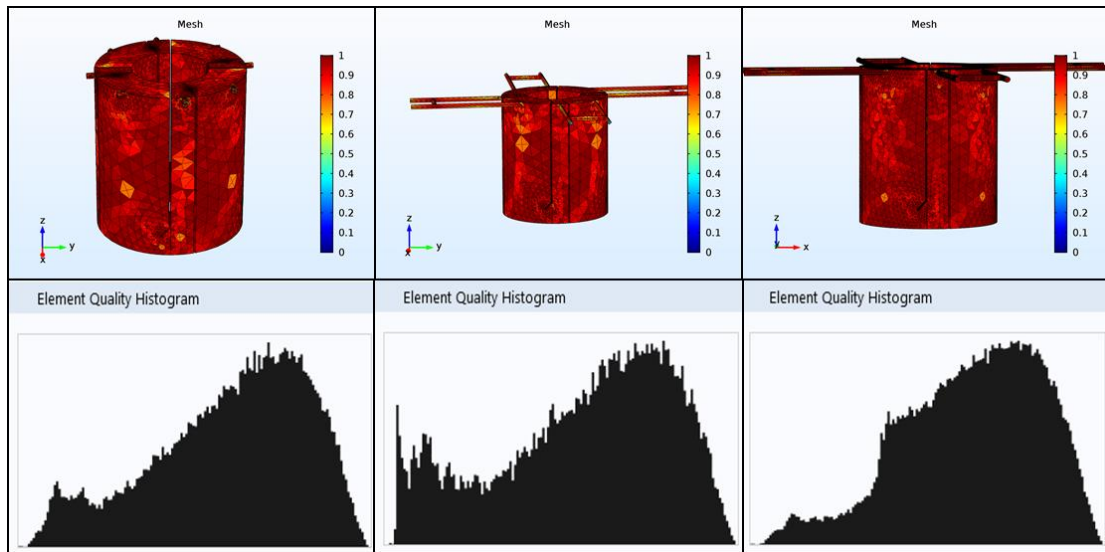
Στον παρακάτω πίνακα (6) δίνονται τα είδη και ο αριθμός των πλεγμάτων, όπως αυτά έχουν παραχθεί από το πρόγραμμα προσομοίωσης Comsol Multiphysics<sup>®</sup>, από τα οποία αποτελείται κάθε περίπτωση καθώς και τα ποιοτικά χαρακτηριστικά αυτών. Στα μοντέλα της απλοποιημένης και της μη απλοποιημένης γεωμετρίας των περιπτώσεων 1 και 2 έχει δοθεί από τον χρήστη η εντολή γένεσης πλέγματος θέτοντας ως κριτήριο το ίδιο μέγεθος πλεγμάτων (coarse mesh). Ο αριθμός όμως των στοιχείων στην πρώτη περίπτωση είναι υπερδιπλάσιος της δεύτερης περίπτωσης ενώ υπερέχει και σε ποιοτικά χαρακτηριστικά, καθώς παρουσιάζει μια μέση τιμή ποιότητας στοιχείων ίση με 0.6 έναντι 0.56 της δεύτερης. Συγκρίνοντας την 3<sup>η</sup> με την 2<sup>η</sup> περίπτωση, παρατηρείται πως ο αριθμός των στοιχείων στην 3<sup>η</sup> περίπτωση υπερέχει της δεύτερης κατά τα 2/3 της πρώτης, έχοντας όμως περίπου την ίδια μέση ποιότητα πλέγματος.

**Πίνακας 6:** Ποιοτικά και ποσοτικά χαρακτηριστικά πλέγματος για κάθε περίπτωση.

	Περίπτωση 1	Περίπτωση 2	Περίπτωση 3
<b>Tetrahedral</b>	63,734	28,580	118,899
<b>Pyramid</b>	689	352	599
<b>Prism</b>	12,371	7,414	22,749
<b>Triangular</b>	13,598	8,054	23,972
<b>Quadrilateral</b>	64	24	48
<b>Edge</b>	1,700	1,765	3,666
<b>Vertex</b>	200	204	204
<b>Number of el.</b>	80,434	36,346	142,247
<b>Min. el. quality</b>	0.001247	0.01418	0.00121
<b>Av. el. quality</b>	0.6012	0.5641	0.6245

Η εικόνα 25 παρουσιάζει τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των πλεγμάτων για τις παραπάνω περιπτώσεις. Παρατηρείται ότι η χαμηλή ποιότητα των στοιχείων του πλέγματος εντοπίζεται στις εξωτερικές σωληνώσεις του αντιδραστήρα (στοιχεία με μπλε χρώμα) με την περίπτωση 2 να είναι αυτή που υστερεί σε σχέση με τις άλλες δύο λόγω του μικρότερου αριθμού στοιχείων που έχουν παραχθεί μιας και η διακριτοποίηση των εξωτερικών σωληνώσεων έχει αλλοιώσει το αρχικό τους σχήμα. Οι περιπτώσεις 1 και 3 παρουσιάζουν περίπου την ίδια συμπεριφορά όσον αφορά την περίπτωση της ποιότητας των στοιχείων του πλέγματος. Κάτι τέτοιο επαληθεύεται και από το ιστόγραμμα ποιότητας των πλεγματικών στοιχείων βάση του οποίου φαίνεται πως την καλύτερη ομοιογένεια παρουσιάζει η περίπτωση 3 με την περίπτωση 1 να ακολουθεί. Όσον αφορά το αραιό πλέγμα για την μη απλοποιημένη γεωμετρία δεν ενδείκνυται για την μελέτη οποιαδήποτε φυσικού μοντέλου.





**Εικόνα 25:** Πάνω, από αριστερά προς τα δεξιά: Ποιοτική απεικόνιση στοιχείων του πλέγματος για τις περιπτώσεις 1, 2 και 3 αντίστοιχα. Κάτω από αριστερά προς τα δεξιά: Ιστόγραμμα ποιότητας στοιχείων του πλέγματος για τις ίδιες κατά σειρά περιπτώσεις.

Εν κατακλείδι, επιλέχθηκε να εφαρμοστεί το αραιό πλέγμα (coarse mesh) στην απλοποιημένη γεωμετρία για την λύση του μοντέλου για το οποίο έχει γίνει η προσομοίωση, καθώς αποδείχθηκε πως προσφέρει ικανοποιητική τάξη ακρίβειας της λύσης, σε σχέση πάντα με την περίπτωση 3 (μη απλοποιημένο μοντέλο πυκνό πλέγμα (fine mesh)). Για την επίλυση των εξισώσεων ορμής και συνέχειας υπολογίστηκαν οι βαθμοί ελευθερίας (DOF's) του συστήματος ίσοι με 482,446 ενώ για την επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς μάζας ίσοι με 21,340 συν 9,034 εσωτερικούς. Ενώ με το πυκνό πλέγμα για την μη απλοποιημένη γεωμετρία οι DOF's για τη Navier-Stokes ήταν 868,268 ενώ για την μεταφορά μάζας 38,247 συν 16,080 εσωτερικοί. Επομένως χρειάστηκε μικρότερη υπολογιστική ισχύς για την επίλυση του μοντέλου έχοντας ταυτόχρονα ικανοποιητικά αποτελέσματα.

## 8. Αποτελέσματα-Συζήτηση

### 8.1 Ανασκόπηση διαδικασίας

Για την εισαγωγή του απλοποιημένου μοντέλου της αναερόβιας χώνευσης για έναν περιοδικό αντιδραστήρα με ανακλαστήρες (PABR) με τη χρήση του λογισμικού Comsol Multiphysics<sup>®</sup>, και τη σύγκριση των αποτελεσμάτων με τα αποτελέσματα ενός εργαστηριακού πειράματος 4<sup>ων</sup> πειραματικών κύκλων λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης, ακολουθήθηκε η εξής διαδικασία:

- Πειραματικός χαρακτηρισμός ρεολογικής συμπεριφοράς του PABR (Σεϊντής, 2015)
- Εισαγωγή και τελειοποίηση γεωμετρίας του PABR στο λογισμικό μοντελοποίησης μέσω πεπερασμένων στοιχείων Comsol Multiphysics<sup>®</sup> (Σεϊντής, 2015), (Καμπερίδης, 2016)
- Μοντελοποίηση ρεολογικής συμπεριφοράς του PABR και προσομοίωση αυτού με ισοδύναμο αριθμό ( $N_r$ ) αντιδραστήρων πλήρους ανάμειξης (CSTR) με βάση τον λόγο του υδραυλικού χρόνου παραμονής προς την περίοδο εναλλαγής ( $\frac{HRT}{T}$ ). (Καμπερίδης, 2016)
- Απλοποίηση της γεωμετρίας του μοντέλου του PABR και ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα.
- Παραμετρική ανάλυση των εξισώσεων σχεδιασμού CSTR για την εύρεση της σταθεράς ( $k$ ) της αντίδρασης κατανάλωσης του υποστρώματος για την παραγωγή βιομάζας, η οποία ακολουθεί κινητική του μοντέλου δύο φάσεων για  $s < 2K_s$  (βλ. Κεφάλαιο 4).
- Μοντελοποίηση του απλοποιημένου μοντέλου της αναερόβιας χώνευσης με τη χρήση του Comsol Multiphysics<sup>®</sup>, με την εισαγωγή του ρυθμού κατανάλωσης του υποστρώματος.
- Παρατήρηση της μεταβολής της συγκέντρωσης του υποστρώματος καθ' ύψος ενός διαμερίσματος του αντιδραστήρα για διαφορετικούς χρόνους παραμονής ( $HRT$ ).

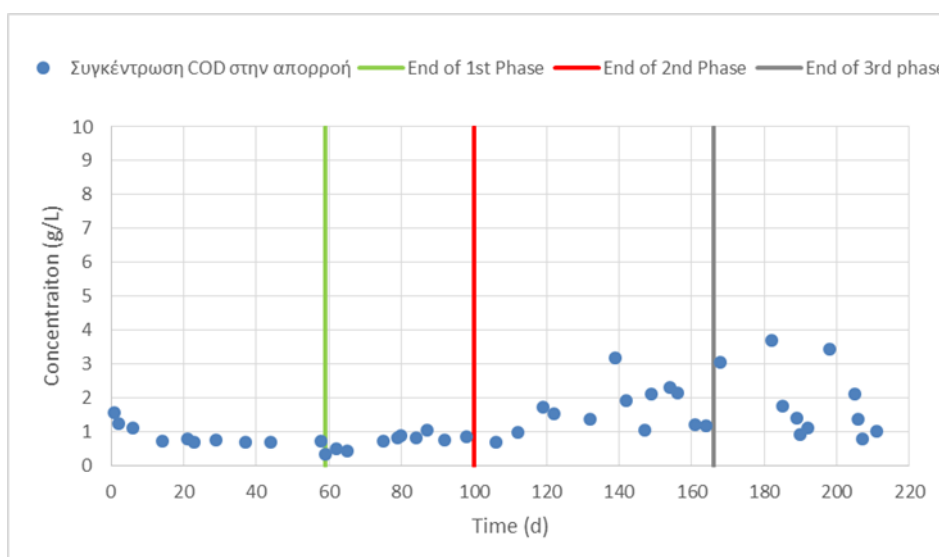
## 8.2 Πείραμα αναερόβιας χώνευσης

Στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής του Ιωάννη Μιχαλόπουλου πραγματοποιήθηκε το πείραμα αναερόβιας χώνευσης 4<sup>ων</sup> κύκλων λειτουργίας με τροφοδοσία το απόβλητο FORBI (βιομάζα από υπολείμματα τροφών). Οι συνθήκες των τεσσάρων φάσεων λειτουργίας δίνονται στον πίνακα 7.

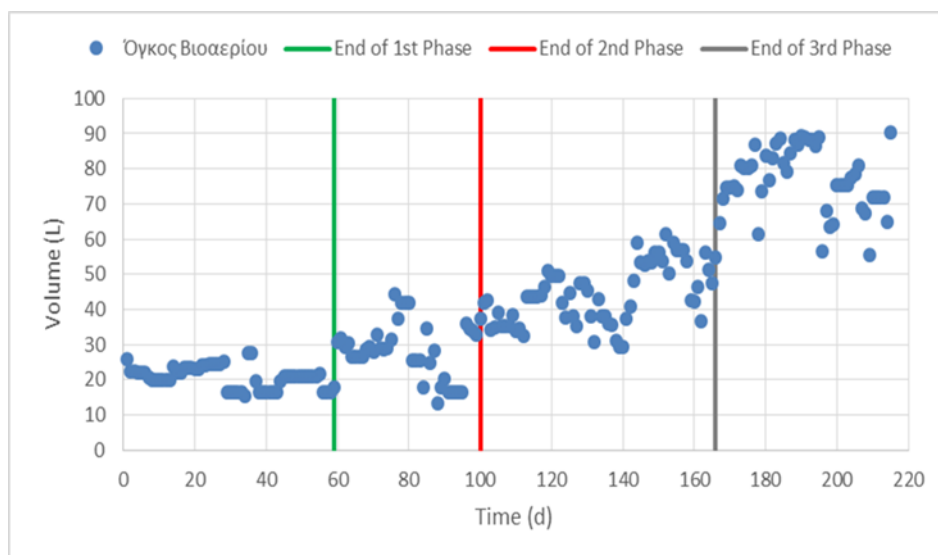
**Πίνακας 7:** Συνθήκες πειράματος λειτουργίας PABR με τροφοδοσία του αποβλήτου FORBI σε 4 διαφορετικές φάσεις.

FORBI	HRT [d]	T [d]	COD <sub>in</sub> [g/L]	COD <sub>t0</sub> [g/L]
<b>Phase 1</b>	12.2	2	7.188	0.500
<b>Phase 2</b>	10.0	2	11.763	0.290
<b>Phase 3</b>	8.7	2	10.704	0.780
<b>Phase 4</b>	5.0	2	10.639	1.486

Τα πειραματικά αποτελέσματα της κατανάλωσης του ολικού COD και της παραγωγής του όγκου του βιοαερίου ανά ημέρα, δίνονται συνολικά στα διαγράμματα 4 και 5 και για τις 4 φάσεις λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης του αντιδραστήρα.

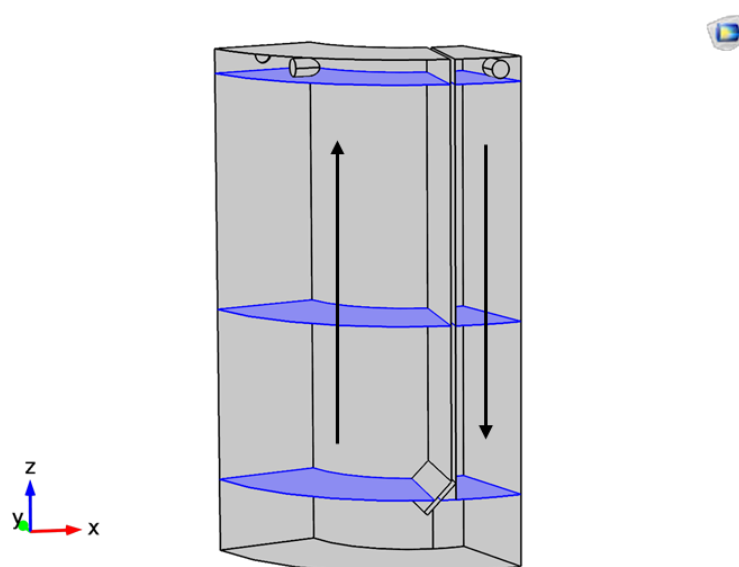


**Διάγραμμα 4:** Πειραματικές μετρήσεις συγκέντρωσης υποστρώματος (COD) στην απορροή κατά τη διάρκεια των 4<sup>ων</sup> κύκλων αναερόβιας χώνευσης.



**Διάγραμμα 5:** Πειραματικές μετρήσεις όγκου παραγόμενου βιοαερίου ανά ημέρα λειτουργίας των 4<sup>ων</sup> κύκλων αναερόβιας χώνευσης.

Παρακάτω αναλύεται κάθε κύκλος αναερόβιας χώνευσης ξεχωριστά και γίνεται η σύγκριση των πειραματικών με τα αποτελέσματα από το μοντέλο που αναπτύχθηκε μέσω του Comsol Multiphysics® που προσομοιώνει την διεργασία αυτή στον PABR. Επίσης παρατηρείται ο περιοδικός τρόπος με τον οποίο μεταβάλλεται η συγκέντρωση του υποστρώματος καθ' ύψος (πάνω, μέση, κάτω) ενός διαμερίσματος αναφοράς του αντιδραστήρα (τμήμα ανοδικής και καθοδικής ροής) (εικόνα 26) και το πώς επηρεάζεται από τον υδραυλικό χρόνο παραμονής (HRT) στο εκάστοτε πείραμα.



**Εικόνα 26:** Διαμέρισμα αναφοράς αντιδραστήρα, τμήμα καθοδικής και ανοδικής ροής.

### **8.3 Μοντελοποίηση αναερόβιας χώνευσης 4<sup>ου</sup> κύκλων λειτουργίας σε PABR.**

#### **8.3.1 Τρόπος εξαγωγής αποτελεσμάτων**

Κατά το πέρας της επίλυσης των μοντέλων τα αποτελέσματα δόθηκαν σε μορφή γραφικών μέσω της επιλογής «Results» κατά την οποία προβλήθηκε η συγκέντρωση και ο ολικός ρυθμός κατανάλωσης του υποστρώματος σε όλο τον όγκο του αντιδραστήρα με τη μορφή εγκάρσιων τομών. Επιπλέον, εξήχθησαν και οι τιμές της συγκέντρωσης του υποστρώματος (COD) στην έξοδο του αντιδραστήρα που χρησιμοποιείται τη συγκεκριμένη χρονική στιγμή, προσομοιώνοντας έτσι την εξαγωγή των πειραματικών αποτελεσμάτων. Τα βήματα που ακολουθήθηκαν για την ενέργεια αυτή ήταν τα εξής: στην κατηγορία «Results» επιλέχθηκε από τα «Derived Values» η προβολή των μέσω τιμών των αποτελεσμάτων σε μια επιφάνεια, «Surface Average», στη συνέχεια επιλέχθηκε η αποθηκευμένη λύση, οι χρόνοι για τους οποίους θα προβληθούν τα αποτελέσματα, η έκφραση που τα περιγράφει και τέλος ορίστηκε 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.

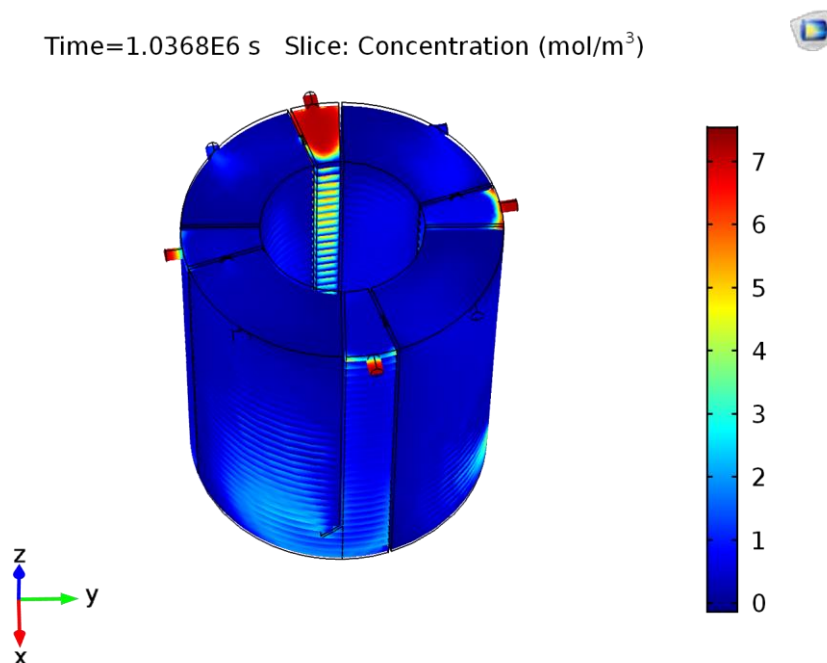
#### **8.3.2 Πρώτος κύκλος λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης**

Η πρώτη φάση αναερόβιας χώνευσης διήρκησε περίπου 60 ημέρες. Οι συνθήκες λειτουργίας αυτού του κύκλου της διεργασίας ήταν: η σταθερά της κινητικής (k), ο χρόνος παραμονής (HRT), η περίοδος εναλλαγής (T), η συγκέντρωση παροχής υποστρώματος (FORBI) στον αντιδραστήρα C, η αρχική συγκέντρωση του υποστρώματος στον αντιδραστήρα C<sub>0</sub>, ο συντελεστής διάχυσης του COD (D<sub>c</sub>), η παροχή στον αντιδραστήρα (V<sub>o</sub>) και ο όγκος του αντιδραστήρα (Volume). Όλες οι παραπάνω συνθήκες λειτουργίας δόθηκαν στο πρόγραμμα με την μορφή παραμέτρων (εικόνα 27) για την επίλυση του μοντέλου. Επίσης δημιουργήθηκαν 116 ( $4 \frac{\text{χρόνος λειτουργίας}}{T} = 4 \frac{58}{2} = 116$ ) βήματα «time dependent steps» για την επίλυση του χρονομεταβαλλόμενου προβλήματος της μεταφοράς μάζας «study 2» καθώς, η τελευταία πειραματική μέτρηση του 1ου κύκλου πάρθηκε την 58η ημέρα λειτουργίας.

Parameters			
Name	Expression	Value	Description
kf	$0.10502654[m^{-3}/(mol \cdot d)]$	$1.2156E-6 m^3/(s \cdot mol)$	Reaction Constant
Co	$0.5E-3[mol/L]$	$0.5 mol/m^3$	Initial Concentration
HRT	$12.2[d]$	$1.0541E6 s$	Hydraulic Residence Time
Dc	$5e-10[m^2/s]$	$5E-10 m^2/s$	diffusion coef
C	$7.188E-3[mol/L]$	$7.188 mol/m^3$	Inflow Concentration
Volume	$77[L]$	$0.077 m^3$	Reactor Volume
b	$kf \cdot C$	$8.7376E-6 1/s$	
Vo	$Volume/HRT$	$7.3049E-8 m^3/s$	Flow Rate

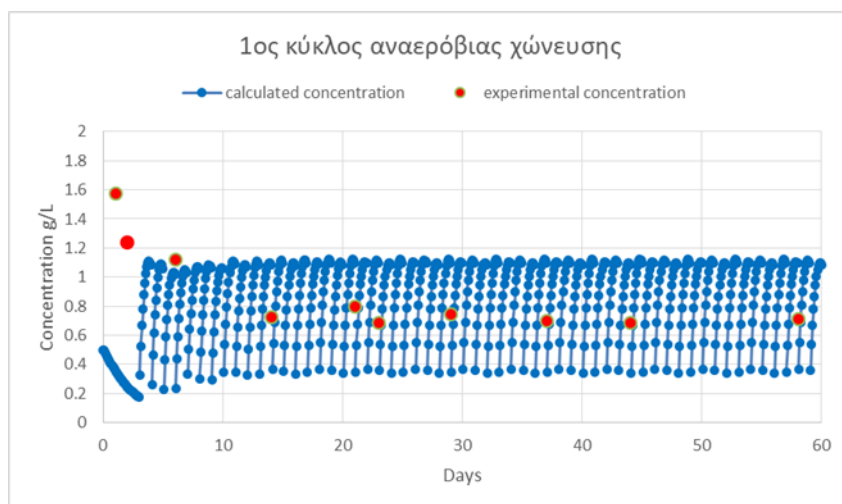
**Εικόνα 27:** Εισαγωγή παραμέτρων για την πρώτη φάση της διεργασίας.

Time=1.0368E6 s Slice: Concentration (mol/m<sup>3</sup>)



**Εικόνα 28:** Κατανομή συγκέντρωσης στον αντιδραστήρα στο τέλος του 1<sup>ου</sup> κύκλου πειράματος αναερόβιας χώνευσης.

Η εικόνα (28) περιγράφει το προφίλ της συγκέντρωσης που έχει επέλθει στον αντιδραστήρα στο τέλος του 1<sup>ου</sup> κύκλου της αναερόβιας χώνευσης. Στο πείραμα αυτό εφαρμόστηκε χρόνος παραμονής (HRT) ίσος με 12.2 ημέρες και περίοδος εναλλαγής (T) ίση με 2 ημέρες. Στον αντιδραστήρα κατά τη διάρκεια του πειράματος έγινε τροφοδοσία ολικού COD ίση με  $7.188g/L$ . Παρατηρείται ότι η συγκέντρωση στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα κατά μέσο όρο ανέρχεται στο  $1g/L$  το οποίο δείχνει ότι υπάρχει μια απομάκρυνση του υποστρώματος της τάξης του 84%. Το παρακάτω διάγραμμα (6) δείχνει την συμπεριφορά της υπολογισμένης συγκέντρωσης του υποστρώματος στην απορροή κατά τη διάρκεια του πειράματος σε σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα.



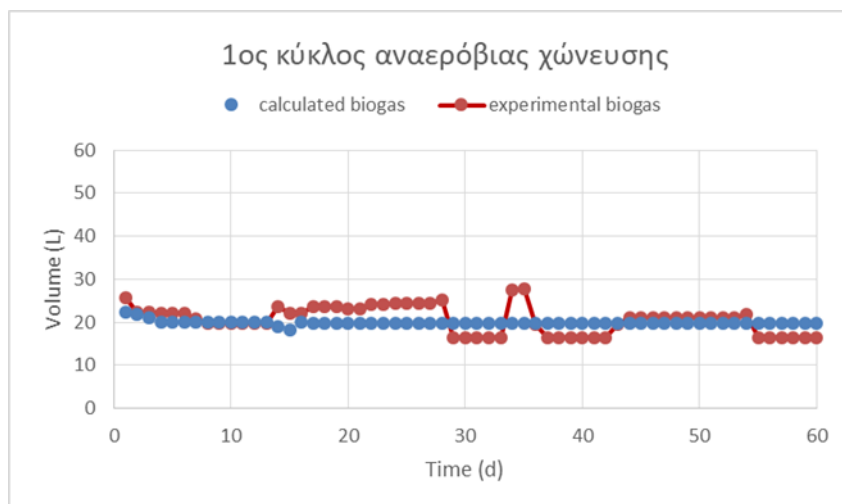
**Διάγραμμα 6:** Διάγραμμα συγκέντρωσης υποστρώματος (COD) στην εκροή του αντιδραστήρα κατά την διάρκεια του 1<sup>ου</sup> πειραματικού κύκλου αναερόβιας χώνευσης. Πειραματικές τιμές και τιμές μοντέλου.

Η υπολογισμένη συγκέντρωση βάσει το μοντέλο δίνει ένα εύρος τιμών καθώς παίρνονται τιμές της συγκέντρωσης ανά ώρα για χρονική διάρκεια ίση με  $T/4$  για κάθε απορροή ξεχωριστά. Το μοντέλο προβλέπει επίσης απομάκρυνση της τάξης του 83% με 90% σε κατάσταση ισορροπίας και όπως παρατηρείται ικανοποιεί τα πειραματικά αποτελέσματα. Κατά την εκκίνηση παρατηρούνται μηδενικές συγκεντρώσεις για τις πρώτες χρονικές στιγμές καθώς το υπόστρωμα δεν έχει μεταφερθεί έως 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 με αποτέλεσμα να συμφωνεί με τις υπόλοιπες πειραματικές τιμές.

Παρακάτω δίνεται το διάγραμμα (7) του όγκου του αερίου που έχει παραχθεί ανά ημέρα από τον πρώτο κύκλο της αναερόβιας χώνευσης. Ο όγκος του αερίου από το μοντέλο έχει υπολογιστεί βάσει ενός συντελεστή απόδοσης  $Y[\frac{L \text{ biogas}}{g \text{ COD που έχει καταναλωθεί}}]$  ο οποίος ισούται με 0.5 και είναι ο μέγιστος θεωρητικός. Ο τύπος που έχει χρησιμοποιηθεί για την εύρεση της παραγωγής του βιοαερίου ανά ημέρα δίνεται παρακάτω:

$$V_{biogas} = \int Y r_{COD} dt = \sum Y(S_0 - s) \frac{V}{HRT} \quad (6.1)$$

Παρατηρείται πως και στην περίπτωση αυτή το μοντέλο προβλέπει σε ικανοποιητικό βαθμό κατά μέσο όρο την παραγωγή του βιοαερίου ανά ημέρα η οποία κυμαίνεται περίπου στα 20L/d. Οι πειραματικές μετρήσεις παρουσιάζουν μέγιστη τιμή παραγωγής βιοαερίου περίπου 27L και ελάχιστη τιμή ίση με 15L με τη μέση παραγωγή βιοαερίου να ανέρχεται και αυτή τα 20L/d.



**Διάγραμμα 7:** Διάγραμμα όγκου παραγόμενου βιοαερίου ανά ημέρα κατά την διάρκεια του 1<sup>ου</sup> πειραματικού κύκλου αναερόβιας χώνευσης. Πειραματικές τιμές και τιμές μοντέλου.

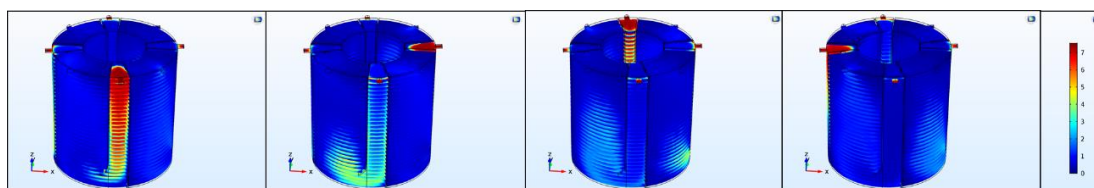
Επίσης παρατηρήθηκε η μεταβολή της συγκέντρωσης καθ' ύψος του αντιδραστήρα ως προς ένα σταθερό διαμέρισμα αναφοράς. Καταγράφηκε η συγκέντρωση στο τμήμα ανοδικής και καθοδικής ροής του διαμερίσματος σε τρία διαφορετικά σημεία, το πρώτο σημείο στο πάνω μέρος του αντιδραστήρα και κάτω από τις εξωτερικές σωληνώσεις, το δεύτερο μέρος στο μέσο και το τρίτο μέρος στον πυθμένα του αντιδραστήρα.

Το διαμέρισμα αυτό λειτούργησε στις αρχές μιας περιόδου εναλλαγής, το τμήμα καθοδικής ροής, ως πηγή τροφοδοσίας ( $0 < t < T/4$ ) ενώ για ( $3T/4 < t < T$ ), το τμήμα ανοδικής ροής, ως απορροή.

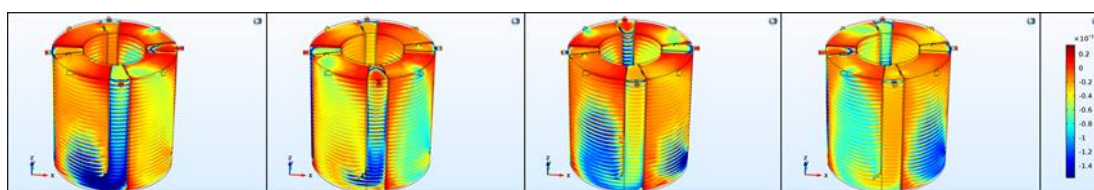
Στις παρακάτω εικόνες αποτυπώνονται, σε γραφική μορφή στον όγκο του αντιδραστήρα και αφού έχει επέλθει η ισορροπία στο σύστημα, στιγμιότυπα από μία περίοδο εναλλαγής ( $T$ ) της συγκέντρωσης του υποστρώματος στο εσωτερικό του (εικόνα 29) αλλά και του ολικού ρυθμού ( $r$ ) με τον οποίο αυτό καταναλώνεται (εικόνα 30). Παρατηρείται ότι, κατά τη διάρκεια μιας περιόδου εναλλαγής ( $T$ ) στο διαμέρισμα



αναφοράς αρχικά ( $t = T/4$ ) η μέση συγκέντρωση στο διαμέρισμα εισόδου στο τμήμα καθοδικής ροής είναι η μέγιστη περίπου  $5[g/L]$  καθώς τροφοδοτείται ενώ στο τμήμα ανοδικής ροής καταγράφεται χαμηλή τιμή. Στη συνέχεια και κατά τη χρονική στιγμή ( $t = T/2$ ) όπου το διπλανό διαμέρισμα πλέον από τη δεξιά πλευρά γίνεται το τροφοδοτούμενο μειώνεται η συγκέντρωση στο τμήμα ανοδικής ροής και αυξάνεται σε αυτό της καθοδικής φτάνοντας κοντά στον πυθμένα τοπικά περίπου τα  $3 [g/L]$  υποστρώματος. Για ( $T/2 < T < 3T/2$ ) παρατηρείται περεταίρω απομάκρυνση υποστρώματος στο τμήμα καθοδικής ροής ενώ λόγω συναγωγής μεγαλύτερη συγκέντρωση παρατηρείται στο τμήμα ανοδικής ροής. Τέλος για ( $3T/2 < t < T/4$ ) όπου από το διαμέρισμα αναφοράς και το τμήμα ανοδικής ροής γίνεται πλέον η απορροή επιτυγχάνεται η μέγιστη κατανάλωση του COD καθώς καταγράφονται συγκεντρώσεις περίπου  $0.5-1.5 [g/L]$ . Την ίδια περιοδική συμπεριφορά παρουσιάζει και ο ολικός ρυθμός κατανάλωσης ο οποίος παρουσιάζει μέγιστη κατά απόλυτο τιμή στα  $1.45 \cdot 10^{-5} [g/m^3s]$  και ελάχιστη κοντά στο μηδέν στους νεκρούς όγκους του αντιδραστήρα.



**Εικόνα 29:** 1<sup>ος</sup> κύκλος λειτουργίας. Από αριστερά προς τα δεξιά. Συγκέντρωση υποστρώματος για  $t=T/4$ ,  $t=T/2$ ,  $t=3T/4$ ,  $t=T$ .

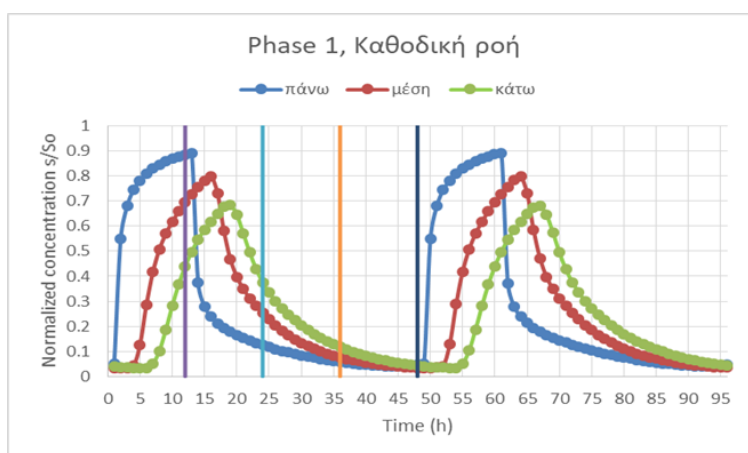


**Εικόνα 30:** 1<sup>ος</sup> κύκλος λειτουργίας. Από αριστερά προς τα δεξιά. Ρυθμός κατανάλωσης υποστρώματος για  $t=T/4$ ,  $t=T/2$ ,  $t=3T/4$ ,  $t=T$ .

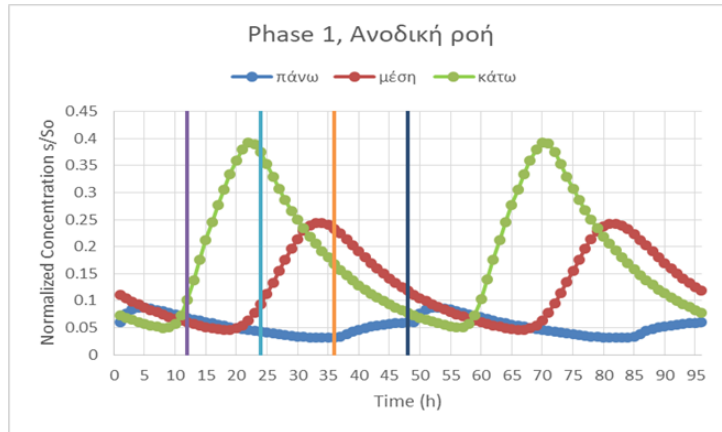
Στα παρακάτω διαγράμματα (8,9) παρουσιάζεται η καθ' ύψος διακύμανση της κανονικοποιημένης, ως προς την συγκέντρωση εισόδου, συγκέντρωσης του υποστρώματος COD στο διαμέρισμα αναφοράς βάση των αποτελεσμάτων του μοντέλου της πρώτης φάσης αναερόβιας χώνευσης στον αντιδραστήρα. Η διάρκεια που

καταγράφεται είναι δύο περίοδοι εναλλαγής ( $2T$ ) και φαίνεται ξεκάθαρα η περιοδική συμπεριφορά του αντιδραστήρα. Τα διαγράμματα αυτά παίζουν συμπληρωματικό ρόλο στην κατανόηση των παραπάνω συμπερασμάτων από τις εικόνες 29&30.

Στο διάγραμμα καθοδικής και ανοδικής ροής φαίνεται η διακύμανση της συγκέντρωσης για σταθερό χρόνο σε όλα τα τμήματα του αντιδραστήρα. Παρατηρείται επίσης ο ρυθμός με τον οποίο μεταφέρονται λόγω συναγωγής οι υψηλές βαθμίδες συγκέντρωσης με μειούμενο ως προς το χρόνο σήμα λόγω κατανάλωσης. Η μέγιστη τιμή της συγκέντρωσης του πάνω στρώματος με αυτή του κάτω στρώματος απέχουν  $5T/48$ . Στο διάγραμμα 8 φαίνεται πως η μέγιστη συγκέντρωση στα χαμηλότερα στρώματα (μέση-κάτω) του αντιδραστήρα σημειώνεται όταν έχει αλλάξει το διαμέρισμα τροφοδοσίας ενώ κατά τη χρονική διάρκεια ( $3T/4 < t < T$ ) το τμήμα καθοδικής ροής παρουσιάζει την μέγιστη απομάκρυνση του υποστρώματος. Στην δε ανοδική ροή (διάγραμμα 9) η συγκέντρωση του υποστρώματος μειώνεται από τα κατώτερα στρώματα του αντιδραστήρα προς τα πάνω. Ο ρυθμός μείωσης είναι μεγαλύτερος σε σχέση με το τμήμα καθοδικής ροής καθώς ο όγκος του τμήματος καθοδικής ροής είναι μικρότερος από αυτόν της ανοδικής. Το αποτέλεσμα είναι πως στο ανώτερο σημείο παρουσιάζεται η μικρότερη δυνατή συγκέντρωση υποστρώματος.



**Διάγραμμα 8:** Διακύμανση της συγκέντρωσης καθ' ύψος της καθοδικής ροής ενός διαμερίσματος αναφοράς του PABR κατά τον 1<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης.



**Διάγραμμα 9:** Διακύμανση της συγκέντρωσης καθ' ύψος της ανοδικής ροής ενός διαμερίσματος αναφοράς του PABR κατά τον 1<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης.

### 8.3.3 Δεύτερος κύκλος λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης

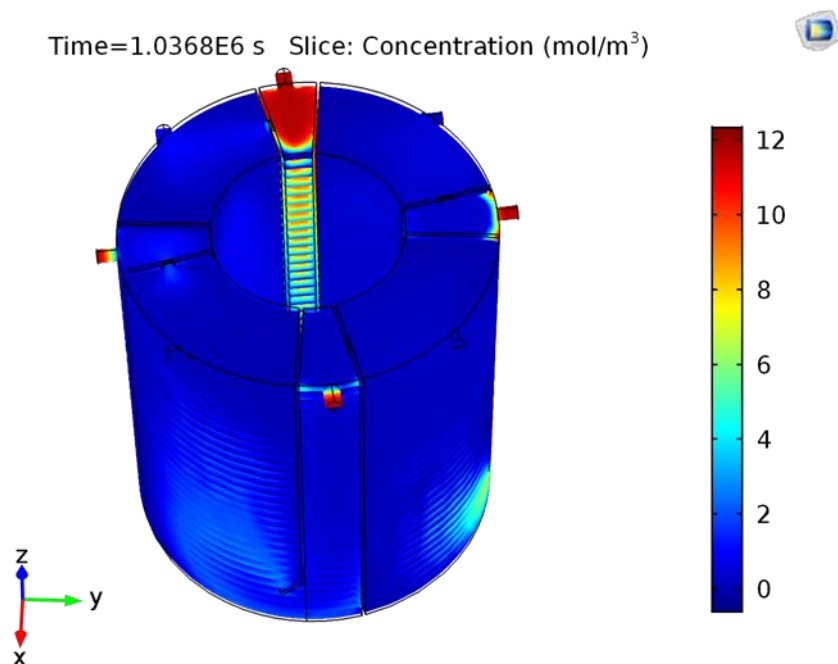
Η δεύτερη φάση αναερόβιας χώνευσης διήρκησε συνολικά 41 ημέρες. Δημιουργήθηκαν  $82 \left(4 \frac{\text{χρόνος λειτουργίας}}{T} = 4 \frac{41}{2} = 180\right)$  βήματα «time dependent steps» για την επίλυση του χρονομεταβαλλόμενου προβλήματος της μεταφοράς μάζας «study 2» καθώς, η τελευταία πειραματική μέτρηση του δεύτερου κύκλου πάρθηκε την 41<sup>η</sup> ημέρα λειτουργίας. Οι συνθήκες λειτουργίας του πειράματος δίνονται στην παρακάτω εικόνα (31). Ο ορισμός τους στο πρόγραμμα επίλυσης έγινε με τη μορφή παραμέτρων. Ο υδραυλικός χρόνος παραμονής της δεύτερης φάσης ήταν 10 ημέρες ενώ η συγκέντρωση του υποστρώματος με το οποίο τροφοδοτήθηκε ο αντιδραστήρα ανήλθε στα  $11.763 [g/L]$ .

Parameters			
Name	Expression	Value	Description
Volume	77[L]	0.077 m <sup>3</sup>	Reactor Volume
HRT	10[d]	8.64E5 s	Hydraulic Residence Time
kf	0.10502654[m <sup>3</sup> /(mol*d)]	1.2156E-6 m <sup>3</sup> /...	Reaction Constant
Vo	Volume/HRT	8.912E-8 m <sup>3</sup> /s	Flow Rate
C	11.763E-3[mol/L]	11.763 mol/m <sup>3</sup>	Inflow Concentration
Co	0.29E-3[mol/L]	0.29 mol/m <sup>3</sup>	Initial Concentration
b	kf*C	1.4299E-5 1/s	
Dc	5e-10[m <sup>2</sup> /s]	5E-10 m <sup>2</sup> /s	

**Εικόνα 31:** Εισαγωγή παραμέτρων για την δεύτερη φάση της διεργασίας.

Παρακάτω παρατίθεται η εικόνα (32) της συγκέντρωσης του COD στον αντιδραστήρα ύστερα από δώδεκα ημέρες λειτουργίας τους πειράματος και αφού έχει επέλθει ισορροπία στο σύστημα. Φαίνεται ότι η φόρτιση του υποστρώματος σε κάθε

διαμέρισμα κυμαίνεται ανάλογα με το ποιο διαμέρισμα κάθε φορά λειτουργεί ως διαμέρισμα εισόδου και ποιο ως διαμέρισμα εκροής. Ο μέσος όρος της συγκέντρωσης στην μόνιμη κατάσταση στον όγκο του αντιδραστήρα ανέρχεται περίπου στα  $1.46[g/L]$ . Επομένως όπως προκύπτει από το μοντέλο υπάρχει μια απομάκρυνση του υποστρώματος κοντά στο 87% σε σχέση με αυτό που τροφοδοτείται.

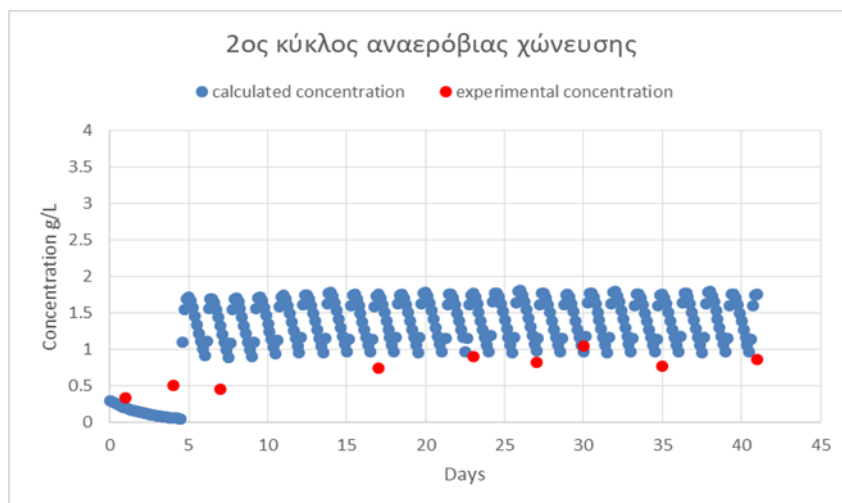


**Εικόνα 32:** Κατανομή συγκέντρωσης στον αντιδραστήρα στο τέλος της 12<sup>ης</sup> ημέρας του 2<sup>ου</sup> κύκλου πειράματος αναερόβιας χώνευσης.

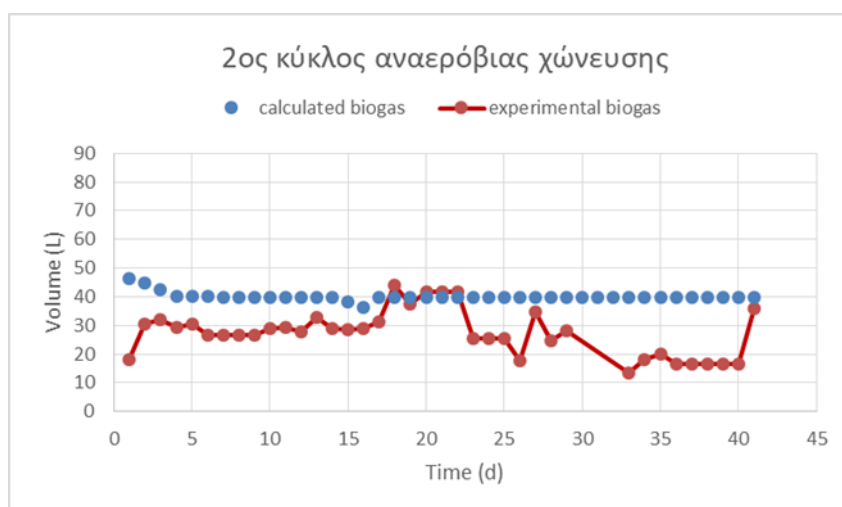
Στο παρακάτω διάγραμμα (10) παρατίθενται λεπτομερώς τα αποτελέσματα του μοντέλου σε σύγκριση με τα πειραματικά. Βάσει των αποτελεσμάτων λοιπόν φαίνεται πως, κατά τη διάρκεια του πειράματος, επιτυγχάνεται μεγαλύτερη απομάκρυνση του ολικού COD στον αντιδραστήρα, σε σχέση με την μέση απομάκρυνση που έχει προβλεφθεί. Η μέση κατανάλωση του υποστρώματος βάσει του πειράματος είναι ίση περίπου με 93%, ενώ το μοντέλο προβλέπει ένα εύρος μεταξύ 85 και 93%.

Επίσης παρατηρείται μια «ασυμφωνία» και στην πρόβλεψη της παραγωγής του βιοαερίου (διάγραμμα 11). Το μοντέλο προβλέπει ότι, στον δεύτερο κύκλο αναερόβιας χώνευσης παράγονται 40[L] βιοαερίου τη μέρα με το πείραμα να παρουσιάζει κυμαινόμενη παραγωγή η οποία έχει μια μέση τιμή κοντά στα 30[L]. Οι διαφορές αυτές μπορεί να οφείλονται σε αστοχίες του μοντέλου προσομοίωσης ή ακόμα και αστοχία

της διατήρησης των συνθηκών του πειράματος (καθορισμός pH, θερμοκρασίας, ανάδευση κλπ.).



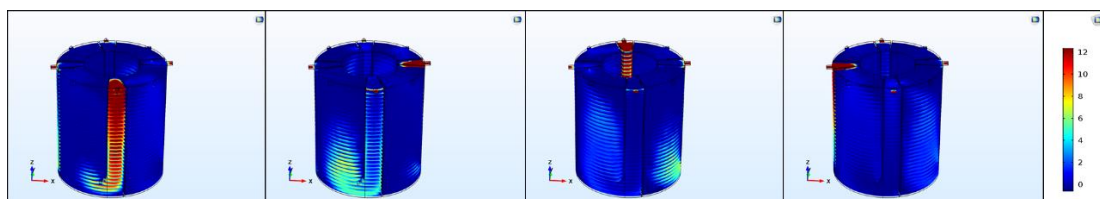
**Διάγραμμα 10:** Διάγραμμα συγκέντρωσης υποστρώματος (COD) στην εκροή του αντιδραστήρα κατά την διάρκεια του 2<sup>ου</sup> πειραματικού κύκλου αναερόβιας χώνευσης. Πειραματικές τιμές και τιμές μοντέλου.



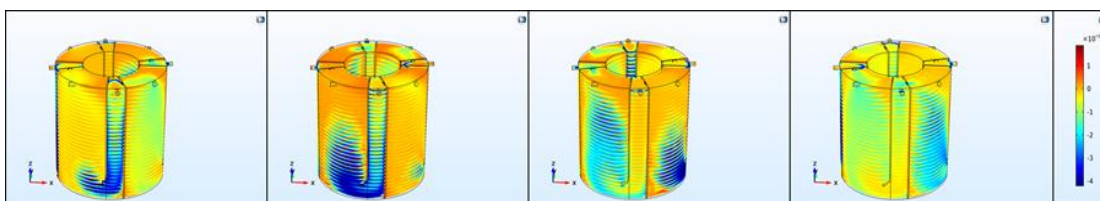
**Διάγραμμα 11:** Διάγραμμα όγκου παραγμένου βιοαερίου ανά ημέρα κατά την διάρκεια του 2<sup>ου</sup> πειραματικού κύκλου αναερόβιας χώνευσης. Πειραματικές τιμές και τιμές μοντέλου.

Στις παρακάτω εικόνες (30&31) δίνεται το προφίλ της συγκέντρωσης και του ολικού ρυθμού κατανάλωσης στον αντιδραστήρα σε τέσσερα διαφορετικά στιγμιότυπα για μία περίοδο εναλλαγής  $[T]$  και αφού έχει επέλθει η ισορροπία στο σύστημα. Αρχικά

φαίνεται πως για  $t = T/4$  δεν έχει προλάβει να αποδομηθεί το εισερχόμενο COD στο διαμερίσμα αναφοράς ενώ ο ρυθμός αποδόμησης στο κάτω μέρος του αντιδραστήρα ισούται κατά απόλυτο τιμή και κατά μέσο όρο με  $2E-5 [g/m^3s]$ . Για  $t = T/2$  μειώνεται η συγκέντρωση του υποστρώματος στο τμήμα καθοδικής ροής ενώ αυξάνεται σε αυτό της ανοδικής ροής λόγω συναγωγής. Τη χρονική στιγμή αυτή παρατηρείται κατά μέσο όρο ρυθμός αποδόμησης στο κάτω μέρος του διαμερίσματος ίσος με την μεγαλύτερη τιμή ίση με  $-4E-5 [g/m^3s]$ . Για  $t = 3T/4$  και  $t = T$  η συγκέντρωση στο καθοδικό τμήμα του αντιδραστήρα έχει μειωθεί κοντά στα  $2 \text{ με } 1 [g/L]$  ενώ ο ρυθμός κατανάλωσης του υποστρώματος στο τμήμα καθοδικής ροής και για τις δύο χρονικές στιγμές παρουσιάζει μικρή τιμή κατά απόλυτο καθώς φαίνεται πως δεν αποδομείται υπόστρωμα, ενώ για τη χρονική στιγμή  $t = 3T/4$  η συγκέντρωση του υποστρώματος στο τμήμα ανοδικής ροής είναι σημαντική, ενώ αποδομείται στον μέγιστο βαθμό για  $t = T$ , όπου και το τμήμα αυτό λειτουργεί πλέον ως απορροή του αντιδραστήρα.



**Εικόνα 33:** 2<sup>ος</sup> κύκλος λειτουργίας. Από αριστερά προς τα δεξιά. Συγκέντρωση υποστρώματος για  $t=T/4$ ,  $t=T/2$ ,  $t=3T/4$ ,  $t=T$ .



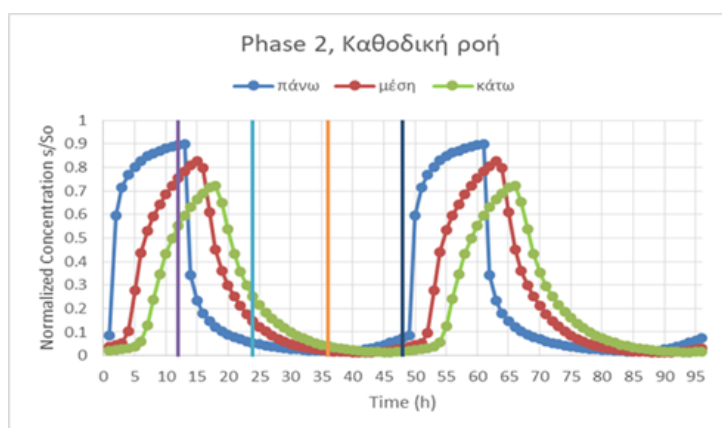
**Εικόνα 34:** 2<sup>ος</sup> κύκλος λειτουργίας. Από αριστερά προς τα δεξιά. Ρυθμός κατανάλωσης υποστρώματος για  $t=T/4$ ,  $t=T/2$ ,  $t=3T/4$ ,  $t=T$ .

Τα παρακάτω διαγράμματα (12, 13) περιγράφουν ποιοτικά την συμπεριφορά της συγκέντρωσης καθ' ύψος του διαμερίσματος αναφοράς και ουσιαστικά παίζουν

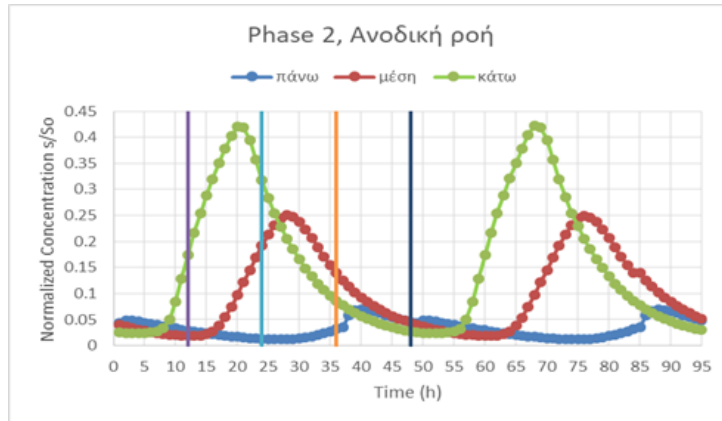
συμπληρωματικό ρόλο στην εξήγηση στην οποία δόθηκε παραπάνω. Στην περίπτωση λοιπόν της δεύτερης φάσης της αναερόβιας χώνευσης ο υδραυλικός χρόνος παραμονής έχει μειωθεί σε σχέση με την πρώτη φάση από 12.2 [d] σε  $HRT = 10$  [d] , μεταφράζεται σε αύξηση της παροχής στον αντιδραστήρα.

Στο τμήμα της καθοδικής ροής παρατηρείται ότι χρόνος που χρειάζεται για την ανίχνευση της μέγιστης συγκέντρωσης στο κατώτερο στρώμα σε σχέση με το χρόνο που ανιχνεύτηκε στο ανώτερο στρώμα είναι ίσος με  $T/12$ . Επίσης παρατηρείται ότι για  $t = T$  έχει ήδη αρχίσει να εμφανίζεται αύξηση της συγκέντρωσης στο πάνω μέρος του τμήματος της καθοδικής ροής, ενώ στη μέση και κάτω η τιμή είναι η ελάχιστη.

Στο τμήμα ανοδικής ροής παρατηρείται ότι στα κατώτερα στρώματα υπάρχει μεγάλη περιοδική διακύμανση της συγκέντρωσης σε σχέση με το χρόνο, ενώ όσο ανεβαίνουμε καθ' ύψος μειώνεται η διακύμανση αυτή, έως ότου φτάνουμε στο ανώτερο σημείο του αντιδραστήρα όπου παρατηρείται μεγάλη μείωση της συγκέντρωσης. Αυτό συμβαίνει λόγω του ότι η μεγαλύτερη φόρτιση του COD αποδομείται στον πυθμένα και κοντά σε αυτόν όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, με αποτέλεσμα όλο και μικρότερη συγκέντρωση να συνάγεται στα ανώτερα στρώματα του διαμερίσματος ανοδικής ροής. Κατά τη χρονική διάρκεια  $3T/4 < t < T/4$  όπου και το διαμέρισμα αναφοράς λειτουργεί ως απορροή, η συγκέντρωση του υποστρώματος που παρατηρείται σε αυτό δείχνει ότι έχει αποδομηθεί στον μεγαλύτερο βαθμό σύμφωνα πάντα με τον ρυθμό αντίδρασης.



**Διάγραμμα 12:** Διακύμανση της συγκέντρωσης καθ' ύψος της καθοδικής ροής ενός διαμερίσματος αναφοράς του PABR κατά τον 2<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης.



**Διάγραμμα 13:** Διακύμανση της συγκέντρωσης καθ' ύψος της ανοδικής ροής ενός διαμερίσματος αναφοράς του PABR κατά τον 2<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης.

### 8.3.4 Τρίτος κύκλος λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης

Η τρίτη φάση αναερόβιας χώνευσης διήρκησε περίπου 67 ημέρες. Δημιουργήθηκαν 120 ( $4 \frac{\text{χρόνος λειτουργίας}}{T} = 4 \frac{60}{2} = 120$ ) βήματα «time dependent steps» για την επίλυση του χρονομεταβαλλόμενου προβλήματος της μεταφοράς μάζας «study 2» καθώς, η τελευταία πειραματική μέτρηση του δεύτερου κύκλου πάρθηκε την 60<sup>η</sup> ημέρα λειτουργίας. Στην παρακάτω εικόνα (35) παρουσιάζονται οι παράμετροι του μοντέλου επίλυσης, στο οποίο δίνονται μεταξύ άλλων ο χρόνος παραμονής  $HRT = 8.7[d]$  και η συγκέντρωση τροφοδοτούμενου COD στον αντιδραστήρα ίση με  $10.70 [g/L]$ . Επίσης, δίνεται η αρχική συγκέντρωση υποστρώματος ίση με  $0.78 [g/L]$ .

experiment			
Global Definitions			
Parameters			
Geometry Parts			
Materials			
Component 1 (comp 1)			
Study 1			
Study 2			
Results			
Parameters			
Name	Expression	Value	Description
Volume	77[L]	0.077 m <sup>3</sup>	Reactor Volume
HRT	8.7[d]	7.5168E5 s	Hydraulic Residence Time
kf	0.10502654[m <sup>3</sup> /(mol*d)]	1.2156E-6 m <sup>3</sup> /...	Reaction Constant
Vo	Volume/HRT	1.0244E-7 m <sup>3</sup> /s	Flow Rate
C	10.70446E-3[mol/L]	10.704 mol/m <sup>3</sup>	Inflow Concentration
Co	0.78E-3[mol/L]	0.78 mol/m <sup>3</sup>	Initial Concentration
b	kf*C	1.3012E-5 1/s	
Dc	5e-10[m <sup>2</sup> /s]	5E-10 m <sup>2</sup> /s	

**Εικόνα 35:** Εισαγωγή παραμέτρων για την τρίτη φάση της διεργασίας.

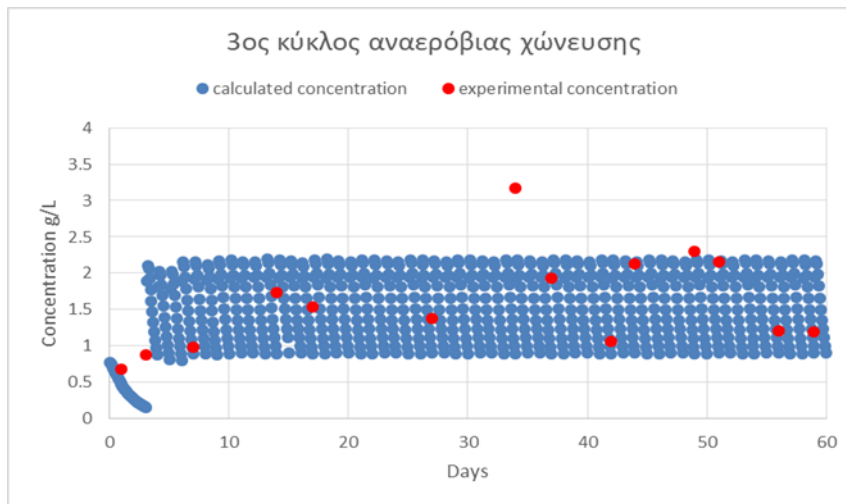


Time=1.0368E6 s Slice: Concentration (mol/m<sup>3</sup>)



**Εικόνα 36:** Κατανομή συγκέντρωσης στον αντιδραστήρα στο τέλος της 12<sup>ης</sup> ημέρας του 3<sup>ου</sup> κύκλου πειράματος αναερόβιας χώνευσης.

Η παραπάνω εικόνα δείχνει (36) την διακύμανση της συγκέντρωσης του υποστρώματος στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα μετά το πέρας 12 ημερών και αφού έχει επέλθει ισορροπία στον τρόπο λειτουργίας του αντιδραστήρα. Παρατηρείται ότι η κατά μέσο όρο συγκέντρωση στον όγκο του αντιδραστήρα, εκτός του διαμερίσματος που λειτουργεί ως τροφοδοσία και συγκεκριμένα του τμήματος καθοδικής ροής που παρουσιάζει τη μέγιστη φόρτιση, είναι ίση με 1.65 [g/L]. Λαμβάνοντας υπόψη τη συγκέντρωση τροφοδοσίας, συμπεραίνεται ότι υπάρχει μια απομάκρυνση υποστρώματος λόγω μεταβολισμού του προς βιοαέριο της τάξης του 84% .



**Διάγραμμα 14:** Διάγραμμα συγκέντρωσης υποστρώματος (COD) στην εκροή του αντιδραστήρα κατά την διάρκεια του 3<sup>ου</sup> πειραματικού κύκλου αναερόβιας χώνευσης. Πειραματικές τιμές και τιμές μοντέλου.

Στο παραπάνω διάγραμμα (14) δίνονται τα αποτελέσματα κατόπιν επίλυσης του μοντέλου για την τρίτη φάση λειτουργίας της αναερόβιας χώνευσης, ενώ συγκρίνονται με τα πειραματικά. Το εύρος του ποσοστού της κατανάλωσης του υποστρώματος στον αντιδραστήρα βάσει των υπολογισμένων τιμών είναι μεταξύ 80-90%, ενώ κατά μέσο όρο το ποσοστό κατανάλωσης του υποστρώματος σύμφωνα με τα πειραματικά αποτελέσματα φτάνει το 85%. Παρατηρείται ότι υπάρχει συμφωνία μεταξύ υπολογισμένων και πειραματικών τιμών και σωστή πρόβλεψη της απομάκρυνσης του COD.

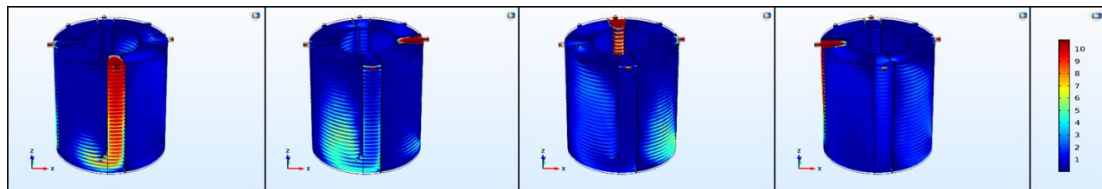
Όσον αφορά το βιοαέριο το οποίο παράγεται κατά τον 3<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης, στο πείραμα καταγράφονται τιμές από 29[L] έως 61 [L] όγκου παραγόμενου βιοαερίου δίνοντας κατά μέσον όρο περίπου 43 [L/d] . Την ίδια στιγμή το μοντέλο προβλέπει κατά μέσον όρο 40 [L/d] συμφωνώντας σε μεγάλο βαθμό με τα πειραματικά δεδομένα. Στο παρακάτω διάγραμμα (15) σκιαγραφείται η συμπεριφορά της διακύμανσης του βιοαερίου μέσω του πειράματος, αλλά και μέσω του υπολογιστικού μοντέλου, ενώ το μοντέλο προβλέπει τα πειραματικά με ικανοποιητικό τρόπο.



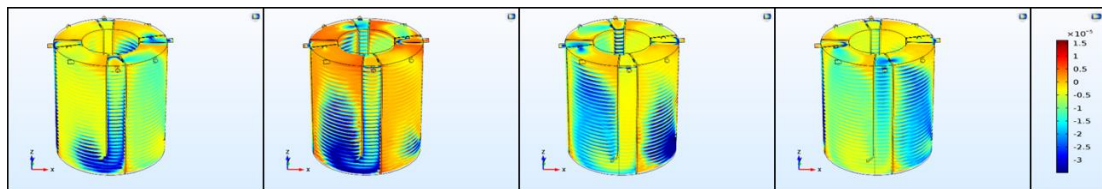
**Διάγραμμα 15:** Διάγραμμα όγκου παραγμένου βιοαερίου ανά ημέρα κατά την διάρκεια του 3<sup>ου</sup> πειραματικού κύκλου αναερόβιας χώνευσης. Πειραματικές τιμές και τιμές μοντέλου.

Στις εικόνες (37) και (38) δίνονται το προφίλ της συγκέντρωσης και του ολικού ρυθμού κατανάλωσης στον αντιδραστήρα, αντίστοιχα, σε τέσσερα διαφορετικά στιγμιότυπα για μία περίοδο εναλλαγής  $[T]$  και αφού έχει επέλθει η ισορροπία στο σύστημα. Αρχικά παρατηρείται ότι για την χρονική στιγμή  $t = T/4$  η συγκέντρωση στο διαμέρισμα αναφοράς στο τμήμα καθοδικής ροής μειώνεται από πάνω προς τα κάτω, καθώς όσο μετακινείται στον πυθμένα του αντιδραστήρα, αυξάνεται και ο ρυθμός με τον οποίο καταναλώνεται το υπόστρωμα. Το συμπέρασμα αυτό επαληθεύεται με την παρατήρηση της εικόνας 38, όπου ο ολικός ρυθμός κατανάλωσης του COD μεταβάλλεται καθ' ύψος του αντιδραστήρα σημειώνοντας την μέγιστη κατανάλωση στα χαμηλότερα στρώματα αυτού. Για  $t = T/2$  φαίνεται πως η συγκέντρωση του υποστρώματος στο τμήμα καθοδικής ροής έχει μειωθεί, καθώς έχει αλλάξει το διαμέρισμα εισόδου που τροφοδοτεί τον αντιδραστήρα και στρώματα μικρότερης φόρτισης από το διπλανό διαμέρισμα έχουν μεταφερθεί στο τμήμα καθοδικής ροής του διαμερίσματος αναφοράς. Για τον λόγο αυτό, παρατηρείται πως ο ρυθμός κατανάλωσης του υποστρώματος στην περιοχή αυτή είναι μειωμένος. Την ίδια χρονική στιγμή φαίνεται ότι στο τμήμα ανοδικής ροής αυξάνεται εν γένει η συγκέντρωση στα χαμηλότερα επίπεδα του αντιδραστήρα, ενώ φαίνεται πως ο ρυθμός αποδόμησης είναι εξίσου υψηλός, φτάνοντας τη μέγιστη τιμή του μέχρι το μέσο του PABR. Για χρόνο  $t = 3T/4$  στο τμήμα καθοδικής ροής καταγράφεται η μικρότερη κατά μέσο όρο συγκέντρωση ενώ στο τμήμα ανοδικής ροής υψηλότερες βαθμίδες συγκέντρωσης

υποστρώματος έχουν συναχθεί στο πάνω μέρος του αντιδραστήρα. Ανάλογη συμπεριφορά έχει και ο ρυθμός κατανάλωσης όπου για το τμήμα ανοδικής ροής υπάρχει κατανάλωση του COD της τάξης του  $-2E-5 \left[ \frac{g}{m^3 s} \right]$ , ενώ για το τμήμα καθοδικής ροής δεν υπάρχει σημαντική κατανάλωση μιας και η συγκέντρωση του υποστρώματος είναι πολύ χαμηλή. Η κατάσταση που μόλις περιγράφηκε αντιστρέφεται τη χρονική στιγμή  $t = T$ , όπου πλέον από το τμήμα ανοδικής ροής του διαμερίσματος αναφοράς του αντιδραστήρα γίνεται η απορροή. Τη χρονική διάρκεια  $3T/4 < t < T$ , ο ρυθμός κατανάλωσης του υποστρώματος στο τμήμα ανοδικής ροής έχει μειωθεί, ενώ αρχίζει να αυξάνεται στο τμήμα καθοδικής ροής όπου και μεγαλύτερες βαθμίδες συγκέντρωσης έχουν μεταφερθεί από το διπλανό διαμέρισμα του αντιδραστήρα.



**Εικόνα 37:** 3<sup>ος</sup> κύκλος λειτουργίας. Από αριστερά προς τα δεξιά. Συγκέντρωση υποστρώματος για  $t=T/4$ ,  $t=T/2$ ,  $t=3T/4$ ,  $t=T$ .

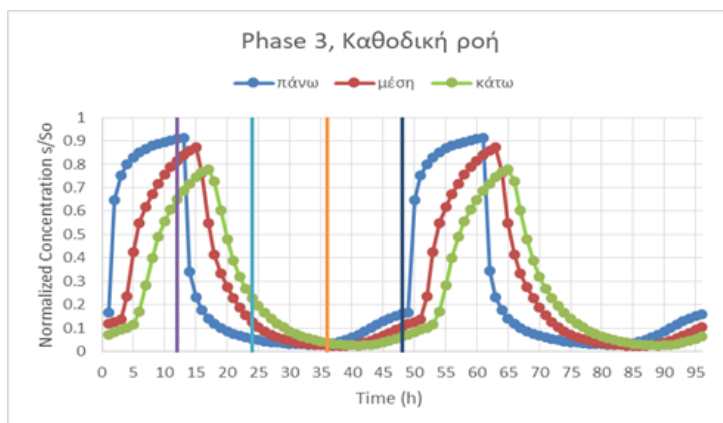


**Εικόνα 38:** 3<sup>ος</sup> κύκλος λειτουργίας. Από αριστερά προς τα δεξιά. Ρυθμός κατανάλωσης υποστρώματος για  $t=T/4$ ,  $t=T/2$ ,  $t=3T/4$ ,  $t=T$ .

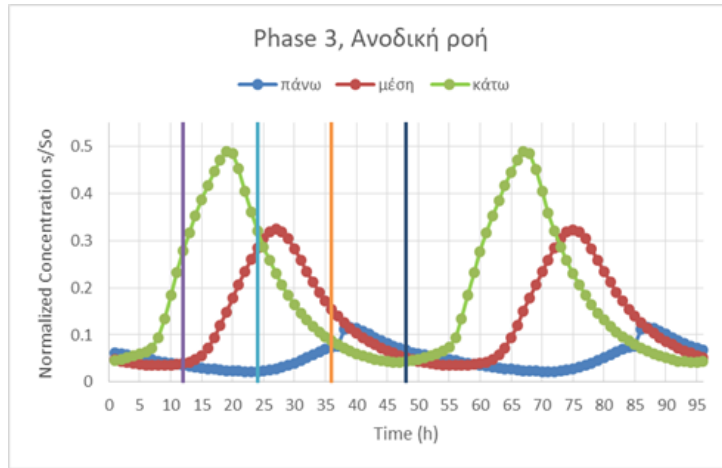
Τα παρακάτω διαγράμματα (16 & 17) περιγράφουν ποιοτικά την συμπεριφορά της συγκέντρωσης καθ' ύψος του διαμερίσματος αναφοράς. Στην περίπτωση λοιπόν της τρίτης φάσης της αναερόβιας χώνευσης ο υδραυλικός χρόνος παραμονής έχει μειωθεί σε σχέση με την δεύτερη φάση από 10 [d] σε  $HRT=8.7$  [d].

Στο διάγραμμα της καθοδικής ροής (16) διαπιστώνεται ότι ο χρόνος που χρειάζεται για την ανίχνευση της μέγιστης συγκέντρωσης στο κατώτερο στρώμα, σε σχέση με το χρόνο που ανιχνεύτηκε στο ανώτερο στρώμα, είναι ίσος με  $T/16$ . Επίσης παρατηρείται ότι για τη χρονική διάρκεια ( $T/2 < t < 3T/4$ ) όπως διαπιστώθηκε και παραπάνω στο τμήμα καθοδικής ροής μειώνεται κατά πολύ η συγκέντρωσή του υποστρώματος, ενώ η αύξηση από πάνω προς τα κάτω αρχίζει και εμφανίζεται για ( $3T/4 < t < T$ ).

Στο διάγραμμα ανοδικής ροής (17) παρατηρείται ότι στα κατώτερα στρώματα υπάρχει μεγαλύτερο περιοδικό πλάτος στη διακύμανση της συγκέντρωσης σε σχέση με το χρόνο, λόγω του μεγαλύτερου όγκου του τμήματος σε σχέση με αυτό της καθοδικής ροής. επίσης, ενώ όσο ανεβαίνουμε καθ' ύψος μειώνεται η διαφορά της τιμής των συγκεντρώσεων έως ότου φτάνουμε στο ανώτερο σημείο του αντιδραστήρα, όπου παρατηρείται μεγάλη μείωση της συγκέντρωσης. Αυτό συμβαίνει λόγω του ότι η μεγαλύτερη φόρτιση του COD αποδομείται στον πυθμένα και κοντά σε αυτόν, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, με αποτέλεσμα όλο και μικρότερη συγκέντρωση να μεταφέρεται στα ανώτερα στρώματα του διαμερίσματος ανοδικής ροής. Κατά τη χρονική διάρκεια  $3T/4 < t < T/4$ , όπου και το διαμέρισμα αναφοράς λειτουργεί ως απορροή, η συγκέντρωση του υποστρώματος που παρατηρείται σε αυτό δείχνει ότι δεν έχει αποδομηθεί στον μεγαλύτερο βαθμό, καθώς παρατηρείται και μεγαλύτερη μείωση για χρόνο περίπου ίσο με  $3T/4$ .



**Διάγραμμα 16:** Διακύμανση της συγκέντρωσης καθ' ύψος της καθοδικής ροής ενός διαμερίσματος αναφοράς του PABR κατά τον 3<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης.



**Διάγραμμα 17:** Διακύμανση της συγκέντρωσης καθ' ύψος της ανοδικής ροής ενός διαμερίσματος αναφοράς του PABR κατά τον 3<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης.

### 8.3.5 Τέταρτος κύκλος λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης

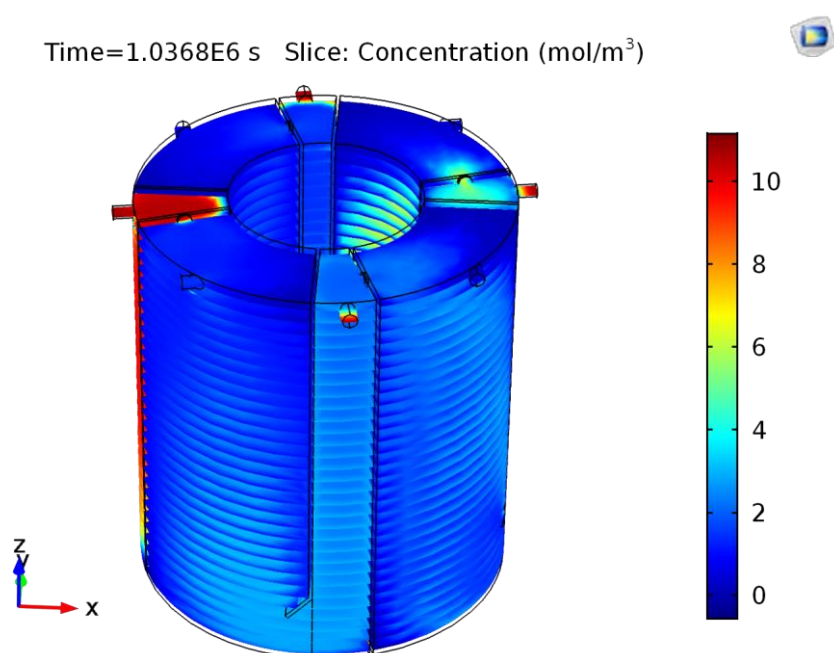
Η τέταρτη και τελευταία φάση αναερόβιας χώνευσης διήρκησε συνολικά 56 ημέρες.

Δημιουργήθηκαν 112 ( $4 \frac{\text{χρόνος λειτουργίας}}{T} = 4 \frac{56}{2} = 112$ ) βήματα «time dependent steps» για την επίλυση του χρονομεταβαλλόμενου προβλήματος της μεταφοράς μάζας «study 2», καθώς η τελευταία μέτρηση πάρθηκε την 56<sup>η</sup> ημέρα λειτουργίας. Οι συνθήκες λειτουργίας του πειράματος δίνονται στην παρακάτω εικόνα (39). Ο ορισμός τους στο πρόγραμμα επίλυσης έγινε με τη μορφή παραμέτρων. Ο υδραυλικός χρόνος παραμονής της τέταρτης φάσης ήταν ο μικρότερος από όλες τις προηγούμενες και ίσος με 5 ημέρες, ενώ η μέση συγκέντρωση του COD με το οποίο τροφοδοτήθηκε ο αντιδραστήρας ήταν 10.639[g/L].

experiment			
Parameters			
Name	Expression	Value	Description
Volume	77[L]	0.077 m <sup>3</sup>	Reactor Volume
HRT	5[d]	4.32E5 s	Hydraulic Residence Time
kf	0.10502654[m <sup>3</sup> /(mol*d)]	1.2156E-6 m <sup>3</sup> /...	Reaction Constant
Vo	Volume/HRT	1.7824E-7 m <sup>3</sup> /s	Flow Rate
C	10.639E-3[mol/L]	10.639 mol/m <sup>3</sup>	Inflow Concentration
Co	1.486E-3[mol/L]	1.486 mol/m <sup>3</sup>	Initial Concentration
b	kf*C	1.2933E-5 1/s	
Dc	5e-10[m <sup>2</sup> /s]	5E-10 m <sup>2</sup> /s	

**Εικόνα 39:** Εισαγωγή παραμέτρων για την τέταρτη φάση της διεργασίας.

Στην παρακάτω εικόνα (40) παρουσιάζεται το προφίλ της συγκέντρωσης στον αντιδραστήρα κατόπιν κατάστασης ισορροπίας του συστήματος. Πιο συγκεκριμένα το στιγμιότυπο πάρθηκε μέσω του προγράμματος προσομοίωσης Comsol Multiphysics® μετά το πέρας της 12<sup>ης</sup> ημέρας λειτουργίας του αντιδραστήρα και αφού είχε παρέλθει μια περίοδος εναλλαγής ( $T$ ). Παρατηρείται λοιπόν ότι η μέση συγκέντρωση που εντοπίζεται στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα ισούται με 3.07 [g/L]. Διαπιστώνεται με αυτόν το τρόπο ότι το ποσοστό της μέσης κατανάλωσης του υποστρώματος σε σχέση με αυτό που τροφοδοτείται ανέρχεται στο 70%.

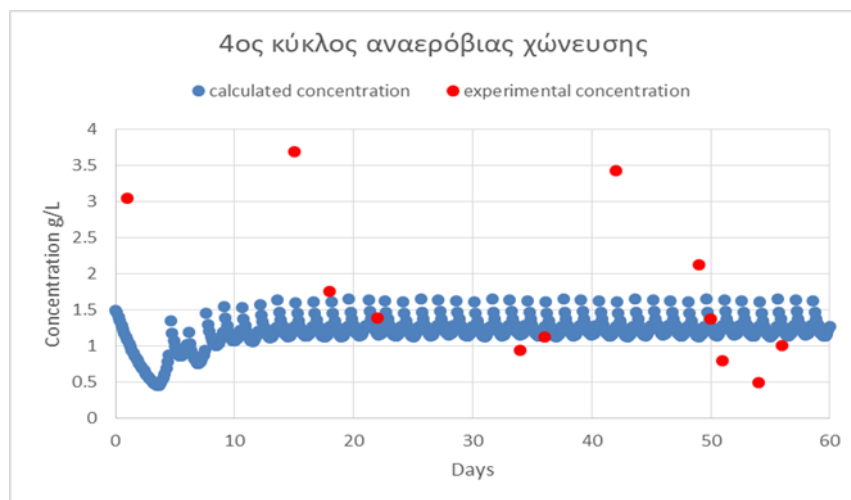


**Εικόνα 40:** Κατανομή συγκέντρωσης στον αντιδραστήρα στο τέλος της 12<sup>ης</sup> ημέρας του 4<sup>ου</sup> κύκλου πειράματος αναερόβιας χώνευσης.

Στα παρακάτω διαγράμματα (18 & 19) παρουσιάζονται τα δεδομένα της συγκέντρωσης του υποστρώματος στην απορροή και της παραγωγής βιοαερίου [όγκου ανά ημέρα] κατόπιν της επίλυσης του μοντέλου για τον τέταρτο κύκλο της αναερόβιας χώνευσης σε σύγκριση με τα πειραματικά.

Όσον αφορά την συγκέντρωση του COD που ανιχνεύεται στην απορροή για κάθε χρονική στιγμή, παρατηρείται πως το μοντέλο παρουσιάζει μια αρκετά ικανοποιητική προσέγγιση σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα. Πιο συγκεκριμένα το μοντέλο προβλέπει μια απομάκρυνση COD της τάξης του 85% με 90% ενώ τα πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζουν μια μέση κατανάλωση του υποστρώματος ίση με 87%.

Για το βιοαέριο το οποίο παράγεται κατά τον 4<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης, στο πείραμα καταγράφονται τιμές από 50[L] έως 90 [L] όγκου παραγόμενου βιοαερίου δίνοντας κατά μέσον όρο περίπου 76 [L/d] . Την ίδια στιγμή, το μοντέλο προβλέπει κατά μέσον όρο 72 [L/d] προβλέποντας κατά ένα μεγάλο βαθμό τα πειραματικά δεδομένα. Στο παρακάτω διάγραμμα 16 σκιαγραφείται η συμπεριφορά της διακύμανσης του βιοαερίου μέσω του πειράματος αλλά και μέσω του υπολογιστικού μοντέλου, ενώ φαίνεται πως το μοντέλο προβλέπει τα πειραματικά με ικανοποιητικό τρόπο.



**Διάγραμμα 18:** Διάγραμμα συγκέντρωσης υποστρώματος (COD) στην εκροή του αντιδραστήρα κατά την διάρκεια του 4<sup>ου</sup> πειραματικού κύκλου αναερόβιας χώνευσης. Πειραματικές τιμές και τιμές μοντέλου.

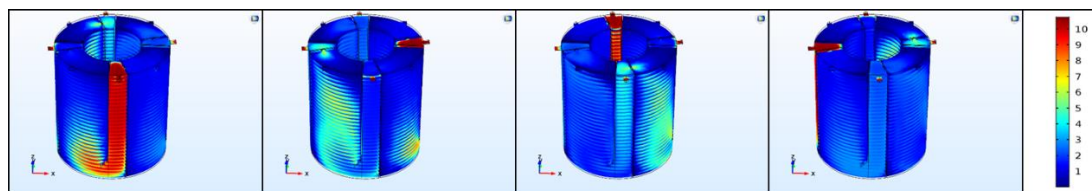




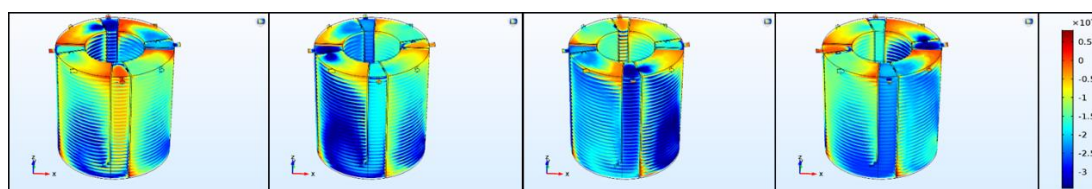
**Διάγραμμα 19:** Διάγραμμα όγκου παραγμένου βιοαερίου ανά ημέρα κατά την διάρκεια του 4<sup>ου</sup> πειραματικού κύκλου αναερόβιας χώνευσης. Πειραματικές τιμές και τιμές μοντέλου.

Στις παρακάτω εικόνες (41 & 42) δίνεται ποιοτικά η διακύμανση της συγκέντρωσης (εικόνα) και ο ολικός ρυθμός κατανάλωσης του υποστρώματος (εικόνα) στον κύριο όγκο του αντιδραστήρα. Αρχικά, για  $t = T/4$ , παρατηρείται ότι στο τμήμα καθόδου του διαμερίσματος αναφοράς, η συγκέντρωση του υποστρώματος που έχει τροφοδοτηθεί από το διαμέρισμα αυτό έχει αναμιχθεί σχεδόν πλήρως μιας και παρουσιάζει υψηλή για τα δεδομένα τιμή ίση με 9-10[g/L]. Την ίδια στιγμή, στο τμήμα ανοδικής ροής στο πάνω μέρος έχει αποδομηθεί σε μεγάλο βαθμό το COD σε αντίθεση με το κάτω μέρος όπου εμφανίζει σημαντικά ποσά συγκέντρωσης υποστρώματος. Στην εικόνα 42, για την ίδια χρονική στιγμή, παρατηρείται στο μεν τμήμα καθοδικής ροής μειωμένος ολικός ρυθμός κατανάλωσης σε σύγκριση με το τμήμα ανοδικής ροής, όπου στο κάτω μέρος και μέχρι το μέσο του διαμερίσματος, ο ρυθμός διάσπασης είναι περίπου ίσος με  $-2.5[g/m^3 s]$ . Για τη χρονική στιγμή  $t = T/2$ , παρουσιάζεται η μικρότερη συγκέντρωση καθ' ύψος του τμήματος καθοδικής ροής στο διαμέρισμα αναφοράς, ενώ φαίνεται στο τμήμα ανοδικής ροής την ίδια χρονική στιγμή να παρουσιάζεται η μεγαλύτερη κατά μέσο όρο συγκέντρωση στον όγκο του. Επίσης παρατηρείται όσον αφορά τον ρυθμό αποδόμησης, να έχει αυξηθεί σε σχέση με την προηγούμενη χρονική στιγμή σε όλο τον όγκο του διαμερίσματος. Για  $t = 3T/4$ , φαίνεται ότι συγκέντρωση μεταφέρεται από το διπλανό διαμέρισμα και αυξάνει την συγκέντρωση στο τμήμα καθοδικής ροής, ενώ στο τμήμα ανοδικής ροής παρατηρείται ότι έχει καταναλωθεί σε μεγάλο βαθμό το υπόστρωμα. επίσης, φαίνεται ότι ο μέσος

ολικός ρυθμός της αντίδρασης παρουσιάζει τη μέγιστη κατά απόλυτο τιμή σε σχέση με τα προηγούμενα στιγμιότυπα στο τμήμα καθοδικής ροής ενώ παρατηρείται μείωση στο τμήμα ανόδου. Τέλος, για  $t=T$ , η απορροή πραγματοποιείται πλέον από το διαμέρισμα αναφοράς, οπότε καταγράφεται και σύμφωνα με την εικόνα η μέγιστη κατανάλωση του υποστρώματος.



**Εικόνα 41:** 4<sup>ος</sup> κύκλος λειτουργίας. Από αριστερά προς τα δεξιά. Συγκέντρωση υποστρώματος για  $t=T/4$ ,  $t=T/2$ ,  $t=3T/4$ ,  $t=T$ .

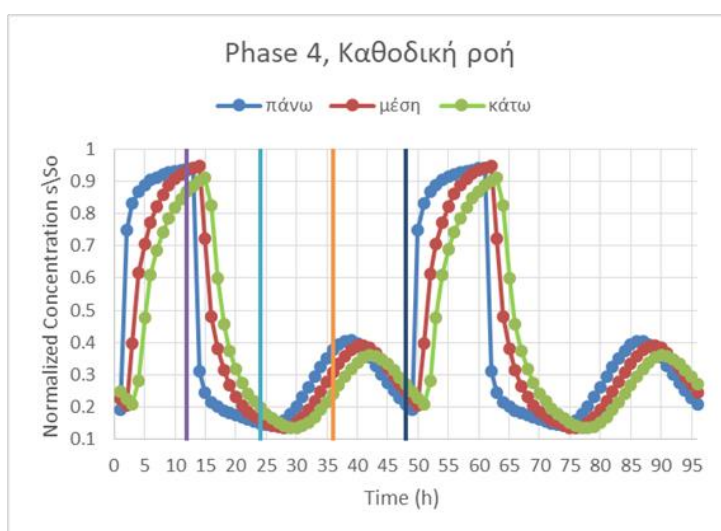


**Εικόνα 42:** 4<sup>ος</sup> κύκλος λειτουργίας. Από αριστερά προς τα δεξιά. Ρυθμός κατανάλωσης υποστρώματος για  $t=T/4$ ,  $t=T/2$ ,  $t=3T/4$ ,  $t=T$ .

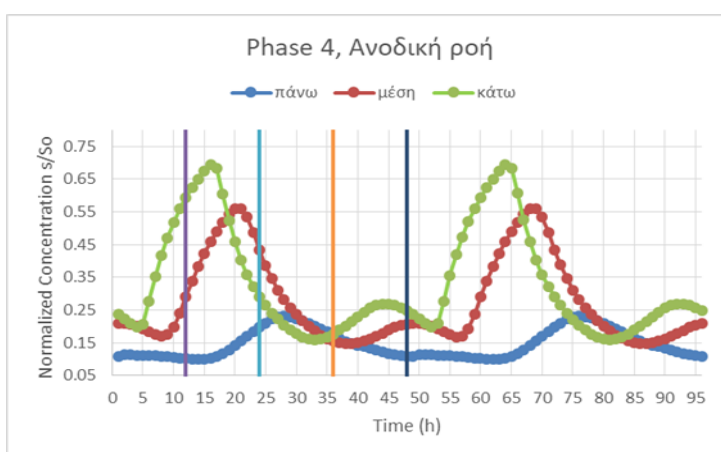
Τα παρακάτω διαγράμματα (20 & 21) περιγράφουν ποιοτικά την συμπεριφορά της συγκέντρωσης καθ' ύψος του διαμερίσματος αναφοράς. Στην περίπτωση λοιπόν της τρίτης φάσης της αναερόβιας χώνευσης ο υδραυλικός χρόνος παραμονής έχει μειωθεί σε σχέση με την δεύτερη φάση από 8.7 [d] σε  $HRT=5$  [d].

Στο τμήμα της καθοδικής ροής (διάγραμμα 20) διαπιστώνεται ότι ο χρόνος που χρειάζεται για την ανίχνευση της μέγιστης συγκέντρωσης στο κατώτερο στρώμα σε σχέση με το χρόνο που ανιχνεύτηκε στο ανώτερο στρώμα είναι ίσος με  $T/24$ . Στο τμήμα καθοδικής ροής, φαίνεται ότι για μια περίοδο εναλλαγής παρουσιάζονται δύο μέγιστα σε όλα τα τμήματα καθ' ύψος του αντιδραστήρα, κάτι που αποδεικνύει ότι για τον εν λόγω χρόνο παραμονής, μεταφέρεται σημαντικό ποσό υποστρώματος από το διπλανό διαμέρισμα, χωρίς να έχει προλάβει να αποδομηθεί σε μεγάλο βαθμό. επίσης, παρατηρείται ότι καθ' ύψος του τμήματος που γίνεται η τροφοδοσία δεν υπάρχει κατανάλωση του υποστρώματος.

Τα δύο μέγιστα συνεχίζουν και υφίστανται στο κάτω και στο μεσαίο στρώμα του τμήματος ανοδικής ροής, αλλά με μικρότερη συχνότητα, καθώς το τμήμα αυτό έχει μεγαλύτερο όγκο με αποτέλεσμα να αυξάνεται και ο ρυθμός κατανάλωσης. Για το χρονικό διάστημα  $3T/4 < t < T$ , στο τμήμα ανοδικής ροής όπου γίνεται και η απορροή, η συγκέντρωση του υποστρώματος έχει προλάβει και έχει αποδομηθεί σε μεγάλο βαθμό.



**Διάγραμμα 20:** Διακύμανση της συγκέντρωσης καθ' ύψος της καθοδικής ροής ενός διαμερίσματος αναφοράς του PABR κατά τον 4<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης.



**Διάγραμμα 21:** Διακύμανση της συγκέντρωσης καθ' ύψος της ανοδικής ροής ενός διαμερίσματος αναφοράς του PABR κατά τον 4<sup>ο</sup> κύκλο αναερόβιας χώνευσης.

### 8.3 Σύνοψη των αποτελεσμάτων

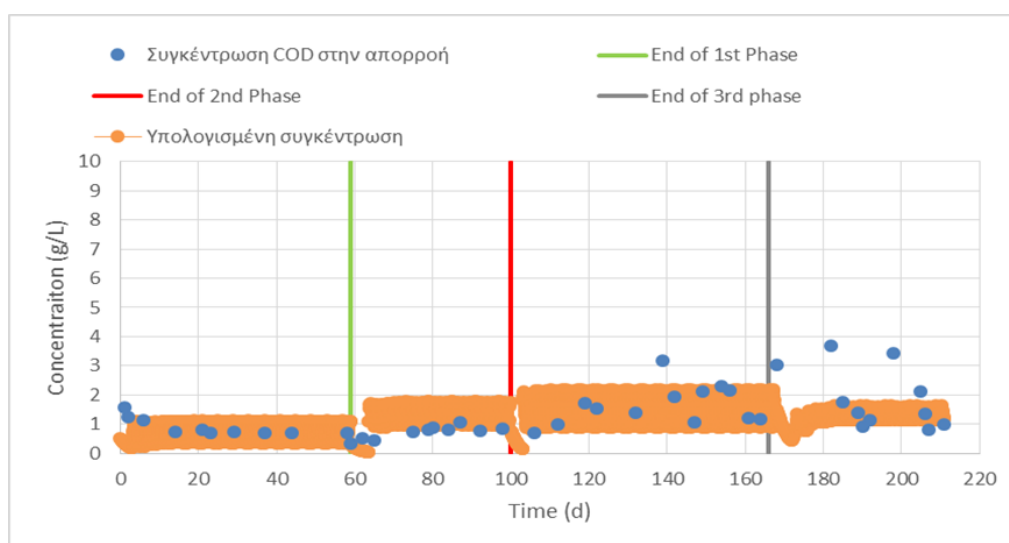
Τα αποτελέσματα που υπολογίστηκαν μέσω της μοντελοποίησης αλλά και αυτά που εξήχθησαν από το πείραμα και των τεσσάρων φάσεων λειτουργίας για την αναερόβια χώνευση συνοψίζονται στον πίνακα 8. Παρουσιάζονται επίσης και τα διαγράμματα των μετρήσεων του COD που ανιχνεύτηκε στην απορροή (διάγραμμα 22), αλλά και του βιοαερίου που παράχθηκε κατά τη διάρκεια της διεργασίας αυτής (διάγραμμα 23).

Παρατηρείται συμφωνία μεταξύ των πειραματικών αποτελεσμάτων και των αποτελεσμάτων που εξήχθησαν μέσω του μοντέλου τόσο για τη συγκέντρωση του υποστρώματος στην απορροή όσο και για την μέση παραγωγή βιοαερίου σε κάθε φάση. Πιο συγκεκριμένα, κατά την πρώτη φάση ο αντιδραστήρας τροφοδοτήθηκε με συγκέντρωση υποστρώματος ίση με  $7.188 [g/L]$ , η υπολογισμένη από το μοντέλο μέση απομάκρυνση όπως και η υπολογισμένη από τα πειραματικά δεδομένα ήταν κοντά στο 87%, ενώ η μέση παραγωγή βιοαερίου έφτασε τα  $20[L]$  ανά ημέρα. Στη συνέχεια, κατά τη δεύτερη φάση του πειράματος, αυξήθηκε η φόρτιση του COD στην τροφοδοσία κατά  $4 [g/L]$  ενώ μειώθηκε και ο χρόνος παραμονής (HRT) από τις  $12.2 [d]$  στις  $10 [d]$ . Η πειραματικώς υπολογισμένη μέση ποσοστιαία κατανάλωση του υποστρώματος ανήλθε στο 93% έναντι 89% που υπολογίστηκε από το μοντέλο. Παρήχθησαν  $26.72[L/d]$  βιοαερίου, ενώ την ίδια στιγμή το μοντέλο προέβλεπε  $39.94 [L/d]$ . Στην δεύτερη φάση λοιπόν παρατηρείται μια μικρή «αστοχία» στην πρόβλεψη των πειραματικών αποτελεσμάτων η οποία μπορεί να οφείλεται σε λανθασμένες παραδοχές επίλυσης του προβλήματος, ή ακόμα και σε μη τήρηση των πειραματικών συνθηκών (θερμοκρασία, pH, ανάδευση κλπ.). Περνώντας στην τρίτη φάση κατά την οποία η τροφοδοσία περιείχε  $10.704 [g/L]$  COD και ο χρόνος παραμονής καθορίστηκε στις  $8.5 [d]$ , η μέση συγκέντρωση του υποστρώματος στην απορροή ήταν περίπου ίση με  $1.6 [g/L]$  μειωμένη κατά 85% σε σχέση με την τροφοδοτούμενη. Στην περίπτωση αυτή τα πειραματικά αποτελέσματα δείχνουν να συμφωνούν με τα θεωρητικά από το μοντέλο προκειμένα. Επίσης διαπιστώθηκε μία μέση παραγωγή βιοαερίου ανά ημέρα ίση με  $43.45 [L]$  με το θεωρητικό να προβλέπει  $40.3 [L/d]$ . Τέλος, για την τέταρτη και τελευταία φάση λειτουργίας του πειράματος αναερόβιας χώνευσης η οποία μοντελοποιήθηκε, η συγκέντρωση του υποστρώματος στην είσοδο έμεινε περίπου η ίδια με την προηγούμενη φάση και ίση με  $10.639 [g/L]$ . Ο χρόνος παραμονής μειώθηκε στις 5 ημέρες, ενώ παρατηρήθηκε ότι η μέση απομάκρυνση βάση των πειραματικών αποτελεσμάτων έφτασε το 84%, ενώ βάσει των θεωρητικών

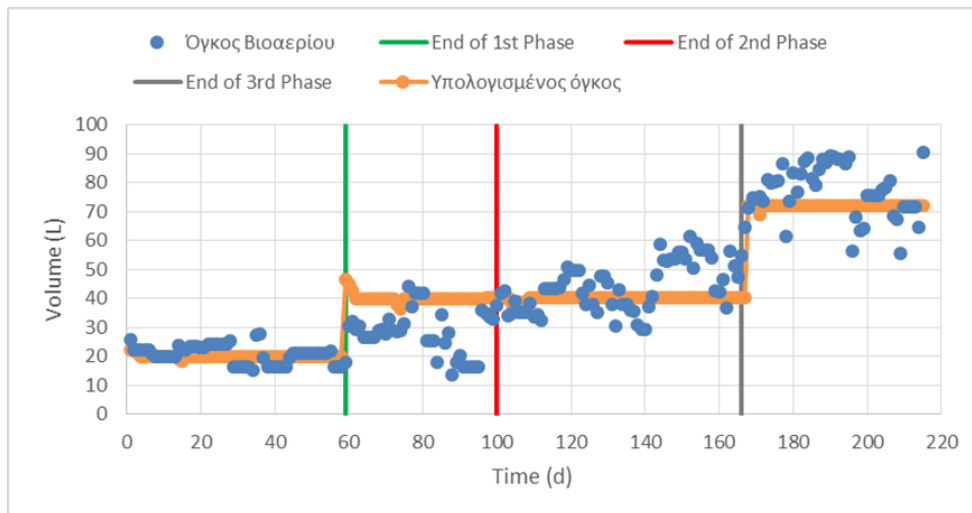
προβλέψεων έφτασε κοντά στο 88%, σημειώθηκε δηλαδή μέση συγκέντρωση στην απορροή ίση με 1.66 [g/L] ενώ την ίδια στιγμή το μοντέλο προέβλεπε 1.27 [g/L].

**Πίνακας 8:** Σύνοψη αποτελεσμάτων και για τις 4 φάσεις λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης.

	Phase 1	Phase 2	Phase 3	Phase 4
HRT[d]	12.2	10	8.5	5
T[d]	2	2	2	2
HRT/T	6.1	5	4.25	2.5
$\bar{S}_{εισ}$ [g/L]	7.188	11.763	10.704	10.639
$\bar{S}_{experimental}$ [g/L]	0.9013±0.29	0.7839±0.20	1.5970±0.65	1.6652±0.79
$\bar{S}_{computed}$ [g/L]	0.8902±0.24	1.2139±0.27	1.5674±0.43	1.2712±0.14
Μέση % απομάκρυνση (experimental)	87%	93%	85%	84%
Μέση % απομάκρυνση (computational)	87%	89%	85%	88%
$\bar{V}_{biogas}(exp)$ [L/d]	20.13	26.72	43.45	76.33
$\bar{V}_{biogas}(computed)$ [L/d]	19.92	39.94	40.30	72.26



**Διάγραμμα 22:** Πειραματικά και θεωρητικά αποτελέσματα συγκέντρωσης COD στην απορροή κατά τις 4 φάσεις λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης.



**Διάγραμμα 23:** Πειραματικά και θεωρητικά αποτελέσματα όγκου παραγωγής βιοαερίου κατά τις 4 φάσεις λειτουργίας αναερόβιας χώνευσης.

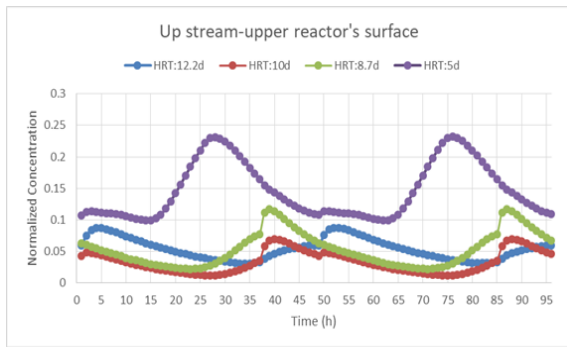
Παρακάτω παρουσιάζονται συνοπτικά τα διαγράμματα (24-29) της κανονικοποιημένης συγκέντρωσης του υποστρώματος, ως προς την αρχική συγκέντρωση τροφοδοσίας σε κάθε φάση, καθ' ύψος ενός διαμερίσματος αναφοράς για μία περίοδο εναλλαγής ( $T$ ). Η περίοδος εναλλαγής κατά τη διάρκεια του πειράματος είχε οριστεί στις 2 ημέρες. Η καταγραφή της συγκέντρωσης πραγματοποιήθηκε σε τρία ύψη του διαμερίσματος άνω, μέσο και κάτω. Τα διαγράμματα που βρίσκονται στην αριστερή στήλη αναφέρονται στο τμήμα ανοδικής ροής, ενώ αυτά που βρίσκονται στην δεξιά στήλη αναφέρονται στο τμήμα καθοδικής ροής του διαμερίσματος αναφοράς. Κάθε διάγραμμα παρουσιάζει τις κανονικοποιημένες συγκεντρώσεις του COD για τους τέσσερις κύκλους αναερόβιας χώνευσης σε μία συγκεκριμένη θέση στο διαμέρισμα. Επομένως, παρατηρείται η διακύμανση του COD καθ' ύψος του αντιδραστήρα με την μεταβολή του χρόνου παραμονής μιας και η περίοδος εναλλαγής παραμένει ίδια κατά τη διάρκεια του πειράματος.

Στο τμήμα καθοδικής ροής στο διαμέρισμα αναφοράς του αντιδραστήρα, διαγράμματα (24,25,26), παρατηρείται κοινή ποιοτική συμπεριφορά της συγκέντρωσης για όλους τους χρόνους παραμονής από  $t = 0$  έως  $t = T/4$  καθώς κατά την χρονική διάρκεια αυτή, το διαμέρισμα αυτό λειτουργεί ως διαμέρισμα τροφοδοσίας, οπότε παρουσιάζει μέγιστη συγκέντρωση. Για την χρονική διάρκεια  $T/4 < t < T$ , παρατηρείται μεταβολή στο προφίλ της συγκέντρωσης ανάλογα με τον υδραυλικό χρόνο παραμονής του πειράματος. Για χρόνους παραμονής 12.2 [d] και 10 [d] φαίνεται να υπάρχει μία συνεχής μείωση της συγκέντρωσης, μέχρι την επόμενη φορά που θα ξαναγίνει

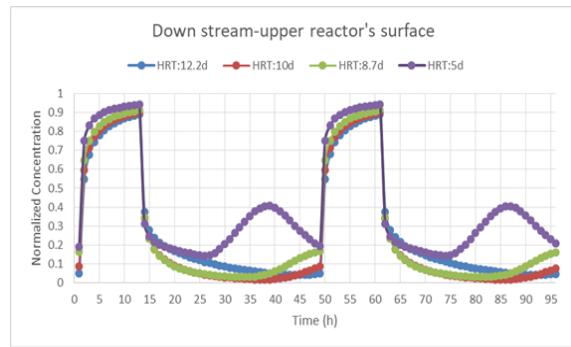
τροφοδοτούμενο το διαμέρισμα αυτό. Στην περίπτωση του HRT ίσο με 8.7 [d] διαπιστώνεται μία πρόωρη αύξηση της συγκέντρωσης, ενώ για HRT ίσο με 5 [d] η αύξηση έχει δημιουργήσει μία περιοδική κορυφή για  $T/2 < t < T$ . Το φαινόμενο αυτό συμβαίνει καθώς μάζα υψηλής συγκέντρωσης μεταφέρεται με συναγωγή, λόγω της αύξησης της ταχύτητας με την οποία κινείται το ρευστό, καθώς μειώνεται ο υδραυλικός χρόνος παραμονής από διπλανά διαμερίσματα, η οποία δεν έχει προλάβει να καταναλωθεί από τους μικροοργανισμούς προς παραγωγή βιοαερίου κατά την διεργασία. Η συμπεριφορά παρατηρείται σε όλο το ύψος του τμήματος καθοδικής ροής, με τη μόνη διαφορά ότι μετατοπίζεται ο χρόνος εντοπισμού της μέγιστης συγκέντρωσης. Επίσης, παρατηρείται πώς για τον μικρότερο χρόνο παραμονής υπάρχει πλήρης ανάμειξη της συγκέντρωσης του COD σε σχέση με τους μεγαλύτερους χρόνους που σημειώνεται μικρή κατανάλωση αυτού.

Στο τμήμα ανοδικής πλέον ροής (διαγράμματα 27,28,29) και όσο μεταφερόμαστε από κάτω προς τα πάνω στο διαμέρισμα αναφοράς παρατηρείται μια απόσβεση στην διακύμανση της συγκέντρωσης ειδικά στο πάνω μέρος του διαμερίσματος για τους χρόνους παραμονής 12.2, 10 και 8.7 ημέρες. Το κάτω μέρος (διάγραμμα 29) παρουσιάζει την ίδια συμπεριφορά με το κάτω μέρος του τμήματος καθοδικής ροής (διάγραμμα 25) αφού συνδέονται άμεσα. Ο λόγος της απόσβεσης συμβαίνει καθώς ο όγκος στον οποίο ρέει το ρευστό έχει αλλάξει από μικρότερο όγκο (τμήμα καθοδικής ροής) – σε μεγαλύτερο όγκο (τμήμα ανοδικής ροής). Επίσης παρατηρείται πώς για HRT ίσο με 5 ημέρες από δύο περιοδικές κορυφές στο διάγραμμα της συγκέντρωσης στο διάστημα μιας περιόδου στο υψηλότερο σημείο του αντιδραστήρα στο τμήμα ανοδικής ροής (διάγραμμα) έμεινε μία κορυφή καθώς έχει αντιδράσει το μεγαλύτερο μέρος αυτής.

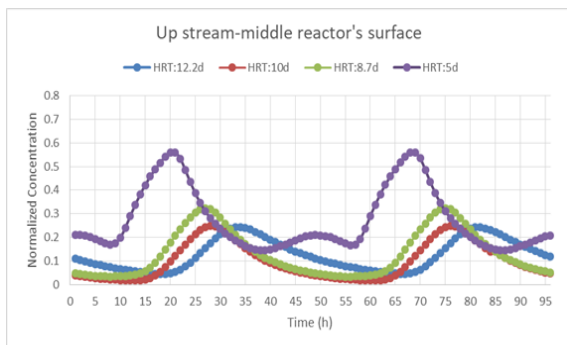
Επομένως ο χρόνος παραμονής παίζει ρόλο στην διακύμανση της συγκέντρωσης στα διαμερίσματα ενώ με την μείωσή του αυξάνεται ο όγκος του αντιδραστήρα στον οποίο αντιδρά το υπόστρωμα. Από την άλλη φαίνεται να μην παίζει ρόλο στο ποσοστό απομάκρυνσης του οργανικού φορτίου διατηρώντας σταθερή τη συγκέντρωση του υποστρώματος που τροφοδοτείται ο αντιδραστήρας.



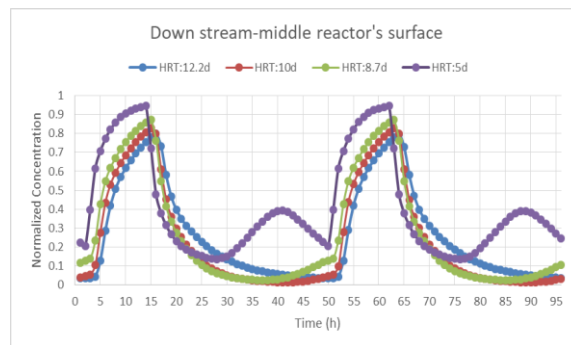
**Διάγραμμα 28:** Τμήμα ανοδικής ροής (πάνω επιφάνεια) Συμπεριφορά συγκέντρωσης για διαφορετικό HRT.



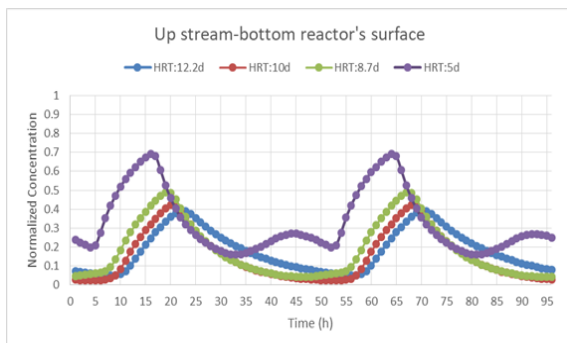
**Διάγραμμα 24:** Τμήμα καθοδικής ροής (πάνω επιφάνεια). Συμπεριφορά συγκέντρωσης για διαφορετικό HRT.



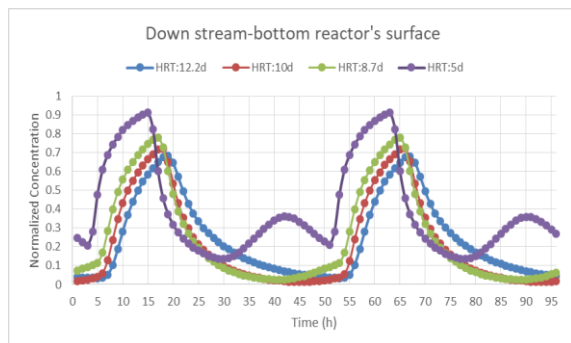
**Διάγραμμα 25:** Τμήμα ανοδικής ροής (μεσαία επιφάνεια) Συμπεριφορά συγκέντρωσης για διαφορετικό HRT.



**Διάγραμμα 26:** Τμήμα καθοδικής ροής (μεσαία επιφάνεια). Συμπεριφορά συγκέντρωσης για διαφορετικό HRT.



**Διάγραμμα 29:** Τμήμα ανοδικής ροής (κάτω επιφάνεια) Συμπεριφορά συγκέντρωσης για διαφορετικό HRT.



**Διάγραμμα 27:** Τμήμα καθοδικής ροής (κάτω επιφάνεια) Συμπεριφορά συγκέντρωσης για διαφορετικό HRT.



#### 8.4 Συμπεράσματα- Προτάσεις για μελλοντική διερεύνηση.

Η μοντελοποίηση του πιλοτικού περιοδικού αναερόβιου αντιδραστήρα με ανακλαστήρες (PABR) ενεργού όγκου 77 (L) περιέλαβε την προσομοίωση ενός πειράματος αναερόβιας χώνευσης τεσσάρων πειραματικών κύκλων. Το μοντέλο προέβλεπε την κατανάλωση του οργανικού υποστρώματος εκφρασμένο σε τιμές χημικά απαιτούμενου οξυγόνου καθώς και το παραγόμενο όγκο βιοαερίου. Πριν από αυτό πραγματοποιήθηκε απλοποίηση του προηγούμενου μοντέλου της γεωμετρίας του αντιδραστήρα όπως αυτή είχε δοθεί από προηγούμενη μελέτη.

Η απλοποίηση της γεωμετρίας του αντιδραστήρα επέφερε μείωση των υπολογιστικών απαιτήσεων όσον αφορά την επίλυση του μοντέλου. Το αποτέλεσμα αυτό επετεύχθη καθώς χρησιμοποιήθηκε αραιότερο πλέγμα από αυτό που απαιτούσε η προηγούμενη γεωμετρία δίνοντας ταυτόχρονα ικανοποιητικά αποτελέσματα. Περαιτέρω απλοποίηση της γεωμετρίας του αντιδραστήρα λόγω της περιοδικότητάς του θα επιφέρει μεγαλύτερη μείωση των βαθμών ελευθερίας για την επίλυση πολυπλοκότερων μοντέλων όπως η μοντελοποίηση των συσσωματωμάτων (granules) της ιλύος στο εσωτερικό του αντιδραστήρα.

Η προσομοίωση, μιας σειράς τεσσάρων πειραμάτων αναερόβιας χώνευσης στον αντιδραστήρα PABR, μέσω του μοντέλου που αναπτύχθηκε το οποίο υποθέτει κατανάλωση ενός θρεπτικού υποστρώματος για την παραγωγή βιομάζας έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα. Πιο συγκεκριμένα έγινε η παραδοχή ότι η αντίδραση κατανάλωσης του COD ακολουθεί απλή κινητική τύπου Blackman ή μοντέλο δύο φάσεων για:  $S < 2K_s$  και τέθηκε ρυθμός αντίδρασης:  $r = -k(S_0 - S)S$  με  $S$  την συγκέντρωση του υποστρώματος (COD). Η σταθερά  $k$  η οποία βρέθηκε ύστερα από παραμετρική ανάλυση βάση των πειραματικών δεδομένων χαρακτηρίζει σε ικανοποιητικό βαθμό την βιοχημική συμπεριφορά του αντιδραστήρα. Το μοντέλο προέβλεψε απομάκρυνση υποστρώματος 85-90% με τα πειραματικά δεδομένα να δίνουν μέση απομάκρυνση ίση με 87%, ενώ και η υπολογισμένη παραγωγή του όγκου του βιοαερίου ικανοποιεί σε μεγάλο βαθμό τα πειραματικά. Η δημιουργία ενός πιο πολύπλοκου μοντέλου το οποίο θα συμπεριλαμβάνει περισσότερα ή ακόμα και όλα τα μεταβολικά βήματα της αναερόβιας χώνευσης (ADM1) σε συνδυασμό με την μοντελοποίηση των συσσωματωμάτων της ιλύος θα χαρακτήριζε σε ικανοποιητικότερο

βαθμό την βιοχημική και ρεολογική συμπεριφορά του αντιδραστήρα. Η πολυπλοκότητα του φαινομένου αυτού χρειάζεται απλοποίηση.

Η μεταβολή της συγκέντρωσης στο μοντέλο της αναερόβιας χώνευσης που αναπτύχθηκε καθ' ύψος του αντιδραστήρα δείχνει να διαφοροποιείται με την μεταβολή του υδραυλικού χρόνου παραμονής αλλά δεν επηρεάστηκε σε μεγάλο βαθμό η απομάκρυνση του ολικού COD στην απορροή. Το γεγονός αυτό δείχνει ότι ο τρόπος εναλλαγής των διαμερισμάτων (αντίθετα από τη φορά των δεικτών του ρολογιού) σε σχέση με την κατεύθυνση της ροής (ωρολογιακά) βοηθά στην εύρυθμη λειτουργία της διεργασίας καθώς η βιομάζα αντιδρά με το υπόστρωμα για μεγαλύτερο χρονικό διάστημα.

## Βιβλιογραφία

- Alvarez PJJ, A. P. (1991). Kinetics of aerobic biodegradation of benzene and toluene in sandy aquifer material. *Biodegradation Vol 2*, 43-51.
- Alvarez PJJ, A. P. (1994). Kinetics of toluene degradation by denitrifying aquifer microorganisms. *Environmental Engineering*, 1327-1336.
- Borden RC, B. P. (1986). Transport of dissolved hydrocarbons influenced by oxygen-limited biodegradation: 1. Theoretical development. *Water Resources Research*, 1973-1982.
- Chen YM, Abriola LM, A. P. (1992). Modeling transport and biodegradation of benzene and toluene in sandy aquifer material: Comparisons With experimental measurements. *Water Resources Research*, 1833-1847.
- Chihhao Fan, C.-F. K.-H. (2017). Quantitative characterization of organic diffusion using an analytical diffusion-reaction model and its application to assessing BOD removal when treating municipal wastewater in a plug flow reactor. *Water Research 121*, 329-337.
- Comsol. (2017). Ανάκτηση από COMSOL Multiphysics®: <https://www.comsol.com/comsol-multiphysics#overview>
- Comsol. (2017). *The Finite Element Method (FEM)*. Ανάκτηση από <https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method#temp1>
- D.J. Batstone, J. K. (1997). *The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1)*. Australia.
- G. Lettinga, A. F. (1980, April). Use of the upflow sludge blanket (USB) reactor concept for biological wastewater treatment, especially for anaerobic treatment. *Biotechnology and Bioengineering*, σσ. 699-734.
- G. Strang & G.J. Fix. (1973). *An Analysis of the Finite Element Method*. New Jersey: Englewood Cliffs.
- G.C. Okpokwasili & C.O. Nweke. (2005). Microbial growth and substrate utilization kinetics. *African Journal of Biotechnology*, 305-317.
- Holland, K. K. (1987). *Industrial applications of anaerobes. In: Anaerobic bacteria*. London: Blackie & Son Limited.
- I. V. Skiadas, H. N. (2000). Modelling of the Periodic Anaerobic Baffled Reactor (PABR) Based on the Retaining Factor Concept. *Wat. Res. Vol. 34*, 3725-3736.
- Lewis R.W., Nithiarasu P., Seetharamu K.N. (2012). *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. New York: John Willey & Sons, Ltd.
- Τσιμπερδώνης, Α. (2014). *Αναερόβια Χώνευση για τη Παραγωγή Βιοαερίου από Απόβλητα σε Περιοδικό Αναερόβιο Αντιδραστήρα*. Αθήνα.
- Wolin, M. J. (1979). *The Rumen Fermentation: A Model for Microbial Interactions in Anaerobic Ecosystems*. New York : Springer, Boston, MA.
- Αθανασιάδη, Ν. Α. (1989). *Μηχανική Ρευστών*. Αθήνα: ΣΥΜΕΩΝ.

- Γεράσιμος Λυμπεράτος & Σταύρος Παύλου. (2011). *Εισαγωγή στη Βιοχημική Μηχανική*. Αθήνα: ΤΖΙΟΛΑ.
- Δ.Κ. Ασημακόπουλος, Β. Λ. (2012). *Μεταφορά Θερμότητας και Μάζας*. Αθήνα: Παπασωτηρίου.
- Καμπερίδης, Θ. (2016). *Υπολογιστική Μελέτη Υδραυλικής Συμπεριφοράς Περιοδικού Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες*. Αθήνα: Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ.
- Μπουντουβής, Α. Γ. (1992). *Υπολογιστική Ανάλυση Με Την Μέθοδο Των Πεπερασμένων Στοιχείων*. Αθήνα: Τμήμα Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π.
- Σεϊντής, Γ. (2015). *Υδραυλικά Χαρακτηριστικά και Κλιμάκωση Μεγέθους Περιοδικού Αναερόβιου Αντιδραστήρα με Ανακλαστήρες. Στο Διπλωματική Εργασία*. Αθήνα: Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ.
- Σκιαδάς, Ι. (1998). *Περιοδικός Αναερόβιος Χωνευτήρας Εναλλασόμενης Ανοδικής και Καθοδικής Ροής. Στο Διδακτωρική Διατριβή*. Πάτρα: Χημικών Μηχανικών.